

УПРАВЛЕНИЕ ЯДЕРНЫМ СПИНОМ В КОМПЛЕКСЕ NV–¹³C МЕТОДОМ ДВОЙНОГО РЕЗОНАНСА

А. Т. Салказанов ^{a*}, А. С. Гусев ^a, Н. И. Каргин ^a, М. М. Калошин ^a, Т. А. Косогорова ^a,
Р. Е. Маргушин ^a, С. С. Вергелес ^a, А. П. Низовцев ^{a,b}, С. Я. Килин ^{a,b}

^a Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”
115409, Москва, Россия

^b Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси
220072, Минск, Беларусь

Поступила в редакцию 3 октября 2025 г.,
после переработки 20 марта 2026 г.
Принята к публикации 31 марта 2026 г.

Экспериментально исследованы спектры оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР) комплексов NV–¹³C в синтетическом CVD-алмазе. Идентифицированы четыре конфигурации, соответствующие расположению атома ¹³C в различных координационных сферах относительно вакансии. Интерпретация спектров выполнена с использованием метода спинового гамильтониана и тензоров сверхтонкого взаимодействия, рассчитанных методом квантово-химического моделирования кластера C₅₁₀[NV]N₂₅₂. На основе численного анализа динамики в микроволновом поле определены параметры двойного резонанса Хартмана–Хана, обеспечивающие наиболее эффективный переворот ядерного спина ¹³C. Показано, что при найденных оптимальных значениях параметров микроволн вероятность переворота превышает 0.9 для всех исследованных конфигураций. Полученные результаты демонстрируют возможность селективного когерентного управления ядерными спинами ¹³C исключительно микроволновым излучением и перспективность их использования в качестве квантовых регистров.

Ключевые слова: NV-центр, алмаз, сверхтонкое взаимодействие, ОДМР, ядерный спин ¹³C, двойной резонанс Хартмана–Хана, квантовые регистры

DOI: 10.31857/S0044451026060011

1. ВВЕДЕНИЕ

Центры азот–вакансия (NV-центры) в алмазе в последние годы привлекают значительное внимание как перспективная квантовая платформа для сенсорики, квантовой информатики и исследований динамики спиновых систем. Уникальная особенность NV-центров заключается в возможности оптической инициализации и считывания спинового состояния при комнатной температуре [1, 2], а также в длительных временах когерентности электронного спина, что делает их удобным объектом для изучения взаимодействия с ядерными спинами в кристалле.

Особый интерес представляют комплексы NV–¹³C, присутствующие в алмазе благодаря на-

личием в окружении NV-центра атомов изотопа углерода ¹³C. Такие комплексы образуют многочастичные спиновые системы, в которых электронный спин NV взаимодействует как с ядерным спином собственного атома азота ¹⁴N, так и с одним или несколькими ядерными спинами изотопического углерода-13 [3, 4], содержание которых в природном алмазе составляет 1.1%, а в искусственно выращиваемых алмазах может быть значительным [5]. Сверхтонкое взаимодействие NV-центра с ядрами ¹³C приводит к характерному мультиплетному расщеплению линий в спектрах оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР), что позволяет идентифицировать конкретные конфигурации и определять параметры сверхтонкого тензора.

Изучение комплексов NV–¹³C имеет не только фундаментальное значение для понимания спиновой динамики в твердом теле, но и прикладное —

* E-mail: atsalkazanov@mephi.ru

ядерные спины ^{13}C активно используются в качестве долгоживущей квантовой памяти в регистрах на основе NV-центров в алмазе [6]. Стандартно манипулирование состояниями ядерных спинов ^{13}C в гибридных системах NV- ^{13}C осуществляется с помощью радиочастотных импульсов [7]. При этом, поскольку гиромагнитное отношение электронного спина на три порядка больше, чем ядерного спина, в последние годы активно развиваются методы непрямого управления ядерным спином с помощью СВЧ-излучения [8, 9].

В работе [10] предложен метод двойного резонанса Хартмана–Хана [11] для когерентного манипулирования состояниями ядерных спинов ^{13}C в системах NV- ^{13}C . Управление осуществляется только СВЧ-импульсами, воздействующими на электронный спин, в сочетании со свободной прецессией системы в анизотропном сверхтонком поле. Анизотропия сверхтонкого взаимодействия приводит к тому, что ось квантования ядерного спина зависит от состояния электронного спина, поэтому быстрые переключения электронного состояния позволяют изменять направление последующей прецессии ядра и тем самым управлять ядерным спином [12–14]. Кроме того, этот подход позволяет поляризовать не только близко расположенный ядерный спин ^{13}C , но и объемный ансамбль ядер ^{13}C [15, 16]. Хотя в данной работе основное внимание уделяется управлению NV- ^{13}C , изучаемая методика является достаточно универсальной. В частности, она может быть адаптирована и для работы с другими перспективными дефектами, такими как SiV-центры [17].

В работе [18] выполнен численный анализ динамики произвольных комплексов NV- ^{13}C под действием микроволнового излучения. В настоящей работе аналогичный подход применяется к комплексам NV- ^{13}C , экспериментально обнаруженным в синтетическом алмазе. Их идентификация осуществляется по спектрам ОДМР в рамках метода спинового гамильтониана. В отличие от работы [19], где для интерпретации экспериментальных данных использовались параметры сверхтонкого взаимодействия, рассчитанные в приближении суперъячейки, в данной работе за основу взято кластерное приближение, позволяющее более корректно описывать локальные особенности электронной структуры NV-дефекта и ближайшего атомного окружения. Поэтому для идентификации комплексов используются матрицы сверхтонкого взаимодействия, рассчитанные в работе [20] методом квантово-химического моделирования большого кластера $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$ и подтвержденные

экспериментально [21]. Далее для каждой системы находятся условия, обеспечивающие эффективное манипулирование ядерным спином ^{13}C .

2. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

В данной работе для исследований использовался образец, состоявший из эпитаксиального слоя алмаза, выращенного методом химического осаждения из газовой фазы (chemical vapor deposition, CVD) на HPHT-подложке (high pressure, high temperature) размером $0.4 \times 0.4 \text{ мм}^2$. Содержание азота в CVD-слое составляло не более 50 ppb (предел метода оптической спектроскопии поглощения на просвет). NV-центры в нем были созданы посредством облучения электронами с энергией 1.8 МэВ и последующего отжига при температуре 850°C в течение 10 мин. Плотность NV-центров оценивалась по картам флуоресценции, получаемым с помощью конфокальной системы. В среднем на области размером $20 \times 20 \text{ мкм}^2$ обнаруживается около 10 NV-центров (рис. 1). На поверхности образца была сформирована микрополосковая линия для подведения управляющего СВЧ-сигнала к NV-центрам (рис. 1 б).

Экспериментальное получение спектров ОДМР включало оптическую накачку с помощью лазера с длиной волны 532 нм для поляризации электронного спина NV-центра, микроволновое излучение в диапазоне от 2 до 4 ГГц для управления спиновыми переходами, сбор флуоресценции (650–800 нм) для регистрации ОДМР-сигнала и источник постоянного магнитного поля.

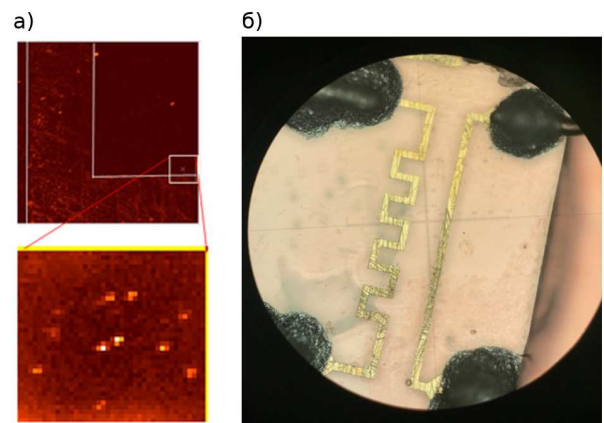


Рис. 1. а — Флуоресцентная карта. б — Микрополосковая линия для подвода СВЧ-сигнала. На панели а фрагмент области выделен белой рамкой

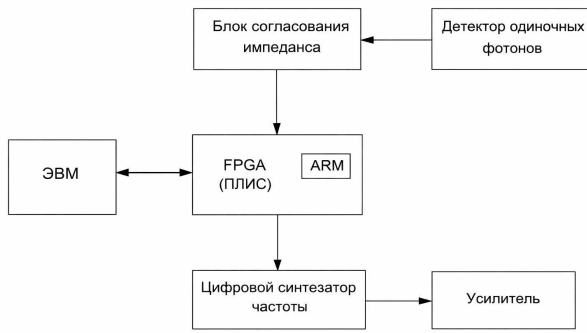


Рис. 2. Схема установки для измерения спектров ОДМР

На рис. 2 приведено схематическое изображение программно-аппаратного комплекса для измерения спектров ОДМР. Программируемая логическая интегральная схема (ПЛИС) используется для детектирования одиночных фотонов и управления генератором. Детекторы одиночных фотонов через согласователь импеданса соединяются с аналоговым входом ПЛИС. Для возбуждения NV-центров и сбора флуоресцентного сигнала используется лазерный сканирующий конфокальный микроскоп Confotec NR500, в котором имеется латеральный порт, соединенный с детектором одиночных фотонов через многомодовое оптоволокно.

3. ОДМР РАЗЛИЧНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ NV-¹³C

В исследуемом алмазном образце были найдены четыре различные конфигурации комплекса NV-¹³C. На рис. 3 приведены спектры ОДМР конфигураций, в которых ядерный спин ¹³C является первым соседом вакансии (а), вторым соседом вакансии (б), третьим соседом вакансии (в) и четвертым соседом вакансии (г). Измерения проводились в слабом магнитном поле 1–3 мТл, чтобы снять вырождение спиновых подуровней и более точно измерить величину расщепления энергетических уровней, индуцированного сверхтонким взаимодействием с ядерным спином ¹³C.

Интерпретация спектров ОДМР осуществлялась с помощью их моделирования в рамках метода спинового гамильтониана. Для этого использовался гамильтониан

$$\mathcal{H} = DS_z^2 + E(S_x^2 - S_y^2) + \gamma_e \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} - \gamma_n \mathbf{B} \cdot \mathbf{I} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{I},$$

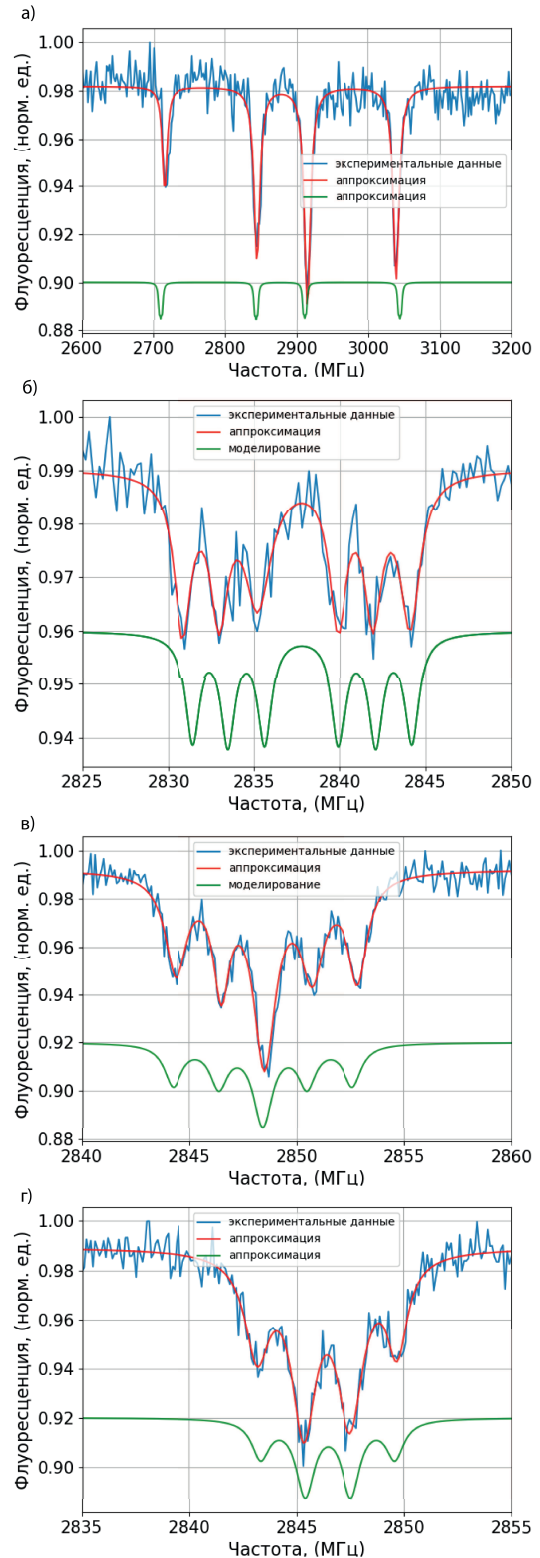


Рис. 3. Экспериментальные спектры ОДМР: ¹³C в первой координационной сфере относительно вакансии (а); ¹³C во второй координационной сфере (б); ¹³C в третьей координационной сфере (в); ¹³C в четвертой координационной сфере (г)

где S_x, S_y, S_z — операторы электронного спина $S = 1$, D — параметр расщепления основного триплетного состояния в нулевом магнитном поле, равный приблизительно 2.87 ГГц, E — параметр поперечного расщепления, \mathbf{V} — вектор внешнего магнитного поля, γ_e и γ_n — соответственно гиромагнитные отношения электронного и ядерного спинов, \mathbf{S} и \mathbf{I} — операторы электронного и ядерного спинов, \mathbf{A} — тензор сверхтонкого взаимодействия. Для корректного описания экспериментально наблюдаемых спектров ОДМР также необходимо учитывать взаимодействие электронного спина NV-центра с ядерным спином изотопа ^{14}N . Поэтому в полный спиновый гамильтониан дополнительно вводятся два вклада: член сверхтонкого взаимодействия, описывающий магнитное взаимодействие между электронным и ядерным спинами, и член ядерного квадрупольного взаимодействия, обусловленный взаимодействием электрического квадрупольного момента ядра ^{14}N с градиентом электрического поля в области ядра.

Тензоры сверхтонкого взаимодействия были выбраны из работы [20], где они были рассчитаны методами квантовой химии для различных положений атомов ^{13}C в кластере $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$. Соответствующие тензоры сверхтонкого взаимодействия имели следующий вид.

Конфигурация, где ^{13}C является первым соседом вакансии:

$$A_4 = \begin{pmatrix} 149.0758 & 27.5430 & 11.0331 \\ 27.5430 & 171.7391 & 16.4669 \\ 11.0331 & 16.4669 & 136.9646 \end{pmatrix}.$$

Конфигурация, где ^{13}C — второй сосед вакансии:

$$A_{158} = \begin{pmatrix} -10.3149 & 0.1541 & 0.2867 \\ 0.1541 & -9.9638 & 0.7720 \\ 0.2867 & 0.7720 & -8.5189 \end{pmatrix}.$$

Конфигурация, где ^{13}C — третий сосед вакансии:

$$A_{161} = \begin{pmatrix} 3.1925 & -0.0880 & 0.8231 \\ -0.0880 & 3.7409 & 0.1308 \\ 0.8231 & 0.1308 & 4.0028 \end{pmatrix}.$$

Конфигурация, где ^{13}C — четвертый сосед вакансии:

$$A_{220} = \begin{pmatrix} 2.7555 & 0.2879 & -0.2225 \\ 0.2879 & 2.0662 & -0.0698 \\ -0.2225 & -0.0698 & 1.9777 \end{pmatrix}.$$

Таблица 1. Рассчитанные и экспериментальные значения расщепления энергетических уровней, индуцированного сверхтонким взаимодействием с ^{13}C

Номер в кластере $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$	Теория, МГц	Эксперимент, МГц
C4	134.1	127.31 ± 0.34
C158	8.58	9.04 ± 0.07
C161	4.09	4.128 ± 0.03
C220	1.99	2.16 ± 0.04

Здесь нижний индекс указывает номер позиции атома в базе данных [20]. Результаты моделирования спектров ОДМР с использованием метода спинового гамильтониана и соответствующих тензоров сверхтонкого взаимодействия представлены на рис. 3 (смещенные зеленые кривые).

Результаты расчетов и данные экспериментов для значений расщепления энергетических уровней приведены в табл. 1.

4. РАСЧЕТ ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ СВЧ-ИМПУЛЬСА, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИХ ПЕРЕВОРОТ ЯДЕРНОГО СПИНА ^{13}C

После экспериментального наблюдения и идентификации в исследуемом образце алмаза конкретных гибридных индивидуальных электронно-ядерных систем $\text{NV-}^{13}\text{C}$ следующим естественным этапом является анализ возможностей когерентного управления состояниями ядерного спина ^{13}C в таких системах. Как отмечалось выше, для этой цели обычно используют радиочастотные импульсы. Однако длительность импульсов, необходимых для реализации заданных квантовых операций, определяется, в том числе, величиной взаимодействия ядерного спина с внешним полем и поэтому должна оставаться меньше времени когерентности электронного спина NV-центра. Поскольку магнитный момент ядра ^{13}C примерно на три порядка меньше магнитного момента электрона, прямое радиочастотное управление ядерным спином оказывается существенно менее эффективным и требует более длительных воздействий. В связи с этим представляет интерес выполнить прогнозное моделирование возможности управления ядерным спином в выявленных индивидуальных системах $\text{NV-}^{13}\text{C}$ с целью определения оптимальных параметров микроволнового излучения — частоты, амплитуды, длительности импульса и других характеристик, обеспечива-

ющих переворот ядерного спина ^{13}C с максимальной возможной вероятностью.

Численный анализ динамики систем NV- ^{13}C проводился с использованием методики, предложенной в работе [18]. Рассматривается спиновая система, состоящая из электронного спина NV-центра ($S = 1$) и ядерного спина изотопа ^{13}C ($I = 1/2$), взаимодействующих посредством сверхтонкого взаимодействия. При наличии магнитного поля и микроволнового возбуждения, квазирезонансного переходам $m_S = 0 \leftrightarrow m_S = -1$, систему NV- ^{13}C можно описывать в рамках эффективной четырехуровневой модели, включающей состояния $|\Psi_1\rangle = |0 \uparrow\rangle$, $|\Psi_2\rangle = |0 \downarrow\rangle$, $|\Psi_3\rangle = |-1 \uparrow\rangle$, $|\Psi_4\rangle = |-1 \downarrow\rangle$ (рис. 4).

Динамика такой системы в микроволновом поле описывается уравнением Шредингера для амплитуд вероятностей состояний. После перехода в систему координат, вращающуюся с частотой микроволн, уравнения движения принимают вид системы линейных дифференциальных уравнений для четырех компонент волновой функции, которые могут быть записаны в матричной форме:

$$\frac{dR}{dt} = iMR,$$

где M — матрица эффективного гамильтониана, зависящая от мощности микроволнового поля W и расстройки $\varepsilon = \omega_{41} - \omega$, отсчитываемой от перехода $4 \leftrightarrow 1$. В соответствии с [18] величина ε используется как опорная расстройка, через которую выражаются расстройки остальных переходов в рассматриваемых модельных системах. Численное решение этой системы уравнений позволяет определить временную эволюцию заселенностей уровней и вычислить вероятность переворота ядерного спина ^{13}C . Подробное описание используемой модели приведено в работе [18].

При заданном магнитном поле 240 Гс, выбранном как компромиссный режим, в котором сохраняются условия для эффективного проявления анизотропного сверхтонкого взаимодействия при уже снятом вырождении спиновых подуровней, оптимальные параметры микроволнового импульса определялись численным поиском максимальной вероятности переворота ядерного спина в предположении, что исходно система находится в состоянии 1. Для каждой пары параметров ε , W решалось уравнение Шредингера для амплитуд вероятностей четырех состояний во вращающейся системе координат. По найденной временной эволюции рассчитывалась вероятность заселения целевого состояния $P_2(t)$. Да-

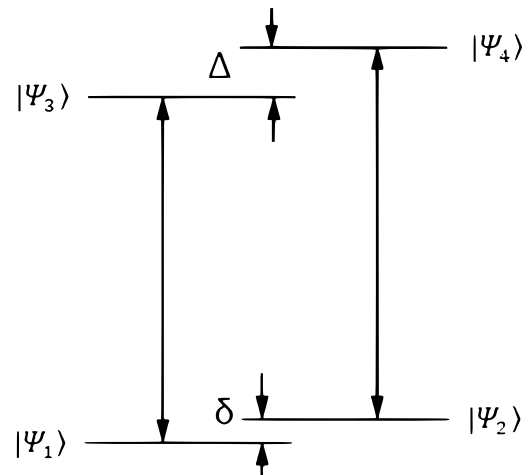


Рис. 4. Энергетическая структура четырехуровневой модели NV- ^{13}C при $A_{zz} > 0$

лее для каждой пары ε , W определялась величина

$$P_2^{\max}(\varepsilon, W) = \max_{t \in [0, t_{\max}]} P_2(t),$$

где t_{\max} — выбранная длительность временного окна моделирования. Глобальный максимум P_2^{\max} искался прямым перебором параметров ε и W на двумерной сетке в заданных диапазонах. В качестве дополнительной характеристики вводилось время переворота t , определяемое как минимальное t , при котором $P_2(t) \geq 0.9$. Достоверность найденного максимума контролировалась проверкой устойчивости результата при сгущении сетки параметров и увеличении временного окна. На рис. 5 приведены тепловые карты зависимости времени переворота ядерного спина от расстройки резонанса ε и мощности микроволнового поля W для различных конфигураций NV- ^{13}C . Значения времени показаны только для тех параметров W и ε , при которых максимальная вероятность переворота ядерного спина удовлетворяет условию $P_2^{\max}(t) > 0.9$.

Полученные зависимости могут быть интерпретированы в рамках модели «одетых» состояний системы NV- ^{13}C . Под действием микроволнового поля электронные уровни NV-центра $m_S = 0$ и $m_S = -1$ смешиваются, формируя квазиэнергетические уровни. В результате система NV- ^{13}C может быть представлена как две связанные двухуровневые системы, соответствующие переходам между состояниями (1–4, 2–3) или (1–3, 2–4) в зависимости от знака параметра A_{zz} . Эффективный переворот ядерного спина реализуется в случае совпадения квазиэнергетических уровней этих двух систем, что соответствует условию двойного резонанса Хартмана–Ха-

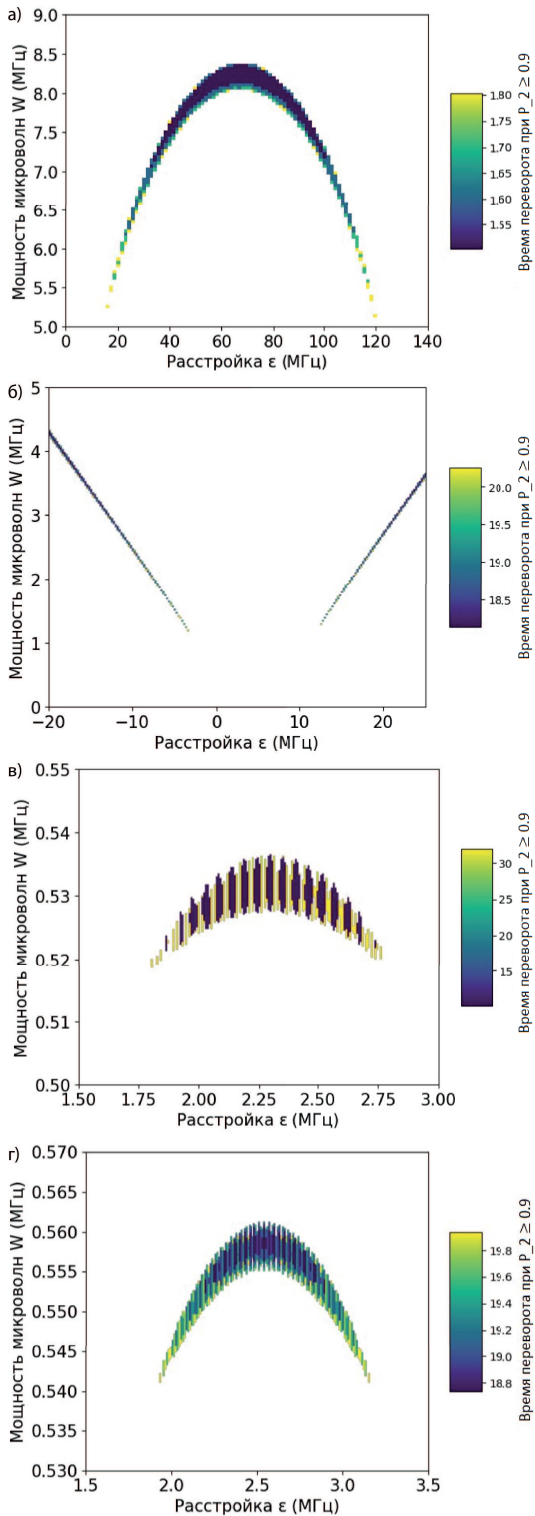


Рис. 5. Тепловые карты зависимости времени переворота ядерного спина от расстройки резонанса ϵ и мощности микроволнового поля W для систем, в которых атом ^{13}C является первым соседом вакансии (а), вторым соседом вакансии (б), третьим соседом вакансии (в), четвертым соседом вакансии (г)

Таблица 2. Параметры управляющего СВЧ-импульса для различных конфигураций $\text{NV-}^{13}\text{C}$ при $B = 240$ Гс

Номер в кластере	ϵ , МГц	W , МГц	Длительность импульса τ , мкс	P_2^{\max}
4	35.18	7.23	1.50	0.96
158	16.25	2.01	18.44	0.94
161	2.012	0.52	10.12	0.91
220	2.27	0.55	18.50	0.91

на. При этом происходит резонансный обмен спиновой поляризацией между электронным и ядерным спинами. Данное условие выполняется лишь для определенных комбинаций мощности микроволнового поля и расстройки резонанса, что приводит к появлению узкой области максимальной вероятности переворота ядерного спина на картах, представленных на рис. 5. Из полученных распределений выбраны оптимальные параметры, приведенные в табл. 2.

Следует отметить, что для некоторых конфигураций $\text{NV-}^{13}\text{C}$ область высокой вероятности переворота ядерного спина представляет собой не изолированный максимум, а протяженную область параметров W и ϵ , в которой вероятность P_2 остается близкой к единице. В частности, для конфигурации, представленной на рис. 5 б, оптимальные параметры располагаются вдоль приблизительно линейной зависимости между мощностью микроволнового поля и расстройкой резонанса. Это поведение согласуется с аналитическими оценками, полученными в работе [18], согласно которым оптимальная расстройка резонанса в режиме двойного резонанса Хартмана–Хана линейно зависит от мощности микроволнового поля. В связи с этим в табл. 2 приводится один из наборов параметров из данной области, соответствующий высокой вероятности переворота ядерного спина и минимальному времени манипулирования. Таким образом, оптимальные параметры не являются единственными, а образуют область решений, обеспечивающих эффективный переворот ядерного спина.

Интересно отметить связь между параметрами сверхтонкого взаимодействия и характерным временем переворота ядерного спина. Переворот ядерного спина в системах $\text{NV-}^{13}\text{C}$ обусловлен анизотропной частью сверхтонкого взаимодействия, которая определяется недиагональными компонентами тензора A_{xz} и A_{yz} . Величину данного взаимодействия удобно характеризовать параметром

$$A_{\perp} = \sqrt{A_{xz}^2 + A_{yz}^2},$$

который определяет степень смешивания состояний с различными ориентациями ядерного спина. В первом приближении характерное время переворота ядерного спина обратно пропорционально величине A_{\perp} .

Для конфигурации, в которой атом ^{13}C является ближайшим соседом вакансии, значения недиагональных компонент тензора сверхтонкого взаимодействия оказываются существенно больше, чем для конфигураций с более удаленным атомом. Это приводит к значительно более быстрому перевороту ядерного спина, что хорошо согласуется с результатами численного моделирования, представленными в табл. 2. Для более удаленных конфигураций NV- ^{13}C величина A_{\perp} уменьшается, что приводит к увеличению характерного времени управления ядерным спином. При этом количественное значение времени переворота определяется не только параметрами сверхтонкого взаимодействия, но и условиями двойного резонанса Хартмана–Хана, а также оптимальными значениями мощности микроволнового поля и расстройки резонанса.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе выполнено комплексное экспериментально-теоретическое исследование спиновой структуры и динамики комплексов NV- ^{13}C в CVD-алмазе. На основе анализа спектров ОД-МР идентифицированы четыре конфигурации центров, соответствующие различным координационным положениям атома ^{13}C относительно вакансии. Для интерпретации экспериментальных спектров использован спиновый гамильтониан с тензорами сверхтонкого взаимодействия, рассчитанными методами квантовой химии, что позволило установить соответствие между наблюдаемой мультиплетной структурой и конкретными конфигурациями комплексов NV- ^{13}C . Для каждой идентифицированной конфигурации определены оптимальные параметры микроволнового управления с учетом индивидуальных характеристик сверхтонкого взаимодействия. Полученные результаты уточняют связь между атомной структурой комплекса, его спектральными характеристиками и параметрами когерентного управления.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего

образования Российской Федерации (соглашение о предоставлении гранта № 075-15-2024-556).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов. Вклад авторов равноценен.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. W. Doherty, N. B. Manson, P. Delaney, F. Jelezko, J. Wrachtrup, and L. C. L. Hollenberg, *Phys. Rep.* **528**, 1 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2013.02.001>.
2. V. V. Dobrovitski, G. D. Fuchs, A. L. Falk, C. Santori, and D. D. Awschalom, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **4**, 23 (2013); <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-030212-184238>.
3. K. R. K. Rao and D. Suter, *Phys. Rev. B* **94**, 060101(R) (2016); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.060101>.
4. M. H. Abobeih, J. Randall, C. E. Bradley, H. P. Bartling, M. A. Bakker, M. J. Degen, M. Markham, D. J. Twitchen, and T. H. Taminiau, *Nature* **576**, 411 (2019); <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1834-7>.
5. Y. Mindarava, R. Blinder, Y. Liu et al., *Carbon* **165**, 395 (2020).
6. Q. Chen, I. Schwarz, and M. B. Plenio, *Phys. Rev. B* **95**, 224105 (2017); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.224105>.
7. F. Jelezko, T. Gaebel, I. Popa et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 130501 (2004).
8. S. S. Hegde, J. Zhang, and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 220501 (2020); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.220501>.
9. P. Jamonneau, A. Dréau, G. Hétet et al., *Eur. Phys. J. D* **76**, 1 (2022); <https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-022-00528-x>.
10. P. London, J. Scheuer, J.-M. Cai et al., *Phys. Rev. Lett.* **111**, 067601 (2013); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.067601>.
11. S. R. Hartmann and E. L. Hahn, *Phys. Rev.* **128**, 2042 (1962); <https://doi.org/10.1103/PhysRev.128.2042>.
12. J. Zhang, S. S. Hegde, and D. Suter, *Phys. Rev. Appl.* **12**, 064047 (2019); <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.12.064047>.
13. S. Hegde, J. Zhang, and D. Suter, arXiv:1905.01649; <https://doi.org/10.48550/arXiv.1905.01649>.

14. K. Saego and S. Sangtawesin, J. Phys. Conf. Ser. **2934**, 012021 (2025); <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2934/1/012021>.
15. G. Alvarez, C. Bretschneider, R. Fischer, P. London, H. Kanda, S. Onoda, J. Isoya, and D. Gershoni, Nat. Commun. **6**, 8456 (2015); <https://doi.org/10.1038/ncomms9456>.
16. V. Kavtanyuk, H. Lee, S. Oh, K. Jeong, and J. Shim, arXiv:2110.14850; <https://doi.org/10.48550/arXiv.2110.14850>.
17. H. Vallabhapurapu, C. Adambukulam, A. Saraiva, and A. Laucht, Phys. Rev. B **105**, 205435 (2022); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.205435>.
18. A. P. Nizovtsev and S. Ya. Kilin, Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. **84**, 235 (2020); <https://doi.org/10.3103/S106287382003017X> [А. П. Низовцев, С. Я. Килин, Изв. РАН, сер. физ. **84**, 310 (2020); <https://doi.org/10.31857/S0367676520030217>].
19. B. Smeltzer, L. Childress, and A. Gali, New J. Phys. **13**, 025021 (2011); <https://doi.org/10.1088/1367-2630/13/2/025021>.
20. A. P. Nizovtsev, S. Ya. Kilin, A. L. Pushkarchuk, V. A. Pushkarchuk, S. A. Kuten, O. A. Zhikol, S. Schmitt, T. Unden, and F. Jelezko, New J. Phys. **20**, 023022 (2018); <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aaa725>.
21. M. H. Abobeih, J. Randall, C. E. Bradley, H. P. Bartling, M. A. Bakker, M. J. Degen, M. Markham, D. J. Twitchen, and T. H. Taminiau, Nature **576**, 411 (2019); <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1834-7>.

Nuclear Spin Control in the NV⁻¹³C Complex by Double Resonance

A. T. Salkazanov^{a,*}, A. S. Gusev^a, N. I. Kargin^a, M. M. Kaloshin^a, T. A. Kosogorova^a,
R. E. Margushin^a, S. S. Vergeles^a, A. P. Nizovtsev^{a,b}, S. Ya. Kilin^{a,b}

^aNational Research Nuclear University MEPhI
115409, Moscow, Russia

^bB. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus
220072, Minsk, Belarus

*E-mail: atsalkazanov@mephi.ru

Received October 3, 2025

Revised March 20, 2026

Accepted March 31, 2026

Abstract

Optically detected magnetic resonance (ODMR) spectra of NV⁻¹³C complexes in synthetic CVD diamond were studied experimentally. Four configurations corresponding to different coordination shells of the ¹³C atom relative to the vacancy were identified. The spectra were interpreted using the spin-Hamiltonian method and hyperfine tensors obtained by quantum-chemical modeling of the C₅₁₀[NV]H₂₅₂ cluster. Based on numerical analysis of the microwave-driven dynamics, Hartmann–Hahn double-resonance parameters providing the most efficient inversion of the ¹³C nuclear spin were determined. For all studied configurations, the spin-flip probability exceeds 0.9 at the optimal microwave parameters. The results demonstrate the feasibility of selective coherent control of ¹³C nuclear spins using microwave radiation only and highlight their potential as quantum registers.

Keywords: NV center, diamond, hyperfine interaction, ODMR, ¹³C nuclear spin, Hartmann–Hahn double resonance, quantum registers

Funding. This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (agreement/grant No. 075-15-2024-556).

Conflict of interest. The authors declare that they have no conflict of interest.

Authors' contributions. The contributions of the authors are equal.