

УДК 538.9

А. И. Иванов, А. Т. Халиков

ПЕРЕНОС ПОЛЯРИЗАЦИИ В СИСТЕМЕ NV⁻ – P₁ В АЛМАЗЕ

Исследован процесс переноса спиновой поляризации в системе NV⁻ – P₁ в алмазе в окрестности LAC. Использован метод, основанный на полном наборе коммутирующих наблюдаемых. Показано, что при оптической накачке системы NV⁻ – P₁ в поле B ≈ 511,5 Г при комнатной температуре может быть осуществлен эффективный перенос поляризации от электронного спина NV⁻-центра к спину электрона P₁-центра.

37

The process of spin polarization transfer in the NV⁻ – P₁ system in diamond in the vicinity of LAC is studied. A method based on a complete set of commuting observables was used. It was shown that with optical pumping of the NV⁻ – P₁ system in a field of B ≈ 511.5 G at room temperature, polarization can be transferred efficiently from the electron spin of the NV center to the electron spin of the P₁-center.

Ключевые слова: алмаз, спиновая поляризация, NV⁻-центр.

Keywords: diamond, spin polarization, NV⁻-center.

Ансамбли NV⁻-центров (nitrogen-vacancy centers) в алмазе представляют интерес для различных применений, включая формирование гиперполяризованных состояний. NV⁻-центр в алмазе был и остается предметом многочисленных исследований. Общей целью ряда исследовательских групп является перенос поляризации от электрона NV⁻-центра на ядерные спины примесей. В целом в этом направлении исследований имеются значительные успехи. Вместе с тем при обилии экспериментальных результатов значительная часть из них до сих пор не нашла убедительного объяснения. Среди результатов, ждущих своего теоретического обоснования, на первом месте – результаты экспериментального исследования процессов переноса поляризации от электронного спина NV⁻-центра к примесным спином окружения в окрестности LAC (level anti-crossing).

В данной работе для исследования процессов переноса спиновой поляризации в системе NV⁻ – P₁ в алмазе мы предлагаем использовать метод, основанный на полном наборе коммутирующих наблюдаемых. Этот метод давно известен в квантовой механике (см., например, [1]), но до наших работ [2; 3] в спектроскопии не применялся. Важно отметить, что при таком подходе спиновые состояния однозначно определяются



полным набором коммутирующих наблюдаемых и каждый собственный спиновый вектор определяется совокупностью собственных значений этого набора. Это дает наиболее полное описание спиновых состояний многочастичных систем, какое только возможно получить в рамках квантовой теории. Предлагаемый подход позволяет не только более полно исследовать свойства поляризации спиновых состояний, но и пролить свет на роль ЛАС в процессах переноса поляризации в алмазе.

NV-центр – это точечный дефект в алмазе, обладающий симметрией C_{3v} , состоящий из атома азота, замещающего углерод, и ближайшей к нему вакансии в узле решетки. Его основное состояние является спиновым триплетом ($S=1$) с осью квантования спина, совпадающей с осью симметрии центра. Примесные атомы азота, находящиеся в том же кристалле алмаза, что и NV-центры, часто называют P_1 -центрами. Они имеют электронный спин $S=1/2$, обусловленный неспаренным электроном, и ядерный спин $I=1$, связанный с ядром ^{14}N , или ядерный спин $I=1/2$, связанный с ядром ^{15}N . Между электронными спинами NV-центра и P_1 -центра возникает диполь-дипольная связь, которая и проявляется в ODMR-спектре пары NV⁻ – P_1 . Влияние ядерного спина проявляется гораздо слабее. Рассмотрим одиночный NV-центр со спином $S_1=1$ и находящийся вблизи него атом азота с электронным спином $S_2=1/2$. С учетом диполь-дипольного взаимодействия этих спинов эффективный спин-гамильтониан основного состояния такой системы можно записать в виде

$$H = D \left(\hat{S}_{1z}^2 - \frac{\hat{S}_1^2}{3} \right) + g_e \beta_e B_z (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}) + T^{\parallel} \hat{S}_{1z} \hat{S}_{2z} + T^{\perp} (\hat{S}_{1x} \hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y} \hat{S}_{2y}), \quad (1)$$

где $D \approx 2870$ МГц – параметр тонкой структуры; $T^{\parallel} = -13,81$ МГц; $T^{\perp} = 33,34$ МГц – аксиальная и неаксиальная компоненты тензора T диполь-дипольного взаимодействия; g_e – электронный g-фактор.

Для расчета спектра гамильтониана (1) воспользуемся методом, который был предложен в [2]. С этой целью определим сначала оператор полного спина

$$\hat{J} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$$

и на основе принципов квантовой теории углового момента построим векторы $|J, M_z\rangle$, являющиеся собственными векторами полного набора коммутирующих операторов $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2$:

$$|3/2, 3/2\rangle = |1,1\rangle|1/2, 1/2\rangle,$$

$$|3/2, 1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle|1/2, 1/2\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|1,1\rangle|1/2, -1/2\rangle,$$



$$\begin{aligned} |3/2, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle|1/2, -1/2\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|1, -1\rangle|1/2, 1/2\rangle, \\ |3/2, -3/2\rangle &= |1, -1\rangle|1/2, -1/2\rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

$$|1/2, 1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1,1\rangle|1/2, -1/2\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle|1/2, 1/2\rangle,$$

$$|1/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle|1/2, -1/2\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, -1\rangle|1/2, 1/2\rangle.$$

Несмотря на то, что в соотношениях (2) векторы допустимых состояний классифицированы по мультиплетам, отметим, что полный спин J не сохраняется, так как гамильтониан \hat{H} вида (1) не коммутирует с оператором \hat{J}^2 . Вместе с тем гамильтониан коммутирует с операторами проекции полного спина, квадрата электронного спина NV-центра и квадрата электронного спина атома азота:

$$[\hat{H}, \hat{J}_z] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{S}_1^2] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{S}_2^2] = 0. \quad (3)$$

Операторы $\hat{H}, \hat{J}_z, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2$ также составляют полный набор коммутирующих операторов. При использовании этого полного набора коммутирующих наблюдаемых векторы основного состояния системы, состоящей из NV-центра и P₁-центра, однозначно характеризуются значением энергии E_i , проекцией полного спина M_z и электронными спинами S_1 и S_2 . Поскольку для всех рассматриваемых состояний электронные спины фиксированы, то есть $S_1 = 1, S_2 = 1/2$, то уравнение на собственные значения и собственные векторы гамильтониана (1) можно записать в виде

$$\hat{H}|E_i, M_z\rangle = E_i|E_i, M_z\rangle, \quad (4)$$

где индекс i вводится, чтобы различать состояния с одинаковым значением M_z и разными значениями энергии E .

Прежде всего заметим, что состояние $|E_1, 3/2\rangle = |3/2, 3/2\rangle$ и состояние $|E_2, -3/2\rangle = |3/2, -3/2\rangle$ вида (2) удовлетворяют уравнению (4) с собственными значениями

$$E_1 = D/3 + 3g_e\beta_e B_z/2 + T^{\parallel}/2,$$

$$E_2 = D/3 - 3g_e\beta_e B_z/2 + T^{\parallel}/2$$

соответственно. Допустимыми стационарными состояниями $|E_i, M_z\rangle$ с $M_z = \pm 1/2$ являются суперпозиции вида

$$|E_{3(4)}, 1/2\rangle = c_{3(4)}|3/2, 1/2\rangle + c'_{3(4)}|1/2, 1/2\rangle, \quad (5)$$

$$|E_{5(6)}, -1/2\rangle = c_{5(6)}|3/2, -1/2\rangle + c'_{5(6)}|1/2, -1/2\rangle.$$



Подставляя (5) в (4) и решая полученное уравнение, мы находим уровни энергии:

$$E_{3(4)} = -D / 6 + g_e \beta_e B_z / 2 - T^{\parallel} / 4 \pm \frac{1}{2} \sqrt{(D - T^{\parallel} / 2)^2 + 2T^{\perp 2}},$$

$$E_{5(6)} = -D / 6 - g_e \beta_e B_z / 2 - T^{\parallel} / 4 \pm \frac{1}{2} \sqrt{(D - T^{\parallel} / 2)^2 + 2T^{\perp 2}}.$$

Зависимость уровней энергии системы NV⁻ – P₁ от внешнего магнитного поля приведена на рисунке. На нем по оси абсцисс отложена величина внешнего магнитного поля в гауссах, а по оси ординат – величина энергии в мегагерцах.

40

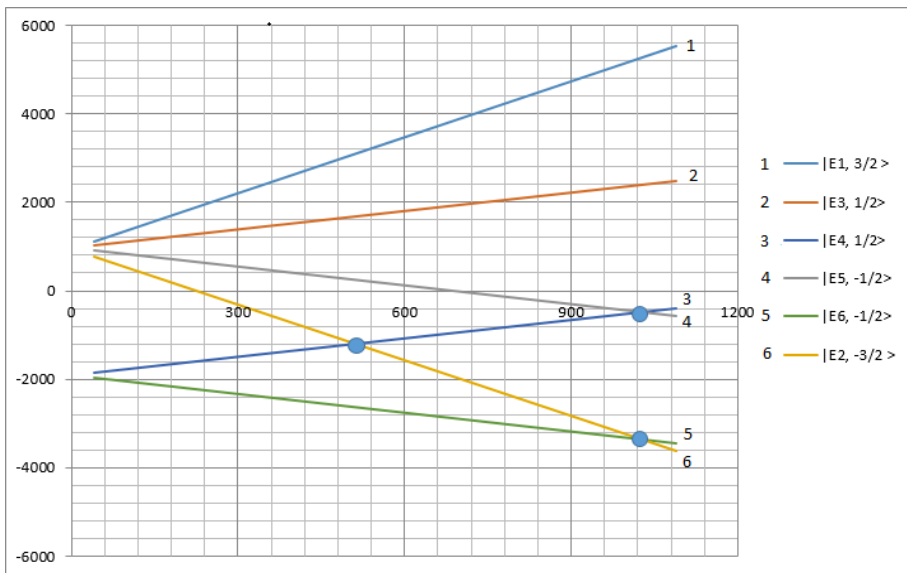


Рис. Зависимость энергии системы NV⁻ – P₁ от внешнего магнитного поля

Состояния $|E_i, M_z\rangle$ обладают одинаковой симметрией, и, следовательно, в силу известной теоремы соответствующие им уровни энергии пересекаться не должны. Однако на рисунке такие «квазипересечения» видны, они появляются при $B \approx 511,5$ Г и $B \approx 1028$ Г. Эти точки называют точками «квазипересечения» уровней энергии. Появление точек ЛАС при исследовании NV⁻-центров в алмазе отмечено давно. Более того, в теоретических расчетах иногда предпринимаются попытки «обойти» эти точки, в связи с чем даже появился термин *avoided crossing*, однако удовлетворительной интерпретации ЛАС до сих пор нет.

Подход к описанию спиновых состояний, основанный на полном наборе коммутирующих наблюдаемых, позволяет предложить интерпретацию ЛАС, суть которой состоит в следующем. В нашем подходе каждое состояние $|E_i, M_z\rangle$ характеризуется единственным набором соб-



ственных значений полного набора коммутирующих наблюдаемых $\hat{H}, \hat{J}_z, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2$. Измеренные значения наблюдаемых, входящих в полный набор, коррелированы для каждого состояния. Следовательно, для выбранной ветви решения при фиксированных значениях параметров гамильтониана измерение наблюдаемых $\hat{J}_z, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2$ автоматически приводит к «измерению» энергии E. Аналогично, для выбранной ветви решения при фиксированных значениях параметров гамильтониана измерение наблюдаемых $\hat{H}, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2$ автоматически приводит к «измерению» проекции полного спина. Это справедливо всюду, за исключением точек $B \approx 511,5$ Г и $B \approx 1028$ Г. В этих точках (точках ЛАС) для выбранной ветви решения при избранных значениях параметров гамильтониана измерение наблюдаемых $\hat{H}, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2$ более не приводит автоматически к «измерению» проекции полного спина. Например, при $B \approx 511,5$ Г для состояний $|E_2, -3/2\rangle$ и $|E_4, 1/2\rangle$ измерение энергии E (в этой точке $E_2 = E_4$) не приводит автоматически к «измерению» проекции полного спина. Таким образом, при $B \approx 511,5$ Г (в точке ЛАС, где $E_2 = E_4$) состояние $|E_2, -3/2\rangle$ и состояние $|E_4, 1/2\rangle$ изменяют свои свойства: в этой точке каждое из них больше не характеризуются одновременно **определенным значением энергии и определенным значением проекции спина**, а потому теорема о непересечении уровней энергии одинаковой симметрии не нарушается. Мы также предполагаем, что отмеченное выше изменение свойств спиновых состояний в окрестности ЛАС приводит к наблюдаемым эффектам: возрастает скорость спин-решеточной релаксации этих состояний. Подобное суждение справедливо и относительно других точек ЛАС.

Подчеркнем, что векторы вида (2) и (5) описывают спин-поляризованные состояния системы NV⁻ – P₁, причем состояния (5) представляют спиновые запутанные состояния (entangled states) электронов NV-центра и P₁-центра. При оптической накачке этой системы во внешнем магнитном поле эффективно заселяются состояния $|E_4, 1/2\rangle$ и $|E_6, -1/2\rangle$, причем при комнатной температуре и слабом поле их населенности равны. Следовательно, суммарная проекция полного электронного спина равна нулю всюду, кроме точек «квазипересечения» (ЛАС). В окрестности ЛАС, например, в поле $B \approx 511,5$ Г (где $E_2 = E_4$) состояние $|E_4, 1/2\rangle$ более не характеризуется определенной проекцией спина и поэтому поляризация будет определяться заселенностью состояния $|E_6, -1/2\rangle$. Таким образом, при оптической накачке системы NV⁻ – P₁ в поле $B \approx 511,5$ Г при комнатной температуре может быть осуществлен эффективный перенос поляризации от электронного спина NV-центра к спину электрона P₁-центра.

Список литературы

1. Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики. М., 1979.



2. *Ivanov A.A., Ivanov A.I.* Side resonances and metastable excited state of NV-center in diamond. arXiv:1701.04097v1[cond-mat.mes-hall].

3. *Talatay A.A., Ivanov A.I., Halikov A.T.* Level anti-crossing in ^{13}C enriched diamond. IEEE Xplore // 2018. **19 F.** 3086. doi: 10.1109/PIERS-FALL.2017.8293664.

Об авторах

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

E-mail: aivanov@kantiana.ru

Александр Петрович Халиков — асп., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: ahalikov-12@mail.ru

The authors

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

E-mail: aivanov@kantiana.ru

Alexander P. Halikov, PhD Student, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: ahalikov-12@mail.ru