УДК 548.4,544.18,544.163



МИКРОВОЛНЫ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО МАНИПУЛИРОВАНИЯ ЯДЕРНЫМИ СПИНАМИ В СИСТЕМАХ NV-¹³С В АЛМАЗЕ

© 2020 г. А. П. Низовцев^{1, 2, *}, С. Я. Килин¹

¹Институт физики имени Б.И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва, Россия

> **E-mail: apniz@ifanbel.bas-net.by* Поступила в редакцию 20.09.2019 г. После доработки 15.11.2019 г. Принята к публикации 27.11.2019 г.

Изучена нестационарная динамика связанных сверхтонким взаимодействием электронно-ядерных спиновых систем ¹⁴NV–¹³C в алмазе под действием микроволнового излучения. Выяснены и интерпретированы оптимальные условия эффективного когерентного манипулирования микроволнами состоянием ядерного спина ¹³C в таких системах.

DOI: 10.31857/S0367676520030217

ВВЕДЕНИЕ

Возможность создавать, контролировать и считывать когерентные состояния многоспиновых систем в твердых телах принципиально важна для квантовой обработки информации, магнитометрии, метрологии и т.п. Для этих целей особенно перспективными являются системы взаимодействующих электронных и ядерных спинов, в которых электроны играют роль "быстрых" кубит и могут использоваться в качестве интерфейсов с "летающими" кубитами — фотонами, а ядерные спины могут хранить квантовую информацию в течение долгого времени благодаря их исключительно высокой изоляции от окружения.

Наиболее известным представителем таких систем является центр окраски "азот-вакансия" (NV-центр) в алмазе (см., например, [1, 2]), электронный спин S = 1 которого в основном электронном состоянии сверхтонко взаимодействует с ядерным спином $I^{(N)} = 1$ атома ¹⁴N, принадлежащего данному NV-центру, и, потенциально, - с соседними ядерными спинами $I^{(C)} = 1/2$ изотопических атомов ¹³С, распределенных случайно в решетке алмаза и замещающих безспиновые атомы ¹²С с вероятностью 1.1%. Электронные спины NV-центров обладают большим временем когерентности при комнатной температуре и для осуществления однокубитных логических операций их состоянием можно когерентно манипулировать на временах ~ наносекунд с помощью импульсных микроволн. Сверхтонкие взаимодействия (СТВ) электронного спина центра с ядерными спинами ¹³С обеспечивают возможность исполнения многокубитных операций, при реализации которых манипулирование состояниями ядерного спина атома ¹³С осуществляется обычно с помошью импульсного радиочастотного излучения, имеющего уже микросекундную длительность. В настоящее время можно считать хорошо отработанными методы инициализации, когерентного манипулирования и измерения с высокой точностью частот переходов и состояний систем ¹⁴NV-¹³С (в том числе содержащих достаточно удаленные от NVцентра ядерные спины) с целью их использования в качестве квантовых регистров и квантовой памяти, а также для реализации квантовой коррекции ошибок, квантовой метрологии и т.п. Для всех этих приложений необходимо детально знать характеристики СТВ для систем NV-13С и понимать их динамику под влиянием внешних воздействий.

Недавно систематические расчеты матриц A_{KL} , описывающих СТВ электронного спина NV-центра с различным образом расположенными ядерными спинами ¹³С, были выполнены в [3, 4], где методом функционала плотности моделировались кластеры алмаза C₂₉₁[NV]⁻H₁₇₂ и C₅₁₀[NV]⁻H₂₅₂, содержащие NV-центр. Используя полученные расчетные данные в спин-гамильтонианах, описывающих системы NV–¹³С, можно найти различные экспериментально наблюдаемые характеристики, а также предсказать оптимальные условия получения желаемых экспериментальных результатов. Для данной работы важным является то, что, согласно сделанным в [4] предсказаниям, для большинства систем NV–¹³С анизотропная составляющая СТВ, описываемая недиагональными элементами матрицы A_{KL} , не является малой. Как показано в [5–7], это позволяет использовать метод двойного резонанса Хартмана–Хана [8] для когерентного манипулирования состояниями ядерных спинов ¹³С в системах NV–¹³С, "одетых" микроволновым излучением (МВИ). Здесь, используя расчетные данные работы [4] о матрицах СТВ для различных спиновых систем NV–¹³С, мы изучаем их нестационарную динамику под действием МВИ и находим его характеристики, обеспечивающие эффективное, с вероятностью порядка 1, манипулирование состоянием ядерного спина ¹³С в таких системах.

СПИН-ГАМИЛЬТОНИАН И МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ ¹⁴NV-¹³C

Для моделирования спиновой системы ¹⁴NV– ¹³C, состоящей из электронного спина S = 1 NVцентра, взаимодействующего с ним ядерного спина $I^{(N)} = 1$ атома ¹⁴N, входящего в состав центра, и ядерного спина $I_i^{(C)} = 1/2$ атома ¹³C, расположенного в некотором узле решетки алмаза вблизи NV-центра, используем стандартный спин-гамильтониан *H* такой спиновой системы [1, 4]

$$H = H_0^{(NV)} + \vec{S} \cdot A^{(C)} \cdot \vec{I}^{(C)} + + \gamma_e^{(NV)} \vec{S} \cdot \vec{B} - \gamma_n^{(N)} \vec{I}^{(N)} \cdot \vec{B} - \gamma_n^{(C)} \vec{I}^{(C)} \cdot \vec{B}.$$
 (1)

Здесь первый член

$$H_0^{(NV)} = D \Big[S_Z^2 - S(S+1)/3 \Big] + \vec{S} \cdot A^{(N)} \cdot \vec{I}^{(N)} + Q \Big[(I_Z^{(N)})^2 - I^{(N)} (I^{(N)} + 1)/3 \Big]$$
(2)

учитывает расщепление при нулевом магнитном поле подуровней $m_S = 0$ и $m_S = \pm 1$ электронного спина центра (D = 2872 МГц), "внутреннее" СТВ в центре ($A^{(N)}$ есть тензор СТВ между спинами \vec{S} и $\vec{I}^{(N)}$, являющийся диагональным с элементами $A_{XX}^{(N)} = A_{YY}^{(N)} = -2.14 \text{ МГц и } A_{ZZ}^{(N)} = -2.70 \text{ МГц в системе главных осей (СГО) NV-центра, в которой ось <math>Z$ совпадает с осью симметрии C_{3V} центра) и квадрупольный момент ядра ¹⁴N Q = -5.01 МГц. Второй член в (1) учитывает СТВ между спинами \vec{S} и $\vec{I}^{(C)}$, описываемое матрицей $A^{(C)}$, которая в общем случае не является диагональной в СГО NV- центра. Последние три члена в (1) описывают взаимодействия всех трех спинов \vec{S} , $\vec{I}^{(N)}$ и $\vec{I}^{(C)}$ с внешним магнитным полем \vec{B} (здесь $\gamma_e^{(NV)} = 2.803 \text{ МГц/гаусс}$, $\gamma_n^{(N)} = 0.3078 \text{ кГц/гаусс и } \gamma_n^{(C)} = 1.0708 \text{ кГц/гаусс}$ – гиромагнитные отношения для электронного спина NV-центра и ядерных спинов ¹⁴N и ¹³C соответственно.

Диагонализация гамильтониана (1) дает (2*S* + + 1)(2*I*^(N) + 1)(2*I*^(C) + 1) = 18 энергий E_{α} трехспиновой системы и коэффициенты $c_{\alpha}^{m_{S},m_{I}^{[N]},m_{I}^{[C]}}$ в спиновых волновых функциях $|\Psi_{\alpha}\rangle$ при их представлении в виде разложения

$$|\Psi_{\alpha}\rangle = \sum_{m_{S}=-S}^{S} \sum_{m_{I}^{(N)}=-I^{(N)}}^{I^{(N)}} \sum_{m_{I}^{(C)}=-I^{(C)}}^{I^{(C)}} c_{\alpha}^{m_{S},m_{I}^{[N]},m_{I}^{[C]}} |m_{S},m_{I}^{[N]},m_{I}^{[C]}\rangle$$
(3)

по базису, образованному спиновыми состояниями $|m_S, m_I^{[N]}, m_I^{[C]}\rangle$, соответствующими определенным магнитным квантовым числам m_S и $m_I^{[N]}$, $m_I^{[C]}$ проекций электронного и ядерных спинов на ось Z.

Внешнее магнитное поле \vec{B} снимает вырождение уровней с проекциями электронного спина $m_S = \pm 1$. Поскольку проекция ядерного спина атома азота ¹⁴N может быть фиксирована [1, 2], для простоты будем далее рассматривать случай $m_I^{[N]} = +1$. Предположим также, что на систему действует МВИ, квазирезонансное переходам между подуровнями NV-центра с проекциями электронного спина $m_S = 0$ и $m_S = -1$. В таком случае в качестве модели системы NV–¹³C вместо 16-уровневой системы можно рассматривать 4-уровневую квантовую систему, включающую в

себя только состояния с $m_S = 0, -1$ и $m_I^{[N]} = +1.$

Вследствие условия $|A_{KL}| \ll D$ для большинства систем NV—¹³C можно использовать секулярное приближение, в котором в гамильтониане (1) оставляются только члены с S_Z . В этом приближении энергии модельной 4-уровневой системы ¹⁴NV—¹³C в магнитном поле $\vec{B} \parallel OZ$ задаются выражениями

$$E_{4,3} \simeq D/3 - \gamma_e^{(\text{INV})} B \pm \Delta/2, \quad (m_S = -1), \\ E_{1,2} \simeq -2D/3 \pm \gamma_n^{(\text{C})} B/2, \quad (m_S = 0),$$
(4)

где $\Delta = \sqrt{A_{nd}^2 + (A_{ZZ} + \gamma_n^{(C)}B)^2}, A_{nd}^2 = A_{ZX}^2 + A_{ZY}^2$. Соответствующие собственные функции $|\Psi_{\alpha}\rangle$ при этом имеют вид:

$$|\Psi_{1}\rangle = |0\uparrow\nearrow\rangle, \ |\Psi_{2}\rangle = |0\uparrow\swarrow\rangle, |\Psi_{3}\rangle = \alpha |\Downarrow\uparrow\nearrow\rangle + \beta \exp(i\varphi) |\Downarrow\uparrow\swarrow\rangle,$$
(5)

$$|\Psi_{4}\rangle = -\beta |\Downarrow\uparrow\nearrow\rangle + \alpha \exp(i\varphi) |\Downarrow\uparrow\swarrow\rangle,$$

где $\alpha = \cos(\theta/2), \quad \beta = \sin(\theta/2), \quad tg(\theta) = A_{nd}/(A_{ZZ} + \gamma^{(C)}B), tg\phi = A_{YZ}/A_{XZ} u \downarrow, 0$ представляют проекции $m_s = -1$ и 0 электронного спина NV-центра, вертикальная стрелка \uparrow представляет



Рис. 1. Энергетические уровни модельных 4-уровневых систем ${}^{14}NV - {}^{13}C$ в слабом магнитном поле $B \parallel OZ$ при $A_{zz} < 0$ (*a*) и $A_{zz} > 0$ (*b*) и переходы между ними, индуцируемые MBИ. "Сильные" переходы показаны сплошными стрелками, "слабые" – пунктирными.

проекцию $m_I^{[N]} = +1$, а косые стрелки \nearrow, \checkmark указывают проекции $m_I^{[C]} = \pm 1/2$ ядерного спина ¹³С.

Из (5) с учетом правил отбора $\Delta m_S = \pm 1$ для ЭПР-переходов в системе NV-¹³С следует, что в типичном случае ($A_{nd} \neq 0$) МВИ может инициировать переходы из состояний 1 и 2 на оба верхних состояния 3 и 4. Вероятности таких переходов зависят от значений параметров α и β. Какие из переходов являются "сильными" или "слабыми" (т.е. имеют большую или малую вероятность), зависит не только от абсолютных значений элементов A_{YZ}, A_{XZ}, A_{ZZ} и магнитного поля B, но и от знака величины $A_{ZZ} + \gamma^{(C)} B$. В слабых полях $\gamma^{(C)} B \ll |A_{ZZ}|$ и в типичной ситуации, когда $|A_{ZZ}| > A_{nd},$ угол heta близок к π при $A_{ZZ} < 0$ и к нулю при $A_{ZZ} > 0$, так что $|\sin(\theta/2)|^2 \sim 1$, $|\cos(\theta/2)|^2 \sim 0$ в первом случае, а во втором случае будем иметь $|\sin(\theta/2)|^2 \sim 0, |\cos(\theta/2)|^2 \sim 1.$ В результате в слабых полях и при $A_{ZZ} < 0$ "сильными" будут переходы 1−4 и 2−3 ($\beta \gg \alpha$), а при $A_{ZZ} > 0$ – переходы 1−3 и 2–4 ($\alpha \gg \beta$). Соответственно, имеется два типа модельных систем NV-13C, представленных на рис. 1а и 1б.

ДИНАМИКА СИСТЕМ NV-¹³С ПОД ДЕЙСТВИЕМ МВИ

Нестационарная эволюция модельной 4-уровневой квантовой системы в поле МВИ с частотой ω , близкой к частотам переходов 1, 2–3, 4, описывается уравнением Шредингера для волновой функции $|\Psi(t)\rangle = \sum_k a_k |\Psi_k\rangle \exp(-iE_k t)$ (k = 1-4), в

котором взаимодействие с МВИ будем описывать оператором $W(t) = W^+ \exp(-i\omega t) + W^- \exp(i\omega t)$. В соответствии с правилами отбора матричные элементы $W = \langle \Downarrow \uparrow \nearrow | W^{\pm} | 0 \uparrow \nearrow \rangle = \langle \Downarrow \uparrow \swarrow | W^{\pm} | 0 \uparrow \checkmark \rangle$ операторов *W*[±] отличны от нуля для состояний с разными проекциями электронного спина и одинаковыми проекциями ядерного спина. С учетом (5) это означает, что матричные элементы переходов между состояниями 1, 2 и 3, 4 модельной системы будут равны αW или βW , причем, как уже отмечалось выше, величины коэффициентов α и β зависят от знака A_{ZZ} . Учитывая сказанное, вводя расстройку резонанса $\varepsilon = \omega_{4,1} - \omega$ и выражая через нее расстройки для остальных переходов в рассматриваемых модельных системах, несложно построить систему уравнений с осциллирующими коэффициентами для амплитуд вероятностей $a_k(t)$, которая имеет одинаковый вид для обеих спиновых систем, представленных на рис. 1а и 1б. Делая в ней замены переменных $\overline{a}_4 = a_4 \exp(-i(\varepsilon - \delta)t),$ $\overline{a}_3 = a_3 \exp(-i(\varepsilon - \Delta - \delta)t),$ $\overline{a}_2 = a_2 \exp(-i\varphi)$ и $\overline{a}_1 = a_1 \exp(i\delta t)$, для компонент *ā*, можно получить уравнение с постоянными коэффициентами, которое, вводя вектор \overline{R} = $=(\overline{a}_4,\overline{a}_3,\overline{a}_2,\overline{a}_1)^T$, можно записать в матричном виде

$$\frac{\dot{\bar{R}}^{t} = i\bar{M}\bar{R}^{t},}{\bar{M}} = \begin{pmatrix} -\varepsilon + \delta & 0 & -\alpha W & \beta W \\ 0 & -\varepsilon + \Delta + \delta & -\beta W & -\alpha W \\ -\alpha W & -\beta W & 0 & 0 \\ \beta W & -\alpha W & 0 & \delta \end{pmatrix}$$
(6)

и искать его нестационарное решение в виде $\overline{R}^{t} = \exp(i\overline{M}t)\overline{R}_{0}$, где \overline{R}_{0} – вектор, описывающий начальное состояние спиновой системы. Поскольку оптическая накачка NV-центра переводит его с вероятностью ~1 в состояние с проекцией электронного спина $m_{S} = 0$, будем в качестве исходного брать состояние $1 = |0 \uparrow \mathbb{A}\rangle$. Зависящие от времени вероятности найти в момент времени tсистему NV–¹³C в состояниях 4-1 определяются решениями уравнения (6): $P_{4}^{t} = |\overline{R}^{t}(1)|^{2}$, $P_{3}^{t} = |\overline{R}^{t}(2)|^{2}$, $P_{2}^{t} = |\overline{R}^{t}(3)|^{2}$, $P_{1}^{t} = |\overline{R}^{t}(4)|^{2}$, где $\overline{R}^{t}(i)$ – компоненты

 $P_2^t = |\bar{R}^t(3)|^2$, $P_1^t = |\bar{R}^t(4)|^2$, где $\bar{R}^t(i)$ – компоненты вектора \bar{R}^t . Как показано ниже, для двух различных спиновых систем, представленных на рис. 1*a* и 1*б*, уравнение (6), имея одинаковый вид, дает существенно разные результаты вследствие различно-го соотношения для них параметров α и β .

Решение уравнений (6) и анализ нестационарного поведения соответствующих спиновых систем будем проводить численно, а для интерпретации полученных численных результатов будем исполь-

зовать аналитические выражения, полученные в рамках секулярного приближения. В частности, оно хорошо работает для систем $NV-{}^{13}C$, в которые входит ядерный спин ¹³С, являющийся вторым и третьим соседом вакансии. Кроме того, согласно базе данных, полученной в работе [4], для всех вторых соседей $A_{ZZ} \le 0$, а для всех третьих соседей $A_{77} > 0$, так что они как раз являются представителями систем, изображенных на рис. 1а и 16 соответственно. Здесь мы приведем результаты численного анализа динамики под действием МВИ, выполненного для двух конкретных систем: в первом случае (рис. 1*a*) выберем систему ${}^{14}NV - {}^{13}C_{234}$, а во втором (рис. 1*б*) – систему ${}^{14}NV - {}^{13}C_{159}$, где нижний индекс у ¹³С указывает номер его позиции в базе данных, полученной в [4]. Рассчитанные в [4] матрицы A_{KL} для систем ¹⁴NV–¹³C₂₃₄ и ¹⁴NV–¹³C₁₅₉ имели вид (в МГц):

$$A^{C_{159}} = \begin{pmatrix} 10.6987 & 1.1499 & 0.5282 \\ 1.1499 & 13.2551 & 1.3779 \\ 0.5282 & 1.3779 & 11.1276 \end{pmatrix},$$

$$A^{C_{234}} = \begin{pmatrix} -3.8682 & 0.8184 & -0.8851 \\ 0.8184 & -6.0693 & -0.2959 \\ -0.8851 & -0.2959 & -6.3569 \end{pmatrix},$$
(7)

В магнитном поле B = 200 гаусс ($B \parallel OZ$) состояния системы ¹⁴NV-¹³C₂₃₄, рассчитанные численной диагонализацией спин-гамильтониана (1), имели энергии, соответствующие частотам переходов $\omega_{21} = 0.2126$ МГц, $\omega_{31} = 2308.5106$ МГц и $\omega_{41} = 2314.7285$ МГц ($\omega_{43} = 6.2179$ МГц), которые хорошо аппроксимируются аналитическими выражениями (4), где для данной спиновой системы $\Delta = 6.2134 \text{ M}$ Гц, $\delta = 0.2141 \text{ M}$ Гц. Соответственно, собственные функции для нее имели вид (2) при $\alpha = 0.0762, \beta = 0.9972, \phi = -2.8189$ радиан. Аналогично, для системы ${}^{14}NV - {}^{13}C_{159}$ численная диагонализация гамильтониана (1) дает частоты переходов $\omega_{21} = 0.2042$ МГц, $\omega_{31} = 2305.8626$ МГц и $\omega_{41} = 2317.2702 \text{ M}$ Гц ($\omega_{43} = 11.4076 \text{ M}$ Гц), что также хорошо соответствует аналитическим результатам: $\Delta = 11.4374$ МГц и $\delta = 0.2142$ МГц. Для собственных функций (4) в данном случае параметры имели значения: $\alpha = 0.9979, \beta = 0.0649, \phi =$ = 1.2047 радиан.

Анализ нестационарной эволюции заселенности P_2^t состояния $2 = |0 \uparrow \swarrow \rangle$ для систем ¹⁴NV– ¹³C₂₃₄ и ¹⁴NV–¹³C₁₅₉ при начальном их состоянии $1 = |0 \uparrow \nearrow \rangle$, выполненный численным решением уравнения (6) при определенных значениях расстройки є и мощности *W* MBИ, показал, что максимально достижимая заселенность P_2^t существенно зависит от выбранных значений є и *W* и в

некоторых случаях она может быть близка к 1. Результаты таких расчетов показаны на рис. 2 в виде трехмерных графиков и в виде их проекции на плоскость є, *W*. Из этих рисунков видно, что максимально достижимая вероятность заселения состояния 2 из состояния 1 под действием МВИ реализуется лишь в узкой области взаимосвязанных параметров ε , *W*. В частности, для системы ¹⁴NV-¹³C₂₃₄ это имеет место уже при сравнительно малых мощностях МВИ и остается таковым при увеличении мощности МВИ при соответствующем линейном увеличении оптимальной расстройки резонанса. В случае системы ${}^{14}NV - {}^{13}C_{159}$ заселенность Р₂ максимальна лишь вблизи значений параметра W, меньших некоторого критического значения $W_{\text{крит}}$ (для системы ¹⁴NV—¹³C₁₅₉ $W_{\text{крит}} \sim 0.7647$ МГц), при превышении которого вероятность переворота спина ¹³С быстро убывает. Максимально достижимая заселенность состояния 2 составляет 0.9411 и 0.966 для систем ¹⁴NV-¹³C₂₃₄ и ¹⁴NV-¹³C₁₅₉ соответственно.

На рис. За и Зб представлены примеры нестационарного поведения заселенностей этих систем, полученные численным решением уравнения (6) при указанных в подписи к рисунку оптимальных значениях параметров Wи є. Из рисунков видно, что в моменты времени ~17 и 19 мкс имеет место почти полная инверсия перехода 1–2, т.е. МВИ такой длительности реализуют с вероятностью ~1 переворот ядерного спина ¹³С из состояния 1 в состояние 2.

Для интерпретации полученных численно оптимальных значений параметров MBИ рассмотрим представленные на рис. 2 спиновые системы NV–¹³C как состоящие из двух связанных CTB "одетых" полем MB-излучения двухуровневых систем (ДУС), включающих состояния 1–4 и 2–3 в случае системы ¹⁴NV–¹³C₂₃₄ и состояния 1–3, 2– 4 – в случае системы ¹⁴NV–¹³C₁₅₉. При полуклассическом описании взаимодействия ДУС b - a с невозмущенными энергиями $E_b^{(0)}$ и $E_a^{(0)}$ ($E_b^{(0)} > E_a^{(0)}$) и собственными функциями $\Psi_b^{(0)}$ и $\Psi_a^{(0)}$ с полем излучения частоты $\omega \sim \omega_{ba}$ квазиэнергетические состояния (КЭС) такой ДУС в резонансном приближении имеют вид (см., например, [9])

$$\Phi_{a} = e^{-i\left(E_{a}^{(0)} + \hbar\varepsilon_{b,a}^{(-)}\right)t/\hbar} \sqrt{\frac{\varepsilon_{b,a}^{(+)}}{\Omega_{b,a}}} \left(\Psi_{a}^{(0)} - \frac{W_{b,a}^{+}}{\varepsilon_{b,a}^{(+)}}\Psi_{b}^{(0)}e^{-i\omega t}\right), \quad (8a)$$

$$\Phi_{b} = e^{-i\left(E_{b}^{(0)} - \hbar\varepsilon_{b,a}^{(-)}\right)t/\hbar} \sqrt{\frac{\varepsilon_{b,a}^{(+)}}{\Omega_{b,a}}} \left(\Psi_{b}^{(0)} + \frac{W_{b,a}^{-}}{\varepsilon_{b,a}^{(+)}}\Psi_{a}^{(0)}e^{i\omega t}\right), \quad (86)$$

§ 3 2020



Рис. 2. Трехмерные графики зависимости максимально достижимой заселенности состояния 2 из состояния 1 от расстройки резонанса $\varepsilon = \omega_{41} - \omega$ и мощности *W* микроволн, полученные численным решением уравнения (6) для систем ¹⁴NV-¹³C₂₃₄ (*a*) и ¹⁴NV-¹³C₁₅₉ (*b*) и их проекции на плоскость ε , *W* (рис. *в* и *г*).



Рис. 3. Нестационарная эволюция заселенностей состояний спиновых систем ${}^{14}NV - {}^{13}C_{234}$ (*a*) и ${}^{14}NV - {}^{13}C_{159}$ (*б*) при воздействии на них МВИ с оптимальными характеристиками, взятыми с графиков рис. 2. В первом случае взяты значения W = 5 МГц, $\varepsilon_{4,1} = 29.4318$ МГц, а во втором – W = 0.76 МГц, $\varepsilon_{4,2} = 6.2415$ МГц. Кривые *1*–4 представляют заселенности состояний 1–4 соответственно.



Рис. 4. Иллюстрация совпадения КЭ уровней правой и левой ДУС рис. 1*a* в случае $\omega < \omega_{3,2}$, $\omega_{4,1}$, когда расстройки МВИ для обеих ДУС положительны.

где $\varepsilon_{b,a}^{(\pm)} = (\varepsilon_{b,a} \pm \Omega_{b,a})/2$, $\Omega_{b,a} = \varepsilon_{b,a} \sqrt{1 + 4 |W_{b,a}^{\pm}|^2 / \varepsilon_{b,a}^2} -$ обобщенная частота Раби, определенная с учетом знака расстройки резонанса $\varepsilon_{b,a} = \omega_{b,a} - \omega$, $W_{ba}^{\pm} -$ матричный элемент взаимодействия с излучением и корни берутся в арифметическом значении. Поскольку в наших случаях частоты переходов двух ДУС различны, для них различными будут и расстройки резонансов относительно частоты MBИ. Соответственно, для этих двух ДУС разными бу-дут значения параметров $\varepsilon_{4,1}^{(\pm)}$, $\varepsilon_{3,2}^{(\pm)}$ и $\Omega_{4,1}$, $\Omega_{3,2}$. Поэтому совпадения квазиуровней обеих ДУС могут иметь место лишь при определенных значениях расстройки резонанса $\varepsilon = \varepsilon_{41}$ и мощности *W* MBИ. В качестве примера на рис. 4 показана одна из возможных таких ситуаций для системы, представленной на рис. 1*a*.

Анализ КЭ-уровней ДУС 4–1 и 3–2, выполненный на основе выражений (8), показал, что при заданной мощности микроволн во всех случаях совпадение энергий КЭС этих ДУС имеет место при значениях расстройки $\varepsilon_{4,1}$, связанных с W следующим простым выражением:

$$\varepsilon_{4,1}^{\text{onr}[\pm]} = \frac{\Delta + \delta}{2} \pm \frac{\Delta - \delta}{2} \sqrt{1 + \frac{4\beta^2 W^2}{\Delta \delta}}.$$
 (9)

В случае слабого МВИ $W \to 0$ оптимальные значения расстройки (9) приближенно равны $\epsilon_{4,1}^{\text{опт[+]}} \approx \Delta, \epsilon_{4,1}^{\text{опт[-]}} \approx \delta$, а при увеличении мощности МВИ они зависят от W линейно. Аналогичный анализ, выполненный для системы, представленной на рис. 16, показал, что для нее совпадение КЭ-уровней "одетых" микроволнами ДУС 1-3 и 2-4 имеет место при значениях параметров, удовлетворяющих соотношениям

$$\varepsilon_{4,2}^{\text{onr}[\pm]} = \frac{\Delta - \delta}{2} \pm \frac{\Delta + \delta}{2} \sqrt{1 - \frac{4\alpha^2 W^2}{\Delta \delta}},$$
 (10)

принципиальное отличие которых от (9) состоит в наличии знака "минус" под корнем, означающего, что в данном случае пересечение КЭ-уровней возможно только при мощностях *W* микроволн, не превышающих критическое значение $W_{\text{крит}} = \sqrt{\Delta\delta/4\alpha^2}$. Для системы ¹⁴NV–¹³C₁₅₉ формула (10) дает значение $W_{\text{крит}} = 0.7747$ МГц. Отметим здесь, что, в отличие от (9), условие (10) записано для расстройки резонанса $\varepsilon_{4,2}$. Нетрудно проверить, что для обеих систем графики зависимостей оптимальных расстроек $\varepsilon_{4,1}^{(\pm)}$ от частоты Раби βW , рассчитанные по формулам (9), (10), практически полностью совпадают с показанными рис. 26 и 2г численными результатами для заселенности $P_2(\max) \sim 1$ состояния 2.

Таким образом, проведенные численные расчеты и их анализ на основе представления об "одетых" системах NV—¹³С позволил получить простые соотношения для взаимосвязанных характеристик МВИ, обеспечивающих эффективное манипулирование ядерным спином ¹³С. Используя базу данных работы [4], аналогичные расчеты могут быть выполнены и для других систем NV—¹³С, в том числе – исследованных экспериментально в [5].

Работа выполнена в рамках республиканской ГПНИ "Конвергенция-2020" и сотрудничества с НИЯУ МИФИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Doherty M.W., Manson N.B., Delaney P. et al. // Phys. Rep. 2013. V. 528. P. 1.
- Dobrovitski V.V., Fuchs G.D., Falk A.L. et al. // Ann. Rev. Cond. Matt. Phys. 2013. V. 4. P. 23.
- 3. Nizovtsev A.P., Kilin S.Ya., Pushkarchuk A.L. et al. // New J. Phys. 2014. V. 16. Art. № 083014.
- 4. *Nizovtsev A.P., Kilin S.Ya., Pushkarchuk A.L. et al.* // New J. Phys. 2018. V. 20. Art. № 023022.
- 5. London P., Scheuer J., Cai J.-M. et al. // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 111. Art. № 067601.
- Hodges J.S., Yang J.C., Ramanathan C. et al. // Phys. Rev. A. 2018. V. 78. Art. № 010303(R).
- Aiello C.D., Cappellaro P. // Phys. Rev. A. 2015. V. 91. Art. № 042340.
- Hartmann S.R., Hahn E.L. // Phys. Rev. 1962. V. 128. P. 2042.
- 9. *Тер-Микаелян М.Л.* // Препринт ИФИ-74-11. Аштарак, 1974.