

ФИЗИКА
PHYSICS

УДК 531:530.145; 537.9; 548.4

Поступила в редакцию 24.11.2016

Received 24.11.2016

**А. П. Низовцев¹, А. Л. Пушкарчук^{2,3}, С. А. Кутень³, В. А. Пушкарчук⁴,
С. Я. Килин¹, А. В. Лузанов⁵, О. А. Жикол⁵**

¹Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь²Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь³Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь⁴Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь⁵Научно-технологический комплекс «Институт монокристаллов»

Национальной академии наук Украины, Харьков, Украина

**СТАБИЛЬНЫЕ ЭЛЕКТРОННО-ЯДЕРНЫЕ СПИНОВЫЕ СИСТЕМЫ NV⁻¹³C
В АЛМАЗЕ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

Методами компьютерной химии рассчитаны матрицы A_{KL} , описывающие сверхтонкое взаимодействие (СТВ) электронного спина центра окраски «азот-вакансия» (NV-центра) в алмазе с ядерным спином атома ^{13}C , который расположен в одном из возможных узлов решетки в пассивированном водородом углеродном кластере $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$. Выполнен систематический анализ скоростей W_0 переверотов ядерных спинов ^{13}C , индуцируемых их анизотропным СТВ с электронным спином NV-центра. Показано, что в кластере имеются специфические позиции ядерного спина ^{13}C , в которых он практически не испытывает таких переверотов вследствие малости недиагональных элементов в соответствующих матрицах A_{KL} . Определено пространственное расположение найденных позиций стабильности в кластере относительно NV-центра и рассчитаны величины характерных расщеплений в спектрах оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР) для стабильных систем NV⁻¹³C, по которым их можно идентифицировать в процессе их экспериментального поиска для использования в разрабатываемых квантовых технологиях. Показано, что полностью стабильными ($W_0 = 0$) являются позиции ядерного спина, расположенные на оси симметрии NV-центра. Найденны характеристики восьми таких «осевых» систем NV⁻¹³C. Впервые обнаружено наличие в кластере дополнительных «неосевых» квазистабильных систем NV⁻¹³C, имеющих малые скорости переверотов ($W_0 \rightarrow 0$) спина ^{13}C вследствие высокой локальной симметрии распределения спиновой плотности, обуславливающей малость недиагональных элементов матриц СТВ для таких систем. Пространственно «не осевые» стабильные системы NV⁻¹³C расположены в плоскости, проходящей через вакансию NV-центра перпендикулярно его оси. Выполненный анализ имеющихся литературных данных показал, что, по-видимому, некоторые из предсказанных стабильных систем NV⁻¹³C уже наблюдались экспериментально.

Ключевые слова: квантовые технологии, кубиты, NV-центр в алмазе, спины, сверхтонкое взаимодействие, квантово-химическое моделирование.

A. P. Nizovtsev¹, A. L. Pushkarchuk^{2,3}, S. A. Kuten³, V. A. Pushkarchuk⁴, S. Ya. Kilin¹, A. V. Luzanov⁵, O. A. Zhikol⁵

¹*B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus*²*Institute of Physical-Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus*³*Institute for Nuclear Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus*⁴*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus*⁵*SSI Institute of Single Crystals of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv, Ukraine*

**ROBUST ELECTRONIC-NUCLEAR NV⁻¹³C SPIN SYSTEMS IN THE DIAMOND
FOR QUANTUM TECHNOLOGIES**

Using the methods of computational chemistry, we calculated matrices A_{KL} describing hyperfine interactions (HFI) between the electron spin of the color 'nitrogen-vacancy' center (NV center) in a diamond and a ^{13}C nuclear spin located somewhere in the H-terminated carbon cluster $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$ hosting the NV center. The rates W_0 of the ^{13}C spin flip-flops induced

by anisotropic HFI are calculated systematically for all possible locations of ^{13}C in the cluster. It is shown that in the cluster, there are specific positions of nuclear ^{13}C spin, in which it almost does not undergo such flip-flops due to small off-diagonal elements in corresponding matrices A_{KL} . Spatial locations of the ^{13}C stability positions in the cluster are discovered and characteristic splitting values in the spectra of optically detected magnetic resonance (ODMR) for the stable NV- ^{13}C systems are calculated, which can be utilized to identify them during their experimental search for use in emerging quantum technologies. It is shown that the positions of the ^{13}C nuclear spin located on the NV center symmetry axis are completely stable ($W_0 = 0$). The characteristics of eight ‘axial’ NV- ^{13}C systems are elucidated. The presence of additional ‘non-axial’ near-stable NV- ^{13}C spin systems also exhibiting very low flip-flop rates ($W_0 \rightarrow 0$) due to a high local symmetry of the spin density distribution resulting in vanishing the off-diagonal HFI matrix A_{KL} elements for such systems is revealed for the first time. Spatially, these ‘non-axial’ stable NV- ^{13}C systems are located near the plane passing through the vacancy of the NV center and being perpendicular to the NV axis. Analysis of the available publications showed that apparently, some of the predicted stable NV- ^{13}C systems have already been observed experimentally.

Keywords: quantum technologies, qubits, NV center in diamond, spins, hyperfine interaction, quantum-chemical simulation.

В современном мире все более широкое применение находят квантовые технологии, основанные на использовании законов квантовой физики для практического управления квантовыми системами на уровне их индивидуальных компонентов – атомов, молекул, примесных центров, фотонов и т. п. Прогресс в разработке таких технологий уже в ближайшее время приведет к созданию принципиально новых методов обработки информации и безопасной ее передачи на большие расстояния, созданию миниатюрных метрологических систем для потребностей нанотехнологий и биомедицинских применений (см., напр., [1, 2]). Особенно перспективным для этих целей является применение одиночных квантовых систем в твердых телах, в частности «гибридных» систем взаимодействующих электронных и ядерных спинов, где 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 [3–6]. Важным преимуществом таких систем является возможность применения хорошо разработанных методов магнитного резонанса, а также огромного потенциала методов и технологий, накопленного в процессе миниатюризации полупроводниковых устройств и интегральных схем.

Наиболее известным и активно изучаемым в последнее десятилетие представителем одиночных электронно-ядерных систем является центр окраски «азот-вакансия» (NV-центр) в алмазе, который состоит из замещающего атома азота (N) и вакансии (V) в соседнем узле решетки алмаза [7–11] (рис. 1, а). В нем электронным кубитом является спин $S = 1$ NV-центра в основном триплетном электронном состоянии, а ядерными спинами – спин $I^{(N)} = 1$ атома ^{14}N , принадлежащего данному NV-центру, и потенциально – ядерные спины $I^{(C)} = 1/2$ изотопических атомов ^{13}C , распределенных случайно в решетке алмаза и замещающих бесспиновые атомы ^{12}C с вероятностью 1,1 % (в естественных условиях). Центр обладает уникальным набором взаимосвязанных фотофизических и спиновых свойств, которые обеспечивают возможность оптической инициализации спинового состояния (с проекцией $m_s = 0$) одиночного электронного спина $S = 1$ и его считывания посредством измерения интенсивности испускаемой центром флуоресценции. Сверхтонкие взаимодействия (СТВ) электронного спина NV-центра с ядерными спинами, используемыми в качестве дополнительных кубит, позволяют выполнять многокубитные операции, которые могут быть реализованы с помощью последовательности оптических, микроволновых или радиочастотных импульсов для инициализации, манипулирования и считывания состояний электронно-ядерных спиновых систем NV- ^{13}C . Впервые это было сделано в 2004 г. в работе [12], где экспериментально была реализована операция «условное НЕ» в системе двух кубитов, которыми являлись электронный спин NV-центра и ядерный спин атома ^{13}C , расположенного в ближайшем к вакансии узле решетки алмаза. Важно отметить, что в данном исследовании впервые одна из квантовых операций была реализована при комнатной температуре. Именно это обстоятельство предопределило резкий рост интереса к изучению одиночных NV-центров. Ими стали активно заниматься многие научные группы во всем мире, усилиями которых в последующие годы были не только детально исследованы электронные и спиновые свойства NV-центров, выяснены разнообразные моменты их весьма нетривиальной фотофизики и ее связи со спиновыми свойствами центров, но и существенно развита инженерия алмаза [13–15]

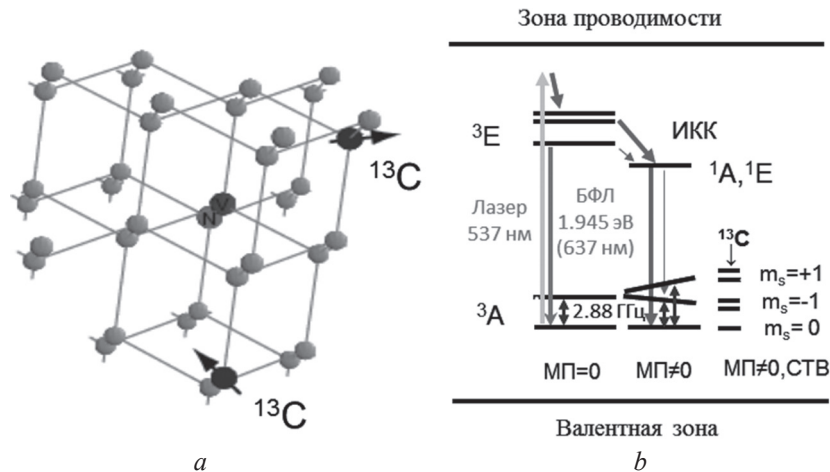


Рис. 1. Центр окраски «азот-вакансия» (NV-центр) в алмазе: *a* – схематическое изображение NV-центра в решетке алмаза и потенциально присутствующих ядерных спинов $I = 1/2$ изотопических атомов ^{13}C ; *b* – энергетические уровни NV-центра и возможные переходы между ними при отсутствии и наличии внешнего магнитного поля (МП = 0 и МП \neq 0 соответственно), а также с учетом сверхтонкого взаимодействия электронного спина центра с ядерным спином атома ^{13}C . Центр эффективно возбуждается из основного триплетного состояния ^3A излучением «зеленого» лазера и испускает яркую «красную» флуоресценцию в триплет-триплетном оптическом переходе $^3\text{E}\text{--}^3\text{A}$, интенсивность которой зависит от проекции спина $S = 1$ вследствие спин-селективных интеркомбинационных (ИСК) переходов в синглетные состояния ^1A , ^1E , скорости которых велики для проекций $m_s = \pm 1$ и малы для проекции $m_s = 0$. Такая спин-селективность ИСК переходов обеспечивает оптическую инициализацию состояния $m_s = 0$ центра, а также возможность оптического считывания спинового состояния центра

Fig. 1. “Nitrogen-vacancy” color center (NV center) in the diamond: *a* – schematic presentation of the NV center and isotopic ^{13}C atoms with nuclear spin $I = 1/2$ potentially presenting in the diamond lattice; *b* – NV center energy levels and possible transitions between them in the absence and in the presence of the applied magnetic field (MF = 0 and MF \neq 0) respectively, as well as those with the account of hyperfine interaction of the NV center electron spin with the ^{13}C nuclear atom spin. The center is excited efficiently by a “green” laser from the ground triplet state ^3A and emits bright “red” fluorescence in the triplet-triplet optical transition $^3\text{E}\text{--}^3\text{A}$, the intensity of which depends on the spin $S = 1$ projection due to the spin-selective intersystem crossing (ISC) transitions to the singlet states ^1A , ^1E , having large rates for projections $m_s = \pm 1$ and small ones for the projection $m_s = 0$. Such ISC transitions spin-selectivity results in the optical initialization of the $m_s = 0$ sub-state of the center and provides the opportunity of optical readout of the spin state of the center

(синтез чистого и даже изотопически чистого алмаза, создание в нем на заданной глубине NV-центров имплантацией, изготовление волноводных, фотонно-кристаллических структур в алмазе и т. п.). В частности, благодаря разработке динамических методов [16] подавления дефазировки состояний электронного спина центра под действием флуктуирующего спинового окружения удалось наблюдать одиночные NV-центры, слабо связанные с достаточно удаленными одиночными ядерными спинами ^{13}C [17–20], которые также стало возможным использовать в качестве кубитов. В настоящее время можно считать хорошо отработанными методы инициализации, когерентного манипулирования и измерения состояний электронных и ядерных спинов в системах NV– ^{13}C с целью их использования для различных целей в качестве квантовых регистров и квантовой памяти.

Еще одной многообещающей областью применения одиночных NV-центров является их использование в качестве сенсоров для измерения сверхслабых магнитных и электрических полей, а также температуры с высоким (нанометровым) пространственным разрешением (см., напр., обзоры [21, 22]). Физической основой метрологических применений NV-центров служит возможность измерения расщепления состояний NV-центра с проекциями электронного спина $m_s = \pm 1$ (рис. 1, *b*), величина которого напрямую связана с напряженностями действующих на центр полей. Для биологических приложений исключительно важным является то обстоятельство, что такие измерения можно проводить при комнатных температурах. Дополнительным позитивным фактором здесь является также то, что нанокристаллы алмаза с NV-центрами нетоксичны и биоинертны. Оценки предсказывали возможность детектирования одиночных электронных и даже ядерных спинов на нанометровых расстояниях, что недавно и было реализовано экспериментально. В перспективе это может привести к созданию нового направления ЯМР спектроскопии

наноразмерных образцов. Детальные обзоры основных результатов можно найти в работах [23, 24]. Следует также отметить, что в настоящее время проводится активный поиск других парамагнитных центров окраски в алмазе [25] и карбиде кремния [26, 27], демонстрирующих в некоторых случаях даже лучшие для применений характеристики по сравнению с NV-центрами.

Для практической реализации разрабатываемых квантовых технологий на основе «гибридных» спиновых систем необходимо иметь полную информацию об их спиновых свойствах и характеристиках сверхтонких взаимодействий в таких системах, а также их взаимосвязях с оптическими характеристиками. В экспериментах с одиночными спиновыми системами для этой цели стандартно используются методы оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР) (см. напр., [7]), обеспечивающие повышение чувствительности на 7 порядков по сравнению с обычным методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), благодаря чему оказывается возможным наблюдать разнообразные стационарные и нестационарные явления ОДМР на одиночных системах NV-¹³C и на основе анализа экспериментальных данных определять элементы матриц СТВ, в том числе и для систем с достаточно удаленными ядерными спинами ¹³C [17–20].

Альтернативным способом определения характеристик сверхтонких взаимодействий является применение современных методов компьютерного моделирования изучаемых спиновых систем, которые позволяют достаточно точно рассчитать пространственные, электронные и спиновые характеристики наноразмерных кластеров [28–33] или суперячеек [34, 35] алмаза, содержащих NV-центры, и далее – характеристики СТВ для различных систем NV-¹³C, отличающихся взаимным расположением электронного и ядерного спинов. В свою очередь последние можно использовать в методе спин-гамильтониана для описания экспериментально наблюдаемых зависимостей, а также поиска и предсказания оптимальных условий для получения нужных результатов при постановке планируемых экспериментов. В частности, нами был выполнен [36] детальный теоретический анализ характеристик СТВ в пассивированном водородом кластере алмаза C₂₉₁[NV]-H₁₇₂, содержащем NV-центр. Было показано, что вследствие симметрии центра в нем имеются «семейства» эквивалентных положений атомов ¹³C, демонстрирующих одинаковые характеристики СТВ. Для всех них в [36] были рассчитаны полные матрицы A_{KL} , описывающие сверхтонкие взаимодействия электронного спина NV-центра с ядерными спинами ¹³C. Подставляя найденные таким образом матрицы СТВ в спин-гамильтониан центра, мы рассчитали величины связанных с СТВ расщеплений $\Delta_i^{(0)}$ (в нулевом внешнем магнитном поле) состояний с проекциями электронного спина $m_s = \pm 1$ для всех возможных систем NV-¹³C в кластере. Следует отметить, что величины $\Delta_i^{(0)}$ являются характерными для каждого семейства, что можно использовать для их идентификации. Действительно, если для некоторой конкретной системы NV-¹³C измерить экспериментально величину СТВ расщепления $\Delta_i^{(0)}$ и найти подходящее значение в приведенной в [36] таблице возможных значений $\Delta_i^{(0)}$, то тем самым можно идентифицировать ее как принадлежащую к определенному семейству и воспользоваться далее рассчитанными для данного семейства матрицами СТВ для сравнения с имеющимися экспериментальными данными. В [36] показано, что такой подход позволил количественно (и практически без подгоночных параметров) описать экспериментальные данные работы [18], где были измерены величины СТВ расщеплений $\Delta_i^{(0)}$ для 400 различных систем NV-¹³C, а также изучена модификация спектра ОДМР в присутствии внешнего магнитного поля различной величины для одной из таких систем. К настоящему времени на основе полученных ранее расчетных данных для кластера C₂₉₁[NV]-H₁₇₂ нами был выполнен аналогичный анализ ряда других экспериментальных наблюдений, также продемонстрировавших успешность описанного подхода. Кроме того, для аналогичного кластера нами были рассчитаны [37] характеристики оптических переходов, давшие близкие к экспериментальным результаты для частоты и силы осциллятора бесфононного оптического триплет-триплетного перехода в NV-центре.

Вместе с тем для нахождения практически адекватных характеристик требуется увеличение размера моделируемого кластера. В частности, для самых разнообразных приложений необходимы максимально стабильные гибридные системы NV-¹³C, в которых ядерный спин атома ¹³C практически не испытывает нарушающих когерентность случайных переворотов, инициируемых

анизотропной составляющей СТВ (недиагональными элементами матрицы A_{KL}), наличие которой приводит при отсутствии внешнего магнитного поля к переворотам ядерного спина атома ^{13}C со скоростями, пропорциональными величине $W = (A_{ZX}^2 + A_{ZY}^2) / (A_{ZX}^2 + A_{ZY}^2 + A_{ZZ}^2)$ (см. [36, 38]), где A_{KL} – элементы матриц $A^{(Ci)}$ сверхтонких взаимодействий. Такие стабильные спиновые системы NV– ^{13}C были недавно обнаружены экспериментально в работах [38–41] в результате рутинного перебора большого количества различных систем NV– ^{13}C (напр., в [39] исследовано около 3300 различных систем NV– ^{13}C в изотопически очищенном алмазе с содержанием 0,2 % ^{13}C). Теория предсказывает [17, 36], что указанная стохастическая динамика ядерного спина ^{13}C отсутствует в тех специфических гибридных системах NV– ^{13}C , в которых атом ^{13}C расположен на оси NV-центра, поскольку для указанных систем матрица СТВ является диагональной и ось квантования ядерного спина всегда параллельна оси NV-центра. Очевидно, для целенаправленного экспериментального поиска таких систем желательно заранее знать их спиновые характеристики, в частности измеряемую экспериментально величину связанного с СТВ расщепления $\Delta_i^{(0)}$ линий в спектрах ОДМР. Для систем NV– ^{13}C с «осевым» расположением атома ^{13}C впервые такая информация была получена в нашей работе [36], где был рассмотрен только случай системы NV– ^{13}C с ближайшим к вакансии «осевым» положением атома ^{13}C , и для данной конкретной системы предсказана величина $\Delta_i^{(0)} = 187,4$ кГц.

В настоящей статье излагаются аналогичные результаты, полученные посредством моделирования бóльшего кластера $C_{510}[\text{NV}]\text{-H}_{252}$ при различном расположении в нем NV-центра, что дало возможность рассчитать характеристики СТВ для восьми спиновых систем NV–«осевой ^{13}C », в которых ядерный спин расположен существенно дальше от NV-центра как со стороны вакансии, так и со стороны атома азота. Анализ имеющихся экспериментальных данных, выполненный на основе полученных результатов, позволил сделать вывод о том, что ряд предсказанных систем NV–«осевой ^{13}C » уже наблюдался экспериментально в работах [38–41].

Для моделирования сверхтонких взаимодействий NV-центра в алмазе с различным образом расположенными в решетке ядерными спинами атомов ^{13}C здесь используется пассивированный водородом углеродный кластер $C_{510}[\text{NV}]\text{-H}_{252}$ с NV-центром, расположенным в центральной части кластера (рис. 2). Оптимизация геометрической структуры кластера и расчет распределения

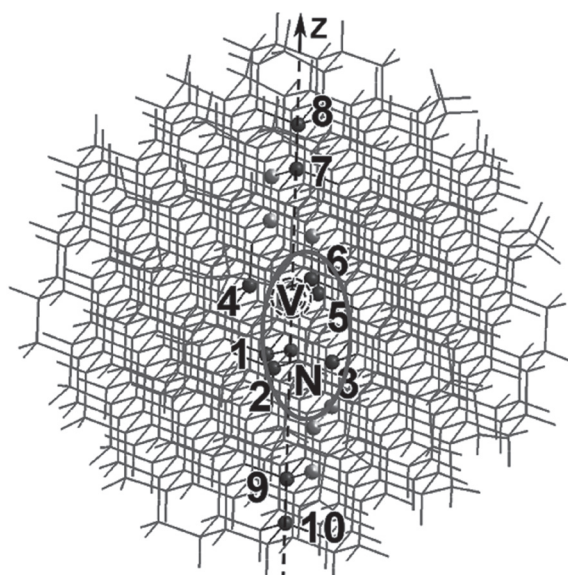


Рис. 2. Кластер $C_{510}[\text{NV}]\text{-H}_{252}$ с центральным расположением в нем NV-центра: положения 4, 5 и 6 нумеруют узлы решетки алмаза, ближайшие к вакансии, положения 7–10 лежат на оси NV-центра; пассивирующие поверхность атомы водорода не показаны

Fig. 2. Cluster $C_{510}[\text{NV}]\text{-H}_{252}$ with the central location of the NV center: Positions 4, 5 and 6 numerate the diamond lattice sites being the nearest neighbors of the vacancy, positions 7–10 are located on the NV center axis; the hydrogen atoms passivating the surface are not shown

спиновой плотности выполнялись методом функционала плотности (DFT) с функционалом B3LYP1 и базисом MINI/3-21G. Расчеты проводились в удаленном режиме на компьютерном кластере научно-технического комплекса «Институт монокристаллов» НАН Украины (г. Харьков). Вычисление матриц сверхтонких взаимодействий $A^{(i)}$ для всех возможных положений ($i = 1 \div 510$) атома ^{13}C в кластере производилось с использованием программных пакетов PC GAMESS (US) и ORCA. Для всех систем NV- ^{13}C это делалось в одной и той же системе координат, являющейся системой главных осей (СГО) NV-центра, в которой начало координат было расположено на атоме азота NV-центра, ось Z совпадала с осью его симметрии, а оси X и Y выбирались произвольно. Как известно, рассчитанные таким образом матрицы могут быть преобразованы к диагональному виду $\bar{A} = U^{-1}AU$ посредством соответствующего унитарного преобразования U , описывающего переход от СГО NV-центра к СГО ядерного спина ^{13}C . Элементы матрицы U при этом имеют смысл направляющих косинусов между различными осями в этих двух системах главных осей. В частности, элемент $U_{33} = U_{zz}$ есть косинус угла между осью Z NV-центра и осью z в СГО соответствующего ядерного спина ^{13}C .

Найденные матрицы $A^{(C_i)}$ СТВ подставлялись в стандартный спин-гамильтониан системы $^{14}\text{NV}-^{13}\text{C}$ (подробнее см. в [36]), численной диагонализацией которого рассчитывались энергии и спиновые волновые функции данной трехспиновой системы аналогично тому, как это было сделано в [36]. В частности, как и в [36], для всех 510 возможных положений ядерного спина ^{13}C в данном кластере были рассчитаны величины сверхтонкого расщепления $\Delta_i^{(0)}$ в нулевом внешнем магнитном поле состояний с проекциями электронного спина $m_s = \pm 1$ (при фиксированной проекции ядерного спина ^{14}N), по которым можно идентифицировать конкретные связанные системы NV- ^{13}C . Поскольку основной целью настоящей статьи является поиск максимально стабильных систем NV- ^{13}C , мы также рассчитали для всех возможных положений ^{13}C в кластере значения параметра $W_0 = (A_{ZX}^2 + A_{ZY}^2) / (A_{ZX}^2 + A_{ZY}^2 + A_{ZZ}^2)$, где A_{KL} – элементы матриц $A^{(C_i)}$ СТВ, которому пропорциональны (см. [36, 38]) индуцированные сверхтонкие взаимодействия скорости переверотов ядерных спинов ^{13}C в нулевом магнитном поле. Отметим, что приведенное аналитическое выражение W_0 через элементы матрицы СТВ получено в так называемом секулярном приближении (подробнее см. в [36]), которое вследствие большой величины тонкого расщепления ($D = 2870$ МГц) основного триплетного состояния NV-центра хорошо выполняется практически для всех систем NV- ^{13}C в кластере.

Результаты расчетов параметров W_0 для различных положений атома ^{13}C в решетке алмаза приведены на рис. 3, причем на рис. 3, *b* они представлены в виде, отсортированном по мере увеличения рассчитанных значений параметра W_0 , а на рис. 3, *c* в увеличенном виде показаны только выделенные на рис. 3, *b* значения скорости переверотов W_0 , являющиеся наименьшими для исследованного кластера ($W_0 < 0,015$). Из рис. 3, *b* видно, что в кластере $\text{C}_{510}[\text{NV}]-\text{H}_{252}$ с центральным расположением NV-центра имеется четыре положения атома ^{13}C , для которых скорости переверотов ядерного спина являются практически нулевыми. Анализ показал, что эти четыре положения – «осевые», т. е. лежат на оси NV-центра. Из рис. 3, *b* также следует, что в кластере имеется еще 18 других положений, для которых скорости переверотов также чрезвычайно малы $W_0 < 10^{-3}$. Анализ пространственного расположения этих позиций показал, что 9 из них находятся на границе кластера и лежат в плоскости, перпендикулярной оси NV-центра и проходящей приблизительно через вакансию NV-центра, поэтому был сделан вывод, что эти положения обусловлены краевыми эффектами. Заметим, что аналогичные «краевые» положения стабильности присутствуют также в меньшем кластере $\text{C}_{291}[\text{NV}]-\text{H}_{172}$. Другие 9 положений стабильности отличались от остальных тем, что для них были практически равны нулю косинусы углов между осью Z NV-центра и осями z систем главных осей ядерных спинов ^{13}C в этих положениях стабильности. Соответствующие матрицы СТВ для таких положений, как и для «осевых», являлись почти диагональными. Анализ показал, что 9 новых положений стабильности относятся к семействам $K2$ и Y , приведенным в табл. 1 работы [36]. В соответствии с нашими расчетными данными для трех положений семейства $K2$ величина обусловленного СТВ расщепления $\Delta_i^{(0)}$ составляла примерно 1 МГц, а сами эти узлы были расположены в плоскости,

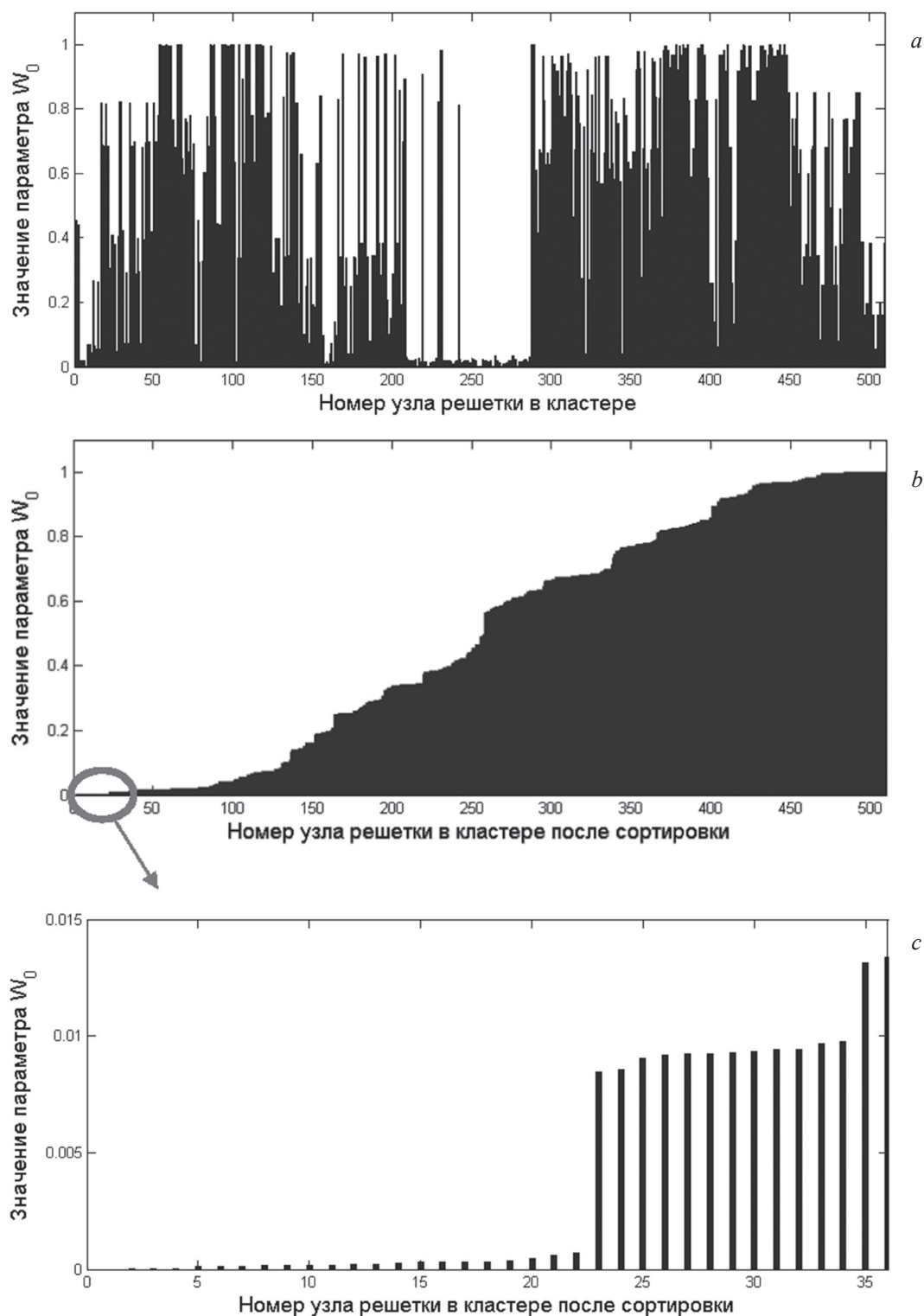


Рис. 3. Индуцированные СТВ скорости W_0 переворотов ядерных спинов атомов ^{13}C , расположенных в различных местах в кластере $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{-H}_{252}$ с центральным расположением NV-центра, представленного на рис. 2: *a* – в зависимости от номера положения атома ^{13}C в кластере; *b* – отсортированные по принципу увеличения скорости переворотов значения рассчитанного параметра W_0 для различных положений атома ^{13}C в кластере; *c* – значения параметра W_0 для 36 положений атома ^{13}C в кластере, имеющих наименьшие скорости $W_0 < 0,015$

Fig. 3. HFI-induced rates W_0 of the ^{13}C nuclear spin flip-flops for the ^{13}C atoms located in different positions in the cluster $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{-H}_{252}$ with the central location of the NV center shown in Fig. 2: *a* – vs. the assigned position number of the ^{13}C atoms in the cluster; *b* – sorted in the ascending order of the parameter W_0 ; *c* – W_0 parameter values for 36 locations of the ^{13}C atoms in the cluster having lowest rates $W_0 < 0.015$

перпендикулярной оси Z NV-центра, на расстоянии примерно $4,45 \text{ \AA}$ от нее, и имели координату $Z \sim 1,73 \text{ \AA}$. Другие 6 положений, относящихся к семейству Y , характеризуются величиной расщепления $\Delta_i^{(0)}$ порядка 205 кГц и также расположены в плоскости, перпендикулярной оси Z NV-центра, на расстояниях $5,36 \text{ \AA}$ от нее, при координате Z порядка $2,25 \text{ \AA}$. Наконец, следующими относительно стабильными положениями, характеризующимися уже существенно большими скоростями переверотов $W_0 > 10^{-2}$, являются положения, расположенные вблизи вакансии NV-центра. Они относятся к семействам A , C и I , характеристики которых приведены в табл. 1 работы [36]. Как следует из рис. 3, b , для других положений атомов ^{13}C в решетке алмаза значения параметра W_0 постепенно растут вплоть до 1.

Для практических целей наибольший интерес представляют характеристики «осевых» положений атома ^{13}C . Как уже отмечалось, в представленном на рис. 1 кластере таких атомов четыре и они имеют номера 7–10. Матрицы СТВ $A^{(Ci)}$, рассчитанные для осевых положений ядерных спинов ^{13}C , были практически диагональными, и эти диагональные элементы приведены в первых четырех строках таблицы. Видно, что ядерный спин $C7$, являющийся пятым соседом вакансии, наиболее сильно взаимодействует с электронным спином NV-центра. Рассчитанная для него величина СТВ расщепления $\Delta_i^{(0)}$ составляет $183,1 \text{ кГц}$, что близко к значению $187,4 \text{ кГц}$, полученному ранее в [36] для этого же положения атома ^{13}C в меньшем кластере $C_{291}[\text{NV}]\text{-H}_{172}$. Для трех других «осевых» положений атома ^{13}C , более удаленных от NV-центра, рассчитанные величины СТВ расщеплений в нулевом магнитном поле составляли $85,1$, $99,9$ и $58,7 \text{ кГц}$ для положений $C8$, $C9$ и $C10$ соответственно.

Из рис. 2 видно, что положение $C10$ находится вблизи поверхности данного кластера, так что последняя могла оказывать влияние на рассчитанные значения характеристик СТВ. Чтобы проверить степень такого влияния, а также получить данные о характеристиках сверхтонких взаимодействий для еще более удаленных «осевых» положений, были выполнены расчеты характеристик СТВ для двух других, показанных на рис. 4 a , b , кластеров $C_{510}[\text{NV}]\text{-H}_{252}$, в которых NV-центр был сдвинут вверх или вниз по сравнению с предыдущим кластером. Аналогичные расчеты, выполненные для этих двух кластеров, дали дополнительные данные о характеристиках СТВ для еще четырех положений $C11$ – $C14$ «осевых» атомов ^{13}C , расположенных как со стороны вакансии NV-центра, так и со стороны атома азота. Полученные для таких кластеров дан-

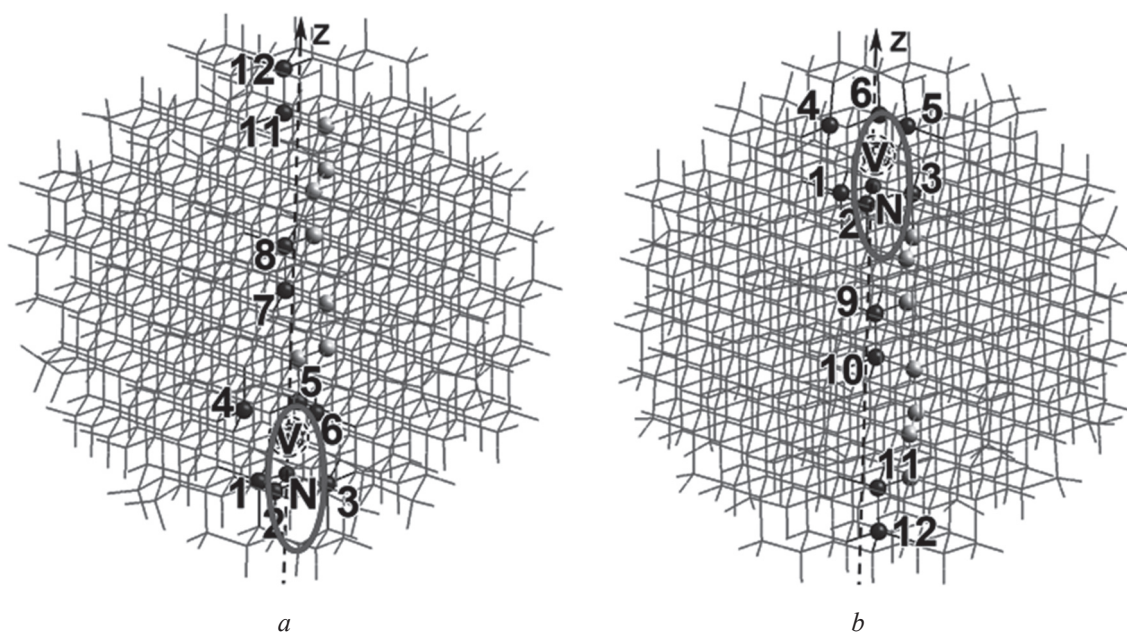


Рис. 4. Кластеры $C_{510}[\text{NV}]\text{-H}_{252}$, отличающиеся от представленного на рис. 2 кластера сдвигом NV-центра вниз (a) и вверх (b)

Fig. 4. Clusters $C_{510}[\text{NV}]\text{-H}_{252}$ differing from that shown in Fig. 2 by the shift of the NV center down (a) and up (b)

ные приведены в четырех нижних строках таблицы, а в первых четырех строках в скобках указаны вновь рассчитанные данные для «осевых» атомов ^{13}C в положениях C7–C10.

Для всех дополнительных «аксиальных» положений атома ^{13}C в кластере характеристики СТВ убывают по мере увеличения их расстояния от NV-центра. Кроме того, из сравнения характеристик сверхтонких взаимодействий, полученных для положения C10 при моделировании различных кластеров, следует, что влияние пассивированной водородом поверхности кластера приводит к некоторому росту величины обусловленного СТВ расщепления в нулевом внешнем магнитном поле.

Диагональные элементы матриц СТВ для спиновых систем NV- ^{13}C с «осевым» расположением атома ^{13}C в кластере $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$, а также рассчитанные расстояния таких атомов ^{13}C от атома азота NV-центра

Diagonal elements of the HFI matrices for the NV- ^{13}C spin systems with the “axial” location of the ^{13}C atom in the $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$ cluster as well as the calculated distances of such atoms from the nitrogen atom of the NV center

Положение	A_{xx} (кГц)	A_{yy} (кГц)	A_{zz} (кГц)	\bar{r}_{NC} (Å)
C7	-268,6 (-273,2)	-268,7 (-274,7)	183,1 (177,2)	6,47 (6,51)
C8	-128,0 (-126,0)	-127,9 (-126,3)	85,1 (88,8)	8,05 (8,08)
C9	-59,0 (-57,8)	-58,9 (-58,0)	99,9 (98,4)	4,58 (4,61)
C10	-30,6 (-30,3)	-30,6 (-30,3)	58,7 (57,7)	6,15 (6,17)
C11	-15,6	-15,6	31,4	12,80
C12	-10,6	-10,6	21,0	14,37
C13	-8,3	-8,3	16,6	10,89
C14	-6,0	-6,0	12,0	12,46

Исходя из полученных расчетных данных для положений стабильности различных систем NV- ^{13}C , можно идентифицировать системы, экспериментально исследованные в работах [38–41]. Так, в [38], где при комнатной температуре были выполнены прямые наблюдения динамики слабо связанных с одиночным NV-центром ядерных спинов ^{13}C , в числе прочих была экспериментально исследована система NV- ^{13}C с большим временем релаксации T_R , для которой при временах наблюдения $T_m \ll T_R$ во временной эволюции ядерного спина ^{13}C по двум возможным состояниям были зафиксированы два отстоящих друг от друга на 201 ± 3 кГц пика, соответствующих вызванному СТВ расщеплению. Учитывая величину этого расщепления, можно предположить, что в данной работе наблюдалась система NV- ^{13}C , в которой атом ^{13}C был либо «осевым», расположенным в ближайшем к вакансии положении (предсказываемая величина расщепления $\Delta_i^{(0)} \sim 183,1$ кГц), либо принадлежал к семейству Y (предсказываемая величина $\Delta_i^{(0)} \sim 205$ кГц). Далее в работах [39, 40] была найдена и использована для квантовой коррекции ошибок в гибридном регистре на электронно-ядерных спинах чрезвычайно стабильная спиновая система NV- ^{13}C , для которой величина вызванного СТВ расщепления $\Delta_i^{(0)}$ составляла 89 кГц. Для нее при комнатной температуре было продемонстрировано отсутствие переворотов спина ^{13}C на временах порядка десятков секунд. Вновь, исходя из расчетных данных, можно предположить, что в этих работах была найдена система NV- ^{13}C , где атом ^{13}C занимал одно из «осевых» положений C8 или C9 (см. рис. 2 или 4), для которых предсказываемые величины $\Delta_i^{(0)}$ составляют 85,1 и 99,9 кГц соответственно. Наконец в работе [41] коррекция ошибок в квантовой метрологии была продемонстрирована с использованием стабильной системы NV- ^{13}C с $\Delta_i^{(0)} \sim 50$ кГц, которой, по-видимому, является «осевая» система с расположением ядерного спина ^{13}C в положении C10 (предсказываемая величина $\Delta_i^{(0)}$ составляет 58,7 кГц). Таким образом, представленный анализ предсказываемых характеристик стабильных систем NV- ^{13}C и его сопоставление с имеющимися экспериментальными данными позволяет сделать вывод о том, что примененные методы компьютерного моделирования обеспечивают количественное соответствие расчетных данных экспериментальным результатам, и, следовательно, их можно использовать для прогнозирования новых планируемых экспериментов на системах типа NV- ^{13}C .

Благодарности. Работа выполнена в рамках задания 3.1 «Исследование и разработка квантово-оптических систем и устройств для применений в квантовой информатике, квантовой криптографии, квантовой метрологии и квантовой сенсорике» ГПНИ «Конвергенция-2020», подпрограмма «Объединение», а также белорусско-украинского проекта БРФФИ № Ф15УК/А-050 «Теоретическое изучение свойств парамагнитных центров окраски в функционализированном наноалмазе методами квантовой химии».

Acknowledgments. The present work was performed within the framework of Task 3.1 ‘Study and Development of Quantum-Optical Systems and Devices for Use in Quantum Informatics, Quantum Cryptography, Quantum Metrology and Quantum Sensorics’ of the State Research Program ‘Convergence-2020’, the Sub-program ‘Integration’, as well as the Belarusian-Ukrainian Project of the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research No. Ф15УК/А-050 ‘Theoretical Study of the Properties of the Paramagnetic Color Centers in Functionalized Nanodiamond by Quantum Chemistry Methods’.

Список использованных источников

1. Dowling, J. P. Quantum technology: the second quantum revolution / J. P. Dowling, G. L. Milburn // *Philos. Trans. R. Soc. A: Math., Phys. and Engineering Sci.* – 2003. – Vol. 361, № 1809. – P. 1655–1674.
2. Quantum technology: from research to application / W. P. Schleich [et al.] // *Appl. Phys. B.* – 2016. – Vol. 122. – P. 130.
3. Morton, J. J. L. Hybrid Solid-State Qubits: The Powerful Role of Electron Spins / J. J. L. Morton, B. W. Lovett // *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* – 2011. Vol. 2, № 1. – P. 189–212.
4. Ardavan, A. Quantum control in spintronics / A. Ardavan, G. A. D. Briggs // *Philos. Trans. R. Soc. A: Math., Phys. and Engineering Sci.* – 2011. – Vol. 369, № 1948. – P. 3229–3248.
5. Quantum computing with defects / J. R. Weber [et al.] // *Proc. Nat. Acad. Sci. USA.* – 2010. – Vol. 107, № 1948. – P. 8513–8518.
6. Quantum Spintronics: Engineering and Manipulating Atom-Like Spins in Semiconductors / D. D. Awschalom [et al.] // *Science.* – 2013. – Vol. 339, № 6124. – P. 1174–1179.
7. Wrachtrup, J. Read-out of single spins by optical spectroscopy / J. Wrachtrup, F. Jelezko // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2004. – Vol. 16, № 30. – P. R1089–R1104.
8. Wrachtrup, J. Processing quantum information in diamond / J. Wrachtrup, F. Jelezko // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2006. – Vol. 18, № 21. – P. S807–S824.
9. Wrachtrup, J. Single defect centres in diamond: A review / J. Wrachtrup, F. Jelezko // *Phys. Status Solidi (a).* – 2006. – Vol. 203, № 13. – P. 3207–3225.
10. The nitrogen-vacancy color centre in diamond / M. W. Doherty [et al.] // *Physics Reports.* – 2013. – Vol. 528, № 1. – P. 1–45.
11. Quantum control over Single Spins in Diamond / V. V. Dobrovitski [et al.] // *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* – 2013. – Vol. 4, № 1. – P. 23–50.
12. Observation of coherent oscillation of a single nuclear spin and realization of a two-qubit conditional quantum gate / F. Jelezko [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93, № 13. – P. 130501.
13. CVD diamond for spintronics / M. L. Markham [et al.] // *Diamond Relat. Mater.* – 2011. – Vol. 20, № 2. – P. 134–139.
14. Fabrication of single optical centres in diamond – a review / J. O. Orwa [et al.] // *J. Lumin.* – 2010. – Vol. 130, № 9. – P. 1646–1654.
15. Aharonovich, I. Diamond Nanophotonics / I. Aharonovich, E. Neu // *Adv. Opt. Mater.* – 2014. – Vol. 2, № 10. – P. 911–928.
16. Souza, A. M. Robust dynamical decoupling / A. M. Souza, G. A. Álvarez, D. Suter // *Phil. Trans. R. Soc. A: Math., Phys. and Engineering Sci.* – 2012. – Vol. 370, № 1976. – P. 4748–4769.
17. Smeltzer, B. ¹³C hyperfine interactions in the nitrogen-vacancy centre in diamond / B. Smeltzer, L. Childress, A. Gali // *New J. Phys.* – 2011. – Vol. 13, № 2. – P. 025021.
18. High-resolution spectroscopy of single NV defects coupled with nearby ¹³C nuclear spins in diamond / A. Dréau [et al.] // *Phys. Rev. B.* – 2012. – Vol. 85, № 13. – P. 134107.
19. Sensing single remote nuclear spins / N. Zhao [et al.] // *Nat. Nanotech.* – 2012. – Vol. 7, № 10. – P. 657–662.
20. Kolkowitz, S. Sensing distant nuclear spins with a single electron spin / S. Kolkowitz, Q. P. Unterreithmeier, S. D. Bennett, M. D. Lukin // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – Vol. 109, № 13. – P. 13760.
21. Magnetometry with nitrogen-vacancy defects in diamond / L. Rondin [et al.] // *Rep. Prog. Phys.* – 2014. – Vol. 77, № 5. – P. 056503.
22. Wrachtrup, J. Single spin magnetic resonance / J. Wrachtrup, A. Finkler // *J. Magn. Reson.* – 2016. – Vol. 269. – P. 225–236.
23. Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond: Nanoscale Sensors for Physics and Biology / R. Schirhagl [et al.] // *Annu. Rev. Phys. Chem.* – 2014. – Vol. 65, № 1. – P. 83–105.
24. Nagl, A. Improving surface and defect center chemistry of fluorescent nanodiamonds for imaging purposes – a review / A. Nagl, S. R. Hemelaar, R. Schirhagl // *Anal. Bioanal. Chem.* – 2015. – Vol. 407, № 25. – P. 7521–7536.
25. Diamond integrated quantum photonics / A. D. Greentree [et al.] // *Mater. Today.* – 2008. – Vol. 11, № 9. – P. 22–31.
26. Castelletto, S. Quantum Effects in Silicon Carbide Hold Promise for Novel Integrated Devices and Sensors / S. Castelletto, B. C. Johnson, A. Boretti // *Adv. Opt. Mater.* – 2013. – Vol. 1, № 9. – P. 609–625.
27. Spin Centres in SiC for Quantum Technologies / G. V. Astakhov [et al.] // *Appl. Magn. Reson.* – 2016. – Vol. 47, № 1. – P. 793–812.
28. Ab Initio modeling of the electronic and spin properties of the [NV] – centers in diamond nanocrystals / V. A. Pushkarchuk [et al.] // *Opt. Spectrosc.* – 2005. – Vol. 99, № 2. – P. 245–256.
29. Modeling of atomic and electronic structure of diamond nanocrystals containing [NV]- centers by the density functional method / V. A. Pushkarchuk [et al.] // *J. Appl. Spectrosc.* – 2007. – Vol. 74, № 1. – P. 95–101.

30. Quantum Chemical Modeling of Structural, Electronic, and Spin Characteristics of NV Centers in Nanostructured Diamond: Surface Effect / V. A. Pushkarchuk [et. al.] // *Opt. Spectrosc.* – 2010. – Vol. 108, № 2. – P. 254–260.
31. Квантовые регистры на одиночных NV+n¹³C центрах в алмазе: I. Метод спин-гамильтониана / А. П. Низовцев [и др.] // *Оптика и спектроскопия.* – 2010. – Т. 108, № 2. – С. 260–269.
32. Spin-Hamiltonian analysis of quantum registers on single NV center and proximal¹³C nuclei in diamond / Alexander P. Nizovtsev [et al.] // *Quantum cryptography and computing: Theory and Implementation* / eds. by R. Horodecki, S. Kilin, J. Kowalik / – IOS Press, 2010. – Vol. 26. – P. 148–157.
33. Kramers Degenerated Spin Systems “NV Center + Few Proximal ¹³C Nuclei” in Diamond for Single-Spin Magnetometry / Alexander P. Nizovtsev [et al.] // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems.* – 2011. – Vol. 14, № 4. – P. 319–334.
34. Gali, A. Ab initio supercell calculations on nitrogen-vacancy center in diamond: Electronic structure and hyperfine tensors / A. Gali, M. Fyta, E. Kaxiras // *Phys. Rev. B.* – 2008. – Vol. 77, № 15. – P. 155206.
35. Smeltzer, B. ¹³C hyperfine interactions in the nitrogen-vacancy centre in diamond / B. Smeltzer, L. Childress, A. Gali // *New J. Phys.* – 2011. – Vol. 13, № 2. – P. 025021.
36. Theoretical study of hyperfine interactions and optically detected magnetic resonance spectra by simulation of the C₂₉₁[NV]-H₁₇₂ diamond cluster hosting NV center / A. P. Nizovtsev [et al.] // *New J. Phys.* – 2014. – Vol. 16, № 8. – P. 083014.
37. Luzanov, A. V. About theoretical peculiarities of lowest excitations in modified nanodiamond color centers / A. V. Luzanov // *Funct. Mater.* – 2017. – Vol. 24.
38. Probing the Dynamics of a Nuclear Spin Bath in Diamond through Time-Resolved Central Spin Magnetometry / A. Dréau [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2014. – Vol. 113, № 13. – P. 137601.
39. Quantum error correction in a solid-state hybrid spin register / G. Waldherr [et al.] // *Nature.* – 2014. – Vol. 506, № 7487. – P. 204–207.
40. Enhancing quantum sensing sensitivity by a quantum memory / S. Zaiser [et al.] // *Nat. Commun.* – 2016. – Vol. 7. – P. 12279.
41. Quantum metrology enhanced by repetitive quantum error correction / Th. Uden [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2016. – Vol. 116, № 23. – P. 230502.

References

1. Dowling J.P., Milburn G.L. Quantum technology: the second quantum revolution. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2003, vol. 361, no. 1890, pp. 1655–1674. Doi: 10.1098/rsta.2003.1227
2. Schleich W.P., Ranade K.S., Anton Ch., Arndt M., Aspelmeyer M., Bayer M., Berg G., Calarco T., Fuchs H., Giacobino E., Grassl M., Hänggi P., Heckl W.M., Hertel I.-V., Huelga S., Jelezko F., Keimer B., Kotthaus J.P., Leuchs G., Lütkenhaus N., Maurer U., Pfau T., Plenio M.B., Raseel E.M., Renn O., Silberhorn Ch., Schiedmayer J., Schmitt-Landsiedel D., Schönhammer K., Ustinov A., Walther P., Weinfurter H., Welzl E., Wiesendanger R., Wolf S., Zeilinger A., Zoller P. Quantum technology: from research to application. *Applied Physics B*, 2016, vol. 122, p. 130. Doi: 10.1007/s00340-016-6353-8
3. Morton J.J.L., Lovett B.W. Hybrid Solid-State Qubits: The Powerful Role of Electron Spins. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 2011, vol. 2, no. 1, pp. 189–212. Doi: 10.1146/annurev-conmatphys-062910-140514
4. Ardavan A., Briggs G.A.D. Quantum control in spintronics. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2011, vol. 369, no. 1948, pp. 3229–3248. Doi: 10.1098/rsta.2011.0009
5. Weber J.R., Koehl W.F., Varley J.B., Janotti A., Buckley B.B., Van de Walle C.G., Awschalom D.D. Quantum computing with defects. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2010, vol. 107, no. 19, pp. 8513–8518. Doi: 10.1073/pnas.1003052107
6. Awschalom D.D., Bassett L.C., Dzurak A.S., Hu E.L., Petta J.R. Quantum Spintronics: Engineering and Manipulating Atom-Like Spins in Semiconductors. *Science*, 2013, vol. 339, no. 6124, pp. 1174–1179. Doi: 10.1126/science.1231364
7. Jelezko F., Wrachtrup J. Read-out of single spins by optical spectroscopy. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2004, vol. 16, no. 30, pp. R1089–R1104. Doi: 10.1088/0953-8984/16/30/r03
8. Wrachtrup J., Jelezko F. Processing quantum information in diamond. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2006, vol. 18, no. 21, pp. S807–S824. Doi: 10.1088/0953-8984/18/21/s08
9. Wrachtrup J., Jelezko F. Single defect centres in diamond: A review. *Physica Status Solidi (a)*, 2006, vol. 203, no. 13, pp. 3207–3225. Doi: 10.1002/pssa.200671403
10. Doherty M.W., Manson N.B., Delaney P., Jelezko F., Wrachtrup J., Hollenberg L.C.L. The nitrogen-vacancy color centre in diamond. *Physics Reports*, 2013, vol. 528, no. 1, pp. 1–45. Doi: 10.1016/j.physrep.2013.02.001
11. Dobrovitski V.V., Fuchs G.D., Falk A.L., Santori C., Awschalom D.D. Quantum control over Single Spins in Diamond. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 2013, vol. 4, no. 1, pp. 23–50. Doi: 10.1146/annurev-conmatphys-030212-184238
12. Jelezko F., Gaebel T., Popa I., Domhan M., Gruber A., Wrachtrup J. Observation of coherent oscillation of a single nuclear spin and realization of a two-qubit conditional quantum gate. *Physical Review Letters*, 2004, vol. 93, no. 13, p. 130501. Doi: 10.1103/physrevlett.93.130501
13. Markham M.L., Dodson J.M., Scarsbrook G.A., Twitchen D.J., Balasubramanian G., Jelezko F., Wrachtrup J. CVD diamond for spintronics. *Diamond and Related Materials*, 2011, vol. 20, no. 2, pp. 134–139. Doi: 10.1016/j.diamond.2010.11.016
14. Orwa J.O., Greentree A.D., Aharonovich I., Alves A.D.C., VanDonkelaar J., Stacey A., Praver S. Fabrication of single optical centres in diamond – a review. *Journal of Luminescence*, 2010, vol. 130, no. 9, pp. 1646–1654. Doi: 10.1016/j.jlumin.2009.12.028
15. Aharonovich I., Neu E. Diamond Nanophotonics. *Advanced Optical Materials*, 2014, vol. 2, no. 10, pp. 911–928. Doi: 10.1002/adom.201400189
16. Souza A.M., Álvarez G.A., Suter D. Robust dynamical decoupling. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2012, vol. 370, no. 1976, pp. 4748–4769. Doi: 10.1098/rsta.2011.0355

17. Smeltzer B., Childress L., Gali A. ^{13}C hyperfine interactions in the nitrogen-vacancy centre in diamond. *New Journal of Physics*, 2011, vol. 13, no. 2, p. 025021. Doi: 10.1088/1367-2630/13/2/025021
18. Dréau A., Maze J.-R., Lesik M., Roch J.-F., Jacques V. High-resolution spectroscopy of single NV defects coupled with nearby ^{13}C nuclear spins in diamond. *Physical Review B*, 2012, vol. 85, no. 13, p. 134107. Doi: 10.1103/physrevb.85.134107
19. Zhao N., Honert J., Schmid B., Klas M., Isoya J., Markham M., Twitchen D., Jelezko F., Liu R.-B., Fedder H., Wrachtrup J. Sensing single remote nuclear spins. *Nature Nanotechnology*, 2012, vol. 7, no. 10, pp. 657–662. Doi: 10.1038/nnano.2012.152
20. Kolkowitz S., Unterreithmeier Q.P., Bennett S.D., Lukin M.D. Sensing distant nuclear spins with a single electron spin. *Physical Review Letters*, 2012, vol. 109, no. 13, p. 13760. Doi: 10.1103/physrevlett.109.137601
21. Rondin L.L., Tetienne J.-P., Hingant T., Roch J.-F., Maletinsky P., Jacques V. Magnetometry with nitrogen-vacancy defects in diamond. *Reports on Progress in Physics*, 2014, vol. 77, no. 5, p. 056503. Doi: 10.1088/0034-4885/77/5/056503
22. Wrachtrup J., Finkler A. Single spin magnetic resonance. *Journal of Magnetic Resonance*, 2016, vol. 269, pp. 225–236. Doi: 10.1016/j.jmr.2016.06.017
23. Schirhagl R., Chang K., Loretz M., Degen Ch.L. Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond: Nanoscale Sensors for Physics and Biology. *Annual Review of Physical Chemistry*, 2014, vol. 65, no. 1, pp. 83–105. Doi: 10.1146/annurev-physchem-040513-103659
24. Nagl A., Hemelaar S.R., Schirhagl R. Improving surface and defect center chemistry of fluorescent nanodiamonds for imaging purposes – a review. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2015, vol. 407, no. 25, pp. 7521–7536. Doi: 10.1007/s00216-015-8849-1
25. Greentree A.D., Fairchild B.A., Hossain F.M., Prawer S. Diamond integrated quantum photonics. *Materials Today*, 2008, vol. 11, no. 9, pp. 22–31. Doi: 10.1016/s1369-7021(08)70176-7
26. Castelletto S., Johnson B.C., Boretti A. Quantum Effects in Silicon Carbide Hold Promise for Novel Integrated Devices and Sensors. *Advanced Optical Materials*, 2013, vol. 1, no. 9, pp. 609–625. Doi: 10.1002/adom.201300246
27. Astakhov G.V., Simin D., Dyakonov V., Yavkin B.V., Orlinskii S.B., Proskuryakov I.I., Anisimov A.N., Soltamov V.A., Baranov P.G. Spin Centres in SiC for Quantum Technologies. *Applied Magnetic Resonance*, 2016, vol. 47, no. 7, pp. 793–812. Doi: 10.1007/s00723-016-0800-x
28. Pushkarchuk V.A., Kilin S.Ya., Nizovtsev A.P., Pushkarchuk A.L., Borisenko V.E., von Borzyskowski C., Filonov A.B. Ab Initio modeling of the electronic and spin properties of the [NV]-centers in diamond nanocrystals. *Optics and Spectroscopy*, 2005, vol. 99, no. 2, pp. 245–256. Doi: 10.1134/1.2034611
29. Pushkarchuk V.A., Kilin S.Ya., Nizovtsev A.P., Pushkarchuk A.L., Filonov A.B., Borisenko V.E. Modeling of atomic and electronic structure of diamond nanocrystals containing [NV]-centers by the density functional method. *Journal Applied Spectroscopy*, 2007, vol. 74, no. 1, pp. 95–101. Doi: 10.1007/s10812-007-0015-x
30. Pushkarchuk V.A., Kilin S.Ya., Nizovtsev A.P., Borisenko V.E., Filonov A.B., Pushkarchuk A.L., Kuten S.A. Quantum Chemical Modeling of Structural, Electronic, and Spin Characteristics of NV Centers in Nanostructured Diamond: Surface Effect. *Optics and Spectroscopy*, 2010, vol. 108, no. 2, pp. 254–260. Doi: 10.1134/s0030400x10020141
31. Nizovtsev A.P., Kilin S.Ya., Pushkarchuk V.A., Pushkarchuk A.L., Kuten S.A. Quantum registers based on single NV + $n^{13}\text{C}$ centers in diamond: I. The spin Hamiltonian method. *Optics and Spectroscopy*, 2010, vol. 108, no. 2, pp. 230–238. Doi: 10.1134/s0030400x10020128
32. Nizovtsev A.P., Kilin S.Ya., Pushkarchuk A.L., Pushkarchuk V.A., Kuten S.A. Spin-Hamiltonian analysis of quantum registers on single NV center and proximal ^{13}C nuclei in diamond. Horodecki R., Kilin S., Kowalik J. (eds.) *Quantum cryptography and computing: Theory and Implementation*. IOS Press, 2010, vol. 26, pp. 148–157. Doi: 10.3233/978-1-60750-547-1-148
33. Nizovtsev A.P., Kilin S.Ya., Pushkarchuk A.L., Pushkarchuk V.L., Kuten S.A. Kramers Degenerated Spin Systems “NV Center + Few Proximal ^{13}C Nuclei” in Diamond for Single-Spin Magnetometry. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2011, vol. 14, no. 4, pp. 319–334.
34. Gali A.A., Fyta M., Kaxiras E. Ab initio supercell calculations on nitrogen-vacancy center in diamond: Electronic structure and hyperfine tensors. *Physical Review B*, 2008, vol. 77, no. 15, p. 155206. Doi: 10.1103/physrevb.77.155206
35. Smeltzer B., Childress L., Gali A. ^{13}C hyperfine interactions in the nitrogen-vacancy centre in diamond. *New Journal of Physics*, 2011, vol. 13, no. 2, p. 025021. Doi: 10.1088/1367-2630/13/2/025021
36. Nizovtsev A.P., Kilin S.Ya., Pushkarchuk A.L., Pushkarchuk V.A., Jelezko F. Theoretical study of hyperfine interactions and optically detected magnetic resonance spectra by simulation of the $\text{C}_{291}[\text{NV}]\text{H}_{172}$ diamond cluster hosting NV center. *New Journal of Physics*, 2014, vol. 16, no. 8, p. 083014. Doi: 10.1088/1367-2630/16/8/083014
37. Luzanov A.V. About theoretical peculiarities of lowest excitations in modified nanodiamond color centers. *Functional Materials*, 2017, vol. 24.
38. Dréau A., Jamonneau P., Gazzano O., Kosen S., Roch J.-F., Maze J.R., Jacques V. Probing the Dynamics of a Nuclear Spin Bath in Diamond through Time-Resolved Central Spin Magnetometry. *Physical Review Letters*, 2014, vol. 113, no. 13, p. 137601. Doi: 10.1103/physrevlett.113.137601
39. Waldherr G., Wang Y., Zaiser S., Jamali M., Schulte-Herbrüggen T., Abe H., Ohshima T., Isoya J., Du J.F., Neumann P., Wrachtrup J. Quantum error correction in a solid-state hybrid spin register. *Nature*, 2014, vol. 506, no. 7487, pp. 204–207. Doi: 10.1038/nature12919
40. Zaiser S., Rendler T., Jakobi I., Wolf Th., Lee S.-Y., Wagner S., Bergholm V., Schulte-Herbrüggen Th., Neumann Ph., Wrachtrup J. Enhancing quantum sensing sensitivity by a quantum memory. *Nature Communications*, 2016, vol. 7, p. 12279. Doi: 10.1038/ncomms12279
41. Uden Th., Balasubramanian P., Louzon D., Vinkler Y., Plenio M.B., Markham M., Twitchen D., Lovchinsky I., Sushkov A.O., Lukin M.D., Retzker A., Naydenov B., McGuinness L.P., Jelezko F. Quantum metrology enhanced by repetitive quantum error correction. *Physical Review Letters*, 2016, vol. 116, no. 23, p. 230502. Doi: 10.1103/physrevlett.116.230502

Информация об авторах

Низовцев Александр Павлович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник центра квантовой оптики и квантовой информатики Института физики им. Б. И. Степанова, Национальная академия наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: apniz@ifanbel.bas-net.by

Пушкарчук Александр Леонидович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории ионного обмена и сорбции Института физико-органической химии, Национальная академия наук Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, г. Минск, Республика Беларусь); Институт ядерных проблем, Белорусский государственный университет (ул. Бобруйская, 11, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: alexp51@bk.ru

Кутень Семен Адамович – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией теоретической физики и моделирования ядерных процессов Института ядерных проблем, Белорусский государственный университет (ул. Бобруйская, 11, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: kut@inp.bsu.by

Пушкарчук Вадим Александрович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник центра 4.11 научно-исследовательской части, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: vadim@nv-center.com

Килин Сергей Яковлевич – академик, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий Центром квантовой оптики и квантовой информатики Института физики им. Б. И. Степанова, Национальная академия наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь); Заместитель Председателя Президиума Национальной академии наук Беларуси. E-mail: kilin@ifanbel.bas-net.by

Лузанов Анатолий Витальевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник отдела рентгеноструктурных исследований и квантовой химии Научно-технологического комплекса «Институт монокристаллов», Национальная академия наук Украины (пр. Ленина, 60, 61072, г. Харьков, Украина). E-mail: avluzanov@xray.isc.kharkov.com

Жикол Олег Анатольевич – кандидат химических наук, научный сотрудник отдела рентгеноструктурных исследований и квантовой химии Научно-технологического комплекса «Институт монокристаллов», Национальная академия наук Украины (пр. Ленина, 60, 61072, г. Харьков, Украина). E-mail: zhikol@xray.isc.kharkov.com

Для цитирования

Стабильные электронно-ядерные спиновые системы NV⁻¹³C в алмазе для квантовых технологий / А. П. Низовцев [и др.] // Вест. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 1. – С. 98–110.

Information about the authors

Nizovtsev Alexander Pavlovich – D. Sc. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Center of Quantum Optics and Quantum Informatics, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: apniz@ifanbel.bas-net.by

Pushkarchuk Alexander Leonidovich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Laboratory of Adsorption and Ion Exchange, Institute of Physical-Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (68, Sarganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus); Institute for Nuclear Problems of the Belarusian State University (11, Bobruiskaia Str., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: alexp51@bk.ru

Kuten Semen Adamovich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory of the Theoretical Physics and Simulation of Nuclear Processes, Institute for Nuclear Problems of the Belarusian State University (11, Bobruiskaia Str., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kut@inp.bsu.by

Pushkarchuk Vadim Alexandrovich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Center 4.11 of the Research Department of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vadim@nv-center.com

Kilin Sergei Yakovlevich – Academician, D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Center of Quantum Optics and Quantum Informatics, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus); Deputy Chairman of the Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus (66, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kilin@ifanbel.bas-net.by

Luzanov Anatolii Vital'ivich – D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Leading Researcher, Department of X-ray Diffraction Studies and Quantum Chemistry, SSI Institute of Single Crystals of the National Academy of Sciences of Ukraine (60, Lenin Ave., 61072, Kharkiv, Ukraine). E-mail: avluzanov@xray.isc.kharkov.com

Zhikol Oleg Anatol'evich – Ph. D. (Chemistry), Researcher, Department of X-ray Diffraction Studies and Quantum Chemistry, SSI Institute of Single Crystals of the National Academy of Sciences of Ukraine (60, Lenin Ave., 61072, Kharkiv, Ukraine). E-mail: zhikol@xray.isc.kharkov.com

For citation

Nizovtsev A.P., Pushkarchuk A.L., Kuten S.A., Pushkarchuk V.A., Kilin S. Ya., Luzanov A.V., Zhikol O.A. Robust electronic-nuclear NV⁻¹³C spin systems in the diamond for quantum technologies. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2017, no. 1, pp. 98–110. (In Russian).