

«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

На правах рукописи



Салказанов Александр Тотразович

**Исследование спиновых свойств одиночных комплексов NV-¹³C в алмазе
для применения в магнитометрии**

2.2.2. – электронная компонентная база микро- и наноэлектроники,
квантовых устройств

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва - 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (НИЯУ МИФИ).

Научный руководитель:

Каргин Николай Иванович, доктор технических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации, советник при ректорате НИЯУ МИФИ.

Научный консультант:

Гусев Александр Сергеевич, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики конденсированных сред (№67) института нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике НИЯУ МИФИ.

Официальные оппоненты:

Акимов Алексей Владимирович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, руководитель лаборатории, RQC-ФИАН;

Бабунц Роман Андреевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией микроволновой спектроскопии кристаллов ФТИ им. А. Ф. Иоффе;

Ральченко Виктор Григорьевич, кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН.

Защита состоится «26» декабря 2025 г. в 14:00 часов на заседании диссертационного совета МИФИ.2.01 федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ и на сайте <https://ds.mephi.ru/> федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».

Автореферат разослан « ____ » _____ 2025 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета МИФИ.2.01,
кандидат технических наук



Веселов Денис Сергеевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИИ

Актуальность темы исследований

NV-центры в алмазе представляют собой перспективную платформу для реализации квантовых устройств, что обусловлено высокой чувствительностью к магнитным полям, а также возможностью оптического и микроволнового управления, основанной на оптически детектируемом магнитном резонансе (ОДМР) [1-3]. В настоящее время достигнуты значительные успехи в разработке квантовых магнитометров на основе ансамблей NV-центров [4-6]. Однако пространственное разрешение таких магнитометров ограничено дифракционным пределом оптических методов (порядка 0.5 мкм). А для одиночных NV-центров симметрия C_{3v} исключает возможность полной векторной магнитометрии.

Спиновое окружение NV-центра, формируемое за счёт присутствия атомов углерода-13, представляет собой дополнительный функциональный ресурс для использования в квантовых технологиях [7]. Находясь вблизи NV-дефекта, ядра ^{13}C могут вступать в сверхтонкое взаимодействие (СТВ) с электронным спином, образуя гибридные комплексы $\text{NV}-^{13}\text{C}$. В таких комплексах за счёт эффекта СТВ имеется зависимость энергетического спектра от азимутального угла магнитного поля во втором порядке теории возмущений [8].

Кроме того, комплекс $\text{NV}-^{13}\text{C}$ является крамерово вырожденной системой, в которой двойное вырождение снимается исключительно под действием магнитного поля, что определяет устойчивость к электрическим возмущениям и механическим напряжениям [9, 10]. Поэтому исследование оптических и спиновых свойств комплексов $\text{NV}-^{13}\text{C}$ является актуальной научной задачей, представляющей интерес как с точки зрения расширения знаний о свойствах электрон-ядерных спиновых систем в алмазе, так и для практических приложений.

Цель и задачи исследования

Целью диссертационной работы является разработка и экспериментальная реализация способа квантовой векторной магнитометрии на основе одиночного спинового комплекса $NV-^{13}C$ в синтетическом алмазе, в котором изотоп углерода-13 (^{13}C) расположен в третьей координационной сфере относительно вакансии. Использование такого комплекса позволяет повысить точность измерений слабых магнитных полей за счёт подавления влияния внутрикристаллических деформационных и связанных с ними электрических полей.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. С применением метода спинового гамильтониана построить квантово-механическую модель комплекса $NV-^{13}C$, учитывающую взаимодействие с магнитным и электрическим полями, а также возможное сверхтонкое взаимодействие с несколькими ядрами ^{13}C .
2. Создать макет кристалла квантового сенсора на основе функционального CVD-слоя алмаза на HPHT-подложке, содержащего микрополосковую линию для подведения к комплексу $NV-^{13}C$ управляющего СВЧ-сигнала, иммерсионные твердотельные микролинзы для повышения внешнего квантового выхода, а также обеспечивающего оптическую адресацию и эффективное сопряжение с подсистемами ОДМР-спектроскопии и измерения автокорреляционной функции второго порядка.
3. Разработать методику пространственно-коррелированного анализа распределения NV-центров и изотопа ^{13}C в CVD-алмазе на основе флуоресцентной и рамановской спектроскопии.
4. Выполнить экспериментальный поиск одиночных комплексов $NV-^{13}C$ с расположением атома ^{13}C в третьей координационной сфере относительно вакансии.
5. Провести теоретический и экспериментальный анализ влияния магнитных и электрических полей на спектры ОДМР комплекса $NV-^{13}C$.

Научная новизна

1. Впервые разработана и экспериментально верифицирована количественная квантово-механическая модель одиночного комплекса NV-центра в алмазе с ядерным спином ^{13}C , являющимся третьим соседом вакансии, учитывающая полный набор взаимодействий и обеспечивающая точную интерпретацию спектров ОДМР такой спиновой системы.
2. Впервые показана возможность использования одиночного комплекса $\text{NV-}^{13}\text{C}$ с атомом ^{13}C в третьей координационной сфере относительно вакансии в качестве квантового сенсора для векторной магнитометрии при комнатной температуре.
3. Установлено, что в системе $\text{NV-}^{13}\text{C}$ вырождение снимается исключительно под действием внешнего магнитного поля, что обеспечивает подавление влияния внутрикристаллических деформационных и связанных с ними электрических полей на энергетические уровни комплекса. С использованием одиночного комплекса $\text{NV-}^{13}\text{C}$ выполнена оценка магнитного поля Земли, что подтверждает экспериментальную реализуемость разработанного подхода.

Практическая значимость

1. Использование гибридной спиновой системы $\text{NV-}^{13}\text{C}$ позволит повысить точность измерений слабых магнитных полей за счёт подавления влияния внутрикристаллических деформационных и связанных с ними электрических полей.
2. Получен патент РФ на изобретение № 2843830 "Устройство для наномасштабной визуализации слабых магнитных полей на основе комплекса $\text{NV-}^{13}\text{C}$ ". Приоритет 05.02.2025 г.
3. Результаты диссертационной работы используются при реализации крупного научного проекта № 075-15-2024-556 от «25» апреля 2024 г. и задач, решаемых в рамках НЦМУ «Электронные и квантовые технологии на основе синтетического алмаза».

Основные положения, выносимые на защиту

1. Квантово-механическая модель комплекса $NV-^{13}C$, основанная на спиновом гамильтониане, учитывающем воздействие магнитного и электрического полей, а также сверхтонкое взаимодействие с ядрами ^{13}C . Модель обеспечивает точность воспроизведения частот резонансных линий ОДМР в пределах ± 1.18 МГц.
2. Экспериментальные данные относительно величины расщепления нулевого поля (13.58 ± 0.06 МГц) в спектре ОДМР комплекса $NV-^{13}C$ с атомом ^{13}C , расположенным в третьей координационной сфере.
3. Способ измерения слабых магнитных полей (порядка 10 мкТл) на основе крамерсово вырожденной спиновой системы $NV-^{13}C$, обладающий сниженной чувствительностью к электрическим возмущениям и механическим напряжениям, что повышает точность определения модуля и вектора магнитного поля.
4. Методика визуализации магнитного поля (порядка 5 мТл) с помощью комплекса $NV-^{13}C$ с атомом ^{13}C , расположенным в третьей координационной сфере.

Достоверность результатов обеспечивается их многократной проверкой с использованием современного оборудования, а также корреляцией с имеющимися в литературе данными.

Апробация работы

Изложенные в диссертационной работе научные результаты докладывались и обсуждались на следующих международных и всероссийских конференциях: на XIV Международной научной конференции «Фуллерены и наноструктуры в конденсированных средах» (г. Минск, 18 - 20 сентября, 2024 г.), на российском форуме «Микроэлектроника - 2023» (г. Сочи, 9 - 14 октября 2023 г.), на российской конференции и школе молодых ученых по актуальным проблемам полупроводниковой фотоэлектроники «Фотоника 2023» (г. Новосибирск, 4 - 8 сентября 2023 г.), на IX

международной молодёжной научной школе-конференция «Современные проблемы физики и технологий» (г. Москва, 26 - 28 апреля 2022 г.), на научно-практической конференции по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники «Мокеровские чтения» (г. Москва, 2020 -2024 г.).

Публикации

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 3 статьях в журналах, индексируемых в базе данных Scopus, 1 статье в журнале из перечня ВАК, 7 работах в сборниках трудов конференций, а также в 1 патенте на изобретение. Список публикаций соискателя приведен в конце автореферата.

Личный вклад автора

Все результаты, представленные в диссертации, получены автором лично или при его непосредственном участии. Автор лично выполнил измерения спектров комбинационного рассеяния света (КРС), флуоресценции и ОДМР, обработку данных, а также моделирование спектров ОДМР.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из пяти глав, включающих литературный обзор, описание приборов и методов исследования, а также содержащих описание методики расчета концентрации, исследование ОДМР алмазов с различным содержанием ^{13}C , магнитометрию с одиночным комплексом $\text{NV-}^{13}\text{C}$, заключения, перечня цитируемой литературы и два приложения. Работа изложена на 138 страницах и содержит 54 рисунка, 3 таблицы, 101 источник литературы.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В **главе 1** рассмотрены свойства комплексов $NV-^{13}C$ и $NV-n^{13}C$. В первом случае система представляет интерес для наномасштабной магнитометрии, во втором случае для реализации квантовых регистров. Так же рассмотрены методы формирования таких комплексов и методы выращивания синтетического алмаза.

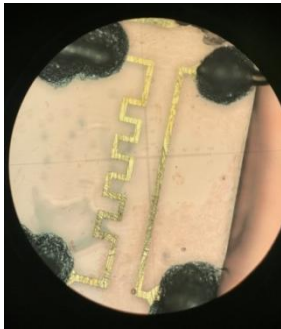
В **главе 2** обсуждаются приборы и методы исследования, которые использовались в данной работе. **Пункт 2.3.1** посвящен описанию макета кристалла квантового сенсора на основе функционального CVD-слоя алмаза, выращенного на НРНТ-подложке, содержащего микрополосковую линию для подведения к комплексу $NV-^{13}C$ управляющего СВЧ-сигнала (рисунок 1, а)), иммерсионные твердотельные микролинзы для повышения внешнего квантового выхода (рисунок 1, б)). Макет кристалла обеспечивает оптическую адресацию, эффективное сопряжение с подсистемами ОДМР-спектроскопии и измерения автокорреляционной функции второго порядка.

Генерация СВЧ-сигнала осуществляется с помощью высокостабильного цифрового синтезатора частот, управляемого программируемой логической интегральной схемой (ПЛИС, FPGA). Для детектирования флуоресценции NV-центров используется детектор одиночных фотонов IDQ ID100 (ID Quantique), который подключается к ПЛИС. Возбуждение NV-центров и сбор оптического сигнала производится с помощью лазерного сканирующего конфокального микроскопа Confotec NR500. Детектор ID100 интегрирован в оптическую систему через многомодовое оптоволокно, обеспечивающее эффективный сбор сигнала при минимальных оптических потерях.

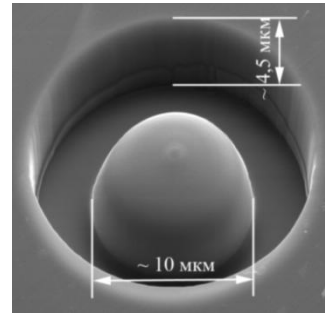
Для работы с ансамблями NV-центров использовалась внешняя СВЧ-антенна, изображение которой приведено на рисунке 1, в). Резонатор

располагался на подвижном столике микроскопа. Алмазный образец (кристалл) крепился в этом случае на предметном стекле, а стекло размещалось над лицевой поверхностью резонатора. На рисунке 1, *з*) также приведена зависимость коэффициента отражения S_{11} от частоты СВЧ сигнала. Минимум (-20 дБ) наблюдается при 2.87 ГГц (соответствует частоте микроволнового перехода между спиновыми состояниями $|0\rangle$ и $|\pm 1\rangle$ в основном состоянии NV-центра в алмазе).

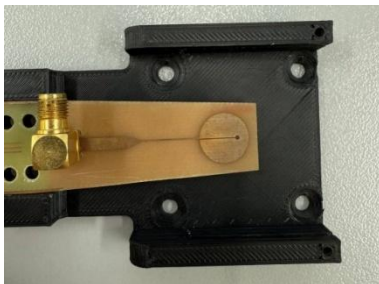
а)



б)



в)



з)

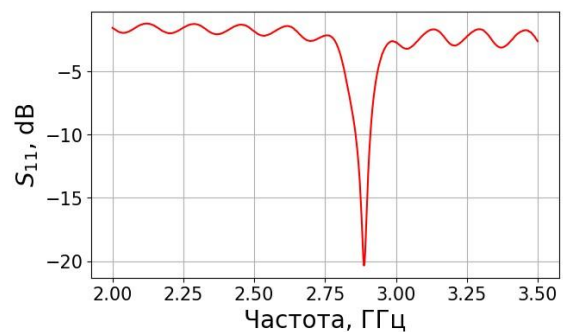


Рисунок 1. *а*) внешний вид микрополоска, *б*) изображение иммерсионной линзы на РЭМ, *в*) внешний вид антенны, *з*) зависимость параметра S_{11} от частоты

В главе 3 описаны технология получения исследуемых алмазных образцов с повышенным содержанием атомов изотопа углерода ^{13}C и методика исследования состава таких образцов. В разделе 3.2 приведена разработанная методика комплексной оценки концентрации NV-центров и ^{13}C в CVD - алмазных слоях. Для более точной характеристики алмаза предлагается, в дополнение к положению пика смеси, также учитывать соотношение площадей под пиками линии смеси и линии природного алмаза. Следующая

формула дает оценку концентрации ^{13}C , усредненной по имеющемуся конфокальному объему:

$$T_{^{13}\text{C}} = \frac{P_{^{13}\text{C}+^{12}\text{C}} \cdot R}{P_{^{13}\text{C}+^{12}\text{C}} + P_{\text{пр.С}}} \cdot N_{\text{C}} \cdot \frac{1}{V} \quad (1)$$

где $P_{^{13}\text{C}+^{12}\text{C}}$ - площадь под линией смеси, $P_{\text{пр.С}}$ - площадь под линией природного алмаза, R - доля ^{13}C в смеси, определяемая Рамановским сдвигом, V - конфокальный объем, N_{C} - количество атомов углерода в данном конфокальном объеме алмаза. В свою очередь концентрация NV-центров может быть оценена по формуле:

$$T_{\text{NV}} = \frac{P_{\text{NV}}}{P_{^{13}\text{C}+^{12}\text{C}} + P_{\text{пр.С}}} \cdot \frac{1}{K} \cdot \frac{1}{V} \quad (2)$$

где P_{NV} - площадь под пиком нулевой фоновой линии NV-центра ($\lambda = 637$ нм), $K = P_{\text{NV}} / (P_{^{13}\text{C}+^{12}\text{C}} + P_{\text{пр.С}})$ - константа, характеризующая одиночный NV-центр.

В главе 4 приведены экспериментально измеренные спектры ОДМР алмазных образцов с различным содержанием ^{13}C , а также квантово-механическая модель, основанная на спиновом гамильтониане, которая используется для интерпретации экспериментальных спектров ОДМР. В пункте 4.1 приведен полный гамильтониан комплекса NV- ^{13}C , включающий в основном электронном состоянии следующие слагаемые: член, описывающий расщепление в нулевом поле и взаимодействие с электрическим полем ($\hat{H}_{\text{РНП_ЭП}}$), сверхтонкие взаимодействия электронного спина NV-центра с ядерными спинами ^{14}N и ^{13}C и квадрупольное взаимодействие с ядром ^{14}N ($\hat{H}_{\text{СТВ_КП}}$), зеемановское взаимодействие с внешним магнитным полем ($\hat{H}_{\text{МП}}$), а также взаимодействие с СВЧ-магнитным полем ($\hat{H}_{\text{СВЧ}}$):

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{РНП_ЭП}} &= (D + d_{\parallel} E_z) \left(\hat{S}_Z^2 - \frac{2}{3} \right) - d_{\perp} E_x (\hat{S}_X^2 - \hat{S}_Y^2) + d_{\perp} E_y (\hat{S}_X \hat{S}_Y + \hat{S}_Y \hat{S}_X) \\ \hat{H}_{\text{СТВ_КП}} &= A_{\parallel}^N \hat{S}_Z \hat{I}_Z^N + A_{\perp}^N (\hat{S}_X \hat{I}_X^N + \hat{S}_Y \hat{I}_Y^N) + Q \left((\hat{I}_Z^N)^2 - \frac{2}{3} \right) + \hat{S} A^C \hat{I}^C \\ \hat{H}_{\text{МП}} &= \gamma_{\text{NV}} \vec{B} \hat{S} - \gamma_N \vec{B} \hat{I}^N - \gamma_C \vec{B} \hat{I}^C \\ \hat{H}_{\text{СВЧ}} &= \gamma_{\text{NV}} \vec{B}_{\text{СВЧ}} \hat{S} - \gamma_N \vec{B}_{\text{СВЧ}} \hat{I}^N - \gamma_C \vec{B}_{\text{СВЧ}} \hat{I}^C \end{aligned} \quad (3)$$

где $\hat{S} = (\hat{S}_X, \hat{S}_Y, \hat{S}_Z)$ - оператор электронного спина NV-центра, $\hat{I}^N = (\hat{I}_X^N, \hat{I}_Y^N, \hat{I}_Z^N)$ оператор ядерного спина азота ^{14}N , $\hat{I}^C = (\hat{I}_X^C, \hat{I}_Y^C, \hat{I}_Z^C)$ - оператор ядерного спина ^{13}C , $D = 2870$ МГц – параметр расщепления нулевого поля, $d_{\parallel} = 0.35$ Гц·см/В и $d_{\perp} = 17$ Гц·см/В параллельная и поперечная составляющая параметра взаимодействия с электрическим полем, $\vec{E} = (E_X, E_Y, E_Z)$ - напряженность электрического поля, \vec{B} – магнитная индукция, $A_{\parallel}^N = -2.14$ и $A_{\perp}^N = -2.7$ МГц продольная и поперечная компонента СТВ с ядерным спином ^{14}N , $Q = -5.01$ МГц – параметр квадрупольного взаимодействия, \mathbf{A}^C - тензор сверхтонкого взаимодействия с ядерным спином ^{13}C , $\gamma_{NV} = 2.8$ МГц/Гс, $\gamma_N = 0.31$ кГц/Гс, $\gamma_C = 1.07085$ кГц/Гс – гиромагнитные отношения электронного спина NV-центра, ядерных спинов ^{14}N и ^{13}C соответственно, $\vec{B}_{\text{СВЧ}}$ - вектор СВЧ - поля. Таким образом, полный гамильтониан основного состояния квантовой системы $\text{NV-}^{13}\text{C}$ можно записать в виде суммы:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{РНЦ_ЭП}} + \hat{H}_{\text{СТВ_КП}} + \hat{H}_{\text{МП}} + \hat{H}_{\text{СВЧ}} \quad (4)$$

Диагонализация полного гамильтониана (4) дает 18 собственных энергий и собственных состояний:

$$|\Psi_{\alpha}\rangle = \sum_{i=1}^{18} c_{\alpha}^i |m_S m_I^N m_I^C\rangle \quad (5)$$

где c_{α}^i - комплексные коэффициенты при базисных спиновых функциях:

$|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow 0 \uparrow\rangle, |\uparrow 0 \downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |0 \uparrow\uparrow\rangle, |0 \uparrow\downarrow\rangle, |00 \uparrow\rangle, |00 \downarrow\rangle, |0 \downarrow\uparrow\rangle, |0 \downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow 0 \uparrow\rangle, |\downarrow 0 \downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$, где первый элемент – это электронный спин NV-центра - m_S , второй элемент - ядерный спин ^{14}N - m_I^N и третий – это спин ^{13}C - m_I^C .

В ситуации, когда рядом с одиночным NV-центром находятся несколько ядерных спинов ^{13}C , часть гамильтониана, отвечающее за сверхтонкое

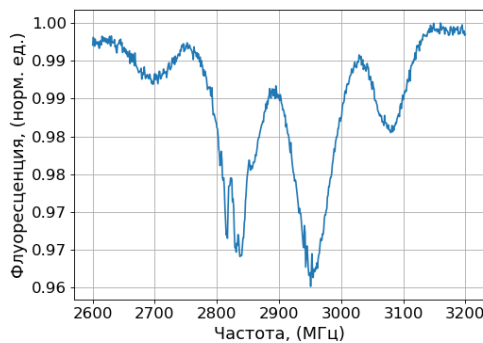
взаимодействие электронного спина NV-центра и ядерных спинов, описывается с помощью выражения:

$$\hat{H}^{[n]} = \hat{H}^{[n-1]} \otimes E + \sum_{KL} A_{KL}^{(n)} S_K \otimes E_1 \dots E_{N-2} \otimes E_{N-1} \otimes I_L \quad (6)$$

знак \otimes означает произведение Кронекера, $A_{KL}^{(j)}$ – матрицы, описывающие сверхтонкое взаимодействие каждого ядерного спина I_L с электронным спином S_K ($K, L = X, Y, Z$), а E представляет собой единичную матрицу размерности 2×2 .

В пункте 4.3 приведены экспериментальные и расчетные спектры ОДМР ансамблей NV-центров в CVD-алмазе с повышенным содержанием изотопов ^{13}C . На рисунке 2 приведены экспериментальный и расчетный спектр ОДМР для образца со $98 \pm 2\%$ содержанием ^{13}C . Из рисунка видно, что описанная выше модель качественно воспроизводит экспериментальные спектры.

а)



б)

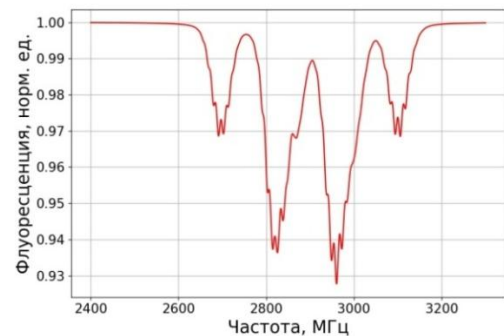


Рисунок 2. а) Экспериментальный спектр ОДМР, б) расчетный спектр

Глава 5 посвящена магнитометрии с помощью одиночных комплексов $\text{NV-}^{13}\text{C}$. В пункте 5.2 приводится методика измерения слабых магнитных полей с помощью Крамерсово вырожденной системы $\text{NV-}^{13}\text{C}$. Рисунок 3, а) иллюстрирует спектр ОДМР комплекса $\text{NV-}^{13}\text{C}$, зарегистрированный в присутствии магнитного поля Земли. Экспериментально измеренная величина расщепления нулевого поля, вызванного СТВ с ядерным спином ^{13}C , составила 13.58 ± 0.06 МГц, что достаточно хорошо согласуется с величиной расщепления 12.4 МГц, рассчитанной методами квантовой химии в работе [11]

для конфигурации NV- ^{13}C , где ^{13}C расположен в третьей координационной сфере относительно вакансии NV-центра. Далее по величине расщепления нулевого поля из базы данных [11] был выбран соответствующий тензор СТВ, который используется в спиновом гамильтониане (4) для моделирования спектров ОДМР.

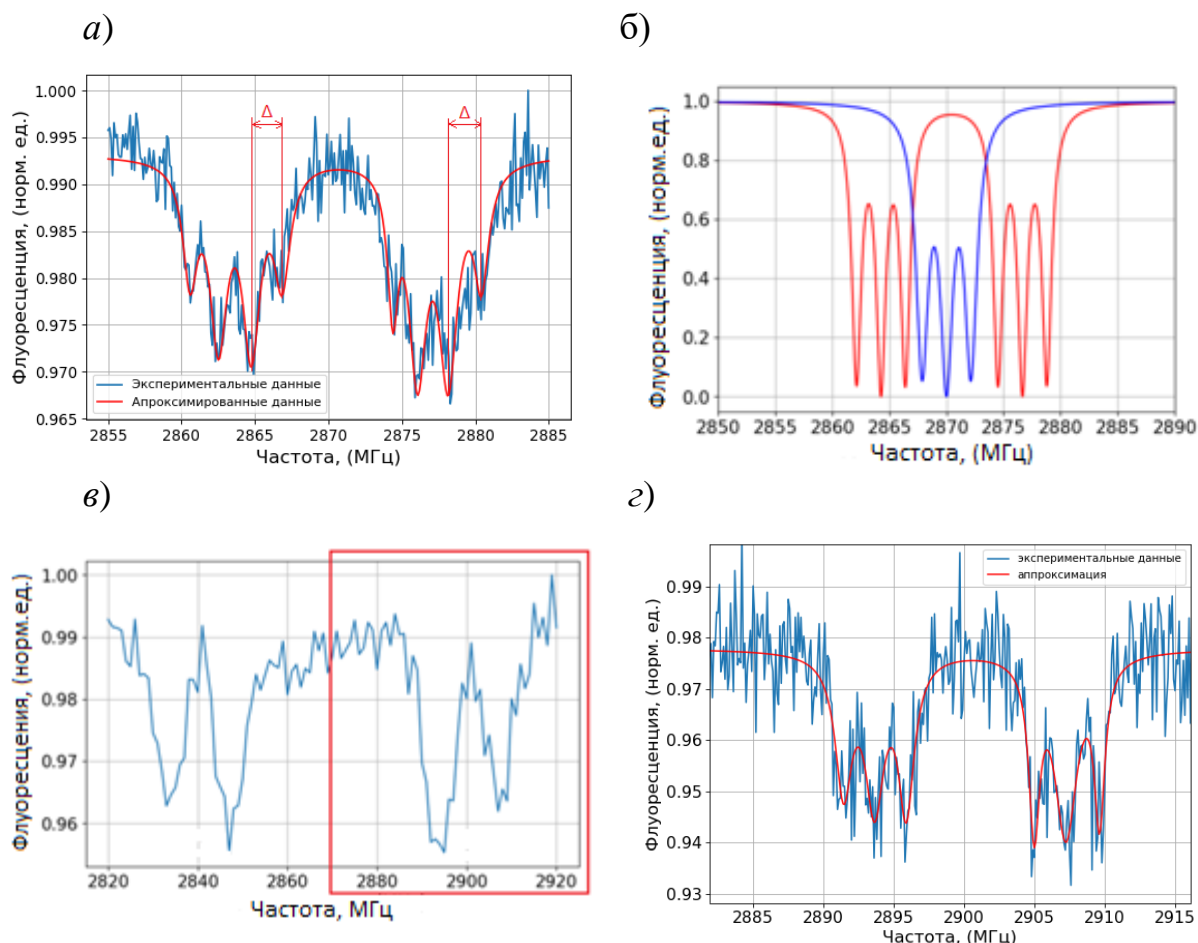


Рисунок 3. *а)* Спектр ОДМР комплекса NV- ^{13}C в условиях магнитного поля Земли, *б)* Модельный спектр ОДМР NV-центра (синяя кривая) и NV- ^{13}C (красная кривая), *в)* экспериментальный спектр ОДМР в магнитном поле 2 мТл, *г)* высокочастотная часть спектра ОДМР в высоком разрешении.

С использованием соответствующего тензора сверхтонкого взаимодействия был рассчитан модельный спектр ОДМР комплекса NV- ^{13}C при нулевом магнитном поле. Результаты моделирования представлены на рисунке 4, *б)*, в сравнении со спектром NV-центра без изотопа ^{13}C , где более узкие линии обусловлены СТВ с ядерным спином ^{14}N . На рисунке 3, *в)*,

показан экспериментальный спектр ОДМР в присутствии магнитного поля: вследствие эффекта Зеемана резонансные частоты сдвигаются, и в спектре отчетливо выделяются две пары линий. На рисунке 3, з), представлен фрагмент спектра из рисунка 3, в), в высоком разрешении, где можно видеть узкие линии от СТВ с ^{14}N (шесть из двенадцати возможных). В то же время на рисунке 3, а), регистрируется лишь восемь линий. Это связано с тем, что две пары резонансных пиков перекрываются.

С целью извлечения параметров магнитного поля задается функционал:

$$Q(B, \theta, \varphi) = \sum_i^n |v_{\text{эксп.}i} - v_{m_i}(B, \theta, \varphi)| \quad (7)$$

где n – число резонансных линий, $v_{\text{эксп.}i}$ – резонансные линии экспериментального спектра ОДМР, $v_{m_i}(B, \theta, \varphi)$ – соответствующие рассчитанные значения резонансных линий при различных параметрах B, θ, φ с помощью диагонализации полного спинового гамильтониана (4). Сначала рассчитываются значения резонансов v_{m_i} при различных комбинациях B, θ, φ . Значения $Q(B, \theta, \varphi)$ сохраняются в массив NumPy, после чего подбором определяются параметры, обеспечивающие наилучшее совпадение с положением экспериментальных резонансных линий $v_{\text{эксп.}i}$, и извлекаются соответствующее значение B, θ, φ .

При этом комплекс $\text{NV-}^{13}\text{C}$, как уже было отмечено во введении, является крамерово вырожденной системой, и это можно использовать в магнитометрии. В пункте 5.2.1 проведен теоретический анализ влияния внутрикристаллического электрического поля на спектры ОДМР NV и $\text{NV-}^{13}\text{C}$. Результаты расчетов приведены на рисунке 4, откуда можно видеть, что в отличие от NV, вырождение энергетических уровней $\text{NV-}^{13}\text{C}$ снимается только с помощью магнитного поля и не зависит от электрического поля. Таким образом, комплекс $\text{NV-}^{13}\text{C}$ позволяет разделить эффекты от внутрикристаллических и внешних (измеряемых) магнитных полей. В частности, используя сенсор $\text{NV-}^{13}\text{C}$, можно провести измерение известного

магнитного поля и далее, проинтерпретировав результаты теоретически с помощью (7), можно найти компоненты действующих на этот центр внутрикристаллических полей (калибровка), которые далее будут использоваться при теоретической интерпретации спектров ОДМР комплекса при воздействии на него неизвестного измеряемого магнитного поля. В случае одиночного NV-центра не получится провести такую процедуру, поскольку воздействия электрического и магнитного полей перемешаны.

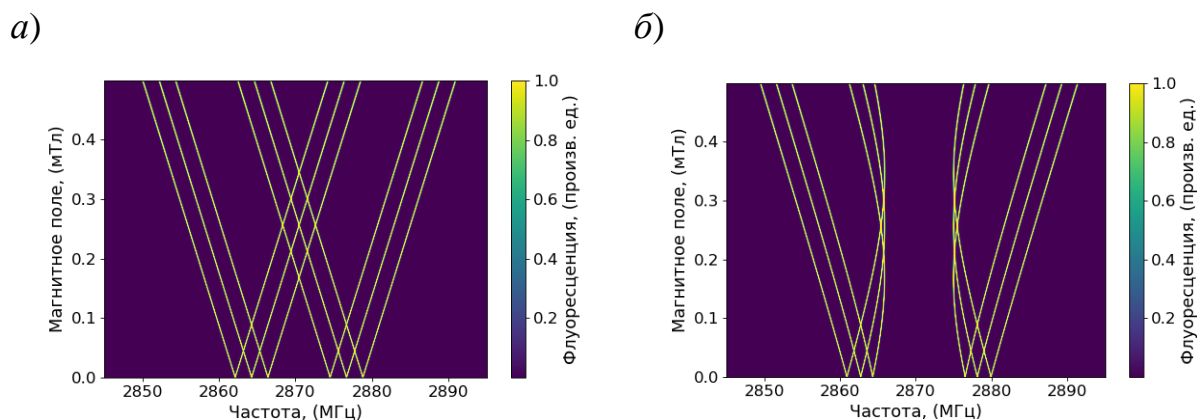


Рисунок 4 а) ОДМР NV-¹³C при различных магнитных полях и $E_{\perp} = 0$, б) ОДМР при полях при $E_{\perp} = 300$ кВ/см

Расчетная величина магнитного поля, действующего на сенсор, составила ~ 40 мкТл, что близко с величиной магнитного поля Земли 53 мкТл в г. Москва (величина получена с помощью калькулятора магнитного поля на сайте NOAA).

Следует отметить, что в данной работе применялся стационарный метод измерения спектров ОДМР, при котором на центр одновременно воздействуют лазерное и микроволновое излучение. Это приводит к расширению резонансных линий, что снижает чувствительность магнитометрии (FWHM линий ОДМР на рисунке 3 составляет ~ 1 МГц). Для повышения спектрального разрешения предложенного здесь метода магнитометрии с использованием крамерсово вырожденной системы NV-¹³C можно использовать импульсную схему измерения спектров ОДМР, которая технически более сложна, однако благодаря повышению спектрального

разрешения позволит учесть величину внутрикристаллических полей и более точно определить величину измеряемого магнитного поля.

В пункте 5.3 рассматривается подход к векторной магнитометрии, основанный на использовании спинового комплекса $NV^{-13}C$. Энергетическая структура системы, представлена на рисунке 5, а), без учета влияния ядра ^{14}N для упрощения анализа. На рисунке 5, б) показана теоретически рассчитанная зависимость частоты квантового перехода между уровнями 3 и 1 от модуля внешнего магнитного поля B и угла θ , при фиксированном значении азимутального угла φ . Из графика следует, что частота резонанса демонстрирует выраженную чувствительность к изменениям как величины поля, так и ориентации его направления, что подтверждает применимость комплекса $NV^{-13}C$ для векторной магнитометрии.

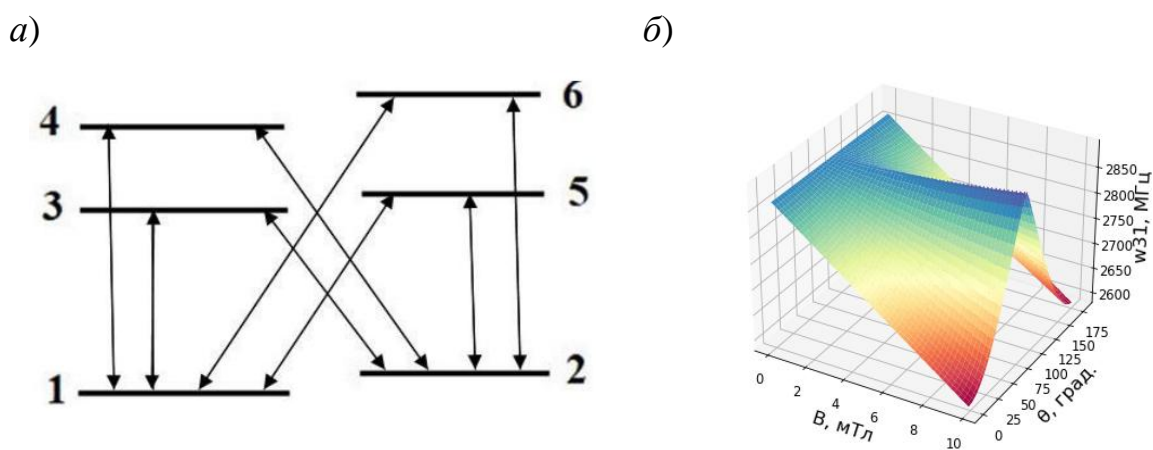


Рисунок 5. а) энергетические уровни комплекса $NV^{-13}C$ в магнитном поле, б) зависимость частоты перехода 3-1 от B и θ

Численное моделирование, выполненное с учетом анализа экспериментальных данных (рисунок 6, а)), показывает, что энергетическое расщепление между уровнями 1 и 2 демонстрирует выраженную зависимость от азимутального угла магнитного поля φ (рисунок 6, б)).

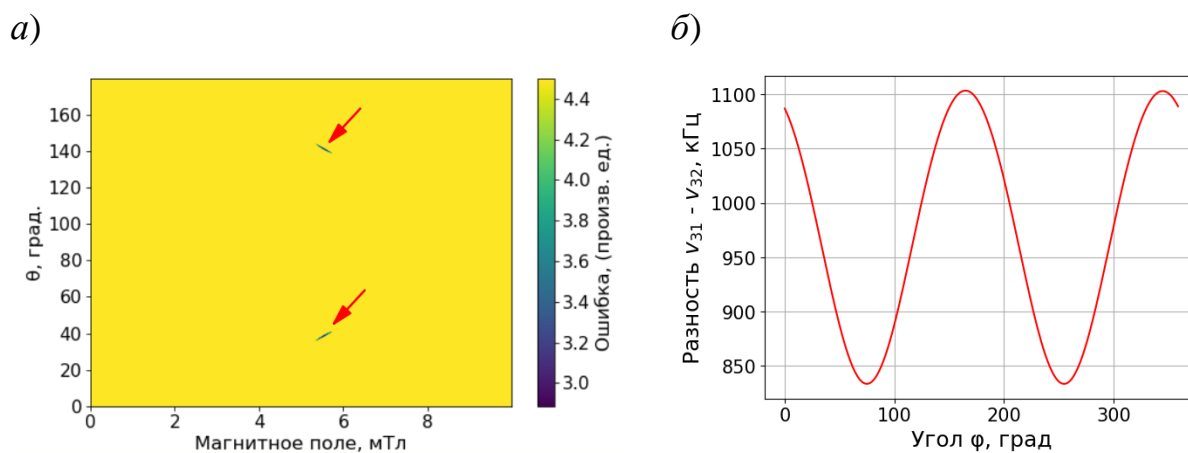


Рисунок 6. *a)* Зависимость функционала (7) от B и θ , *б)* расчетная зависимость разностей частот переходов 3-1 и 3-2 в комплексе $NV^{-13}C$, рассчитанная при фиксированных значениях $B = 5.6$ мТл и $\theta = 38.87^\circ$

Эта чувствительность открывает перспективу реализации трёхмерной визуализации магнитного поля на основе комплекса $NV^{-13}C$. Изменение частоты расщепления резонансных линий ОДМР в зависимости от ϕ составляет порядка 100 кГц. Для реализации полной векторной магнитометрии на основе исследуемого комплекса, помимо анализа спектральных характеристик ОДМР, может выполняться непосредственное определение частоты ЯМР-перехода 2-1 (рисунок 5, *a)*) путём его целенаправленного возбуждения и регистрации резонансного отклика с применением согласованных СВЧ – и радиочастотных импульсных последовательностей [12-14].

В заключении приведены основные результаты диссертационной работы.

Основные результаты, полученные в диссертационной работе:

1. Построена квантово-механическая модель комплекса $NV^{-13}C$ с использованием метода спинового гамильтониана. Учтены взаимодействия с магнитным и электрическим полями, сверхтонкое взаимодействие с ядерным спином ^{14}N и спинами нескольких ядер ^{13}C . Модель применена для интерпретации спектров ОДМР при различных условиях.

2. Создан макет кристалла квантового сенсора, содержащего функциональный CVD-слой алмаза на HPHT-подложке, микрополосковую линию для подведения к комплексу $NV-^{13}C$ управляющего СВЧ-сигнала, иммерсионные твердотельные микролинзы для повышения внешнего квантового выхода, а также обеспечивающего оптическую адресацию, эффективное сопряжение с подсистемами ОДМР-спектроскопии и измерение автокорреляционной функции второго порядка.
3. Разработана и реализована методика пространственно-коррелированного анализа распределения NV-центров и изотопа ^{13}C в CVD-алмазе, основанная на совмещённой флуоресцентной и рамановской спектроскопии.
4. Экспериментально реализован поиск одиночных комплексов $NV-^{13}C$ с расположением атома ^{13}C в третьей координационной сфере относительно вакансии. Идентифицированные комплексы использованы в экспериментах по векторной магнитометрии.
5. Проведён теоретический и экспериментальный анализ влияния магнитных и электрических полей на спектры ОДМР комплекса $NV-^{13}C$. Показано, что исследуемая спиновая система обладает крамерсовым вырождением, снимаемым исключительно внешним магнитным полем. Это обеспечивает устойчивость сенсора к влиянию электрических и деформационных полей и позволяет измерять слабые магнитные поля с высокой точностью.
6. Предложена методика визуализации магнитного поля (порядка 5 мТл) в наномасштабе с помощью комплекса $NV-^{13}C$ с атомом ^{13}C , расположенным в третьей координационной сфере.

Список публикаций по теме диссертации

*Научные статьи в журналах и изданиях, включенных в перечень ВАК
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации:*

1. **Салказанов А.Т.**, Гусев А.С., Калошин М.М., Косогорова Т.А., Низовцев А.П., Килин С.Я., Каргин Н.И. Наносенсор слабых магнитных полей на основе крамерсово вырожденной спиновой системы $^{14}\text{NV}-^{13}\text{C}$ // Письма в Журнал технической физики. — 2025. — Т. 51, № 13. — С. 7-10. (**ВАК К1**)

Научные статьи в журналах, входящих в базы данных Scopus:

2. **Salkazanov A.T.**, Gusev A.S., Kaloshin M.M., [et al.] Optically detectable magnetic resonance of NV-center ensembles in CVD diamond with different ^{13}C contents // Journal of Applied Spectroscopy. — 2024. — Vol. 91, No. 5. — P. 994-1002. — DOI: 10.1007/s10812-024-01812-x. (**Scopus Q4**)

3. Nizovtsev A.P., Kukin N.S., Muradova A.R., Semenov P.A., **Salkazanov A.T.**, Smirnova M.O., Pushkarchuk A.L., Vasilev A.N., Kargin N.I., Kilin S. Ya.. Vector Magnetometry Using a Single NV- ^{13}C Complex in Diamond // Journal of Applied Spectroscopy. — 2023.—V. 89. - I.6. — pp. 1064-1071. — DOI: 10.1007/s10812-023-01467-0. (**Scopus Q4**)

4. **Salkazanov A.T.**, Smirnova M.O., Tarelkin S.A., Gusev A.S., Drozdova T.E., Kaloshin M.M., Kargin N.I., Kornilov N.V., Nizovtsev A.P.. Investigation of Isotopic Composition and Purity of ^{13}C -Enriched CVD-Diamond Layers by Raman Spectroscopy and Photoluminescence // Journal of Applied Spectroscopy. — 2023. — V. 89. — I. 6. — pp. 1059-1063. — DOI: 10.1007/s10812-023-01466-1. (**Scopus Q4**)

Патенты:

5. Каргин Н.И., Гусев А.С., **Салказанов А.Т.**, Калошин М.М., Васильев А.Н., Кукин Н.С., Семёнов П.А., Низовцев А.П. Устройство для наномасштабной визуализации слабых магнитных полей на основе комплекса NV- ^{13}C // Патент РФ № 2843830, опубликовано 18.07.2025, бюл. № 20.

Прочие публикации

1. **Salkazanov A. T.**, Gusev A. S., Kargin N. I., Kaloshin M. M., Klokov V. A., Kosogorova T. A., Margushin R. E., Sauri A. D., Sychev A. A., Vergeles S. S.

Development of a Correlator for Measuring the Second-Order Autocorrelation Function of Single Photon Sources. Russian Microelectronics. — 2025. — Т. 54, № 4. — С. 325–332. <https://doi.org/10.1134/S1063739725600529>

2. **Салказанов А.Т.**, Вергелес С.С., Гусев А.С., Калошин М.М., Кукин Н.С., Маргушин Р.Е., Каргин Н.И., Низовцев А.П. Исследование энергетических уровней крамерсово-вырожденной системы $^{14}\text{NV-}^{13}\text{C}$ в магнитном и электрическом поле. Вестник НИЯУ МИФИ. — 2024. — Т. 13, № 4. — С. 204 - 210. <https://doi.org/10.26583/vestnik.2024.346>

3. Низовцев А. П., Пушкарчук А. Л., **Салказанов А. Т.**, Килин С. Я. Моделирование спектров оптически детектируемого магнитного резонанса индивидуальных спиновых систем $^{14}\text{NV-}^{13}\text{C}$ в алмазе для векторной магнитометрии // Фуллерены и наноструктуры в конденсированных средах: сб. науч. ст. / Нац. акад. наук Беларуси, Ин-т тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова. – Минск, 2024. – С. 151–157. – ISBN 978-985-7138-28-9.

4. Низовцев А. П., Пушкарчук А. Л., **Салказанов А. Т.**, Килин С. Я. Моделирование спектров оптически детектируемого магнитного резонанса крамерсово вырожденных спиновых систем ^{15}NV и $^{14}\text{NV-}^{13}\text{C}$ в алмазе для магнито- и электрометрии // Фуллерены и наноструктуры в конденсированных средах: сб. науч. ст. / Нац. акад. наук Беларуси, Ин-т тепло - и массообмена им. А. В. Лыкова. — Минск, 2024. — С. 158–164. — ISBN 978-985-7138-28-9.

5. **Салказанов А.Т.**, Гусев А.С., Калошин М.М., Саури А.Д., Жариков А.М., Низовцев А.П., Килин С.Я., Каргин Н.И., Рыжук Р.В. ОДМР ансамблей NV-центров в CVD-алмазе с различным содержанием изотопа ^{13}C // Мокеровские чтения: 15-я Международная научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники, 22–23 мая 2024 г.: сборник трудов. — М.: НИЯУ МИФИ, 2024. — С. 165–166.

6. **Салказанов А.Т.**, Кукин Н.С., Мурадова А.Р., Низовцев А.П., Семенов П.А., Смирнова М.О., Пушкарчук А.Л., Васильев А.Н., Гусев А.С., Калошин М.М., Каргин Н.И. Спиновая система NV- ^{13}C в магнитометрии // Тезисы докладов Российской конференции и школы молодых ученых по актуальным

проблемам полупроводниковой фотоэлектроники "ФОТОНИКА 2023" (4-8 сентября 2023 г., Новосибирск). - Новосибирск: ИФП СО РАН, 2023. - С. 120. DOI: 10.34077/RCSP2023-120.

7. **Салказанов А. Т.**, Васильев А. Н., Гусев А. С., Калошин М. М., Каргин Н. И., Кукин Н. С., Мурадова А. Р., Низовцев А. П., Семенов П. А., Пушкарчук А. Л. Векторная магнитометрия с использованием одиночного комплекса NV-¹³C в алмазе // ЭКБ и микроэлектронные модули: тезисы докладов научной конференции в рамках Российского форума «Микроэлектроника 2023». — Парк науки и искусства «Сириус», 9–14 октября 2023 г. — М.: ТЕХНОСФЕРА, 2023. — С. 636.

8. **Салказанов А.Т.**, Арзамасцева Д.М.,Тарелкин С.А., Смирнова М.О., Гусев А.С., Каргин Н.И.ОДМР комплекса NV – ¹³C в гомоэпитаксиальном алмазном слое // Мокеровские чтения: 13-я Международная научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники, 25–26 мая 2022 г.: сборник трудов. — М.: НИЯУ МИФИ, 2022. — С. 165–166.

9. **Салказанов А.Т.**, Арзамасцева Д.М., Гусев А.С., Смирнова М.О., Тарелкин С.А., Исследование изотопного состава гомоэпитаксиальных алмазных слоев // Мокеровские чтения: 12-я Международная научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники, 19–21 мая 2021 г.: сборник трудов. — М.: НИЯУ МИФИ, 2021. — С. 81–82.

Список используемой литературы

1. Doherty M.W., Manson N.B., Delaney P., Jelezko F., Wrachtrup J., Hollenberg L.C.L. The nitrogen-vacancy colourcentre in diamond // Physics Reports. – 2013. – Vol. 528, № 1. – P. 1–45. – DOI: 10.1016/j.physrep.2013.02.001.
2. 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, № 1. – P. 23–50. – DOI: 10.1146/annurev-conmatphys-030212-184238.

3. Neumann P., Wrachtrup J. Optical Engineering of Diamond / P. Neumann, J. Wrachtrup. – Weinheim, Germany: Wiley-VCH, 2013. – 277 p. – ISBN 978-3-527-41102-6. – DOI: 10.1002/9783527648603.

4. Webb J.L., Clement J.D., Troise L., Ahmadi S., Johansen G.J., Huck A.H., Andersen U.L. Nanotesla sensitivity magnetic field sensing using a compact diamond nitrogen-vacancy magnetometer // Applied Physics Letters. – 2019. – Vol. 114. – Art. 231103. – DOI: 10.1063/1.5095241.

5. Stürner F.M., Brenneis A., Kassel J., Wostradowski U., Rölver R., Fuchs T., Nakamura K., Sumiya H., Onoda S., Isoya J., Jelezko F. Compact integrated magnetometer based on nitrogen-vacancy centres in diamond // Diamond and Related Materials. – 2019. – Vol. 93. – P. 59-65. – DOI: 10.1016/j.diamond.2019.01.008.

6. Childress L., Gurudev Dutt M.V., Taylor J.M., Zibrov A.S., Jelezko F., Wrachtrup J., Hemmer P.R., Lukin M.D. Coherent Dynamics of Coupled Electron and Nuclear Spin Qubits in Diamond // Science. – 2006. – Vol. 314. – P. 281-285. – DOI: 10.1126/science.1131871.

7. Pham L.M., Le Sage D., Stanwix P.L., Yeung T.K., Glenn D., Trifonov A., Cappellaro P., Hemmer P.R., Lukin M.D., Park H. Magnetic field imaging with nitrogen-vacancy ensembles // New Journal of Physics. – 2011. – Vol. 13. – Art. 045021. – DOI: 10.1088/1367-2630/13/4/045021.

8. Rao K.R.K., Suter D. Characterization of hyperfine interaction between nitrogen-vacancy centers and ^{13}C nuclear spins in diamond // Physical Review B. — 2016. — Vol. 94, № 6. — Art. 060101(R). — DOI: 10.1103/PhysRevB.94.060101.

9. Nizovtsev A.P., Kilin S.Ya., Pushkarchuk A.L., Pushkarchuk V.A., 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, № 3. — P. 319-328.

10. Nizovtsev A.P., Kilin S.Ya., Pushkarchuk A.L., Pushkarchuk V.A., Kuten S.A. Kramers-degenerated NV+¹³C spin systems in diamond: analytical description // Proceedings of SPIE. — 2012. — Vol. 8699. — Art. 86990T. — DOI: 10.1117/12.2019074.
11. Nizovtsev A.P., Kilin S.Ya., Pushkarchuk A.L., Pushkarchuk V.A., Kuten S.A., Zhikol O.A., Schmitt S., Unden T., Jelezko F. Non-flipping ¹³C spins near an NV center in diamond: hyperfine and spatial characteristics by density functional theory simulation of the C510[NV]H252 cluster // New Journal of Physics. — 2018. — Vol. 20. — Art. 023022. — DOI: 10.1088/1367-2630/aaa725.
12. Boss J. M., Cujia K. S., Zopes J., Degen C. L. Quantum sensing with arbitrary frequency resolution // Science. — 2017. — Vol. 356, no. 6340. — P. 837–840. — DOI: 10.1126/science.aam7009.
13. Schmitt S., Gefen T., Stürner F. M., Unden T., Wolff G., Müller C., Scheuer J., Naydenov B., Markham M., Pezzagna S., Meijer J., Schwarz I., Plenio M., Retzker A., McGuinness L. P., Jelezko F. Sub-millihertz magnetic spectroscopy with a nanoscale quantum sensor // Science. — 2017. — Vol. 356, no. 6340. — P. 832–837. — DOI: 10.1126/science.aam5532.
14. Abobeih M. H., Randall J., Bradley C. E., Bartling H. P., Bakker M. A., Degen M. J., Markham M., Twitchen D. J., Taminiau T. H. Atomic-scale imaging of a 27-nuclear-spin cluster using a single-spin quantum sensor // Nature. — 2019. — Vol. 576, no. 7787. — P. 411–415. — DOI: 10.1038/s41586-019-1834-7.