

А. А. Иванов, А. И. Иванов

**ПРИРОДА БОКОВЫХ РЕЗОНАНСОВ В АЛМАЗЕ:
ВЛИЯНИЕ ИЗОТОПОЗАМЕЩЕНИЯ УГЛЕРОДА**

56

Исследована структура спектров оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР) в алмазе. Анализ сверхтонкого взаимодействия в системе, состоящей из замещающего углерод атома азота и находящихся вблизи него вакансии и изотопа C^{13} , выполнен на основе нового подхода. Рассмотрены законы сохранения, получено правило отбора для разрешенных переходов и вычислены уровни энергии. По экспериментально измеренным частотам боковых резонансов вычислены параметры сверхтонкого расщепления в алмазе. Основой нового подхода стало применение перепутанных спиновых состояний к анализу спектров спин-гамильтонианов.

We discuss the structure of optically detected magnetic resonance (ODMR) spectra of diamond crystal. We propose the new approach to the calculation of hyperfine interaction in composed system, consisted of negatively charged nitrogen-vacancy (NV) center and nearby C^{13} nuclear spin. Energy levels, rule selection and radiative transitions are obtained by new method. It is obtained the estimation of the carbon hyperfine splitting parameters in the diamond NV- center from side-resonance frequencies in the frame of this method. The base of this method is the using of entangled spin states.

Ключевые слова: алмаз, сверхтонкая структура, боковые резонансы.

Key words: diamond, hyperfine structure, side resonance.

Отрицательно заряженные центры в кристалле алмаза (NV-центры), содержащие атом азота, замещающий атом углерода в узле кристаллической решетки, и расположенную в соседнем узле вакансию, являются хорошей основой для создания приборов в области магнитометрии, электрометрии, пьезометрии, квантовой обработки информации [1]. Оптически детектируемый магнитный резонанс (ОДМР) активно используется для исследования свойств NV-центров [2]. В этом методе измеряется изменение интенсивности фотолюминесценции центра после его возбуждения оптическим и микроволновым импульсами. Оптические переходы в NV-центре позволяют достичь высокой степени спиновой электронной поляризации при комнатной температуре. При оптическом возбуждении центра лазером, излучающим свет в зеленой области спектра, электроны преимущественно населяют триплетное состояние $m_s = 0$ основного состояния. Населенность этого и некоторых других состояний можно оценить по сигналам ОДМР.



В отсутствие магнитного поля основной пик ОДМР NV-центра на частоте 2870 МГц соответствует переходу между подуровнями $m_s = 0$ и $m_s = \pm 1$ основного триплетного состояния [2]. При увеличении разрешения регистрируются также боковые резонансные пики вблизи основного пика. В работе [3] отмечены боковые резонансы B , C , D и E . Расстояние между симметрично расположенными относительно центрального резонанса двумя боковыми резонансами группы B незначительно. Причиной образования резонансов этой группы авторы работы [3] считают взаимодействие между NV-центром и атомом азота, замещающим атом углерода в соседнем узле решетки (P1 центр). В слабых магнитных полях (<60 Гс) проявляется тонкая структура боковых резонансов. В [4] мы показали, что в тонкую структуру боковых резонансов в алмазе в отсутствие внешнего магнитного поля дает вклад сверхтонкое взаимодействие электронного спина и спина ядра ^{14}N в NV-центре. Боковые резонансы группы C располагаются несимметрично относительно центрального резонанса, расстояние между ними составляет 126 МГц [3]. Причина образования этих боковых резонансов – сверхтонкое взаимодействие электронного спина NV-центра и спина ядра C^{13} .

Данная работа посвящена анализу сверхтонкого взаимодействия в системе, состоящей из замещающего углерод атома азота и находящегося вблизи него вакансии и изотопа C^{13} . Этот анализ проводится на основе нового подхода. При этом рассматриваются законы сохранения и правила отбора для разрешенных переходов. Простые аналитические выражения для частот разрешенных переходов позволяют решить обратную задачу: по экспериментально измеренным частотам боковых резонансов непосредственно вычислить параметры сверхтонкого расщепления в алмазе. Основой нового подхода стало применение перепутанных спиновых состояний к анализу спектров спин-гамильтонианов.

NV-центр в алмазе имеет симметрию C_{3v} . Его основное состояние является спиновым триплетом ($S = 1$) с осью квантования спина совпадающей с осью симметрии центра. Мы рассмотрим одиночный центр и находящийся вблизи него изотоп углерода C^{13} с ядерным спином $I = 1/2$. Эффективный спин-гамильтониан основного состояния такой системы в единицах частоты с учетом сверхтонкого взаимодействия в рамках теории кристаллического поля можно записать в следующем виде:

$$\hat{H} = D(\hat{S}_z^2 - \hat{S}^2 / 3) + A^{\parallel} \hat{S}_z \hat{I}_z + A^{\perp} (\hat{S}_x \hat{I}_x + \hat{S}_y \hat{I}_y), \quad (1)$$

где $D \approx 2870$ МГц – параметр тонкой структуры; A^{\parallel} и A^{\perp} – аксиальный и неаксиальный параметры сверхтонкого расщепления.

Для расчета спектра гамильтониана (1) воспользуемся методом, который мы предложили в [4]. С этой целью определим сначала оператор полного спина

$$\hat{J} = \hat{S} + \hat{I},$$



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

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

58

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

Несмотря на то что в соотношениях (2) и (3) 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 и квадрата спина ядра:

$$[\hat{H}, \hat{J}_z] = 0, [\hat{H}, \hat{S}^2] = 0, [\hat{H}, \hat{I}^2] = 0. \quad (4)$$

Следовательно, векторы основного состояния NV-центра характеризуются значением энергии E , проекцией полного спина M_z , электронным спином S и ядерным спином I . Поскольку для всех рассматриваемых состояний $S = 1, I = 1/2$, то уравнение на собственные значения и собственные векторы гамильтониана (1) можно записать в виде

$$\hat{H} |E_{M_z}^{(i)}\rangle = E_{M_z}^{(i)} |E_{M_z}^{(i)}\rangle. \quad (5)$$

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

Прежде всего заметим, что векторы $|E_{\pm 3/2}\rangle$ удовлетворяют уравнению (5) с собственным значением

$$E_{\pm 3/2} = \frac{1}{3}D + A^{||}.$$

Допустимыми стационарными состояниями с $M_z = \pm 1/2$ являются также суперпозиции вида

$$|E_{\pm 1/2}^{(i)}\rangle = c_1^{(i)} |3/2, \pm 1/2\rangle + c_2^{(i)} |1/2, \pm 1/2\rangle. \quad (6)$$



Подставляя (6) в (5) и решая полученное уравнение, мы находим уровни энергии

$$E_{\pm 1/2}^{(1)} = -2D/3 + V + P, E_{\pm 1/2}^{(2)} = -2D/3 + V - P, \quad (7)$$

где

$$V = D/2 - A^{\parallel}/4, P = \sqrt{V^2 + (A^{\perp})^2/2}.$$

Таким образом, для гамильтониана (1) с учетом законов сохранения (4) найдены две группы стационарных состояний. Действительно, к первой группе (с энергиями около $1/3D$) можно отнести состояния $|E_{\pm 3/2}\rangle$ и $|E_{\pm 1/2}^{(1)}\rangle$. Ко второй (с энергиями около $-2/3D$) – состояния $|E_{\pm 1/2}^{(2)}\rangle$. Излучательные переходы между этими состояниями подчиняются правилу отбора $\Delta M_z = \pm 1$ [4]. Основной пик резонанса наблюдается на частоте 2870 МГц.

Боковые резонансы соответствуют переходам между состояниями $|E_{1/2}^{(2)}\rangle$ и $|E_{-1/2}^{(1)}\rangle$, $|E_{-1/2}^{(2)}\rangle$ и $|E_{1/2}^{(1)}\rangle$ с частотой ν_1 и переходам между состояниями $|E_{1/2}^{(2)}\rangle$ и $|E_{3/2}\rangle$, $|E_{-1/2}^{(2)}\rangle$ и $|E_{-3/2}\rangle$ с частотой ν_2 соответственно. Таким образом, в структуре боковых резонансов в алмазе проявляется анизотропия сверхтонкого взаимодействия NV-центра с ядром. Более того, если A^{\parallel} не равно A^{\perp} , то эти боковые резонансы расположены несимметрично относительно центрального резонанса. Расстояние между такими несимметрично расположенными двумя боковыми резонансами группы С, согласно работе [3], значительное и составляет 126 МГц. Если, основываясь на этих экспериментальных данных, принять $\nu_2 = 56$ МГц и $\nu_1 = 70$ МГц, то для аксиального и неаксиального параметров сверхтонкого расщепления получаем следующие значения $A^{\parallel} = -121$ МГц и $A^{\perp} = \pm 166$ МГц.

В заключение отметим, что рассмотренная нами система привлекала внимание исследователей и раньше. Например, авторы работы [5] использовали взаимодействие электронного спина NV-центра со спином ядра изотопа углерода для демонстрации квантового логического гейта NOT и условного двухкубитового гейта CROT. При этом использовались состояния вида $|m_s\rangle |m_i\rangle$ с $m_s = \pm 1$, $m_i = \pm 1/2$. Заметим, что полученные нами перепутанные состояния (6) переходят в состояния вида $|m_s\rangle |m_i\rangle$ работы [5] только при нулевом значении неаксиального параметра сверхтонкого расщепления A^{\perp} . В этом случае два боковых резонанса группы С должны располагаться симметрично относительно центрального резонанса, однако экспериментально такое их расположение не отмечено. Следовательно, модель работы [5] нереалистична.

Список литературы

1. Doherty M. W., Dolde F., Fedder H. et al. Theory of the ground spin state of the NV-center in diamond // Phys. Rev. 2012. Vol. B 85.
2. Gaebel T., Domhan M., Popa I. et al. Room temperature coherent control of coupled single spin in solid // Nat. Phys. 2006. Vol. 2. P. 408.
3. Simanovskaya M., Jensen K., Jarmolova A. et al. Sidebands in optically detected magnetic resonance signals of nitrogen vacancy centers in diamond // Phys. Rev. 2012. Vol. B 87.



4. Иванов А. И., Иванов А. А. К расчету спектров ядерного магнитного резонанса // Вестник Балтийского федерального университета им. И. Канта. 2015. Вып. 4.

5. Jezecko F., Gaebel T., Popa I. et al. Observation of coherent oscillation of single nuclear spin and realization of a two-qubit conditional quantum gate // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93. P. 130501.

Об авторах

Александр Алексеевич Иванов — асп., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград.

E-mail: aivanov023@gmail.com

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

E-mail: AIvanov@kantiana.ru

About authors

Aleksander Ivanov — PhD student, I. Kant Baltic Federal University, Kaliningrad.

E-mail: aivanov023@gmail.com

Prof. Aleksey Ivanov — I. Kant Baltic Federal University, Kaliningrad.

E-mail: AIvanov@kantiana.ru

УДК 550.338

А. В. Марков, А. Р. Абдуллаев, М. В. Клименко

ВЛИЯНИЕ СОЛНЕЧНОЙ И ГЕОМАГНИТНОЙ АКТИВНОСТИ НА СУТОЧНЫЕ ВАРИАЦИИ N_mF_2 ЗИМОЙ В СРЕДНИХ ШИРОТАХ

Представлены результаты проведенного исследования зависимости дневных $\langle N_mF_2 \rangle_{27}$ на различных долготах от солнечной и геомагнитной активности в январе 2012 – 2015 гг. Рассмотрена зависимость суточных вариаций N_mF_2 от уровня солнечной активности. Показано, что зависимость N_mF_2 от солнечной активности носит линейный характер, отличающийся на различных станциях.

The paper presents the results of the study according to day $\langle N_mF_2 \rangle_{27}$ at different longitudes by solar and geomagnetic activity in January 2012–2015. The dependence of the daily variations of N_mF_2 of the level of solar activity. It is shown that the dependence of N_mF_2 and solar activity is linear in nature, different at different stations.

Ключевые слова: солнечная активность, широтные зоны, электронная концентрация, ионосфера.

Key words: solar activity, latitudinal zones, electronic concentration, ionosphere.