

*А. И. Иванов, А. А. Кулагина, А. А. Шпилевой*

## ИЗОТОПНОЕ ЗАМЕЩЕНИЕ УГЛЕРОДА И КВАЗИПЕРЕСЕЧЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ В АЛМАЗЕ

104

*Представлены результаты исследования спиновых состояний в основном электронном состоянии единственного азотно-вакансионного центра (NV<sup>-</sup>) в обогащенном <sup>13</sup>C алмазе. Анализ основан на применении метода, который использует полный набор коммютирующих операторов. Результаты показывают, что в этой системе существует два двойных вырождения энергетических уровней, которые можно рассматривать как частный случай ЛАС. Изменение свойств спиновых состояний центра NV<sup>-</sup> на уровне квазипересечения рассматривается как возможная причина изменения интенсивности фотолюминесценции NV<sup>-</sup>-центров.*

*The paper presents the results of a study of spin states in the main electronic state of the only nitrogen-vacancy center (NV<sup>-</sup>) in a <sup>13</sup>C-enriched diamond. The analysis is based on applying a method that uses a full set of commuting operators. The results show that there are two double degenerations of energy levels in this system, which can be considered as a special case of LAC. Changes in the properties of the spin states of the NV<sup>-</sup>-center at the quasi-intersection level are considered as a possible cause of changes in the photoluminescence intensity of NV<sup>-</sup>-centers.*

**Ключевые слова:** кристаллический алмаз, квазипересечение энергетических уровней, релаксация, зеемановское расщепление, гиперполяризация.

**Keywords:** crystal diamond, quasi-intersection of energy levels, relaxation, Zeeman splitting, hyperpolarization.

Контроль над отдельными электронными и ядерными спинами в твердом состоянии открывает широкие перспективы в структурном анализе. Отрицательно заряженный азотно-вакансионный (NV<sup>-</sup>) центр в алмазе представляет большой интерес для исследователей благодаря их уникальным свойствам [1]. NV<sup>-</sup>-центры цвета в алмазе находились в фокусе внимания ряда исследований из-за их перспективности в качестве датчиков магнитных [2; 3] и электрических [4] полей; кубитов, которые можно оптически инициализировать и считывать [5]; флуоресцентных маркеров для биологических систем [6] и т.п. NV<sup>-</sup>-центр идеально подходит для перечисленных приложений благодаря пространственному разрешению в атомном масштабе и исключительным оптическим и спиновым свойствам в широком диапазоне рабочих температур. NV<sup>-</sup>-центр представляет собой примесь в кристалле алмаза. Оптические NV<sup>-</sup>-переходы обеспечивают высокую степень спиновой поляризации при комнатной температуре посредством оптической накачки. Электронный спин NV<sup>-</sup>-центра поляризуется в основном состоянии  $m_s = 0$  при оптическом освещении и измеряется с помощью методов оптического обнаружения [7], одним из которых является обнаружение

изменения интенсивности флуоресценции соответствующего сдвигу заселенности основного состояния, вызванного магнитным полем (ODMR – оптически обнаруженный магнитный резонанс) [8].

NV-центр имеет триплет основного состояния  $|\pm 1\rangle$  и  $|0\rangle$ , разделенный расщеплением нулевого поля при  $D \approx 2,87$  ГГц. В магнитном поле  $B$  вдоль оси NV зеэмановское расщепление  $\gamma_e B$  с электронным гиромагнитным отношением  $\gamma_e = 28,025$  ГГц/Тл нейтрализует расщепление нулевого поля основного состояния в магнитном поле при  $B \sim 1024$  Гс, что приводит к антипересечению (LAC) между  $|\pm 1\rangle$  и  $|0\rangle$  [9]. Однако в присутствии магнитного поля NV испытывает сложный LAC из-за сверхтонкого взаимодействия спина электрона NV с его собственным ядерным спином и спинами среды.

Спектры ODMR в образцах алмаза с различной степенью обогащения  $^{13}\text{C}$  в магнитных полях различной интенсивности и теоретическое описание наблюдаемых спектральных особенностей приведены в работах [10; 11]. Понимание спектров ODMR является важным шагом в разработке эффективных методов гиперполяризации в изотопно-модифицированном алмазе с развитием для датчиков вращения на основе алмаза [12; 13] и применений в фундаментальных физических исследованиях [14].

В данной работе предложено новое теоретическое описание наблюдаемых спектральных особенностей. Мы полагаем, что для понимания особенностей в ODMR-спектрах, полученных в работах [10; 11], важную роль играет LAC. Основой представленного подхода исследования NV LAC является расчет уровней энергии NV в магнитном поле. Чтобы найти собственные значения для спинового гамильтониана NV, необходимо выбрать базисные функции спина. Обычно простые произведения одночастичных спиновых функций используются как приближения для многочастичных базисных функций. Затем матрица гамильтониана строится в выбранном базисе и диагонализуется с использованием численного метода, обычно в рамках теории возмущений (например, [15]). Свойства полученных спиновых собственных функций в численном методе не исследованы должным образом, что, в свою очередь, приводит к усложнению правил отбора для радиационных переходов.

Для получения собственных векторов и собственных значений спинового гамильтониана мы вводим метод, основанный на полном наборе коммутирующих операторов (CSCO). Этот метод давно известен в квантовой механике, но до недавнего времени в спектроскопии никогда не применялся [16–18]. Гамильтониан в представленном подходе считается либо оператором CSCO, либо функцией CSCO. Собственные векторы этого множества построены с использованием принципов квантовой теории момента импульса. Большинство таких векторов квалифицируются как запутанные спиновые состояния. Энергетические уровни находят путем решения ряда уравнений меньшей степени, чем те, которые были найдены путем диагонализации гамильтониана с использованием численных методов. Также возможно получить аналитические выражения для некоторых уровней энергии. Свойства резуль-



тирующих спиновых состояний однозначно определяются CSCO, и каждый собственный спиновый вектор определяется уникальным набором значений CSCO.

Центр NV в алмазе состоит из атома азота, который замещает атом углерода, и вакансии в решетке. Его основное состояние — триплетное ( $S=1$ ) с осью спинового квантования, обеспечиваемой центральной осью симметрии NV. Мы рассматриваем один NV-центр с тремя  $^{13}\text{C}$ -атомами углерода в первой оболочке.

Спин ядра  $^{13}\text{C}$  углерода равен  $I=1/2$ . Сверхтонкая связь ближайших соседних атомов углерода (ядерный спин  $I=1/2$ ) составляет около 130 МГц [9]. Сверхтонкая связь спина электрона с  $^{14}\text{N}$  в центре NV  $\sim 3$  МГц [19]. Спиновый гамильтониан основного состояния NV-центра в присутствии магнитного поля МГц [19]. Спиновый гамильтониан основного состояния NV-центра в присутствии магнитного поля В (в единицах частоты) определяется следующим образом:

$$\hat{H} = D(\hat{S}_z^2 - \frac{\hat{S}^2}{3}) + \gamma \hat{S}_z B_z + \frac{A^\perp}{2}(\tilde{I}^2 - \tilde{I}_{123}^2 - \tilde{S}^2) + \Delta A \hat{S}_z (\hat{I}_{1z} + \hat{I}_{2z} + \hat{I}_{3z}),$$

где  $D \approx 2870$  МГц — тонкая структура;  $\hat{S}$  — оператор спина электрона;  $\tilde{I}_{123} = \tilde{I}_{1z} + \tilde{I}_{2z} + \tilde{I}_{3z}$  — оператор спинов трех ядер  $^{13}\text{C}$ ;  $A^\perp = 166$  МГц,  $A^\parallel = 121$  МГц — поперечная и продольная сверхтонкая магнитная составляющая;  $\Delta A = A^\parallel - A^\perp$ ; направление оси z совпадает с осью электронного спинового момента.

Для вычисления энергетического спектра Гамильтониана определим сперва оператор полного спина:  $\tilde{j} = \tilde{K} + \tilde{I}_4$ . Полный набор наблюдаемых:  $\hat{H}, \tilde{j}_z, \tilde{I}_{12}^2, \tilde{I}^2, \tilde{S}^2, \tilde{I}_1^2, \tilde{I}_2^2, \tilde{I}_3^2$ . Для обозначения состояний исследуемой системы мы предлагаем следующую систему. Используя дираковские обозначения векторов для идентификации каждого состояния, следует указывать соответствующие этому состоянию собственные значения операторов, составляющих полный набор:  $E_{j_z}$  — собственное значение Гамильтониана, соответствующее данному состоянию системы, снабженное индексом оператора проекции полного углового момента;  $j_z, j_{12}$  — собственное значение оператора спина двух ядер углерода  $^{13}\text{C}$ ;  $j_{123}$  — собственное значение оператора спина трех ядер углерода  $^{13}\text{C}$ ;  $j_4$  — собственное значение оператора спина ядра азота  $^{14}\text{N}$ :  $|E_{j_z}, j_z, j_{12}, j_{123}, j_4\rangle$ .

Собственные значения оставшихся операторов, входящих в полный набор, являются одинаковыми для всех состояний системы, поэтому их мы предлагаем не включать в обозначения с целью сокращения записи.

Мы предлагаем строить собственные функции четырехчастичной спиновой системы на основании набора собственных функций трехчастичной спиновой системы, состоящей из трех атомов углерода  $^{13}\text{C}$ , обладающих одинаковыми значениями спинов  $s_1 = s_2 = s_3 = \frac{1}{2}$ :



$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3, \quad \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (\alpha_1 \beta_2 \alpha_3 + \beta_1 \alpha_2 \alpha_3 + \alpha_1 \alpha_2 \beta_3), \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= \beta_1 \beta_2 \beta_3, \quad \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (\alpha_1 \beta_2 \beta_3 + \beta_1 \alpha_2 \beta_3 + \beta_1 \beta_2 \alpha_3), \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\parallel} &= \frac{1}{\sqrt{6}} (2\alpha_1 \alpha_2 \beta_3 - \alpha_1 \beta_2 \alpha_3 - \beta_1 \alpha_2 \alpha_3), \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{\perp} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 \alpha_3 - \beta_1 \alpha_2 \alpha_3), \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{\parallel} &= \frac{1}{\sqrt{6}} (-2\beta_1 \beta_2 \alpha_3 + \alpha_1 \beta_2 \beta_3 + \beta_1 \alpha_2 \beta_3), \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{\perp} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 \beta_3 - \beta_1 \alpha_2 \beta_3). \end{aligned}$$

Полный набор операторов для данной системы:  $\hat{S}^2, \hat{S}_z, \hat{S}_{12}^2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_3^2$ . Соответственно, в обозначении вектора на первой позиции стоит собственное значение оператора квадрата полного спина системы  $\hat{S}^2$ , а на второй позиции — собственное значение оператора проекции спина системы.

Рассмотрим четырехчастичную спиновую систему, состоящую из трех атомов углерода  $^{13}\text{C}$ , обладающих спинами:  $s_1 = s_2 = s_3 = \frac{1}{2}$  и NV-центра, обладающего спином  $s = 1$ .

Путем построения линейных комбинаций по вышеописанному принципу для четырехчастичной спиновой системы получается набор из 24 собственных функций:

$$\begin{aligned} \left| \frac{5}{2}, \frac{5}{2} \right\rangle &= -\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 (1), \quad \left| \frac{5}{2}, -\frac{5}{2} \right\rangle = \beta_1 \beta_2 \beta_3 (-1), \\ \left| \frac{5}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{5}} (\sqrt{2} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 (0) + \alpha_1 \beta_1 \alpha_3 (1) + \beta_1 \alpha_2 \alpha_3 (1) + \alpha_1 \alpha_2 \beta_3 (1)), \\ \left| \frac{5}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{5}} (\sqrt{2} \beta_1 \beta_2 \beta_3 (0) + \alpha_1 \beta_2 \beta_3 (-1) + \beta_1 \alpha_2 \beta_3 (-1) + \beta_1 \beta_2 \alpha_3 (-1)), \\ \left| \frac{5}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{10}} (\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 (-1) + \sqrt{2} (\alpha_1 \beta_2 \alpha_3 (0) + \beta_1 \alpha_2 \alpha_3 (0) + \alpha_1 \alpha_2 \beta_3 (0)) + \\ &+ \alpha_1 \beta_2 \beta_3 (1) + \beta_1 \alpha_2 \beta_3 + \beta_1 \beta_2 \alpha_3 (1)), \\ \left| \frac{5}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{10}} (\beta_1 \beta_2 \beta_3 (1) + \sqrt{2} (\alpha_1 \beta_2 \beta_3 (0) + \beta_1 \alpha_2 \beta_3 (0) + \beta_1 \beta_2 \alpha_3 (0)) + \\ &+ \alpha_1 \beta_2 \alpha_3 (-1) + \beta_1 \alpha_2 \alpha_3 (-1) + \alpha_1 \alpha_2 \beta_3 (-1)), \end{aligned}$$



$$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}} (3\alpha_1\alpha_2\alpha_3(0) - \sqrt{2}(\alpha_1\beta_2\alpha_3(1) + \beta_1\alpha_2\alpha_3(1) + \alpha_1\alpha_2\beta_3(1))),$$

$$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{15}} (-3\beta_1\beta_2\beta_3(0) - \sqrt{2}(\alpha_1\beta_2\beta_3(-1) + \beta_1\alpha_2\beta_3(-1) + \beta_1\beta_2\alpha_3(-1))),$$

$$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{3\sqrt{5}} (3\sqrt{2}\alpha_1\alpha_2\alpha_3(-1) - 2\sqrt{2}(\alpha_1\beta_2\beta_3(1) + \beta_1\alpha_2\beta_3(1) + \beta_1\beta_2\alpha_3(1)) + \alpha_1\beta_2\alpha_3(0) + \beta_1\alpha_2\alpha_3(0) + \alpha_1\alpha_2\beta_3(0)),$$

$$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{3\sqrt{5}} (2\sqrt{2}(\alpha_1\beta_2\alpha_3(-1) + \beta_1\alpha_2\alpha_3(-1) + \alpha_1\alpha_2\beta_3(-1)) + \beta_1\beta_2\alpha_3(1) - \alpha_1\beta_2\beta_3(0) - \beta_1\alpha_2\beta_3(0) - \beta_1\beta_2\alpha_3(0) - 3\sqrt{2}\beta_1\beta_2\beta_3(1)),$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{3\sqrt{2}} (-3\alpha_1\beta_2\alpha_3(-1) + \sqrt{2}(\alpha_1\beta_2\alpha_3(0) + \beta_1\alpha_2\alpha_3(0) + \alpha_1\alpha_2\beta_3(0)) - \alpha_1\beta_2\beta_3(1) - \beta_1\alpha_2\beta_3(1) - \beta_1\beta_2\alpha_3(0) - \beta_1\beta_2\alpha_3(1)),$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{3\sqrt{2}} (3\beta_1\beta_2\beta_3(1) - \sqrt{2}(\alpha_1\beta_2\beta_3(0) + \beta_1\alpha_2\beta_3(0) + \beta_1\beta_2\alpha_3(0)) + \alpha_1\beta_2\alpha_3(-1) + \beta_1\alpha_2\alpha_3(-1) + \alpha_1\alpha_2\beta_3(-1)),$$

$$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle_{\parallel} = \frac{1}{\sqrt{6}} (2\alpha_1\alpha_2\beta_3(1) - \alpha_1\beta_2\alpha_3(1) - \beta_1\alpha_2\alpha_3(1)),$$

$$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle_{\parallel} = \frac{1}{\sqrt{6}} (2\beta_1\beta_2\alpha_3(-1) - \alpha_1\beta_2\beta_3(-1) - \beta_1\alpha_2\beta_3(-1)),$$

$$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\parallel} = \frac{1}{3\sqrt{2}} (\alpha_1\beta_2\beta_3(1) + \beta_1\alpha_2\beta_3(1) - 2\beta_1\beta_2\alpha_3(1)) + \frac{1}{3} (2\alpha_1\alpha_2\beta_3(0) - \alpha_1\beta_2\alpha_3(0) - \beta_1\alpha_2\alpha_3(0)),$$

$$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{\parallel} = \frac{1}{3\sqrt{2}} (2\alpha_1\alpha_2\beta_3(-1) - \alpha_1\beta_2\alpha_3(-1) - \beta_1\alpha_2\alpha_3(-1)) - \frac{1}{3} (2\beta_1\beta_2\alpha_3(0) - \alpha_1\beta_2\beta_3(0) - \beta_1\alpha_2\beta_3(0)),$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\parallel} = \frac{1}{3\sqrt{2}} (\sqrt{2}(2\beta_1\beta_2\alpha_3(1) - \alpha_1\beta_2\beta_3(1) - \beta_1\alpha_2\beta_3(1)) + 2\alpha_1\alpha_2\beta_3(0) - \alpha_1\beta_2\alpha_3(0) - \beta_1\alpha_2\alpha_3(0)),$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{\parallel} = \frac{1}{3\sqrt{2}} (\sqrt{2}(2\alpha_1\alpha_2\beta_3(-1) - \alpha_1\beta_2\alpha_3(-1) - \beta_1\alpha_2\alpha_3(-1)) + 2\beta_1\beta_2\alpha_3(0) - \alpha_1\beta_2\beta_3(0) - \beta_1\alpha_2\beta_3(0)),$$

$$\left\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle_{\perp} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1\beta_2\beta_3(-1) - \beta_1\alpha_2\beta_3(-1)),$$



$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (\alpha_1 \beta_2 \beta_3(1) - \beta_1 \alpha_2 \beta_3(1) + \sqrt{2} (\alpha_1 \beta_2 \alpha_3(0) - \beta_1 \alpha_2 \alpha_3(0))),$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (\alpha_1 \beta_2 \alpha_3(-1) - \beta_1 \alpha_2 \alpha_3(-1) + \sqrt{2} (\alpha_1 \beta_2 \beta_3(0) - \beta_1 \alpha_2 \beta_3(0))),$$

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (\alpha_1 \beta_2 \alpha_3(0) - \beta_1 \alpha_2 \alpha_3(0) - \sqrt{2} (\alpha_1 \beta_2 \beta_3(1) - \beta_1 \alpha_2 \beta_3(1))),$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} (\alpha_1 \beta_2 \beta_3(0) - \beta_1 \alpha_2 \beta_3(0) + \sqrt{2} (\alpha_1 \beta_2 \alpha_3(-1) - \beta_1 \alpha_2 \alpha_3(-1))).$$

109

Собственные значения:

$$\left| E_{\frac{5}{2}}, \frac{5}{2}, 1, \frac{3}{2} \right\rangle = \left| \frac{5}{2}, \frac{5}{2} \right\rangle, E_{\frac{5}{2}} = \frac{D}{3} + \gamma B_z + \frac{3A_{\perp}}{2} + \frac{3\Delta A}{2},$$

$$\left| E_{-\frac{5}{2}}, -\frac{5}{2}, 1, \frac{3}{2} \right\rangle = \left| \frac{5}{2}, -\frac{5}{2} \right\rangle, E_{-\frac{5}{2}} = \frac{D}{3} - \gamma B_z + \frac{3A_{\perp}}{2} + \frac{3\Delta A}{2},$$

$$\begin{aligned} \left| E_{\frac{3}{2}}, \frac{5}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle &= \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle_{\parallel}, \left| E_{\frac{3}{2}}, \frac{3}{2}, 0, \frac{1}{2} \right\rangle = \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle_{\perp}, E_{\frac{3}{2}} = \\ &= \frac{D}{3} + \gamma B_z + \frac{A_{\perp}}{2} + \frac{\Delta A}{2} - \end{aligned}$$

– двукратное вырождение, не снимаемое магнитным полем.

$$\left| E_{\frac{3}{2}}^i, \frac{3}{2}, 1, \frac{3}{2} \right\rangle = c_1^i \left| \frac{5}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle + c_2^i \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle, i = 1, 2;$$

$$E_{\frac{3}{2}}^i = \frac{1}{2} \left( -\frac{D}{3} + \gamma B_z + \frac{A_{\parallel}}{2} \pm \sqrt{6A_{\perp}^2 + \left( \gamma B_z + \frac{A_{\parallel}}{2} \right)^2} \right);$$

$$\left| E_{-\frac{3}{2}}^i, -\frac{3}{2}, 1, \frac{3}{2} \right\rangle = c_1^i \left| \frac{5}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle + c_2^i \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle, i = 1, 2;$$

$$E_{-\frac{3}{2}}^i = \frac{1}{2} \left( -\frac{D}{3} - \gamma B_z + \frac{A_{\parallel}}{2} \pm \sqrt{6A_{\perp}^2 + \left( \gamma B_z - \frac{A_{\parallel}}{2} \right)^2} \right);$$

$$\left| E_{\frac{1}{2}}^i, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle = c_1^i \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\parallel} + c_2^i \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle_{\parallel}, \left| E_{\frac{1}{2}}^i, \frac{1}{2}, 0, 1 \right\rangle = c_1^i \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\perp} + c_2^i \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\perp}, i = 1, 2;$$

$$E_{\frac{1}{2}}^i = \frac{1}{2} \left( -\frac{D}{3} + \gamma B_z - \frac{A_{\perp}}{2} \pm \sqrt{2A_{\perp}^2 + \left( \gamma B_z - \frac{A_{\perp}}{2} \right)^2} \right) -$$

– двукратное вырождение каждого корня, не снимаемое магнитным полем.



$$\left| E_{-\frac{1}{2}}^i, -\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2} \right\rangle = c_1^i \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{\parallel} + c_2^i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{\parallel}, \left| E_{-\frac{1}{2}}^i, -\frac{1}{2}, 0, 1 \right\rangle = c_1^i \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{\perp} + c_2^i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{\perp}, i=1,2;$$

$$E_{-\frac{1}{2}}^i = \frac{1}{2} \left( -\frac{D}{3} - \gamma B_z - \frac{A_{\parallel}}{2} \pm \sqrt{2A_{\perp}^2 + (\gamma B_z + \frac{A_{\parallel}}{2})^2} \right) -$$

— двукратное вырождение каждого корня, не снимаемое магнитным полем.

110

$$\left| E_{\frac{1}{2}}^i, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2} \right\rangle = c_1^i \left| \frac{5}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + c_2^i \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle + c_3^i \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, i=1,2,3;$$

$$H_{11} = \frac{1}{10} \left( \frac{-8D}{3} + 2\gamma B_z + 15A_{\perp} - 3\Delta A \right),$$

$$H_{31} = H_{13} = -\frac{1}{\sqrt{5}} (-D + \Delta A),$$

$$H_{22} = \frac{1}{15} (4D + 2\gamma B_z - 15A_{\perp} - 13\Delta A),$$

$$H_{21} = H_{12} = -\frac{1}{\sqrt{5}} \left( -D - 3\gamma B_z - \frac{\Delta A}{2} \right),$$

$$H_{33} = \frac{1}{6} (-2\gamma B_z - 15A_{\perp} - 5\Delta A),$$

$$H_{32} = H_{23} = -\frac{1}{3\sqrt{5}} \left( -D + 5\gamma B_z + \frac{7\Delta A}{2} \right);$$

$$\left| E_{-\frac{1}{2}}^i, -\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2} \right\rangle = c_1^i \left| \frac{5}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + c_2^i \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + c_3^i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, i=1,2,3;$$

$$H_{11} = \frac{1}{10} \left( \frac{-8D}{3} - 2\gamma B_z + 15A_{\perp} - 3\Delta A \right),$$

$$H_{31} = H_{13} = -\frac{1}{\sqrt{5}} (-D + \Delta A),$$

$$H_{22} = \frac{1}{15} (4B - 2\gamma B_z - 15A_{\perp} - 13\Delta A),$$

$$H_{21} = H_{12} = -\frac{1}{5} \left( D - 3\gamma B_z + \frac{\Delta A}{2} \right),$$

$$H_{33} = \frac{1}{6} (2\gamma B_z - 15A_{\perp} - 5\Delta A),$$

$$H_{32} = H_{23} = \frac{1}{3\sqrt{5}} \left( -D - 5\gamma B_z + \frac{7\Delta A}{2} \right).$$

Значения уровней энергии, полученные для приведенных выше параметров с учетом правил отбора для соответствующих квантовых чисел, приведены на рисунке 1.

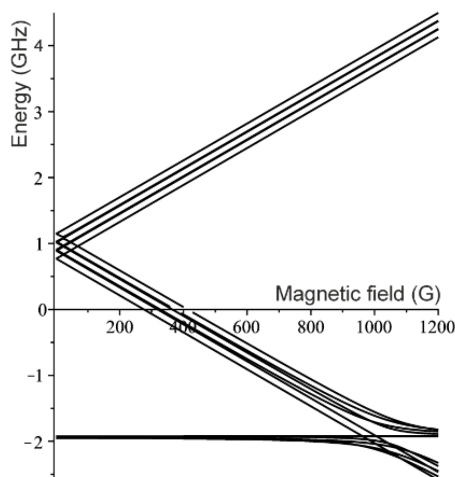


Рис. 1. Диаграмма энергетических уровней NV-центра в алмазе

Сопоставление полученных результатов с экспериментальным спектром [10] представлено на рисунке 2.

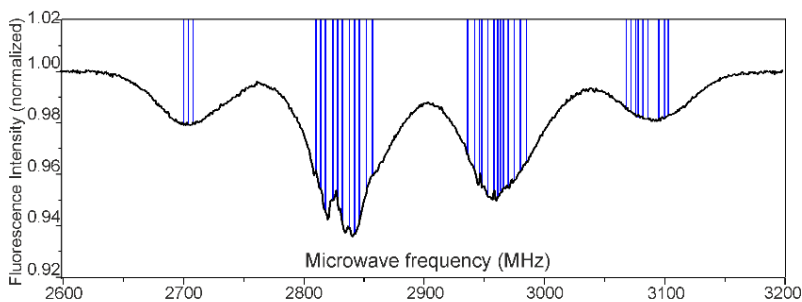


Рис. 2. Наложение вычисленных частот переходов в NV-центре (вертикальные прямые линии) на ODMR-спектр NV-центра в алмазе (горизонтальный график) [10]

### Список литературы

1. Doherty M. V., Manson N. B., Delaney P. et al. The nitrogen-vacancy colour centre in diamond // *Physics Reports*. 2013. 528, 1.
2. Taylor J. M., Cappellaro P., Childress L. et al. High-sensitivity diamond magnetometer with nanoscale resolution // *Nat. Phys.* 2008. 4, 810.
3. Acosta V. M., Bauch E., Jarmola A. et al. Broadband magnetometry by infrared-absorption detection of nitrogen-vacancy ensembles in diamond // *Applied Physics Letters*. 2010. 97, 174104.
4. Dolde F., Fedder H., Doherty M. W. et al. Electric-field sensing using single diamond spins // *Nature Physics*. 2011. 7, 459.





5. Robledo L., Childress L., Bernien H. et al. High-fidelity projective read-out of a solid-state spin quantum register // *Nature*. 2011. 477, 574.
6. Schirhagl R., Chang K., Loretz M., Degen C.L. Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond: Nanoscale Sensors for Physics and Biology // *Annual Review of Physical Chemistry*. 2014. 65, 83.
7. Jezcko F., Gaebel T., Popa I. et al. Observation of Coherent Oscillations in a Single Electron Spin // *Phys. Rev. Lett.* 2004. 92, 076401.
8. van Oort E., Manson N.B., Glasbeek M. Optically detected spin coherence of the diamond N-V centre in its triplet ground state // *J. Phys.* 1988. C 21, 4385.
9. He X.F., Manson N.B., Fisk P.T.H. Paramagnetic resonance of photoexcited N-V defects in diamond. II. Hyperfine interaction with the  $^{14}\text{N}$  nucleus // *Phys. Rev.* 1993. B 47, 8809.
10. Jarmola A., Bodrog Z., Kehayias P. et al. Optically Detected Magnetic Resonances of Nitrogen-Vacancy Ensembles in  $^{13}\text{C}$  Enriched Diamond. 2016. ArXiv:1608.08706v1 [quant-ph].
11. Parker A.J., Wang H., Li Y. et al. Decoherence-protected transitions of nitrogen vacancy centers in 99 %  $^{13}\text{C}$ -enriched diamond. 2015. ArXiv:1506.05484v1 [quant-ph].
12. Ledbetter M.P., Jensen K., Fischer R. et al. Gyroscopes based on nitrogen-vacancy centers in diamond // *Phys. Rev. A*. 2012. 86, 052116.
13. Ajoy A., Cappellaro P. Stable three-axis nuclear-spin gyroscope in diamond // *Phys. Rev. A*. 2012. 86, 062104.
14. Ledbetter M.P., Budker D. Zero-field nuclear magnetic resonance // *Physics Today*. 2013. 66, 44.
15. Wood J.D.A., Broadway D.A., Hall L.T. et al. A Wide-band, nanoscale magnetic resonance spectroscopy using quantum relaxation of a single spin in diamond. 2016. ArXiv:1604.00160v1 [quant-ph].
16. Ivanov A.A., Ivanov A.I. Side resonances and metastable excited state of NV-center in diamond // 2017. ArXiv:1701.04097v1 [cond-mat.mes-hall].
17. Иванов А.А., Иванов А.И. Природа боковых резонансов в алмазе: влияние изотопозамещения углерода // *Вестник Балтийского федерального университета им. И. Канта. Сер.: Физико-математические и технические науки*. 2016. №4. С. 56–60.
18. Ivanov A.A., Ivanov A.I. Diamond Side Resonances: Influence of Isotopic Substitution of Carbon // *Task Quarterly*. 2017. 21, № 2. 205.
19. Doherty M.V., Dolde F., Fedder H. et al. Theory of the ground-state spin of the NV- center in diamond // *Phys. Rev.* 2012. B85, 205203.

#### Об авторах

Алексей Иванович Иванов — д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: A.Ivanov@kantiana.ru

Анастасия Алексеевна Кулагина — ст. преп., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: ALebedkina@kantiana.ru

Андрей Алексеевич Шпилевой — канд. физ.-мат. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: AShpilivoi@kantiana.ru



**The authors**

Prof. Alexey I. Ivanov, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: AIvanov@kantiana.ru

Anastasia A. Kulagina, Assistant Professor, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: ALebedkina@kantiana.ru

Dr Andrey A. Shpilevoy, Associate Professor, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: AShpilevoi@kantiana.ru