

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

FACULTAD DE CIENCIAS



TESIS

**Simulación de la Fotodinámica del Centro
Nitrógeno-Vacante e Implementación de la Resonancia
Magnética Ópticamente Detectable en Diamante**

PARA OBTENER EL TÍTULO PROFESIONAL DE LICENCIADO EN FÍSICA

ELABORADO POR

JUAN ALONSO ALCALA LUJAN

 **0000-0003-4434-3497**

ASESOR

DR. CHARLIE OSCAR ONCEBAY SEGURA

 **0000-0003-1396-8494**

LIMA - PERÚ

2025

Citar/How to cite	Alcalá Lujan [1]
Referencia/Reference	[1] J. Alcalá Lujan, “ <i>Simulación de la Fotodinámica del Centro Nitrógeno-Vacante e Implementación de la Resonancia Magnética Ópticamente Detectable en Diamante</i> ” [Tesis de pregrado]. Lima (Perú): Universidad Nacional de Ingeniería, 2025.
Estilo/Style: IEEE	

Citar/How to cite	(Alcalá, 2025)
Referencia/Reference	Alcalá, J. (2025). <i>Simulación de la Fotodinámica del Centro Nitrógeno-Vacante e Implementación de la Resonancia Magnética Ópticamente Detectable en Diamante</i> . [Tesis de pregrado, Universidad Nacional de Ingeniería]. Repositorio Institucional UNI.
Estilo/Style: APA (7ma ed.)	

Dedicatoria

La presente tesis va dedicada a mi familia:

A mi madre, de quien he heredado su bondad y su buen trato al prójimo; a mi padre, de quien he heredado su perseverancia y su total concentración en el trabajo;
a mi hermana, de quien he recibido mucha ayuda que aún debo;
y a mi sobrino, quien es el más joven y el más alegre por la vida.

Agradecimientos

Agradezco profundamente a mi familia por brindarme el tiempo y el espacio necesarios para escribir esta tesis. Valerse por uno mismo no siempre es sencillo, y el ser querido, alimentado y apoyado por quienes nos rodean es un privilegio que merece una gratitud elevada. Esta tesis no se hubiera culminado sin su apoyo incondicional e invaluable.

Agradezco a mi asesor, Charlie Oncebay, por brindarme la libertad de desarrollar las ideas que dieron forma a esta tesis, así como por su orientación oportuna y precisa cuando más la necesité. En el camino de la vida académica, es fácil perderse; sin embargo, tuve la fortuna de contar con su guía segura que me ayudó a mantener el rumbo. Espero que esta tesis sea vista como una muestra de mi gratitud.

Agradezco a Lucas Nunes Sales de Andrade y Sérgio Ricardo Muniz, quienes durante mi estancia en la USP de São Carlos, en Brasil, fueron una guía paciente a pesar de mi pésimo portugués. Su buen trato y los valiosos consejos que me ofrecieron resultaron fundamentales, y que esta tesis disponga de una parte experimental se debe en parte a ellos.

Agradezco al Programa Nacional de Investigación Científica y Estudios Avanzados (PROCIENCIA) por confiar en mí al brindarme financiamiento para viajar a Brasil y elaborar un proyecto que ayudó a elaborar esta tesis. Es oportuno mencionar su apoyo que me permitió llevar a cabo un proyecto científico que, espero, en algún momento pueda beneficiar a otros peruanos mediante el conocimiento adquirido.

Durante la elaboración de esta tesis he aprendido cuatro virtudes (valor, justicia, templanza, moderación) que me han servido como criterio del buen vivir. En este proceso, no puedo dejar de agradecer la influencia de los pensadores grecorromanos, cuyos escritos me brindaron guía y propósito. Libros como el “Manual de vida” de Epicteto, las “Meditaciones” de Marco Aurelio y las “Cartas a Lucilio” de Séneca han sido una compañía, alimentando mi desarrollo moral y orientándome en mis relaciones con los demás. Su sabiduría ha hecho que el esfuerzo diario por culminar esta tesis sea más grato y significativo.

“¿Cuánto más vas a esperar para exigir lo mejor de ti? Se te han presentado las enseñanzas esenciales y pretendes comprenderlas. Entonces, ¿qué clase de maestro estás esperando? ¿Estás retrasando la puesta en práctica de estos principios hasta que él llegue? Eres una persona adulta, no un niño. Si continúas siendo descuidado y perezoso, encontrando excusas y postergando el momento de actuar, tu falta de progreso pasará desapercibida, y al final habrás vivido y muerto sin propósito.

En este mismo instante, pues, piensa que eres digno de vivir como un adulto que se perfecciona. Considera todo lo óptimo como una ley inviolable. Y si se te presenta un momento de dolor o de placer, de gloria o de desgracia, recuerda que el combate es ahora. Ahora es cuando comienza la Olimpiada, y no puede ser postergada.”

— Parafraseado de Enquiridión 51, “Epicteto”

Resumen

El centro nitrógeno-vacante (NV) en diamante es un defecto cristalino que actúa como centro de color y presenta fluorescencia dependiente del espín, lo que permite su uso como sensor de campo magnético mediante resonancia magnética ópticamente detectable (ODMR). En este trabajo se estudia (1) la fotodinámica del sistema NV con el formalismo de sistemas cuánticos abiertos, y se realizan simulaciones para anticipar resultados experimentales; y (2) se implementa la técnica ODMR, donde se registran espectros de fluorescencia en función de la frecuencia de microondas. Las simulaciones fotodinámicas reproducen el fenómeno de saturación bajo excitación con un láser verde de 532 nm a altas potencias, así como la disminución de fluorescencia en presencia de campos magnéticos elevados, ambos observados en un único centro NV. Además, los espectros ODMR obtenidos con un campo magnético externo, generado por un imán de neodimio, confirman el efecto del campo al mostrar 8 resonancias, y se identifican limitaciones prácticas para el uso de centros NV como magnetómetros.

Palabras Clave— Nitrogeno-Vacante, Fluorescencia, ODMR, Resonancia

Abstract

The nitrogen-vacancy (NV) center in diamond is a crystalline defect that acts as a color center and exhibits spin-dependent fluorescence, which enables its use as a magnetic field sensor through optically detected magnetic resonance (ODMR). This work studies (1) the photodynamics of the NV system using the formalism of open quantum systems, with simulations performed to anticipate experimental results; and (2) the implementation of the ODMR technique, where fluorescence spectra are recorded as a function of microwave frequency. The photodynamic simulations reproduce the saturation phenomenon under excitation with a 532 nm green laser at high power, as well as the decrease in fluorescence in the presence of high magnetic fields, both observed in a single NV center. Furthermore, the ODMR spectra obtained under an external magnetic field, generated by a neodymium magnet, confirm the field effect by revealing 8 resonances, and practical limitations in the use of NV centers as magnetometers are identified.

Keywords— Nitrogen-Vacancy, Fluorescence, ODMR, Resonance

Tabla de contenido

Resumen	vi
Abstract	vii
Introducción	xiv
Objetivos	xvi
I. Centro nitrógeno vacante	1
A. Diamante	1
B. El centro nitrógeno vacante	2
C. El Hamiltoniano del centro NV	5
D. Dinámica óptica	10
II. Modelo fenomenológico del centro NV	14
A. Introducción	14
B. Ecuación maestra	20
C. Simulación de la dinámica óptica	23
D. Discusiones	26
III. Magnetometría con centros NV	29
A. Magnétometría Óptica con un centro NV	29
B. Magnétometría con un conjunto de centros NV	32
C. Hamiltoniano y un campo magnético aplicado	33
D. Vector Magnetometría	36
IV. Experimento ODMR	41
A. Introducción al experimento	41

B. Diseño experimental	43
C. Resultados	49
D. Discusiones	52
V. Conclusiones	57
VI. Bibliografía	59

Lista de Tablas

Tabla I:	Tasas de transición	23
----------	-------------------------------	----

Lista de Figuras

Figura I.	(a) Celda unidad del diamante puro. (b) El defecto nitrógeno vacante o centro NV.	2
Figura II.	Espectro de emisión normalizado de un conjunto de centros NV ⁻ y NV ⁰ a 10 K para diferentes potencias de excitación (532 nm).	3
Figura III.	Espectro ODMR a temperatura ambiente de un único centro NV ⁻	4
Figura IV.	Estructura fina e hiperfina del estado fundamental electrónico NV ⁻ . . .	5
Figura V.	Frecuencias de transición $\nu_{\pm}$ en función del campo magnético total aplicado a lo largo del eje NV.	8
Figura VI.	(a) Autoenergías E_0^B , E_-^B y E_+^B del Hamiltoniano en función del módulo del campo magnético B para diferentes ángulos θ . Módulo al cuadrado de la proyección (b) del autoestado $ +\rangle_B$ en $ +1\rangle$, (c) del autoestado $ 0\rangle_B$ en $ 0\rangle$ y (d) del autoestado $ -\rangle_B$ en $ -1\rangle$	9
Figura VII.	Estructura electrónica del centro NV ⁻ a temperatura ambiente.	11
Figura VIII.	Fluorescencia resuelta en el tiempo a temperatura ambiente correspondiente a los estados iniciales de espín $m_s = 0$ y $m_s = 1$ bajo iluminación de un laser de 532 nm.	12
Figura IX.	Sistema de niveles NV.	15
Figura X.	Visual del modelo de un único centro NV dentro de una pequeña región cúbica del diamante.	17
Figura XI.	(a) Intensidad de fluorescencia (I_{PL}) de un centro NV único en función de la potencia (P) de la luz incidente de 532 nm (verde). (b) Intensidad de fluorescencia (I_{PL}) en función del módulo del campo magnético B aplicado sobre tres centros NV únicos.	19

Figura XII.	(a) Dinámica de evolución fotodinámica de las poblaciones del centro NV con láser verde encendido entre $1 - 10 \mu s$ y láser verde apagado entre $10 - 12 \mu s$. (b) Poblaciones de equilibrio del centro NV tras una exposición prolongada al láser verde.	24
Figura XIII.	Datos simulados de la fluorescencia PL en función de k , mostrando la saturación.	26
Figura XIV.	Mapa de calor de la fluorescencia PL normalizada en función de $B_z = B \cos(\theta)$ y $B_{\perp} = B \sin(\theta)$, con $k = 0,03$ en esta simulación.	27
Figura XV.	Simulación de la división de niveles por efecto Zeeman bajo un campo magnético externo aplicado a un único centro NV.	30
Figura XVI.	(a) Las 4 posibles orientaciones del centro NV. (b) Aparición de cuatro pares de resonancias correspondientes a las orientaciones del centro NV.	34
Figura XVII.	(a) Frecuencias de transición $\nu_{\pm}$ hasta 40 mT y (b) hasta 8 mT.	35
Figura XVIII.	(a) Proyecciones en los cuatro ejes del NV del campo magnético generado por la corriente en una sección de microalambre. (b) Mapeo de las componentes y del módulo del campo magnético cuando circula una corriente de intensidad $I = 4 \text{ mA}$. (c) Mapeo correspondiente cuando no hay corriente $I = 0 \text{ mA}$. (d) Mapeo diferencial del campo magnético y sus componentes, aislando el efecto de la corriente sin el fondo, donde $\delta \mathbf{B} = \mathbf{B} - \mathbf{B}_0$	39
Figura XIX.	Diagrama de pasos para implementar el código que genera la figura XVIII.	40
Figura XX.	Configuración de fluorescencia general para experimentos con centros NV.	42
Figura XXI.	Esquema para la generación de microondas en una antena.	44
Figura XXII.	(a) Esquema para el control del AOM. (b) Patrón de difracción producida por el AOM (c) Con el iris se selecciona el primer orden de difracción.	45
Figura XXIII.	Configuración experimental.	46

Figura XXIV.	(a) Muestra de diamante ultrapuro con una capa ultradelgada de centros NV. (b) Muestra posicionada junto a la antena en el portamuestra.	47
Figura XXV.	(a) Película de cobre de 100 nm de grosor depositado sobre una lámina de vidrio. (b) Circuito impreso en papel glossy. (c) Circuito transferido a la película de cobre.	48
Figura XXVI.	Diagrama de flujo del experimento ODMR.	50
Figura XXVII.	Espectro ODMR de fluorescencia normalizada sin campo magnético estático aplicado.	51
Figura XXVIII.	Espectro ODMR de fluorescencia normalizada con campo magnético estático aplicado.	52
Figura XXIX.	Comparación de espectros ODMR	55

Introducción

La ingeniería que aprovecha las propiedades cuánticas ya es una realidad, y el defecto centro nitrógeno-vacante (o centro NV) en diamante es un ejemplo destacado. Este sistema cuántico actúa como un átomo artificial que puede absorber y emitir luz visible, con transiciones ópticas bien definidas. Su espín electrónico puede ser inicializado, controlado y leído a temperatura ambiente mediante el uso de un láser y un campo de microondas [1].

El centro NV presenta una intensidad de fluorescencia (radiación luminosa al absorber fotones) dependiente del espín que permite la lectura de su estado cuántico. Esta fluorescencia puede ser comprendida con una dinámica entre siete niveles electrónicos subyacente descrita como una evolución NO unitaria en el marco del formalismo matemático de sistemas cuánticos abiertos [2].

El estado de espín del centro NV puede ser modificado mediante la aplicación de radiación de microondas, así como por campos eléctricos, magnéticos y de deformación mecánica. Particularmente, se ha enfocado el uso de conjuntos de centros NV como sensores de campos magnéticos, permitiendo la creación de imágenes magnéticas en regiones bidimensionales o tridimensionales con resolución espacial manométrica [3] y ha demostrado ser útil tanto en la ciencia de materiales como en las ciencias de la vida [4].

La técnica más común para realizar magnetometría con centros NV es la resonancia magnética detectada ópticamente (ODMR, por sus siglas en inglés) y consiste en la medición directa y óptica del cambio de frecuencia resonante cuando se aplica un campo magnético al centro NV. En una medida para ODMR la muestra es iluminada con luz verde y la intensidad de luz roja fluorescente es monitoreada cuando un campo de microondas es lentamente sintonizado cerca de la resonancia [5]

La relevancia del centro NV radica en su potencial uso en ciencias aplicadas como

computación cuántica y metrología [6]. Sin embargo, antes de alcanzar tales aplicaciones, es fundamental comprender los aspectos básicos de este sistema. Por lo tanto, esta tesis propone dos objetivos principales: Primero, simular el comportamiento fotodinámico con un modelo teórico y discutir su uso como herramienta de investigación para calibrar o visualizar experimentos con centros NV. El segundo objetivo es realizar el experimento de resonancia magnética detectada ópticamente (ODMR) con un conjunto de centros NV e interpretar los resultados.

El capítulo 1 ofrece una breve introducción al centro NV, abordando su estructura electrónica, el Hamiltoniano que lo describe y la descripción fotodinámica de fluorescencia. En el capítulo 2, se presenta primero un modelo teórico del centro NV, seguido por el uso de la ecuación de Lindblad para simular los resultados fotodinámicos, los cuales son discutidos al final del capítulo. El capítulo 3 introduce algunos conceptos clave de la magnetometría con centros NV, describiendo cómo reconstruir un vector de campo magnético aplicado a un conjunto de centros NV utilizando las frecuencias de resonancia del espectro ODMR. Finalmente, el capítulo 4 detalla las partes principales de la configuración óptica y electrónica para realizar el experimento de ODMR, presentando los resultados obtenidos y su interpretación.

Objetivos

El presente trabajo tiene como objetivo general el estudio del centro nitrógeno-vacante (NV) en diamante, abordando dos aspectos fundamentales:

1. La **simulación teórica** de la fotodinámica del centro NV mediante un modelo de sistemas cuánticos abiertos, con el propósito de analizar su respuesta a la excitación óptica.
2. La **implementación experimental** de la técnica de Resonancia Magnética Detectada Ópticamente (ODMR) para la caracterización del centro NV en muestras de diamante.

Para ello, se plantean los siguientes objetivos específicos:

- Simular la fotodinámica del centro NV utilizando un modelo basado en sistemas cuánticos abiertos, con el fin de analizar su evolución bajo excitación óptica.
- Evaluar la influencia de la potencia del láser de excitación sobre la polarización óptica del centro NV, identificando el papel del parámetro k en la optimización de este proceso.
- Analizar la fluorescencia del centro NV en función del campo magnético aplicado, determinando la existencia de regiones con mayor sensibilidad a variaciones del campo magnético.
- Reproducir numéricamente el fenómeno de saturación de fluorescencia a altas potencias de excitación y establecer su relación cuantitativa con el parámetro k .
- Implementar experimentalmente la técnica de ODMR en una muestra de diamante con centros NV, obteniendo y analizando los espectros de fluorescencia en función de la frecuencia de microondas.

- Caracterizar los espectros ODMR en ausencia y presencia de un campo magnético externo, evaluando la influencia de las deformaciones en la red cristalina del diamante y la orientación cristalográfica de los centros NV.
- Comparar la calidad del espectro ODMR obtenido en este trabajo con los resultados reportados en [7], analizando mejoras en contraste y ancho a media altura (FWHM) mediante la optimización del sistema de detección y la selección de muestras de diamante con centros NV de alta calidad.

Estos objetivos buscan proporcionar una comprensión más profunda de las propiedades fotofísicas del centro NV y su aplicación en magnetometría cuántica.

I. Centro nitrógeno vacante

A. Diamante

El diamante puro está compuesto por átomos de carbono y es una forma alotrópica, al igual que el grafito, el grafeno y el carbono amorfo. La estructura cristalográfica del diamante es un patrón regular repetido de átomos de carbono enlazado por orbitales sp^3 . La celda unidad de la red es una estructura cúbica de cara centrada (fcc) y su base tiene 2 átomos de carbono con posición relativa $[\frac{1}{2}, 0, 0]$ y $[\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$ [8] (véase la Figura 1a). Cada átomo de carbono tiene 4 vecinos cercanos posicionados en los vértices de un tetraedro centrado en el átomo de carbono, dando lugar a una simetría tetraédrica y debido a esta simetría, los enlaces sp^3 están separados por un ángulo de $109,5^\circ$ [5]. La disposición única de los átomos de carbono en el diamante lo convierte no solo en el material más duro según la escala de Mohs, sino que también lo hace inerte a modificaciones químicas sin el uso de condiciones extremas. Su amplia brecha de energía de 5.45 eV (bandgap indirecto) le proporciona transparencia óptica para la luz hasta aproximadamente 230 nm [9].

El diamante, aunque teóricamente se presenta como un sólido perfecto, en la realidad contiene defectos o fallos en su estructura periódica. Estos defectos se clasifican según su dimensionalidad en puntuales, lineales y superficiales. Los defectos puntuales, que afectan a uno o a pocos átomos de la red cristalina, incluyen vacantes o lagunas (ausencia de un átomo en su posición regular), intersticiales (átomos que ocupan espacios entre posiciones de la red) e impurezas (átomos de una especie química diferente que pueden estar como sustitutos o en intersticios) [10]. Estos defectos puntuales tienen un papel principal en las propiedades físicas del diamante.

Un defecto de la red capaz de absorber luz visible se le denomina centro de color [11]. En el diamante, el centro de color más estudiado es el centro nitrógeno vacante o centro NV y

consiste en un átomo de carbono vacante o faltante en la red de diamante que se encuentra al lado de un átomo de nitrógeno, que ha sustituido a uno de los átomos de carbono. Los centros NV pueden formarse bien naturalmente durante el crecimiento del diamante o artificialmente usando una variedad de técnicas de irradiación (por electrones, neutrones o protones) y la implantación de iones [3].

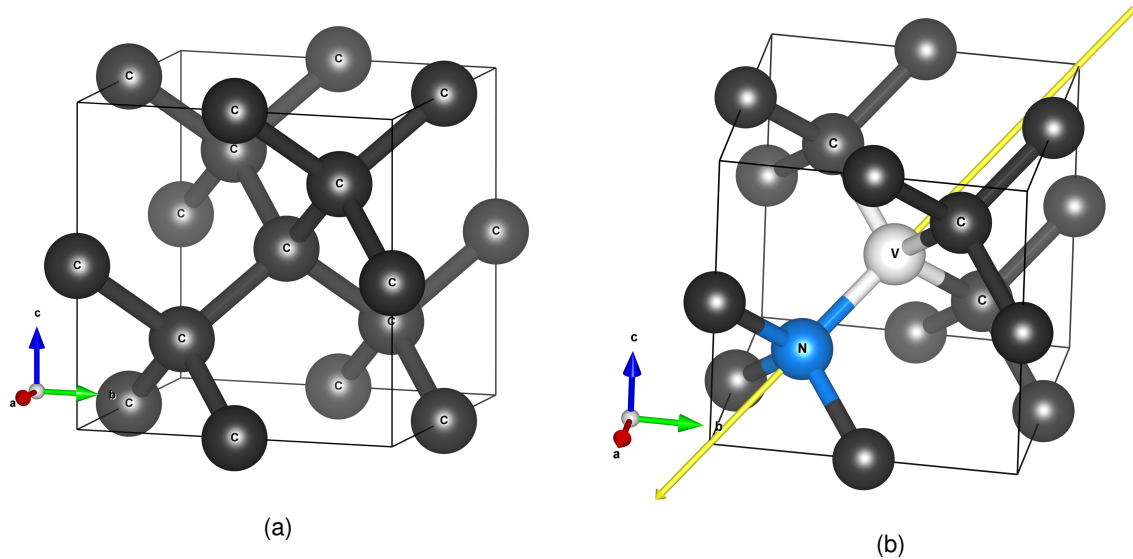


Figura 1. (a) Celda unidad del diamante puro. (b) El defecto nitrógeno vacante o centro NV.

El nitrógeno (N), vacante (V) y los carbonos (C) reciben etiqueta en las esferas. El vector amarillo alineado con el eje de simetría del centro N-V tiene orientación $[1\bar{1}\bar{1}]$. Figura realizada por el autor utilizando VESTA [12]

B. El centro nitrógeno vacante

El centro NV es un defecto puntual en el diamante con un eje de simetría C_{3v} , compuesto por un par de vacante en la red y un nitrógeno sustitucional, orientado a lo largo de la dirección cristalina $[1\bar{1}\bar{1}]$ [1] (véase la Figura 1b). Este puede existir a lo largo de 4 orientaciones cristalográficas diferentes $[111]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}1\bar{1}]$ y $[\bar{1}\bar{1}1]$ que son en principio equivalente, pero conducen a diferentes alineamientos de sus ejes del centro NV con respecto a un campo magnético estático u oscilante externamente aplicado [13].

Los centros NV pueden existir en 2 estados de carga (NV^- , NV^0), el estado de carga del NV está impuesto por las impurezas que lo rodean y la posición del nivel de Fermi [14]. Las

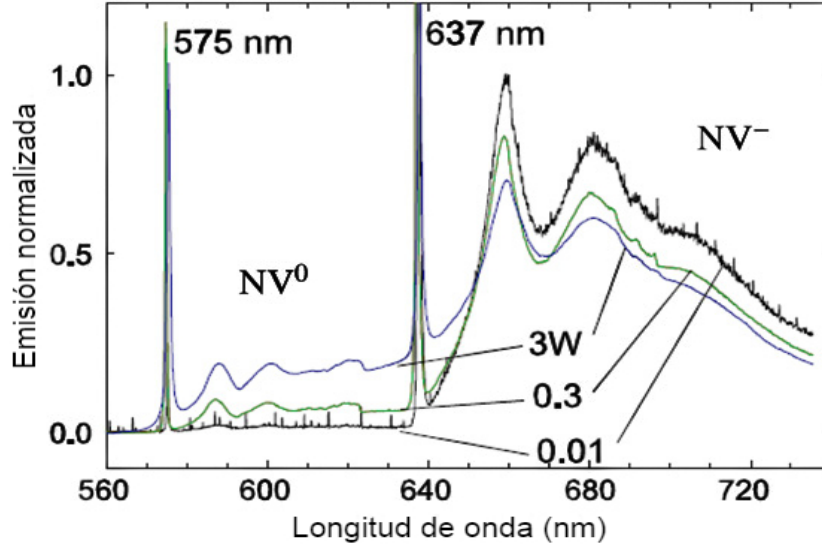


Figura II. Espectro de emisión normalizado de un conjunto de centros NV^- y NV^0 a 10 K para diferentes potencias de excitación (532 nm).

Adaptado de [1].

características que identifican al NV^- y al NV^0 son sus líneas ópticas de cero fonones (ZPLs, por sus siglas en inglés) (véase la Figura II), estas líneas indican transiciones directas en la que no están involucrados fonones. El centro NV^- es el responsable de la línea aguda de 637 nm (1,945 eV) y el centro NV^0 de la línea aguda de 575 nm (2,156 eV), para ambos centros el espectro de emisión se extiende a mayores longitudes de onda debido a sus asociadas bandas vibrónicas [15]. Las líneas de cero fonones (ZPL) agudas y las bandas vibro-electrónicas bien definidas del NV^0 y NV^- indican que las transiciones ópticas ocurren entre niveles de defectos discretos que están profundamente dentro de la brecha de energía del diamante lo que implica que las bandas de valencia o conducción no participan en estas transiciones ópticas. Por esta razón, el centro NV se conoce como un defecto de nivel profundo en el diamante [1].

El centro NV^0 no es activo magneto-ópticamente, en contraste al centro NV^- que tiene aplicaciones en magnetometría [4]. En lo que sigue, el estado centro de carga negativa NV^- será simplemente denominado como centro NV.

La estructura electrónica del centro NV se calcula mediante la aplicación del modelo molecular a un sistema compuesto por un átomo de nitrógeno y tres átomos de carbono que rodean una vacante. En este modelo, el centro NV se considera un sistema con cuatro orbitales

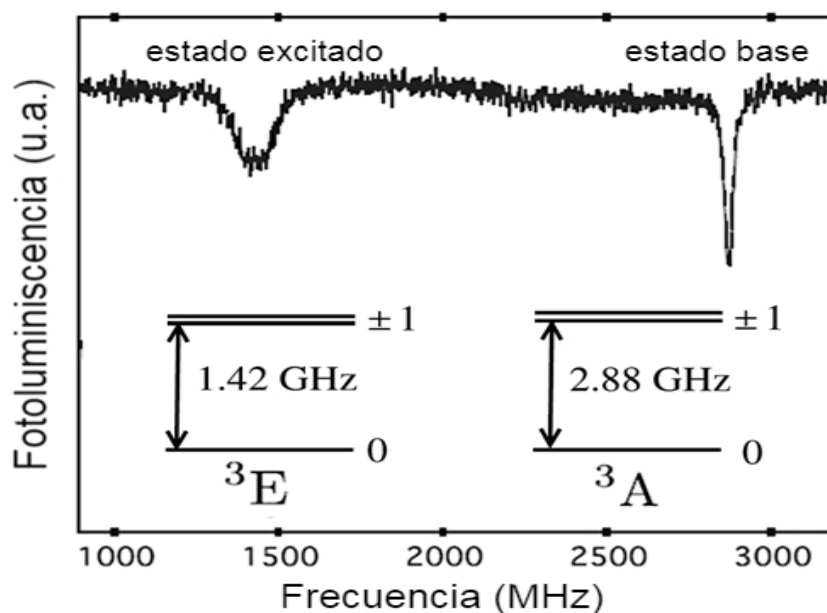


Figura III. Espectro ODMR a temperatura ambiente de un único centro NV^- .

Las caídas en fluorescencia en 1.42 GHz y 2.88 GHz se identifican por el estado excitado 3E y el estado base 3A_2 respectivamente. Adaptado de [1].

moleculares y seis electrones: tres provenientes de los enlaces de los átomos de carbono con la vacante, dos del átomo de nitrógeno, y un sexto electrón atrapado de los alrededores para así crear el estado de carga global NV^- . Colectivamente, esos electrones poseen un espín efectivo de 1 en el estado fundamental electrónico [1].

El centro NV presenta estados de espín triplete que pueden ser detectados mediante resonancia paramagnética electrónica (EPR) o por resonancia magnética detectada ópticamente (ODMR). En la figura III las resonancias en $\sim 2,87$ GHz y $\sim 1,42$ GHz son observados a temperatura ambiente y se les atribuye a la división en campo cero, del triplete espín en el estado base 3A_2 y del triplete espín en el estado excitado 3E , respectivamente. Las resonancias magnéticas de 3A_2 y 3E son caracterizados por aproximados factores giromagnéticos “g” de $\sim 2,0028$ y $\sim 2,01$ respectivamente [1].

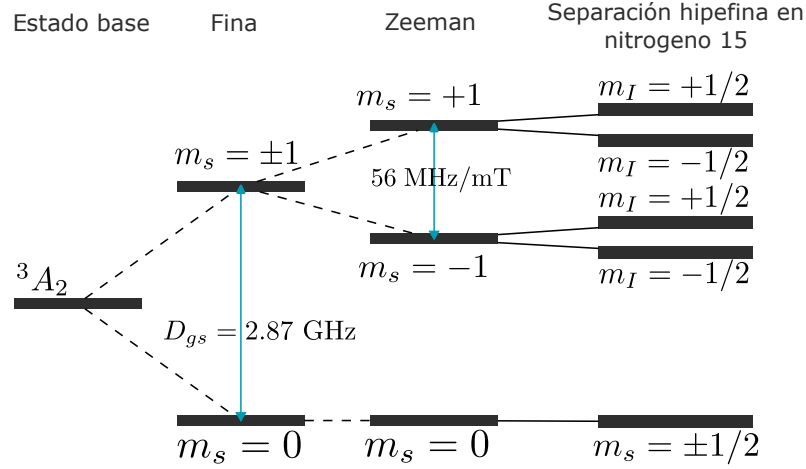


Figura IV. Estructura fina e hiperfina del estado fundamental electrónico NV^- .

Se indica la división en campo cero D_{gs} , el desdoblamiento Zeeman y las interacciones hiperfinas para un espín nuclear del ^{15}N . Reproducido de [16].

C. El Hamiltoniano del centro NV

El Hamiltoniano del estado base electrónico del centro NV puede ser expresado como

$$H_{\text{NV}} = H_{\text{ZF}} + H_{\text{nuclear}} + H_{\text{magnetico}} + H_{\text{electrico}} + H_{\text{deformacion}} \quad (1)$$

donde H_{ZF} resulta de una interacción electrónica espín-espín dentro del NV en campo cero (ZF, por sus siglas en inglés) y explica la división de estructura fina de $\approx 2,87 \text{ GHz}$; H_{nuclear} caracteriza las interacciones que surgen con el espín nuclear del nitrógeno (espín nuclear $I = 1$ para ^{14}N y $I = 1/2$ para ^{15}N) y explican la división de estructura hiperfina (véase la Figura IV); y los términos $H_{\text{magnetico}}$, $H_{\text{electrico}}$ y $H_{\text{deformacion}}$ describen la interacción de espín electrónico del centro NV con campos magnético, eléctricos y de deformación del cristal respectivamente [1].

El espín electrónico $S = 1$ del centro NV tiene una división del orden de GHz por interacción fina y una división adicional del orden de los MHz por interacción hiperfina para diferentes estados espín nuclear [1]; por otro lado, en casos extremos de gran campo eléctrico o en diamantes con alta deformación los valores de todos los parámetros de $H_{\text{eléctrico}}$ y de $H_{\text{deformación}}$ son del orden de $\sim 1 \text{ MHz}$ o menores [17]. Lo anterior justifica que se puede simplificar el Ha-

miltoniano (1) para modelar el comportamiento espín del centro NV en presencia de un campo magnético externo .

El estado base del centro NV es un sistema de espín $S = 1$, el cual consiste en un triplete de estados correspondientes a las tres posibles proyecciones del espín en un campo magnético aplicado a lo largo del eje del NV, que generalmente se toma como el eje “z”. Este triplete está formado por los autoestados del operador S_z que son: $|0\rangle$, $|-1\rangle$ y $|+1\rangle$, con los respectivos autovalores 0, -1 y $+1$.

El sistema espín base del centro NV sometido a un campo externo y despreciando la interacción hiperfina con los espines nucleares o interacciones eléctricas es descrito por el siguiente Hamiltoniano

$$H_{\text{NV}} = D_{gs} \left(S_z^2 - \frac{2}{3} \right) + E(S_x^2 - S_y^2) + \gamma_e \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad (2)$$

La separación del estado espín $|0\rangle$ con los estados $|\pm 1\rangle$ está referida con el parámetro de división de campo cero en el eje $D_{gs} = 2,87$ GHz . El parámetro de división de campo cero fuera del eje E induce una separación entre los estados $|\pm 1\rangle$ y reduce la simetría C_{3v} del NV, este parámetro en diamantes de alta pureza tiene un valor $E \approx 100$ KHz mientras que en nanodiamantes puede alcanzar unos pocos MHz (Nótese que $E \ll D_{gs}$) [4]. Por la relevancia en los experimentos, el hamiltoniano H_{NV} está en unidades de frecuencia [13].

El término $\gamma_e \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}$ en (2) da cuenta del campo magnético externo $\mathbf{B}$ aplicado al centro NV que levanta la degeneración de los estados $|\pm 1\rangle$ por efecto zeeman. El parámetro $\gamma_e = (g_e \mu_B)/h \approx 28$ GHz/T es conocido como la relación giromagnética del centro NV y $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ es el operador espín-1 electrónico adimensional que tiene de componentes las matrices de Pauli, así el producto $\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}$ puede ser expresado en sus componentes $B_x S_x + B_y S_y + B_z S_z$ luego es posible separar los efectos producidos por un campo magnético alineado al eje de simetría del NV (B_z) del campo magnético no alineado (B_x o B_y)

$$H_{\text{NV}} = D \left(S_z^2 - \frac{2}{3} \right) + E(S_x^2 - S_y^2) + \overbrace{\gamma B_z S_z}^{\mathcal{H}_{||}} + \overbrace{\gamma(B_x S_x + B_y S_y)}^{\mathcal{H}_{\perp}} \quad (3)$$

así la componente del campo magnético alineado al eje de simetría del centro NV (B_z) con-

tribuye a la separación de los estados $|\pm 1\rangle$ mientras que las componentes no alineadas (B_x y B_y) mezclan los estados espín diferentes.

Tomando los autoestados de S_z : $\{|1\rangle = | + 1 \rangle ; |2\rangle = |0\rangle ; |3\rangle = | - 1 \rangle\}$ se representa matricialmente las matrices de Pauli

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

y el Hamiltoniano (3) queda como

$$H_{NV} = \begin{bmatrix} \gamma B_z + \frac{D}{3} & \gamma \left(\frac{\sqrt{2}B_x}{2} - \frac{\sqrt{2}iB_y}{2} \right) & E \\ \gamma \left(\frac{\sqrt{2}B_x}{2} + \frac{\sqrt{2}iB_y}{2} \right) & -\frac{2D}{3} & \gamma \left(\frac{\sqrt{2}B_x}{2} - \frac{\sqrt{2}iB_y}{2} \right) \\ E & \gamma \left(\frac{\sqrt{2}B_x}{2} + \frac{\sqrt{2}iB_y}{2} \right) & -\gamma B_z + \frac{D}{3} \end{bmatrix} \quad (5)$$

luego la ecuación característica $|H_{NV} - \lambda I| = 0$ ofrece las autoenergías del sistema

$$\lambda^3 + \left(-(\gamma B_x)^2 - (\gamma B_y)^2 - (\gamma B_z)^2 - \frac{D^2}{3} - E^2 \right) \lambda + \frac{(\gamma B_x)^2 D}{3} + \frac{(\gamma B_y)^2 D}{3} - \frac{2(\gamma B_z)^2 D}{3} - (\gamma B_x)^2 E + (\gamma B_y)^2 E + \frac{2D^3}{27} - \frac{2DE^2}{3} = 0 \quad (6)$$

Un caso sencillo a resolver es $B_x = B_y = 0$, es decir, cuando el campo magnético $B = B_z$ está alineado al eje del centro NV. Luego los autoestados con sus respectivas autoenergías son

$$|G\rangle = |0\rangle \quad E_G = -\frac{2D}{3} \quad (7)$$

$$|-\rangle = \frac{(-E)|+1\rangle + \left((\gamma B_z) + \sqrt{(\gamma B_z)^2 + E^2} \right) |-1\rangle}{\sqrt{2 \left((\gamma B_z)^2 + E^2 + (\gamma B_z) \sqrt{(\gamma B_z)^2 + E^2} \right)}} \quad E_- = \frac{D}{3} - \sqrt{(\gamma B_z)^2 + E^2} \quad (8)$$

$$|+\rangle = \frac{\left((\gamma B_z) + \sqrt{(\gamma B_z)^2 + E^2} \right) |+1\rangle + E |-1\rangle}{\sqrt{2 \left((\gamma B_z)^2 + E^2 + (\gamma B_z) \sqrt{(\gamma B_z)^2 + E^2} \right)}} \quad E_+ = \frac{D}{3} + \sqrt{(\gamma B_z)^2 + E^2} \quad (9)$$

con esta solución se puede calcular las frecuencias de transición: $\nu_- = E_- - E_G$ y $\nu_+ = E_+ - E_G$, las cuales se grafican en la figura V para un rango pequeño de campos en μT . Se observa que

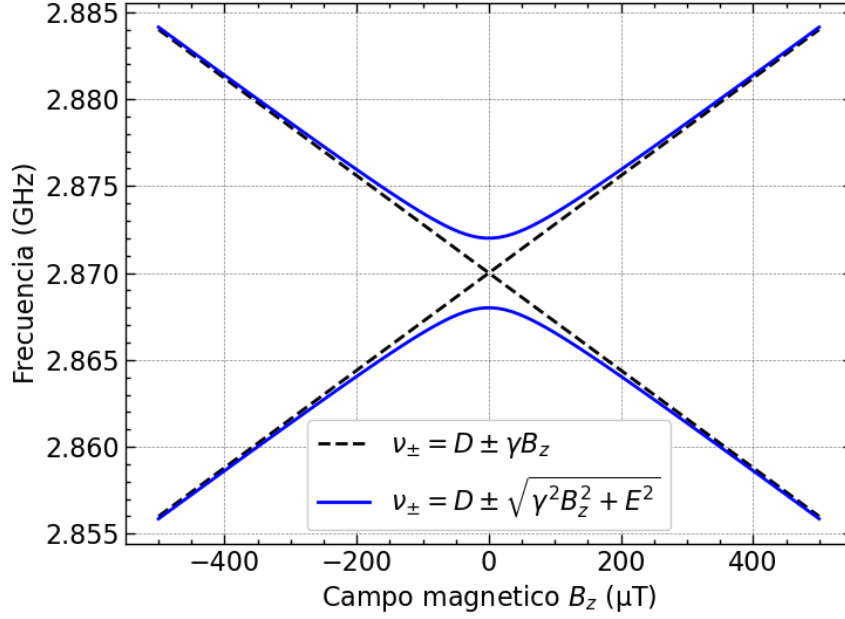


Figura V. Frecuencias de transición $\nu_{\pm}$ en función del campo magnético total aplicado a lo largo del eje NV.

La línea negra discontinua es para un parámetro $E = 0$ MHz mientras que la línea azul corresponde a $E = 2$ MHz. Figura realizada por el autor.

el parámetro “E” evita un cruce en campo cero ($B_z = 0$) en las frecuencias de transición y esto implica que no existe estados degenerados. Por otro lado, para campos altos ($|B_z| \gg E$) las frecuencias de transición se pueden aproximar a $\nu_{\pm} \approx D \pm \gamma B_z$.

El caso más general, en el que el campo no está alineado con el eje NV, se aborda mejor utilizando un sistema de coordenadas esféricas. En este contexto, las componentes del campo magnético son:

$$\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z) = (B \sin(\theta) \cos(\varphi), B \sin(\theta) \sin(\varphi), B \cos(\theta)) \quad (10)$$

donde θ es el ángulo formado entre el campo $\mathbf{B}$ y el eje NV. El ángulo azimutal φ se puede asumir nulo sin pérdida de generalidad, debido a la simetría C_{3v} del NV. Los autoestados y autoenergías del Hamiltoniano en presencia de un campo $\mathbf{B}$ se etiquetan como $\{|0\rangle_{\mathbf{B}}, |- \rangle_{\mathbf{B}}, |+ \rangle_{\mathbf{B}}\}$ y $\{E_0^{\mathbf{B}}, E_-^{\mathbf{B}}, E_+^{\mathbf{B}}\}$, respectivamente (véase la Figura VIa). El cuadrado del módulo de las proyecciones de estos nuevos autoestados en los autoestados de S_z , es decir, $\{|\langle 0|0\rangle_{\mathbf{B}}|^2, |\langle -1|- \rangle_{\mathbf{B}}|^2, |\langle +1|+ \rangle_{\mathbf{B}}|^2\}$, puede sugerir en qué condiciones los estados $|0\rangle$, $|-1\rangle$ y $|+1\rangle$ aproximan adecua-

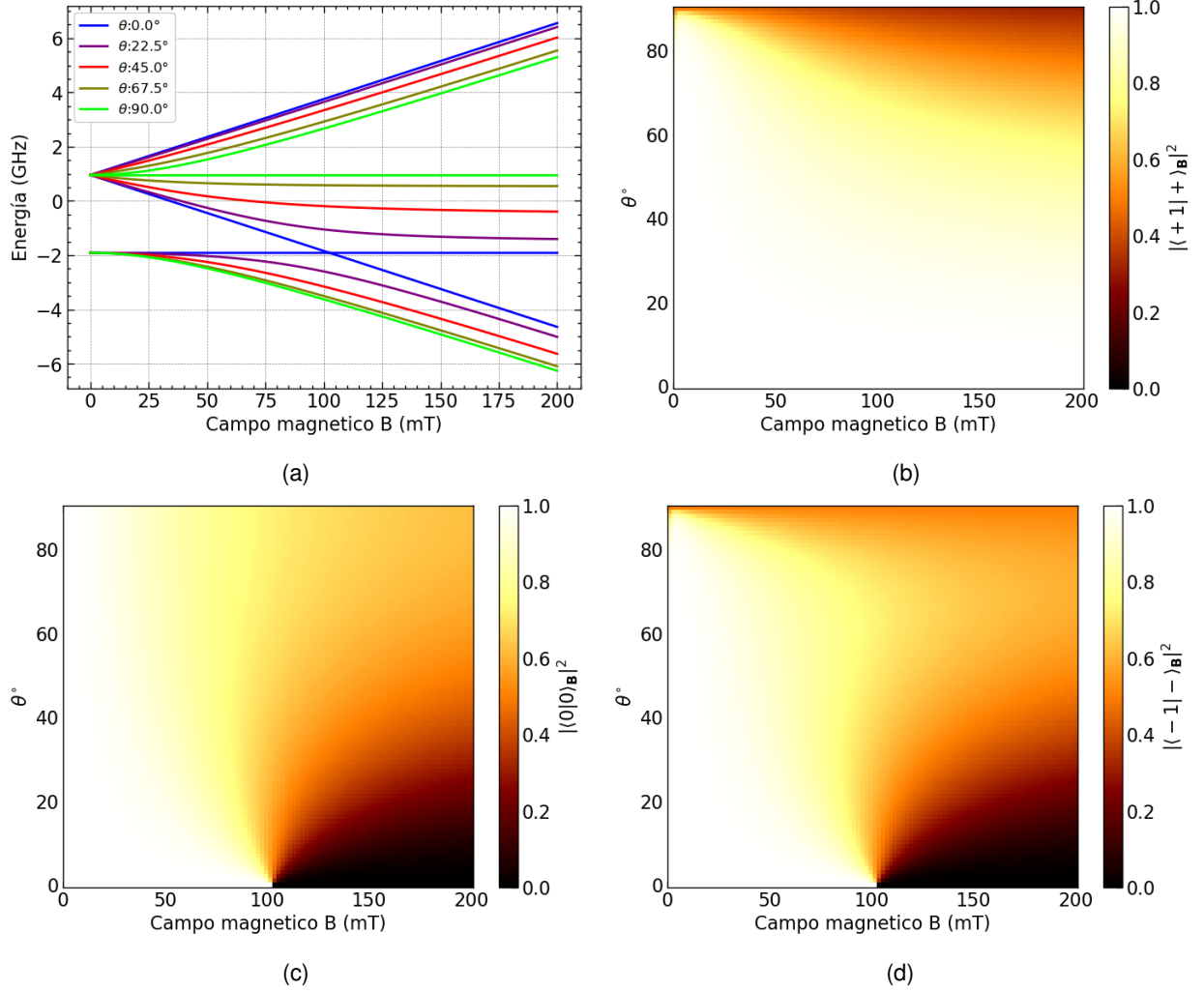


Figura VI. (a) Autoenergías E_0^B , E_-^B y E_+^B del Hamiltoniano en función del módulo del campo magnético B para diferentes ángulos θ . Módulo al cuadrado de la proyección (b) del autoestado $|+\rangle_B$ en $|+1\rangle$, (c) del autoestado $|0\rangle_B$ en $|0\rangle$ y (d) del autoestado $|-\rangle_B$ en $|-1\rangle$.

Una región de proyección alta (regiones blancas) indican donde los autoestados del Hamiltoniano (3) se pueden aproximar $|\pm\rangle_B \approx |\pm 1\rangle$, $|0\rangle_B \approx |0\rangle$ y las regiones oscuras indican donde estos últimos autoestados son una superposición de los estados $|\pm 1\rangle$ y $|0\rangle$. Figura realizada por el autor.

damente a los autoestados del Hamiltoniano. En las figuras VIb, VIc y VIId, se observa que en las regiones blancas comunes donde $\theta < 40^\circ$ y $|\mathbf{B}| < 100$ mT, la aproximación se mantiene. Sin embargo, para $|\mathbf{B}| > 100$ mT, aparecen regiones oscuras en las dos últimas figuras, indicando una mezcla entre los estados $|0\rangle$ y $|\pm 1\rangle$.

Finalmente, el hamiltoniano del estado espín excitado del centro NV a temperatura ambiente es equivalente al hamiltoniano del estado base. El parámetro γ_e y el eje de cuantización son los mismos, pero el parámetro de división de campo cero es $D_{es} = 1,42$ GHz. En otras palabras, el Hamiltoniano del espín en el estado excitado es simplemente la ecuación 2 con el reemplazo de D_{gs} por D_{es} [1].

D. Dinámica óptica

Un único centro NV puede absorber y emitir fotones. La diferencia de energía entre el estado fundamental y el primer estado excitado corresponde a una longitud de onda de 637 nm (luz roja), tal como lo indica la línea óptica de fonón cero en el espectro de emisión (véase figura II). Experimentalmente, es conveniente excitar el centro NV con luz de 532 nm (luz verde) debido a la presencia de estados más altos por encima del primer estado excitado, los cuales decaen rápidamente hacia este estado mientras mantienen la población de espín [18].

Bajo iluminación visible, el centro NV emite fluorescencia (PL, por sus siglas en inglés) en su banda lateral de fonones (PSB) en el rango de $\approx 650 - 750$ nm, cuya intensidad depende de la proyección de espín en el estado fundamental [19]. Esto implica la existencia de fotodinámicas en el centro NV, donde las dinámicas rápidas (típicamente en tiempos de nanosegundos) se explican por transiciones radiactivas y no radiactivas intrínsecas entre los estados electrónicos del centro NV, mientras que las dinámicas lentas (típicamente en tiempos de micro o milisegundos) se deben a transiciones extrínsecas [1].

La fotodinámica básica del centro NV puede describirse mediante tres niveles electrónicos: un estado base triplete de espín $S = 1$ con simetría 3A_2 , un estado excitado triplete de espín $S = 1$ con simetría 3E , y un estado singlete metaestable $|s\rangle$ que involucra dos niveles con simetrías 1A_1 y 1E [1]. Tanto el estado base como el estado excitado se dividen en tres subniveles $m = 0, \pm 1$, que representan las proyecciones de espín. El diagrama de los subniveles de

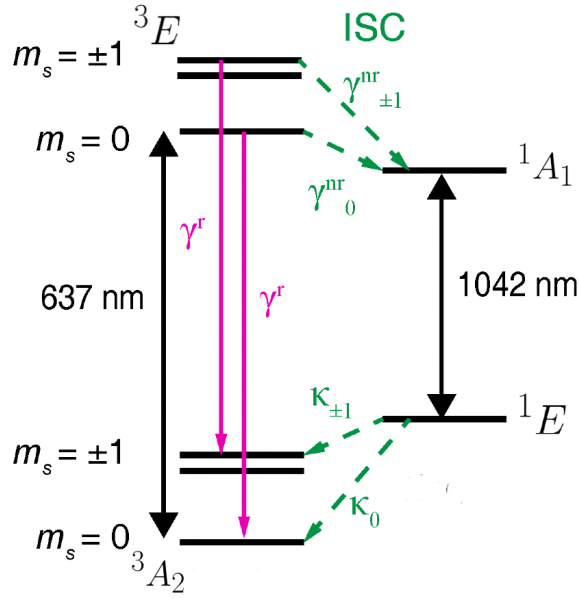


Figura VII. Estructura electrónica del centro NV^- a temperatura ambiente.

Las líneas sólidas con etiqueta γ^r indican transiciones radiactivas y las líneas discontinuas con etiquetas γ_m^{nr}, κ_m indican transiciones no radiactivas. Entre los estados 1A y 1E se produce una transición en el espectro del infrarrojo (1042 nm). Es común referirse a los estados con $m_s = \pm 1$ como los “estados oscuros”, en contraste con el estado con $m_s = 0$ llamado el “estado brillante”. Adaptado de [19].

energía correspondientes del centro NV se muestra en la figura VII.

Los subniveles triplete en el estado excitado pueden relajarse al estado base por transiciones radiactivas que producen una fluorescencia roja o decaer por una vía secundaria que involucra un cruce intersistema (ISC, por sus siglas en inglés) no radiactivo hacia estados singlete [20]. La tasa total de decaimiento de la proyección de espín del estado excitado γ_m se da por la suma de la tasa radiactiva γ^r que es independiente de la proyección espín y la tasa no radiactiva γ_m^{nr} que depende fuertemente de la proyección del espín.

$$\gamma_m = \gamma^r + \gamma_m^{nr} \quad (11)$$

Se tiene $\gamma_{\pm 1}^{nr} \approx 10\gamma_0^{nr}$ y esta diferencia genera una respuesta transitoria a la iluminación que varía drásticamente según la proyección inicial del espín en el estado fundamental [19] (véase la Figura VIII).

El estado singlete $|s\rangle$ desempeña un comportamiento clave en el centro NV. Por un

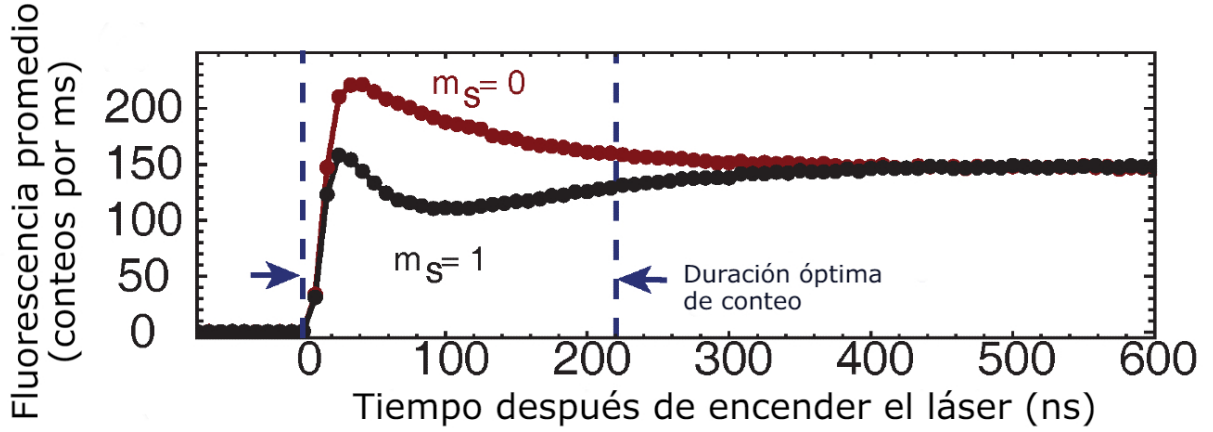


Figura VIII. Fluorescencia resuelta en el tiempo a temperatura ambiente correspondiente a los estados iniciales de espín $m_s = 0$ y $m_s = 1$ bajo iluminación de un láser de 532 nm.

Los “conteos por ms” indican una tasa de fotones detectados y un valor alto significa una mayor población en el estado excitado del centro NV. En los primeros 225 ns (indicado entre líneas azules discontinuas verticales) se da un conteo óptimo para captar la fluorescencia. Adaptado de [19], originalmente de [21].

lado, las transiciones ópticas conservan principalmente el espín ($\Delta m_s = 0$), mientras que los ISC no radiactivos al estado 1A_1 son fuertemente selectivos en espín [4], esto quiere decir que el estado excitado $m = \pm 1$ tiene alta probabilidad de decaer a través del estado 1A_1 y el estado excitado $m = 0$ mayormente decaerá vía una transición radiactiva, esto conduce a una diferencia óptica entre los estados $m_s = 0$ y $m_s = \pm 1$ de aproximadamente 30 % que desaparece durante una iluminación láser prolongada (véase la Figura VIII) debido a que el estado más bajo 1E tiene una preferencia por decaer hacia el estado base $m = 0$ que corresponde al estado fundamental del centro NV [22]. Por lo tanto, el proceso bajo un bombeo óptico de luz verde prolongada provee un gran grado de polarización al estado fundamental $m_s = 0$ del defecto NV

En resumen, bajo excitación óptica, los decaimientos no radiactivos a través de un estado cruce intersistemas (ISC) de estados dependientes del espín produce:

1. Contraste de fluorescencia dependiente del estado espín
2. Polarización óptica del espín en el estado fundamental $m_s = 0$ del centro NV⁻

Estas 2 propiedades permiten simultáneamente la lectura y polarización en la proyec-

ción espín $m_s = 0$ del centro NV, comparando la fluorescencia integrada del estado de espín a leer con mediciones de calibración de la fluorescencia integrada correspondiente a los estados de espín $m_s = 0$ y ± 1 [1].

II. Modelo fenomenológico del centro NV

A. Introducción

El centro nitrógeno vacante o centro NV es un defecto puntual del diamante que compone tres carbonos, un nitrógeno y una vacante [1]. El sistema NV presenta un espín electrónico igual a uno ($S=1$) y si ignoramos interacciones hiperfinas, este sistema espín triplete con $m_s = 0, \pm 1$ puede ser descrito por el siguiente Hamiltoniano [4]

$$H = DS_z^2 + E(S_x^2 - S_y^2) + \gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad (12)$$

el cual considera la interacción de campo cero y la interacción del espín con el campo magnético $\mathbf{B}$, aquí el eje de simetría del NV coincide con el eje “z”. El $D \approx 2,87$ GHz es llamado parámetro de división de campo cero axial, el $E \approx 5$ MHz es llamado parámetro de división de campo cero fuera del eje y $\gamma = 28$ GHz/T es la relación giro-magnética del NV. Además, el vector $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ tiene de componentes las matrices de Pauli.

Los estados espín tripletes del estado base (Estado 3A_2) y excitado (Estado 3E) junto con el estado singlete asociado al cruce intersistema (ISC) forman 7 niveles energéticos para el centro NV. Las transiciones energéticas entre estos niveles pueden ser ópticas como las que ocurren entre los estados 3A_2 y 3E separados por 1.945 eV (637 nm) o NO ópticas como las asociadas al ISC [1]. Estos siete niveles es lo que conforma el sistema NV de estudio (véase la Figura IX).

Si el sistema NV no interacciona con sus alrededores, entonces la descripción de su estado se da por la ecuación de von Neumann [23]

$$i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho] \quad (13)$$

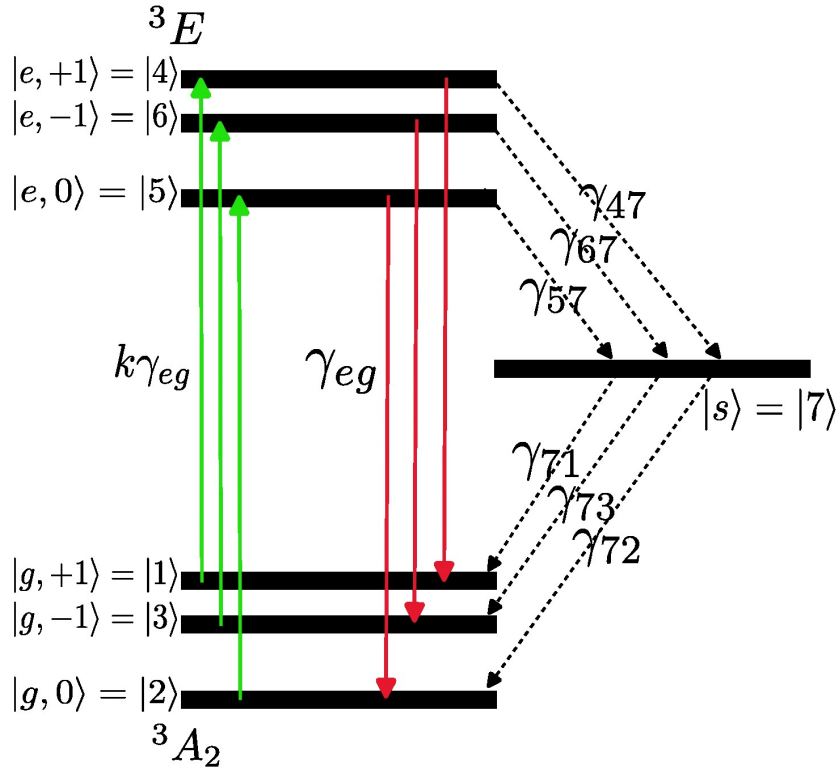


Figura IX. Sistema de niveles NV.

Las flechas continuas y discontinuas representan transiciones ópticas y NO-ópticas respectivamente. La etiqueta γ_{ij} indica la tasa de transición desde el nivel $|i\rangle$ al nivel $|j\rangle$. Figura realizada por el autor.

Mientras que la ecuación de Schrödinger ($i\hbar\partial_t|\psi\rangle = H|\psi\rangle$) describe estados puros mediante las funciones de onda $|\psi\rangle$, la ecuación de von Neumann describe estados mixtos mediante la matriz densidad ρ [24]. Los estados mixtos consideran incertidumbres tanto intrínsecamente cuánticas como experimentales y esa es la razón de que el formalismo de matriz densidad sea relevante para describir el centro NV.

La ecuación (13) describe sistemas cerrados y estos son una idealización de sistemas reales (en analogía a lo que sucede con sistemas clásicos cerrados), ya que en la naturaleza nada está aislado [23] por lo tanto, la ecuación de von Neumann describe sistemas desacoplados de su ambiente [25]

Bien, se puede considerar un sistema general que está siempre dividido en un sistema de interés, denominado “S” (el sistema de NV), y un ambiente, denominado “E” (todo lo ajeno

al NV y no accesible experimentalmente). En ese caso, la dinámica del sistema compuesto sigue la ecuación de von Neumann con el siguiente Hamiltoniano [23]

$$H = H_S + H_E + H_{\text{int}}, \quad (14)$$

donde H_{int} representa la interacción entre el sistema H_S y el ambiente H_E . En este caso, resulta conveniente utilizar ecuaciones maestras para describir exclusivamente el sistema de interés. Un ejemplo de esto es la ecuación maestra de Lindblad [2]

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_S, \rho(t)] + \sum_k \gamma_k \left(L_k \rho(t) L_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_k^\dagger L_k, \rho(t) \} \right) \quad (15)$$

donde H_S es el Hamiltoniano del sistema y da cuenta de la evolución unitaria del sistema, los $\{L_k\}$ son los operadores de Lindblad que representan procesos no unitarios como la relajación o la decoherencia, que ocurren a ciertas tasas $\{\gamma_k\}$ [26].

Con la condición inicial $\rho(t = 0)$ la ecuación (15) nos permite seguir las poblaciones y las coherencias del sistema cuántico en el tiempo; sin embargo, cuando el Hamiltoniano H_S no genera coherencias, entonces el sistema evoluciona rápidamente a una dinámica completamente decoherente y es más práctico describir el sistema con una ecuación clásica de tasas [18].

En una descripción sin coherencia en el centro NV, las siete poblaciones $P_i = \{P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, P_6, P_7\}$ de los niveles de energía sigue la ecuación de tasas [20]

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_{j=1}^7 (\gamma_{ij} P_j - \gamma_{ji} P_i) \quad (16)$$

donde γ_{ij} es la tasa de transición desde el nivel $|i\rangle$ al nivel $|j\rangle$ y estas pueden verse visualizadas en la figura IX. Los valores experimentales de las tasas de transición para el centro NV pueden encontrarse en los trabajos de Robledo et al. [27] y Tetienne et al. [20]

Los diversos enfoques para estudiar el centro NV dependen de lo que se desea describir o investigar, y esto a su vez requiere un análisis previo de los parámetros que influyen en un experimento. Por ejemplo, para realizar una descripción cuantitativa de la fotofísica de los

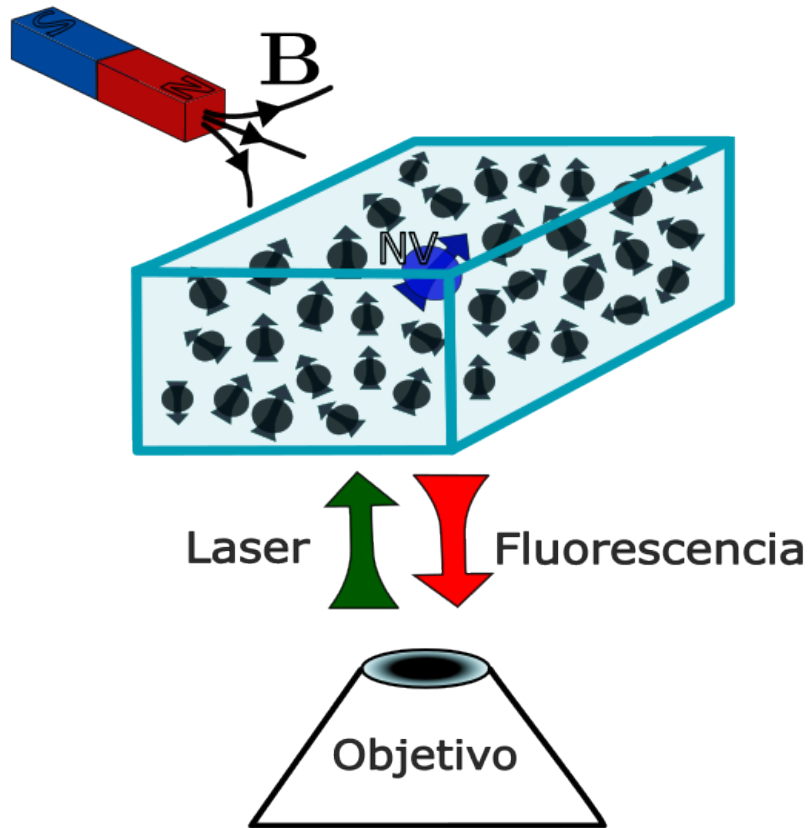


Figura X. Visual del modelo de un único centro NV dentro de una pequeña región cúbica del diamante. Este NV está sometido a un campo magnético B_0 y un laser verde. Los elementos negros que rodean al NV representan los espines que perturban el estado cuántico del NV. Figura realizada por el autor.

centros NV a baja temperatura, se puede usar un modelo extendido de ecuaciones de tasas dependiente del campo magnético [28]. Por otro lado, si se pretende modelar la dependencia de la temperatura de la fotofísica de un único centro NV, se utiliza la ecuación maestra de Lindblad [29].

Existen trabajos donde se investiga la dinámica de fluorescencia del centro NV resolviendo la ecuación de tasas óptica para obtener fórmulas teóricas completas de un método de lectura de espín óptico [30, 31] o con la ecuación de Lindblad derivar variables aleatorias asociadas a la medición de fluorescencia [18].

Se pueden usar modelos teóricos del centro NV con las ecuaciones antes mencionadas para el diseño de una tecnología. Por ejemplo, hay un trabajo donde se cuantifica la intensidad de fluorescencia del centro NV con un modelo de ecuación de tasas para realizar todas las

mediciones que involucran la implementación de un motor térmico cuántico [32] o donde se simula la fluorescencia (PL) emitida de un conjunto de centros NV en el contexto de un sensor magnético cuántico [33].

Con un modelo teórico también se puede simular resultados experimentales, por ejemplo, con la ecuación de Lindblad se puede simular un ODMR de un conjunto de centros NV [34].

Finalmente, existen tesis doctorales donde se usa la ecuación maestra de Lindblad para investigar la fotodinámica de los centros NV en relación con diversos experimentos estándar [5, 35, 36].

El sistema NV que se describe en el presente capítulo está visualizado en la figura X, donde una luz verde (637 nm) incide en una pequeña región cúbica dentro del diamante y la luz roja fluorescente (PL) es extraída de esta misma región. Se considera que en la zona de iluminación hay un único centro NV. Este centro NV está sometido, además, a un campo magnético constante B_0 proveniente de un imán. La estructura interna de siete niveles de energía de este centro está esquematizada en la figura IX, donde tres niveles corresponden al estado base, tres al estado excitado y uno al estado intermedio ISC. A nivel teórico, aunque simple, este modelo es capaz de describir la fotodinámica del centro NV y puede usarse como una herramienta de investigación.

Para simular la fotodinámica se usa la ecuación de Lindblad (15), el Hamiltoniano (12) del centro NV y los operadores de Lindblad. La descripción matemática de estos elementos se basa en el trabajo de Hincks et al. [18]. Las tasas de transición entre niveles de energía son recogidas del trabajo de Tetienne et al. [20]. Las poblaciones de los niveles de energía y la fluorescencia en esta simulación se determinan a partir de la matriz de densidad $\rho(t)$, que es la solución de la ecuación de Lindblad.

El objetivo de la simulación de la fotodinámica es describir cómo la fluorescencia del centro NV depende de ciertos parámetros del modelo, los cuales pueden estar relacionados con condiciones experimentales controlables. Como ejemplo, la saturación de la fluorescencia en función de la potencia del láser de excitación (véase figura XIa) y la disminución de la fluorescencia en presencia de un campo magnético (véase figura XIb) son fenómenos conocidos en el estudio de centros NV. En este trabajo, estos fenómenos se simulan y se explican en el

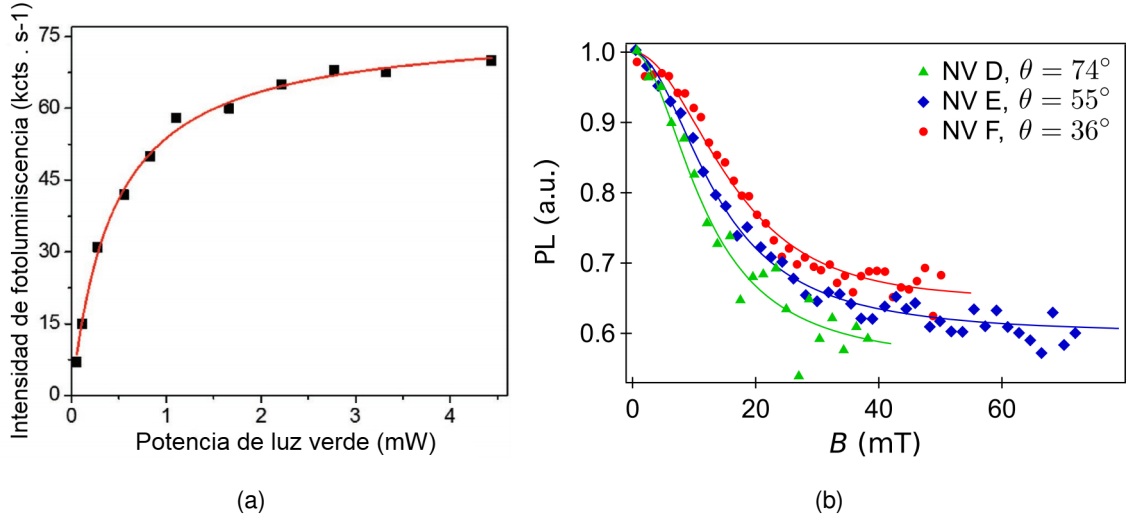


Figura XI. (a) Intensidad de fluorescencia (I_{PL}) de un centro NV único en función de la potencia (P) de la luz incidente de 532 nm (verde). (b) Intensidad de fluorescencia (I_{PL}) en función del módulo del campo magnético B aplicado sobre tres centros NV únicos.

La figura (a) fue extraída de [37] y los puntos cuadrados representan datos experimentales, y la línea roja corresponde al ajuste con la función $I_{PL} = I_0 \frac{P}{P + P_0}$. La figura (b) fue extraída de [20] y el ángulo θ indica la inclinación entre el eje de cuantización del NV y el campo magnético.

marco del modelo utilizado.

Es importante comentar que no se considera un campo de microondas presente en el modelo por lo que sería más práctico usar la ecuación de tasas; sin embargo, se prefiere el uso de la ecuación maestra de Lindblad por ser más completa su descripción y también de fácil extensión si se incluye en el futuro un campo eléctrico actuante en el sistema.

La descripción detallada del modelo teórico junto con el código escrito en Python para simular la fotodinámica del centro NV está habilitado en notebooks de jupyter para libre consulta por otros investigadores [38].

B. Ecuación maestra

El espacio de Hilbert asociado al sistema de 7 niveles se descompone en una suma directa

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ground} \oplus \mathcal{H}_{excited} \oplus \mathcal{H}_{isc} \quad (17)$$

donde $\dim(\mathcal{H}_{ground}) = \dim(\mathcal{H}_{excited}) = 3$ y $\dim(\mathcal{H}_{isc}) = 1$. La base de este espacio vectorial $\mathcal{H}$ es

$$|g, +1\rangle = |1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (18)$$

$$|g, 0\rangle = |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (19)$$

$$|g, -1\rangle = |3\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (20)$$

$$|e, +1\rangle = |4\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (21)$$

$$|e, 0\rangle = |5\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (22)$$

$$|e, -1\rangle = |6\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (23)$$

$$|s\rangle = |7\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (24)$$

donde $\{+1, 0, -1\}$ son etiquetas de espín correspondientes a los autovalores de $S_z = \text{diag}(1, 0, -1)$ y $\{g, e, s\}$ se refiere a los estados base, excitado y singlete, respectivamente. La base está conformada por los autoestados del operador $S_z \oplus S_z \oplus I_{1 \times 1}$.

El sistema cuántico del centro NV es expresado por el Hamiltoniano H siguiente

$$H = H_{ground} \oplus H_{excited} \oplus 0 \quad (25)$$

donde

$$H_{ground} = D_g(S_z^2 - \frac{2}{3}I) + E(S_x^2 - S_y^2) + \gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad (26)$$

$$H_{excited} = D_e(S_z^2 - \frac{2}{3}I) + E(S_x^2 - S_y^2) + \gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad (27)$$

los valores tomados son $D_g = 2,87$ GHz, $D_e = 1,42$ GHz, $E = 5$ MHz y $\gamma = 28$ GHz/T y los operadores de espín 1 son las matrices de pauli

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (28)$$

De manera ideal si el centro NV fuera un sistema cerrado, podría ser descrito por un estado puro o función de onda $|\psi\rangle$ que sigue una evolución unitaria dada por la ecuación de Schrödinger ($H|\psi\rangle = \partial_t |\psi\rangle$). Se describe, en cambio, por un estado mixto, que sigue el formalismo de matriz densidad. La matriz densidad de este sistema tiene la dimensión del Hamiltoniano del centro NV y usando la base del espacio $\mathcal{H}$ tiene la siguiente representación

$$\rho = \sum_i \rho_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} & \rho_{15} & \rho_{16} & \rho_{17} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} & \rho_{25} & \rho_{26} & \rho_{27} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} & \rho_{35} & \rho_{36} & \rho_{37} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} & \rho_{45} & \rho_{46} & \rho_{47} \\ \rho_{51} & \rho_{52} & \rho_{53} & \rho_{54} & \rho_{55} & \rho_{56} & \rho_{57} \\ \rho_{61} & \rho_{62} & \rho_{63} & \rho_{64} & \rho_{65} & \rho_{66} & \rho_{67} \\ \rho_{71} & \rho_{72} & \rho_{73} & \rho_{74} & \rho_{75} & \rho_{76} & \rho_{77} \end{pmatrix} \quad (29)$$

donde ρ_i es la probabilidad clásica de que el sistema esté en el estado $|\psi_i\rangle$, ρ_{ii} es la población de los estados respectivos $|i\rangle$ y ρ_{ij} representa la coherencia entre los estados $|i\rangle$ y $|j\rangle$. El sistema cuántico NV en general es considerado como un sistema abierto y su evolución es modelado usando la ecuación maestra de Lindblad

$$\dot{\rho} = -i[\rho, H] + \sum_{a=1}^{11} \left(L_a \rho L_a^\dagger - \frac{1}{2} (L_a^\dagger L_a \rho + \rho L_a^\dagger L_a) \right) \quad (30)$$

Donde H es el Hamiltoniano del centro NV de (25), ρ es la matriz densidad de (29) y L_a son los operadores de Lindblad que se describen fenomenológicamente a continuación [18].

La absorción de un fotón lleva el sistema NV del estado $\mathcal{H}_{ground}$ al $\mathcal{H}_{excited}$, y para la emisión espontánea de un fotón ocurre lo inverso. Ambos procesos conservan el espín. Luego

los operadores de Lindblad que conservan el espín asociado a los procesos de excitación y emisión espontánea son

$$L_1 = \sqrt{\gamma_{eg}}(|g, +1\rangle \langle e, +1| + |g, 0\rangle \langle e, 0| + |g, -1\rangle \langle e, -1|) \quad (31)$$

$$L_2 = \sqrt{k \gamma_{eg}}(|e, +1\rangle \langle g, +1| + |e, 0\rangle \langle g, 0| + |e, -1\rangle \langle g, -1|) \quad (32)$$

donde γ_{eg} es la tasa de emisión espontánea y representa la tasa a la cual los estados excitados decaen al estado base con una emisión de un fotón. El parámetro adimensional “ k ” corresponde a la potencia del láser de excitación, en el experimento es del orden de la unidad y es nula cuando el láser está apagado. El valor “ $\Lambda = k\gamma_{eg}$ ” es la tasa resonante que simplifica la transición del estado base a la banda fononica del estado excitado y su rápido decaimiento de esa banda al estado de fonón-cero [5].

Desde el estado excitado existen rutas que no conservan el espín y permiten que preferencialmente los estados $|e, -1\rangle$ y $|e, +1\rangle$ decaigan al estado base a través de estado ISC $|s\rangle$. Este puede ser modelado usando los operadores disipativos de Lindblad

$$L_3 = \sqrt{\gamma_{47}} |s\rangle \langle e, +1| \quad L_4 = \sqrt{\gamma_{57}} |s\rangle \langle e, 0| \quad L_5 = \sqrt{\gamma_{67}} |s\rangle \langle e, -1| \quad (33)$$

$$L_6 = \sqrt{\gamma_{71}} |g, +1\rangle \langle s| \quad L_7 = \sqrt{\gamma_{72}} |g, 0\rangle \langle s| \quad L_8 = \sqrt{\gamma_{73}} |g, -1\rangle \langle s| \quad (34)$$

Donde $\gamma_{47}, \gamma_{57}, \gamma_{67}$ de los 3 primeros operadores corresponde a las transiciones de los estados excitados $|e, +1\rangle, |e, +0\rangle$ y $|e, -1\rangle$ hacia el estado ISC $|s\rangle$. Los parámetros γ_{71}, γ_{72} y γ_{73} de los 3 últimos operadores corresponde a las transiciones del estado $|s\rangle$ a los niveles del estado base $|e, +1\rangle, |e, +0\rangle$ y $|e, -1\rangle$.

Las transiciones que no conservan el espín tiene una tasa de transición relativamente pequeña γ_{01} . Se pueden modelar estas transiciones con los siguientes operadores de Lindblad

$$L_8 = \sqrt{\gamma_{01}} |g, +1\rangle \langle e, 0| \quad L_9 = \sqrt{\gamma_{01}} |g, -1\rangle \langle e, 0| \quad (35)$$

$$L_{10} = \sqrt{\gamma_{01}} |g, 0\rangle \langle e, +1| \quad L_{11} = \sqrt{\gamma_{01}} |g, 0\rangle \langle e, -1| \quad (36)$$

Tabla I
Tasas de transición

Referencia	γ_{eg}	$\gamma_{47} = \gamma_{67}$	γ_{57}	$\gamma_{71} = \gamma_{73}$	γ_{72}	γ_{01}
[20]	65.9	53.3	7.9	0.73	0.98	≈ 0

Nota: Todos los datos están en MHz.

Las poblaciones $P_i(t)$ de los 7 niveles asociados al modelo NV en cuestión y la fluorescencia Γ_{PL} que esta emite son definidas como [18]

$$P_1(t) = P_{g+1}(t) = \text{Tr}[|g, +1\rangle \langle g, +1| \rho(t)] \quad (37)$$

$$P_2(t) = P_{g0}(t) = \text{Tr}[|g, 0\rangle \langle g, 0| \rho(t)] \quad (38)$$

$$P_3(t) = P_{g-1}(t) = \text{Tr}[|g, -1\rangle \langle g, -1| \rho(t)] \quad (39)$$

$$P_4(t) = P_{e+1}(t) = \text{Tr}[|e, +1\rangle \langle e, +1| \rho(t)] \quad (40)$$

$$P_5(t) = P_{e0}(t) = \text{Tr}[|e, 0\rangle \langle e, 0| \rho(t)] \quad (41)$$

$$P_6(t) = P_{e-1}(t) = \text{Tr}[|e, -1\rangle \langle e, -1| \rho(t)] \quad (42)$$

$$P_7(t) = P_s(t) = \text{Tr}[|s\rangle \langle s| \rho(t)] \quad (43)$$

$$\Gamma_{PL} = \gamma_{eg} \text{Tr}[P_e \rho(t)] \quad (44)$$

donde se cumple $\left(\sum_{i=1}^5 P_i(t) = 1\right)$ y $P_e = |e, +1\rangle \langle e, +1| + |e, 0\rangle \langle e, 0| + |e, -1\rangle \langle e, -1|$ es el operador proyector en el subespacio del estado excitado.

En este modelo se usó los parámetros de la tabla I que son visualizados en la figura IX

C. Simulación de la dinámica óptica

En resumen, la resolución de la ecuación de Lindblad (30) utilizando los operadores de Lindblad (31)–(36) y las tasas experimentales de la tabla (I) permite obtener la matriz densidad $\rho(t)$, la cual posibilita el cálculo de las poblaciones y la fluorescencia del centro NV con las ecuaciones (37)–(44) en cualquier instante de tiempo. La dinámica se resolvió mediante los algoritmos descritos por Campaioli et al. [26] y el código escrito en Python se encuentra disponible en un repositorio de GitHub [38].

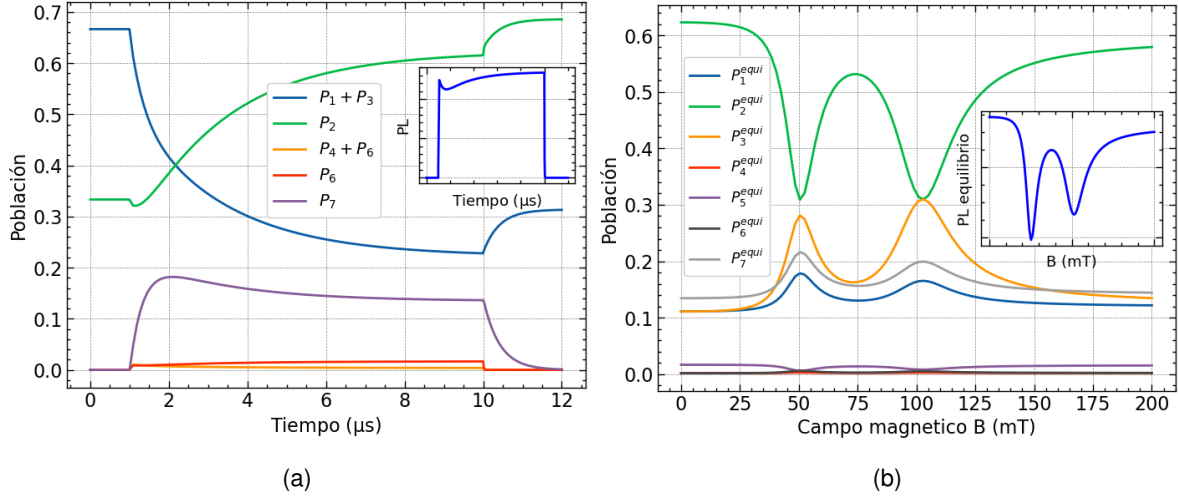


Figura XII. (a) Dinámica de evolución fotodinámica de las poblaciones del centro NV con láser verde encendido entre 1 – 10 μs y láser verde apagado entre 10 – 12 μs . (b) Poblaciones de equilibrio del centro NV tras una exposición prolongada al láser verde.

Para mejorar la legibilidad, se han combinado las poblaciones $P_1 + P_3$ y $P_4 + P_6$. Los parámetros utilizados en la simulación fueron $\theta = 3^\circ$ y $k = 0,03$. La subfigura en (a) muestra la intensidad de fluorescencia PL en los 12 μs y la sub figura en (b) presenta la fluorescencia en equilibrio en función del campo magnético hasta 200 mT. Figuras generadas por el autor.

Las simulaciones que se ejecutaron con el modelo descrito son:

1. La primera simulación se realizó para analizar el comportamiento de las poblaciones en la fotodinámica a lo largo de tres etapas (véase la Figura XIIa). En la primera etapa, entre 0 y 1 μs , el sistema se mantiene en una distribución de Boltzmann a temperatura ambiente, lo que implica una población inicial equilibrada entre los niveles del estado base $P_1 = P_2 = P_3 = 1/3$. La segunda etapa, de 1 a 10 μs , corresponde al encendido del láser verde ($k \neq 0$), mientras que en la última etapa, de 10 a 12 μs , el láser verde está apagado ($k = 0$).

La ecuación de Lindblad tiene una única solución de equilibrio y es independiente de las condiciones iniciales; en otras palabras, cualquier condición inicial fuera del equilibrio convergería a la misma distribución final al alcanzar $t = 10 \mu\text{s}$. Posteriormente, a partir de $t = 10 \mu\text{s}$, se observa una caída exponencial de las poblaciones en los estados excitados y en el estado singlete, que culmina con $P_7 \approx 0$.

La Figura XIIa revela que el estado $|g, 0\rangle$ no logra una polarización completa; es decir, $P_2(t = 12 \mu s) < 1$, lo cual indica que el estado final ρ es un estado mixto. Esta polarización imperfecta se debe a la tasa de transición del estado $|e, 0\rangle$ al estado metaestable $|s\rangle$, a saber $\gamma_{57} = 7,9$ MHz, utilizado en la simulación. Si se estableciera un valor nulo para γ_{57} , se obtendría una polarización perfecta.

2. La segunda simulación se realizó para investigar las poblaciones del estado estable del NV en función de la magnitud del campo magnético (véase la Figura XIIb). En los valles y picos, las poblaciones coinciden aproximadamente con los mínimos en la fluorescencia de equilibrio PL, debido a la mezcla de niveles entre $m = 0$ y $m = -1$, que se aproximan sin cruzarse debido al término no nulo $H_\perp$ en el Hamiltoniano de la simulación. Esta caída en la fluorescencia cerca de 50 mT y 100 mT corresponde a lo descrito para los niveles del estado excitado y del estado base, respectivamente.

Si se disminuye ángulo θ en la simulación, el primer valle en la fluorescencia desaparece gradualmente. Por el contrario, al incrementar el ángulo θ , ambos valles se desvanecen y dan lugar a una caída pronunciada en la fluorescencia.

3. La tercera simulación se realizó para observar el comportamiento de saturación en la emisión de fluorescencia (PL) del centro NV en función del parámetro k (véase la Figura XIII). Esta saturación ocurre cuando la tasa de excitación $\Lambda = k\gamma_{eg}$ supera la tasa de decaimiento γ_{eg} . Además, al definir el parámetro de saturación k_s y la fluorescencia de saturación PL_∞ , los datos pueden ajustarse a la siguiente curva:

$$PL = PL_\infty \cdot \frac{k}{k + k_s} \quad (45)$$

La curva muestra que, para valores de $k \ll k_s$, la PL crece de manera lineal con k . Sin embargo, conforme k se incrementa y se aproxima a k_s , el comportamiento se desvía hacia una dependencia no lineal.

4. La última simulación se realizó para investigar la fluorescencia (PL) normalizada función de las componentes paralela $B_z = B \cos(\theta)$ y perpendicular $B_\perp = B \sin(\theta)$ al eje del centro NV variado en el rango de módulo de campo magnético de 0–150 mT. (véase la

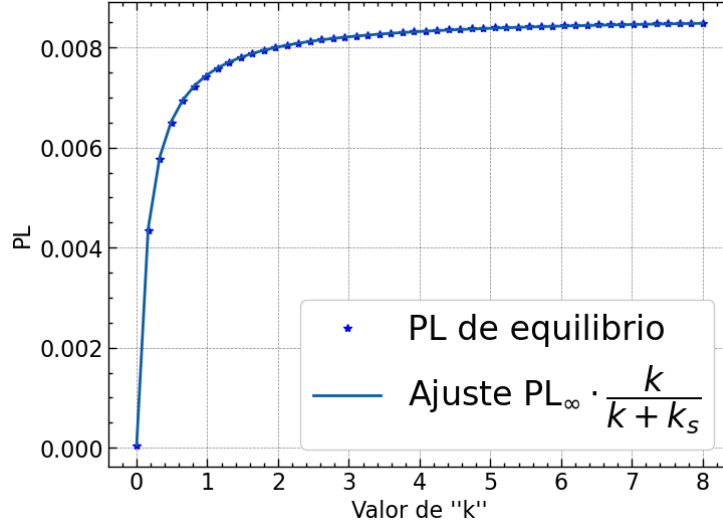


Figura XIII. Datos simulados de la fluorescencia PL en función de k , mostrando la saturación.

Los datos fueron ajustados con la curva $PL_{\infty} \cdot \frac{k}{k+k_s}$, donde $PL_{\infty} = 0,00865$ y $k_s = 0,16$. Figura generada por el autor.

figura XIV).

Para cualquier valor de $B_{\perp}$ en el mapa de calor la fluorescencia normalizada decrece al incrementar B_z . La sub figura en XIIb es el mismo comportamiento que se acaba de mencionar. La razón de este comportamiento general en la simulación es por la acumulación de población en el estado singlete $|s\rangle$.

D. Discusiones

El parámetro k utilizado en la simulación depende directamente de la potencia o intensidad del láser verde. Un valor bajo de $k < 0,03$ resulta en el mismo estado de equilibrio que el mostrado en la Figura XIIa si se permite un tiempo suficientemente largo. Por el contrario, un valor alto de k acelera la llegada al equilibrio, aunque reduce significativamente la polarización debido al término γ_{57} , que aumenta la población en el estado singlete. Esto implica que no es posible alcanzar una polarización perfecta ni en tiempos prolongados, y mucho menos en tiempos breves. La simulación sugiere, por lo tanto, que la polarización perfecta es inalcanzable bajo los parámetros utilizados de la tabla I. Sin embargo, este resultado de la simulación apunta a una posible optimización del parámetro k o de la intensidad del láser para maximizar

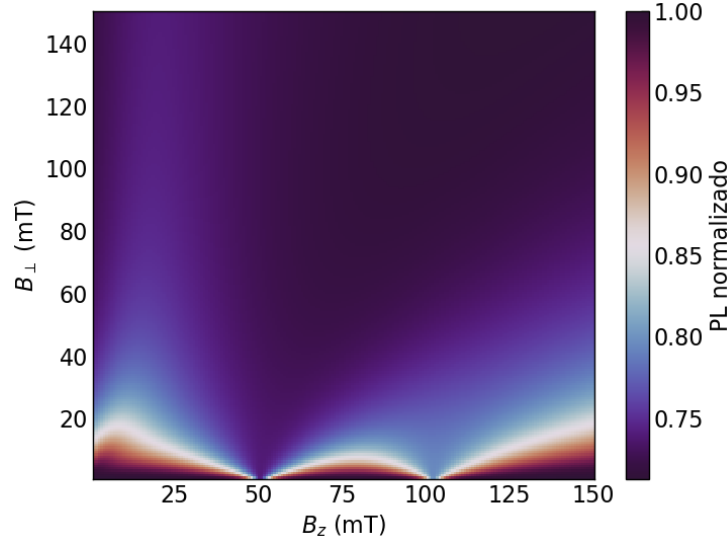


Figura XIV. Mapa de calor de la fluorescencia PL normalizada en función de $B_z = B \cos(\theta)$ y $B_{\perp} = B \sin(\theta)$, con $k = 0,03$ en esta simulación.

Figura generada por el autor.

la polarización en un tiempo breve.

Las figuras XIIb y XIV simulan un fenómeno de cruce evitado, o “anticruce”, cerca de $B_z = 50$ mT y $B_z = 100$ mT. En estos puntos, los estados $m = 0$ y $m = -1$ en los niveles del estado base y del estado excitado presentan una pequeña diferencia de energía, lo cual induce una mezcla de espines que genera cambios abruptos en la fluorescencia (PL). Estos resultados de simulación, de ser bien entendidos, podrían emplearse para simular la sensibilidad de campos magnéticos a través de las variaciones en la fluorescencia.

La figura XIII muestra que una tasa alta de bombeo de población desde el estado base al estado excitado causa que una parte significativa de la población quede atrapada en el estado singlete tras el decaimiento. Esto reduce la población en el estado $|g, 0\rangle$ y, por ende, la diferencia de población entre los niveles $m = 0$ y $m = \pm 1$, lo cual disminuye la sensibilidad de lectura de espín del centro NV, fundamental en muchos experimentos. Las simulaciones realizadas conducen a un comportamiento de saturación predecible y verificable experimentalmente. Registrando la fluorescencia en función de la potencia o intensidad del láser de excitación se podría relacionar el parámetro k con la intensidad del láser verde.

La figura XIV muestra las regiones donde la fluorescencia cae hasta un 20 % (dentro

de las líneas de contorno blanco) y donde cae hasta un 30 % (fuera de estas líneas). Esta distinción sugiere que el centro NV podría usarse como sensor cualitativo de campo magnético a nanoescala. Por ejemplo, un campo desconocido B que disminuya la fluorescencia en un 25 % indicaría que $B > 20$ mT

Finalmente, el modelo teórico de la fotodinámica del centro NV empleado en este trabajo reproduce tanto la saturación como la disminución de la fluorescencia (véase figuras XIa y XIb), y sugiere que podría adaptarse para realizar comparaciones experimentales. Esta adaptación enfrenta el desafío de conectar los parámetros experimentales con los del modelo; por ejemplo, surge la cuestión de si es posible establecer una relación precisa entre el parámetro k y la intensidad del láser verde. Además, aunque el modelo no considera ciertos fenómenos adicionales que podrían afectar la fotodinámica, esto no representa un problema, ya que dichos fenómenos pueden integrarse de manera fenomenológica, ya sea en el Hamiltoniano o en los operadores de Lindblad. Así, el modelo teórico resulta ser adaptable, y tal adaptación dependerá del objetivo experimental específico que se persiga.

Se espera que los resultados presentados aquí contribuyan a entender la naturaleza cuántica del centro NV y promuevan una investigación que involucre aspectos experimentales.

III. Magnetometría con centros NV

A. Magnetometría Óptica con un centro NV

Magnetometría es la medida de la magnitud y dirección o proyección de campos magnéticos, un magnetómetro simple es la aguja de una brújula que se alinea a lo largo de la proyección planar del campo magnético a su alrededor. Todos los magnetómetros, por más sofisticados que sean, presentan parámetros dependientes del campo magnético externo, por ejemplo el valor de la resistencia de un sensor magnetorresistivo varía con el campo magnético alterno aplicado [17].

El centro NV posee las propiedades necesarias para ser utilizado como un magnetómetro, ya que presenta niveles de energía que son sensibles al campo magnético externo, esto permite determinar el campo al medir las frecuencias de transición entre estos niveles [39]. Esta sensibilidad se manifiesta en el estado del centro NV, que forma un triplete de espín en su estado fundamental orbital. Debido al campo cristalino del diamante, estos tres posibles estados de espín se dividen en diferentes niveles de energía: el estado $m_s = 0$ tiene la energía más baja, mientras que los estados $m_s = \pm 1$ están elevados en energía por 2.87 GHz. La presencia de un campo magnético en el centro NV provoca una división adicional de los subniveles $m_s = \pm 1$ debido al efecto Zeeman, que es proporcional a la proyección del campo magnético a lo largo del eje NV [40] (véase la Figura XV). Esta división por efecto Zeeman se puede medir mediante la detección óptica de la resonancia de espín electrónico (ESR) y en eso se basa la magnetometría y la generación de imágenes magnéticas con centros NV en un principio. [20].

Una principal ventaja de la magnetometría con centros NV es que puede realizarse a condiciones ambientales además debido a que este defecto puntual es de tamaño atómico que se encuentra en la superficie del diamante permite lograr gran sensibilidad a campos magnéticos y resolución espacial nanométrica en la realización de imágenes magnéticas [40].

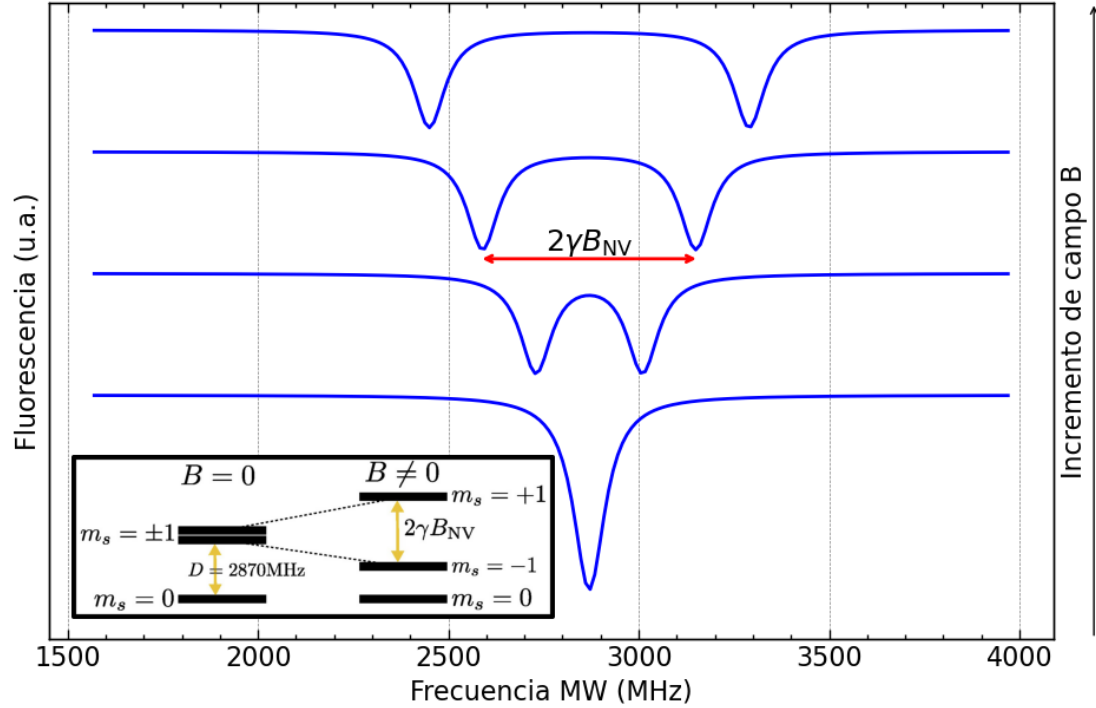


Figura XV. Simulación de la división de niveles por efecto Zeeman bajo un campo magnético externo aplicado a un único centro NV.

El espectro con un solo valle corresponde a la ausencia de campo externo, mientras que los tres espectros con dos valles corresponden a campos externos de magnitud creciente. La separación entre los valles es proporcional a la proyección del campo magnético sobre el eje del NV, " B_{NV} ". Los valles representan caídas en la fluorescencia que ocurren cuando hay resonancia entre el campo de microondas aplicado y las transiciones de espín del centro NV. Figura realizada por el autor.

El experimento más sencillo en magnetometría con centros NV es la medición directa de la separación Zeeman bajo la influencia de un campo magnético externo. Esta técnica requiere aplicar un láser continuo, que no está en resonancia con las transiciones ópticas del sistema de espín, mientras se barre lentamente un campo de microondas auxiliar para registrar un espectro de fluorescencia. La figura XV muestra la forma de un espectro ODMR con una disminución de la fluorescencia que se produce cuando la frecuencia de microondas es resonante con la transición $m_s = 0 \longleftrightarrow m_s = \pm 1$ [39]. La técnica anterior descrita, conocida como resonancia magnética detectada ópticamente (ODMR), es característico de los centros NV y solo se ha observado en unas pocas moléculas o defectos [22]. Los experimentos de ODMR se pueden realizar bajo iluminación y excitación por microondas continua, o también en

experimentos con iluminación y microondas de manera pulsada [22].

La sensibilidad al campo magnético se visualiza en la figura XV, al no tener un campo magnético externo sobre el NV aparece un solo valle en la fluorescencia que corresponde a la transición $m_s = 0 \longleftrightarrow m_s = \pm 1$. Al aplicar un campo magnético, la degeneración de los subniveles de espín $m_s = \pm 1$ se levanta por el efecto Zeeman, lo que lleva a la aparición de dos valles o frecuencias de resonancia en el espectro ODMR que corresponde a las transiciones $m_s = 0 \longleftrightarrow m_s = -1$ y $m_s = 0 \longleftrightarrow m_s = +1$. La separación de frecuencias entre las dos resonancias para campos débiles se puede aproximar a $2\gamma B_{NV}$, donde $\gamma = 28 \text{ GHz/T}$ es la relación giro-magnética del electrón y B_{NV} es el campo magnético paralelo al eje NV así las mediciones de las frecuencias ODMR proporciona la proyección del campo magnético sobre el eje del NV [4]. El contraste, es decir, la altura de los valles en el ODMR, es más alto si el centro NV está alineado con el campo magnético. Si el centro NV o la muestra que genera el campo externo gira respecto al otro, el contraste disminuye [16].

Para comparar diferentes técnicas de magnetometría, se define la sensibilidad del campo magnético, denotada como η , con la unidad de medida $T/\sqrt{\text{Hz}}$. Esta sensibilidad representa el cambio mínimo detectable en el campo magnético cuando la señal es recolectada durante un tiempo de integración de 1 segundo. La inclusión del $1/\sqrt{\text{Hz}}$ en la sensibilidad normaliza el valor medido con respecto al tiempo de integración necesario para detectar la señal [5].

La sensibilidad basada en el espín electrónico para magnetometría con el espectro ODMR es [9]

$$\eta = \frac{h}{g\mu_B} \frac{\Delta\nu}{\sqrt{I_0}C} \quad (46)$$

donde I_0 es la tasa de fluorescencia, C es el contraste ODMR, $\Delta\nu$ es el ancho de línea de la resonancia ODMR, g es el factor de Landé y μ_B es el magnetón de Bohr. La ecuación (46) es válida para un solo NV, si utilizamos un conjunto que incluye N centros NV entonces la sensibilidad mejora en un factor de $\sqrt{N}$ [17].

Un η pequeño corresponde a un magnetómetro de mayor sensibilidad, lo que implica que un campo magnético más bajo puede ser detectado. Se reporta sensibilidades con centros NV del orden de $pT - \mu T/\sqrt{\text{Hz}}$ [39] que entra en competencia con otras tecnologías que pueden

llegar hasta una sensibilidad del orden $fT/\sqrt{\text{Hz}}$ [17].

Tanto los magnetómetros de diamante con un único NV como de un conjunto de NV's (ensamble) han encontrado uso para aplicaciones en física de la materia condensada; neurociencia y biología de sistemas vivos; resonancia magnética nuclear; ciencia terrestre y planetaria; y magnetometría vectorial industrial [17].

El campo de la magnetometría con centros NV es extenso. Un trabajo de revisión elaborado por Zhang et al. [41] analiza los principios, la sensibilidad, el potencial de desarrollo técnico y las perspectivas de este campo. Un tutorial que ofrece una descripción general, concisa y pedagógica sobre la ingeniería de microondas, la ciencia de materiales y la magnetometría en NV es proporcionado por Abe and Sasaki [42]. El trabajo de Rondin et al. [4] discute las primeras aplicaciones de los magnetómetros con NV's en el contexto del nanomagnetismo, la física mesoscópica y las ciencias de la vida. Finalmente, para comprender las limitaciones de sensibilidad actuales de los magnetómetros con centros NV, se puede consultar el trabajo de Barry et al.[17].

B. Magnetometría con un conjunto de centros NV

Existen magnetómetros que utilizan una punta de sonda de escaneo monolítica de diamante que contiene un solo centro NV a unos ≈ 10 nm de su extremo. Este magnetómetro puede alcanzar una sensibilidad de ≈ 300 nT/ $\sqrt{\text{Hz}}$ [43]. Un alternativo magnetómetro es usar un conjunto de alta densidad de centros NV (ensamble). Este consiste de una capa activa de centros NV ubicada cerca de la superficie de una placa de diamante. El objeto magnético se coloca cerca de esta superficie y el campo magnético modifica la fluorescencia emitida por los centros NV. Este último magnetómetro mejora la sensibilidad del campo magnético en un factor de $1/\sqrt{N}$ donde N es el número de centros NV dentro del volumen de detección óptica [9]. Sin embargo, la ganancia en sensibilidad se compensa parcialmente por un contraste reducido en la lectura del espín [4].

Magnetometría con centros NV permite medir no solo la intensidad del campo magnético, sino también sus componentes vectoriales. Además, al utilizar una capa fina de centros NV, permite producir una imagen magnética de campo amplio de una muestra al recolectar fluores-

cencia (PL) en una cámara (por ejemplo, un CCD). Normalmente, entre 100 a 10 000 centros NV contribuyen a la señal en cada píxel, de esta manera cada píxel de la imagen codifica las propiedades del campo magnético local [9].

El centro NV tiene simetría C_{3v} y su eje de simetría puede tomar 4 direcciones cristalográficas del diamante: $[111]$, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$ y $[\bar{1}\bar{1}1]$ (véase la Figura XVIa). Los diamantes diseñados típicamente contienen una alta densidad de centros NV (del orden de 10^{19} cm^{-3}) con ejes de simetría distribuidos a lo largo de las 4 orientaciones cristalográficas [17]. Cada centro es principalmente sensible a la proyección del campo magnético a lo largo de su eje, lo que hace que el espectro ODMR de un conjunto de centros NV exhiba cuatro pares de resonancias (véase la Figura XVIb). Estas frecuencias de resonancia se miden comúnmente ajustando datos experimentales con una suma de funciones lorentzianas [5]

$$y = I_0 \left(1 - \sum_i C_i \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_i^2 + (f - f_{0,i})^2} \right) \quad (47)$$

donde I_0 es la intensidad de fluorescencia lejos de las transiciones resonantes. Los valores C_i , Γ_i y $f_{0,i}$ son, respectivamente, el contraste, la mitad de la anchura a media altura (HWHM, por sus siglas en inglés) y la frecuencia resonante de la i -ésima disminución

Los cuatro pares de resonancia, a diferencia de un solo centro NV, se puede usar para la reconstrucción vectorial de un campo magnético aplicado [43].

C. Hamiltoniano y un campo magnético aplicado

Para determinar la relación entre las frecuencias del espectro ODMR y el campo magnético se tiene que estudiar el Hamiltoniano del estado espín base del defecto NV. Despreciando la interacción hiperfina con los espines nucleares cercanos en la red del diamante, este Hamiltoniano se escribe como [4]

$$H = \overbrace{DS_z^2 + \gamma B_{NV}S_z}^{\mathcal{H}_{||}} + \overbrace{\gamma(B_xS_x + B_yS_y)}^{\mathcal{H}_{\perp}} + E(S_x^2 - S_y^2) \quad (48)$$

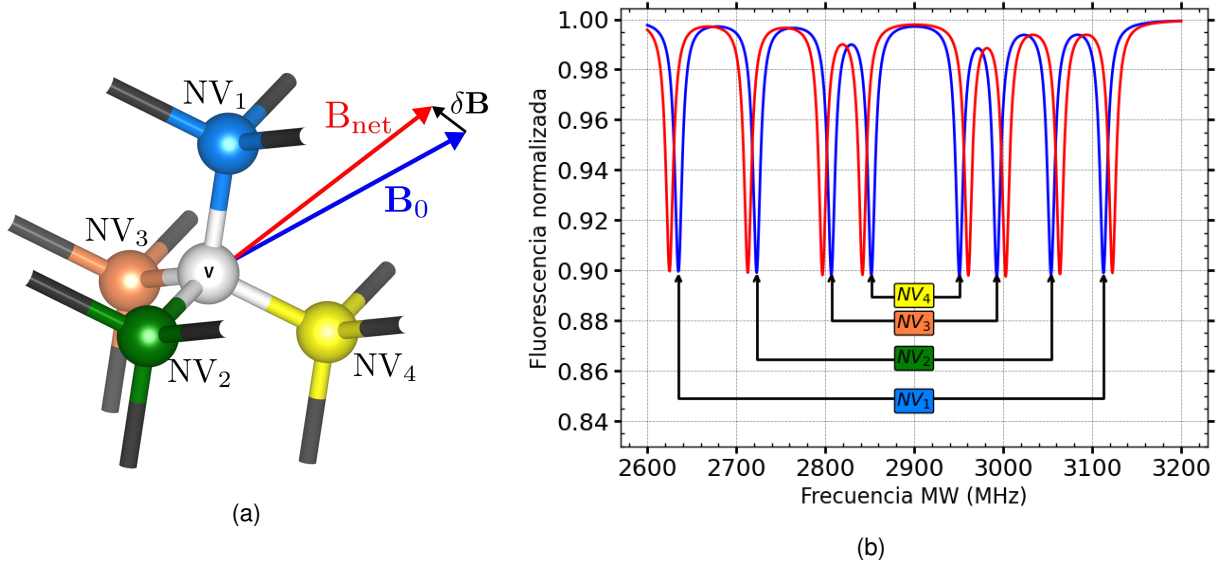


Figura XVI. (a) Las 4 posibles orientaciones del centro NV. (b) Aparición de cuatro pares de resonancias correspondientes a las orientaciones del centro NV.

Los campos magnéticos externo base B_0 y neto B_{net} están representados por los espectros ODMR en azul y rojo, respectivamente. Los espectros fueron simulados con la ecuación (47). Figura realizada por el autor.

donde el eje “z” coincide con el eje del centro NV, esto implica que el campo en coordenadas esféricas se representa de la siguiente manera

$$B_x = B \sin \theta \cos \phi \quad (49)$$

$$B_y = B \sin \theta \sin \phi \quad (50)$$

$$B_{NV} = B \cos \theta \quad (51)$$

Las autoenergías propias de H permite el cálculo de las dos frecuencias de transición $\nu_{\pm}$ que se pueden hallar en un ODMR experimentalmente. La dependencia de estas frecuencias con el campo magnético B se muestra en la figura XVIIa para varios ángulos θ entre B y el eje del defecto NV, utilizando $D = 2,87$ GHz y $E = 5$ MHz, que son valores típicos para los defectos NV alojados en nano cristales de diamante.

Se pueden distinguir diferentes regímenes dependiendo de la amplitud del campo magnético. Para amplitudes de campo magnético débil, es decir, $\mathcal{H}_{\perp} \ll \mathcal{H}_{\parallel}$ y $B_{\perp} = \sqrt{B_x^2 + B_y^2} \ll$

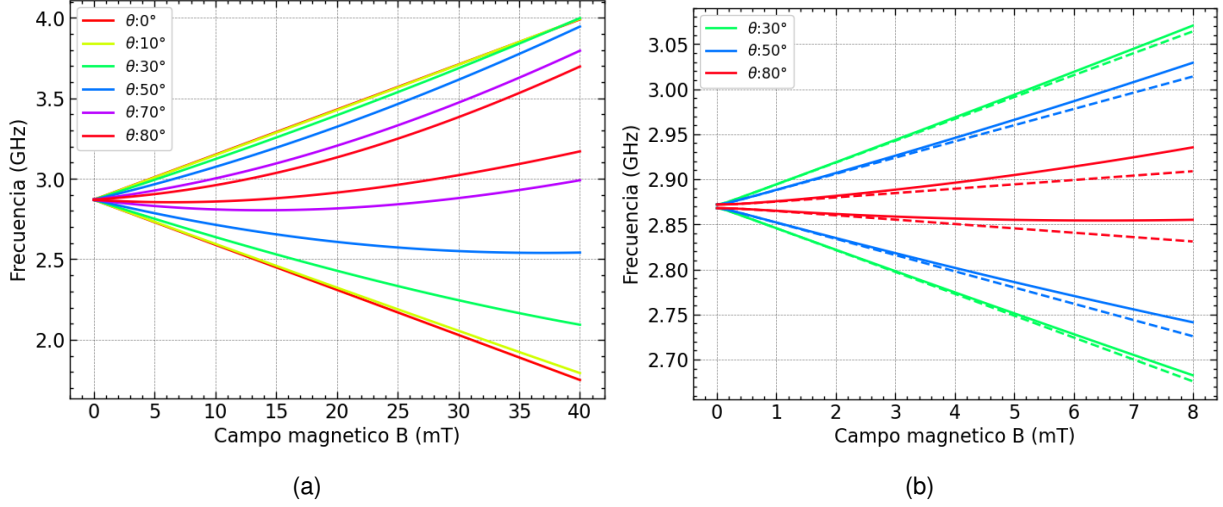


Figura XVII. (a) Frecuencias de transición $\nu_{\pm}$ hasta 40 mT y (b) hasta 8 mT.

Las líneas continuas corresponden a los valores calculados usando el Hamiltoniano (48), mientras que las líneas discontinuas representan los valores obtenidos con la aproximación de campo débil (52). Figura realizada por el autor.

100mT, las frecuencias se calculan con la siguiente aproximación (véase la Figura XVIIb) [4]

$$\nu_{\pm} = D \pm \sqrt{(\gamma B_{NV})^2 + E^2} \quad (52)$$

Cuando la condición $\mathcal{H}_{\perp} \ll \mathcal{H}_{\parallel}$ no se cumple, las frecuencias $\nu_{\pm}$ dependen fuertemente de la orientación del campo magnético con respecto al eje del defecto NV, en este caso las frecuencias $\nu_{\pm}$ están relacionadas mediante las siguientes ecuaciones [44]

$$(\gamma B)^2 = \frac{1}{3}(\nu_+^2 + \nu_-^2 - \nu_+\nu_- - D^2) \quad (53)$$

$$D \cos 2\theta = \frac{7D^3 + 2(\nu_+ + \nu_-)(2(\nu_+^2 + \nu_-^2) - 5\nu_+\nu_-) - 3D(\nu_+^2 + \nu_-^2 - \nu_+\nu_-)}{9(\nu_+^2 + \nu_-^2 - \nu_+\nu_- - D^2)} \quad (54)$$

Aunque esta última relación es más compleja, puede ser útil para calcular el vector del campo magnético si se conocen previamente los cuatro pares de frecuencias obtenidas en un experimento completo de ODMR.

D. Vector Magnetometría

Midiendo las características del espectro ODMR de un conjunto de centros NV, cuyos ejes de simetría están distribuidos a lo largo de las cuatro orientaciones cristalográficas, es posible calcular las tres componentes cartesianas en el sistema de referencia del laboratorio. En la figura XVIb se ha simulado el espectro ODMR correspondiente a un conjunto de centros NV en una placa de diamante, al aplicar un campo magnético $\mathbf{B}_0$ (campo base) en una dirección diferente a cualquiera de los cuatro ejes de los centros NV. En este caso, el Hamiltoniano (tomando $E = 0$) se reescribe como [42]:

$$H^{(i)} = D(S_z^{(i)})^2 + \gamma \mathbf{B}_0 \cdot \mathbf{S}^{(i)} = D(S_z^{(i)})^2 + B_0(\sin(\theta_i)S_x^{(i)} + \cos(\theta_i)S_z^{(i)}) \quad (55)$$

donde $\mathbf{S}^{(i)}$ es el operador espín, con el eje de cuantización tomado a lo largo del “eje i” del centro NV ($i=1,2,3,4$). Aquí θ_i es el ángulo entre $\mathbf{B}_0$ y el eje de cuantización “i”. Si el sistema de referencia del laboratorio (x, y, z) coincide con los ejes de la placa de diamante, y se asume que el diamante tiene orientación cristalina [100] en la superficie superior, entonces el eje “z” es perpendicular a la superficie superior del diamante. En estas condiciones, los vectores unitarios paralelos a los ejes de cuantización tienen las siguientes coordenadas [43]:

$$\vec{n}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \vec{n}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \vec{n}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{n}_4 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (56)$$

Este campo base, $\mathbf{B}_0$ previamente conocido, sirve para calibrar el sistema, es decir, para correlacionar los 4 pares de frecuencias medidas del ODMR con los respectivos 4 ejes de simetría posibles del NV (véase la Figura XVI). Se tiene dos métodos para realizar dicha calibración

El primer método consiste en calcular numéricamente del Hamiltoniano (55) los cuatro pares de frecuencias de resonancia y realizar el ajuste con las frecuencias medidas para asociar las frecuencias de resonancia con los ejes de del NV..

El segundo método consiste en calcular numéricamente las proyecciones de campo

magnético en los ejes de cuantización B_i con las expresiones sencillas $B_i = |\mathbf{B}_0 \cdot \vec{n}_i| = |B_0 \cos(\theta_i)|$ y realizar el ajuste con la expresión $B_j = |B_0 \cos(\theta_j)|$ halladas de las frecuencias medidas del espectro ODMR y la ecuación (54). Aquí “ B_i ” y “ B_j ” se pueden agrupar en parejas en 24 formas posibles, pero 1 solo es la correcta para la correcta calibración.

Luego de hacer el ajuste, es decir, de calibrar el sistema, se puede aplicar un pequeño campo magnético $\delta\mathbf{B} \ll \mathbf{B}_0$ desconocido para tener un campo neto, $\mathbf{B}_{neto} = \mathbf{B}_0 + \delta\mathbf{B}$ que desplaza las ocho frecuencias de resonancia ligeramente como es visualizado en la figura XVIb. Para determinar el campo magnético $\mathbf{B}_{neto}$ representado en el sistema laboratorio

$$\mathbf{B}_{neto} = \begin{pmatrix} B_{netox} \\ B_{netoy} \\ B_{netoz} \end{pmatrix} \quad (57)$$

se usa la expresión $\mathbf{B}_{neto} \cdot \vec{n}_i = B_0 \cos(\theta_i)$ que lleva a resolver un sistema de cuatro ecuaciones con tres incógnitas. Para los cuatro vectores unitarios de (56) la forma explícita es

$$\mathbf{A}_{4 \times 3} \begin{bmatrix} B_{netox} \\ B_{netoy} \\ B_{netoz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_0 \cos(\theta_1) \\ B_0 \cos(\theta_2) \\ B_0 \cos(\theta_3) \\ B_0 \cos(\theta_4) \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}_{4 \times 3} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (58)$$

que se resuelve de manera óptima con la pseudoinversa Moore-Penrose $\mathbf{A}^+$ [45] del cual se obtiene

$$\begin{bmatrix} B_{netox} \\ B_{netoy} \\ B_{netoz} \end{bmatrix} = \mathbf{A}_{3 \times 4}^+ \begin{bmatrix} B_0 \cos(\theta_1) \\ B_0 \cos(\theta_2) \\ B_0 \cos(\theta_3) \\ B_0 \cos(\theta_4) \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}_{3 \times 4}^+ = \frac{\sqrt{3}}{4} \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (59)$$

y así se calcula $\mathbf{B}_{neto}$. Finalmente, sustrayendo $\mathbf{B}_0$ de $\mathbf{B}_{neto}$ se puede lograr tener un sistema de vector magnetometría que halle campos magnéticos $\delta\mathbf{B}$ desconocidos

La descripción anterior se aplicó con los datos del trabajo de Tetienne et al. [7] para producir un mapeo del campo magnético (véase la Figura, XVIII) generado por una corriente

continúa que circula por microalambres metálicos fabricados sobre un sustrato de diamante eléctricamente aislante. El código que detalla el procedimiento implementado para obtener la figura XVIII se encuentra en [38] para libre consulta y un diagrama resumen de pasos seguidos para implementar el código se visualiza en la figura XIX.

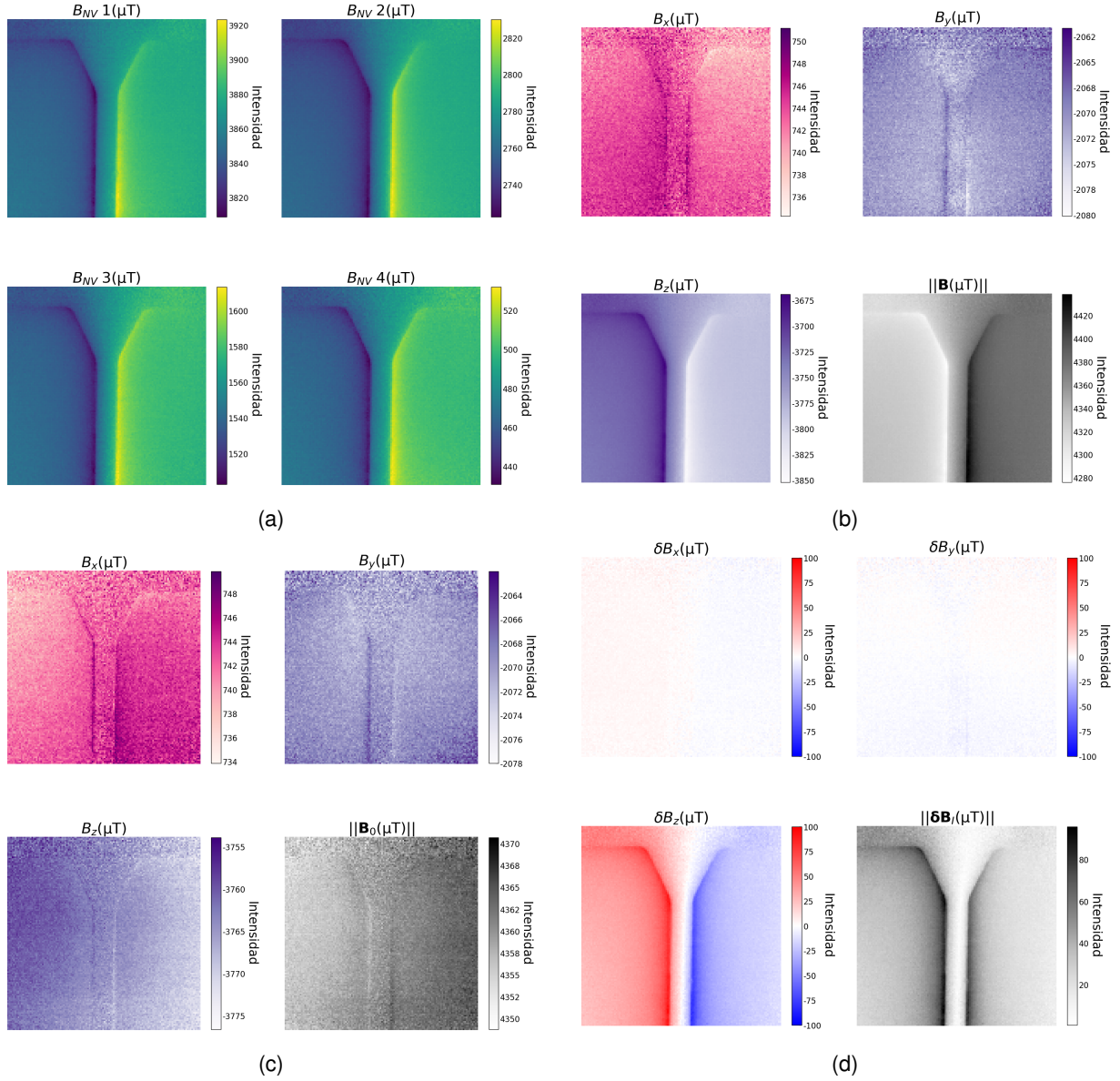


Figura XVIII. (a) Proyecciones en los cuatro ejes del NV del campo magnético generado por la corriente en una sección de microalambre. (b) Mapeo de las componentes y del módulo del campo magnético cuando circula una corriente de intensidad $I = 4 \text{ mA}$. (c) Mapeo correspondiente cuando no hay corriente $I = 0 \text{ mA}$. (d) Mapeo diferencial del campo magnético y sus componentes, aislando el efecto de la corriente sin el fondo, donde $\delta \mathbf{B} = \mathbf{B} - \mathbf{B}_0$.

Figura realizada por el autor utilizando datos de [7].

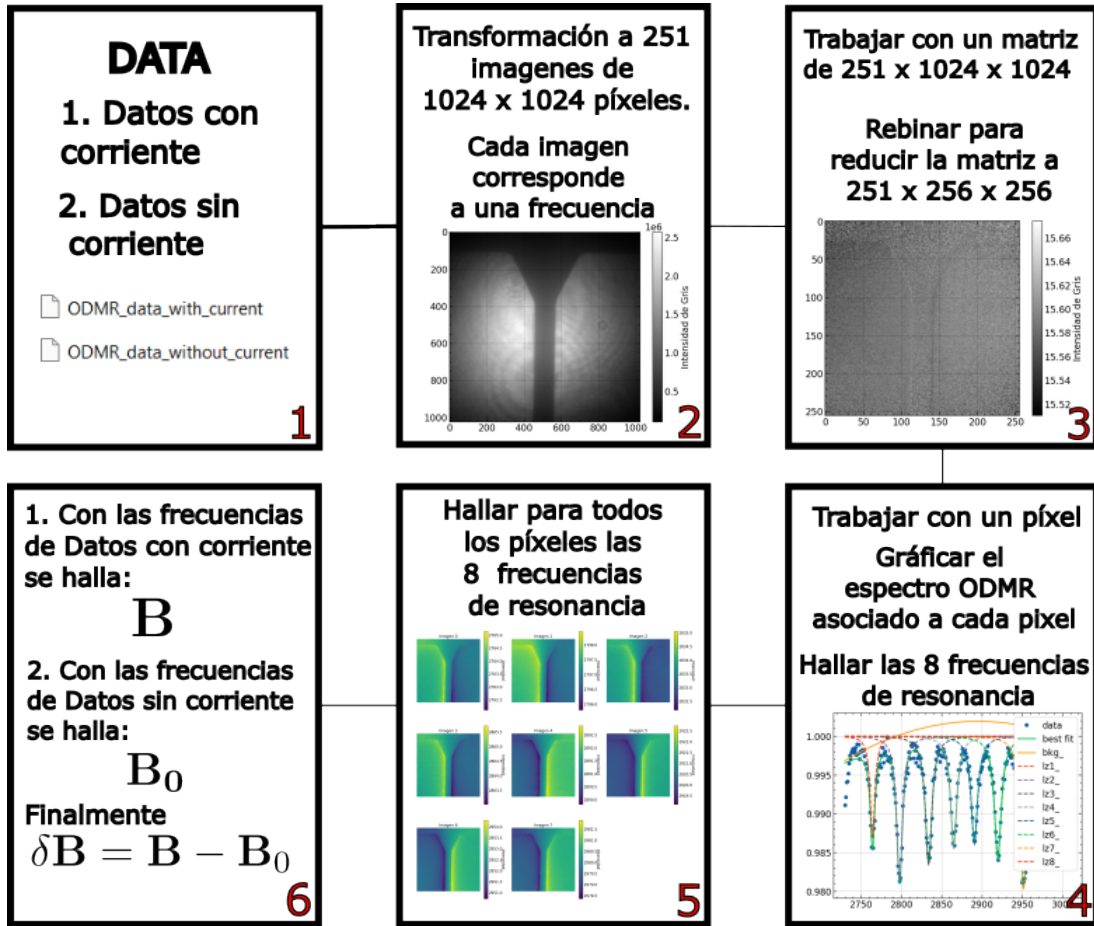


Figura XIX. Diagrama de pasos para implementar el código que genera la figura XVIII.

En el primer paso, se debe disponer de los datos (2 archivos) compartidos en el trabajo de [7]. En el segundo paso se transforma uno de los dos archivos en 251 imágenes, cada una correspondiente a una frecuencia, de las mediciones de fluorescencia sobre el sustrato de diamante. El tercer paso consiste en rebinar los píxeles (con una relación de 4:1) para reducir el tiempo de cómputo en el procesamiento posterior. En el cuarto paso, se extrae el espectro ODMR de las 251 imágenes correspondientes a un solo píxel, identificando las 8 frecuencias de resonancia. En el quinto paso, se repite el paso anterior para todos los 256×256 píxeles (sin rebinado, el proceso hubiera sido sobre 1024×1024 píxeles). Finalmente, en el sexto paso, se emplean las frecuencias de resonancia encontradas tanto en los "Datos con corriente" como en los "Datos sin corriente" para calcular el campo B (véase figura XVIIIb) y B_0 (véase figura XVIIIc), respectivamente. Finalmente, se obtiene $\delta B = B - B_0$ para generar la figura XVIIId. Diagrama realizado por el autor.

IV. Experimento ODMR

A. Introducción al experimento

El centro nitrógeno vacante (NV) es un centro de color altamente fotoestable que emite una señal de fluorescencia roja (600-800 nm) cuando es excitado con luz verde (532 nm). Este sistema se comporta como un átomo con propiedades de espín bien definidas y puede ser polarizado con un bombeo óptico. La señal de fluorescencia puede utilizarse para detectar transiciones de espín inducidas por radiación de microondas (MW) a través de la técnica de resonancia magnética detectada ópticamente (ODMR) [4, 43].

En una medición de ODMR, se ilumina un centro NV con luz verde y se monitorea la intensidad de la fluorescencia roja mientras se barre un campo de microondas alrededor de la frecuencia de resonancia, donde se observa una disminución detectable en la fluorescencia [14]. Al iluminar un conjunto de centros NV y aplicar simultáneamente un campo magnético estático, se pueden detectar hasta 8 resonancias. El espectro ODMR se representa en una gráfica de la intensidad de fluorescencia “I” en función de la frecuencia ν del campo MW aplicado sobre el centro o conjunto de centros.

El espectro ODMR permite medir las componentes cartesianas de un campo magnético estático que actúa sobre el centro NV, lo que posibilita el mapeo espacial del campo vectorial magnético de una muestra utilizando centros NV ubicados cerca de la superficie de un diamante [7]. Este mapeo puede emplearse para obtener imágenes magnéticas de células vivas en condiciones ambientales de laboratorio, con una resolución espacial subcelular de hasta 400 nm [46], o para reconstruir la densidad de corriente vectorial en estructuras geométricas de complejidad variable [47]. Además, es posible diseñar un magnetómetro basado en un conjunto de centros NV y calibrarlo [33] para medir en tiempo real las tres componentes cartesianas de un campo magnético dinámico [45].

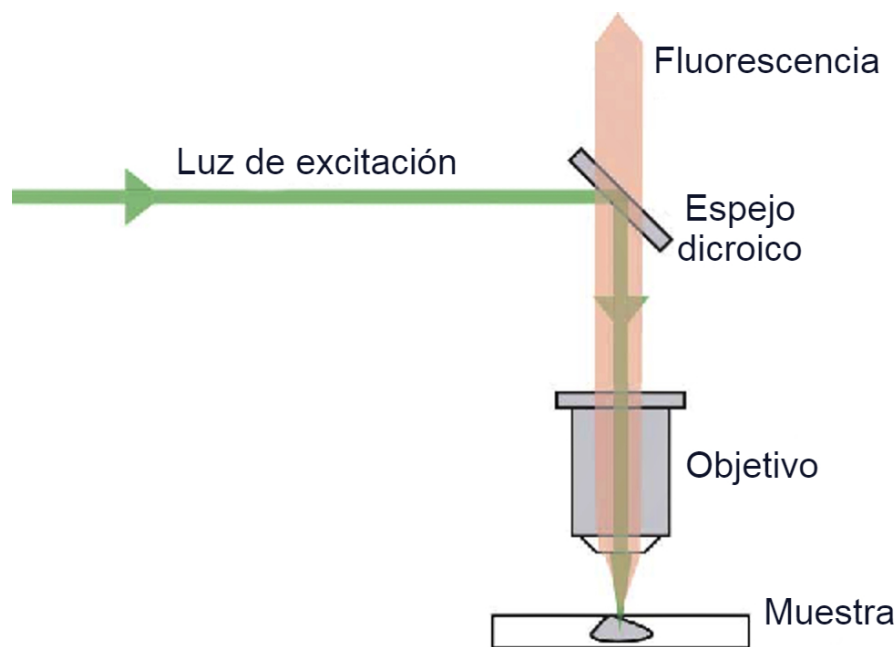


Figura XX. Configuración de fluorescencia general para experimentos con centros NV.

Adaptado de [14].

Realizar un experimento de ODMR implica tres tareas básicas: 1) Iluminar el centro NV para excitarlo, 2) Colectar la señal de fluorescencia, y 3) Aplicar un campo magnético con frecuencia de microondas para controlar los subniveles de espín [48]. Las dos primeras tareas pueden realizarse con un "microscopio confocal personalizado", que requiere una alineación precisa para aislar la fluorescencia de un solo centro [42]. No obstante, esta precisión puede relajarse si se trabaja con un conjunto de centros NV [14]. Para llevar a cabo la tercera tarea, se utiliza una antena de microondas en forma recta o circular, ubicada cerca (o a través) de la muestra de diamante que contiene los centros NV [42]. Una configuración general de fluorescencia se muestra en la figura XX, donde un espejo dicróico refleja la luz verde y transmite la luz roja, permitiendo la recolección de la señal de fluorescencia mientras se rechaza la luz de excitación. El objetivo se utiliza para enfocar la luz de excitación y, al mismo tiempo, recolectar la fluorescencia inducida [14].

Se pueden encontrar guías sencillas para la construcción y operación de un microscopio de fluorescencia personalizado para realizar mediciones ODMR en los trabajos de Zhang et al. [14] y y Reuschel et al. [48]. Otra guía similar, que incluye experimentos de control del estado de espín (relajación de espín, oscilación de Rabi, etc.) del centro NV está en el trabajo

de Sewani et al. [13]. Para una guía más avanzada, el trabajo de Yang et al. [49] proporciona un enfoque sobre la resolución de interacciones hiperfinas en el espectro ODMR. Finalmente, el trabajo de Babashah et al. [50] explica los requisitos de hardware y software necesarios para la adquisición de datos en ODMR.

Existen diversos diseños para implementar un sistema ODMR, y se pueden consultar las tesis de diversos autores [51, 52, 53, 54, 55] para obtener descripciones y discusiones detalladas sobre el tema.

En el presente trabajo se describe el procedimiento experimental, basado en los diseños presentados en las tesis de Segura [56] y Andrade [57], con el objetivo principal de obtener el espectro ODMR de una muestra de diamante que contiene un conjunto de centros NV y analizar el efecto de un campo magnético estático sobre dicho espectro.

B. Diseño experimental

La configuración del experimento construido tiene un arreglo para generar microondas (MW) y un arreglo óptico para guiar la luz de excitación y la fluorescencia que se describen a continuación

Generación de MW

Para inducir transiciones entre los estados $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$, se utilizaron microondas generado por un **sintetizador de señal SG384**. Este equipo produce una señal sinusoidal con un rango de frecuencia DC hasta 4 GHz y una potencia máxima de 16.5 dBm. El encendido y apagado de la señal de microondas fue controlado mediante un **switch rápido (CMCCS0947A-C2)**, que recibe una señal TTL (Transistor-Transistor Logic) desde una **placa digital de alta velocidad (SpinCore PulseBlaster, PBESR-PRO-300)**, con una resolución temporal de 3.3 ns.

Después del switch, la señal de microondas es enviada a un **preamplificador (Mini Circuits ZX60-80008E-S+)**, que incrementa la potencia en aproximadamente 10 dB, y posteriormente a un **amplificador (Mini Circuits ZHL-16W-43-S+)**, que amplifica la señal en 45 dB. La señal se transmite a través de una antena con diseño en forma de Omega, la cual fue

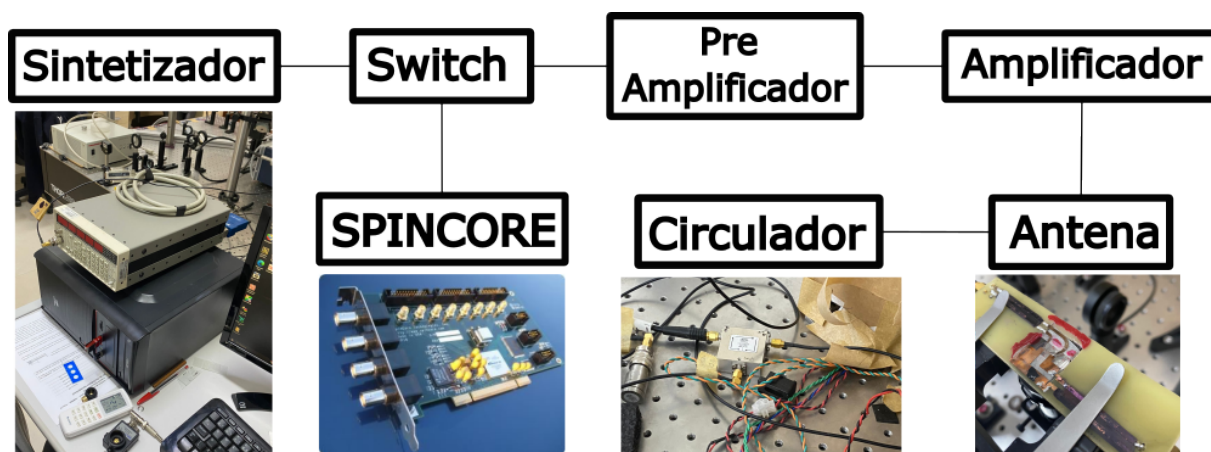


Figura XXI. Esquema para la generación de microondas en una antena.

Imagen realizada por el autor.

construida específicamente para intensificar el campo magnético debido a su radio pequeño.

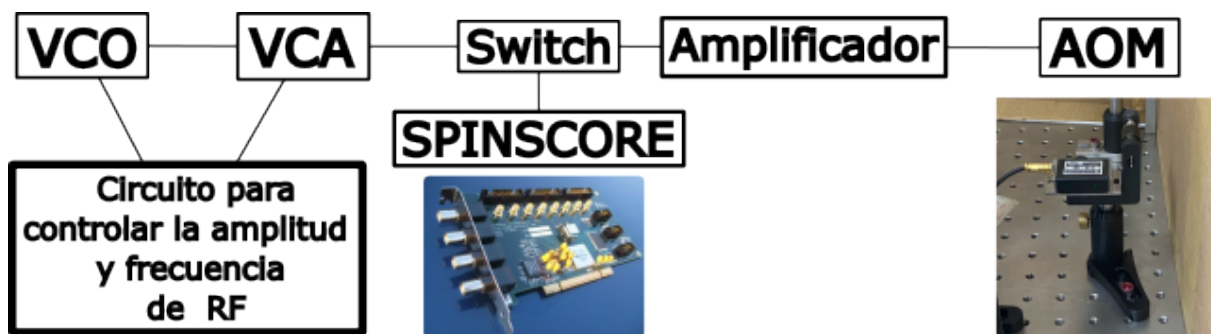
Con el fin de proteger el equipo, en particular el amplificador, se implementó un **circulador (Circulator CS 3000)** conectado a una carga de $50\ \Omega$ de alta resistencia. El esquema para generar microondas se muestra en la figura XXI.

Control del laser

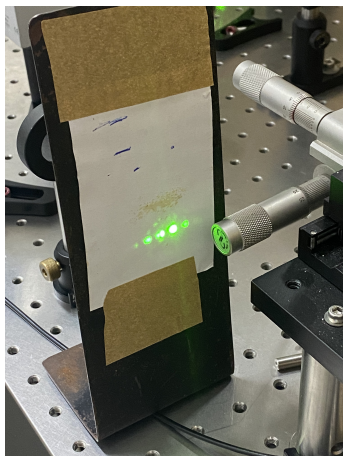
El bombeo óptico y la lectura de fluorescencia se realizaron mediante un **láser verde de 532 nm (Thorlabs, DJ532-40)** y una **cámara CCD**, respectivamente. Para controlar el encendido y apagado del láser, se empleó un **Modulador Acústico Óptico (AOM) (AOMO 3110-320)**, compuesto por un cristal y un transductor piezoeléctrico, que es activado mediante una señal de radiofrecuencia (RF). Esta señal genera una vibración en el transductor, produciendo una onda acústica en el cristal, lo que crea un patrón de difracción en el haz láser.

La frecuencia (**controlada por un oscilador controlado por voltaje (VCO), Mini-Circuits ZX9-200-S+**) y la amplitud (**controlada mediante atenuadores variables de voltaje (VVA), Mini-Circuits ZX73-2500-S+**) de la RF son gestionadas por un circuito electrónico dedicado. La señal RF pasa por un **switch (Mini-Circuits ZASWA-2-50DR+)**, que al igual que en el caso de las microondas, es controlado por la placa digital (PBESR-PRO-300). Luego, la señal RF es amplificada por un **amplificador (Mini-Circuits ZHL-03-5WF)** y enviada al AOM.

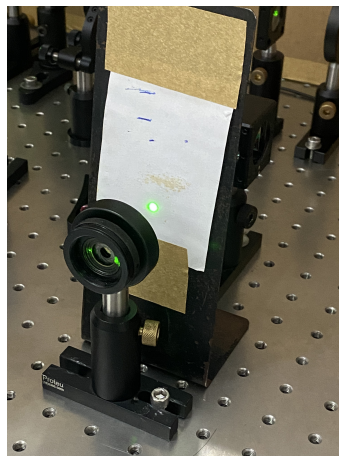
Un esquema del control del AOM se muestra en la figura XXIIa. El AOM genera un



(a)



(b)



(c)

Figura XXII. (a) Esquema para el control del AOM. (b) Patrón de difracción producida por el AOM (c) Con el iris se selecciona el primer orden de difracción.

Esquema e imágenes tomadas por el autor.

patrón de difracción (véase figura XXIIb) y, ajustando correctamente la frecuencia y potencia, se puede maximizar la difracción de primer orden, la cual se selecciona mediante un iris (Véase figura XXIIc). De este modo, el AOM controla el encendido y apagado del láser con precisión.

Arreglo óptico

Se utilizaron lentes para expandir y colimar el haz de luz verde hasta un diámetro aproximado de 10 mm. El haz es reflejado por un espejo y dirigido hacia un **filtro dicróico (Sem-Rock, Di02-R561-25x36)**, que refleja la luz de 532 nm. A continuación, el haz reflejado se dirige hacia un **lente objetivo (Apochromat 50x-0.95 NA)** y luego hacia el diamante.

La fluorescencia emitida por el diamante es recogida por el mismo objetivo y atraviesa

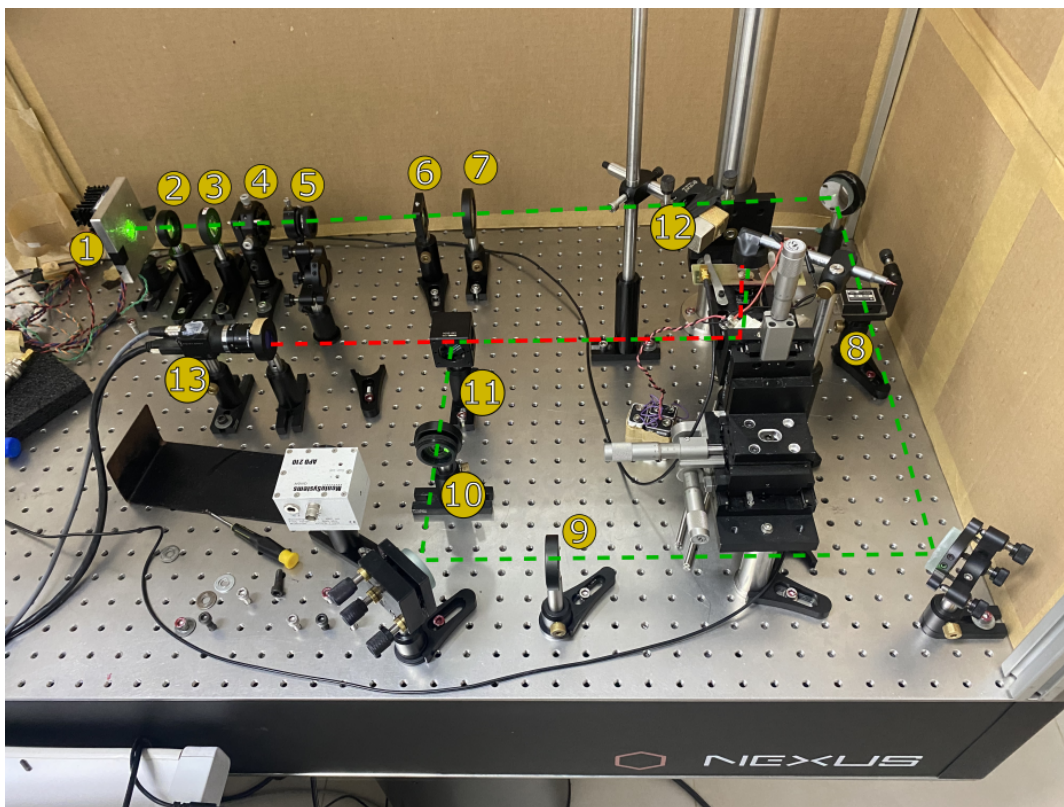


Figura XXIII. Configuración experimental.

1) Láser 532 nm 2) Lente 3 cm - colimador 3) Lente 5 cm - focalizar 4) Pin role 50 μ m - mejora el haz espacialmente 5) Iris 6) Lente - colimador 7) Lente 60 cm - focalizar en AOM 8) AOM 9) Lente 60 cm - colimar 10) Iris - Selecciona el primer orden 11) Dicroico - Refleja la luz verde y deja pasar la luz roja 12) Iman de Neodimio 13) Camara CCD. Imagen tomada por el autor.

el dicroico, permitiendo que solo la fluorescencia llegue a la **cámara CCD (POINT GREY FL3-FW-0S1M-C)**, donde es colectada.

Para generar el efecto Zeeman, se posicionó un **imán de neodimio** cerca de la muestra. La figura XXIII muestra los elementos mencionados.

Muestra

En este trabajo, se usó una muestra de diamante ultrapuro de tipo IIa, fabricada mediante deposición química en fase vapor (CVD). El proceso incluyó la irradiación de la superficie con iones de nitrógeno ($^{15}\text{N}^+$) a una energía de 5 keV y una densidad de $10^{13} \text{ }^{15}\text{N}^+/\text{cm}^2$, con el objetivo de generar una fina capa de centros NV a una profundidad aproximada de entre 8

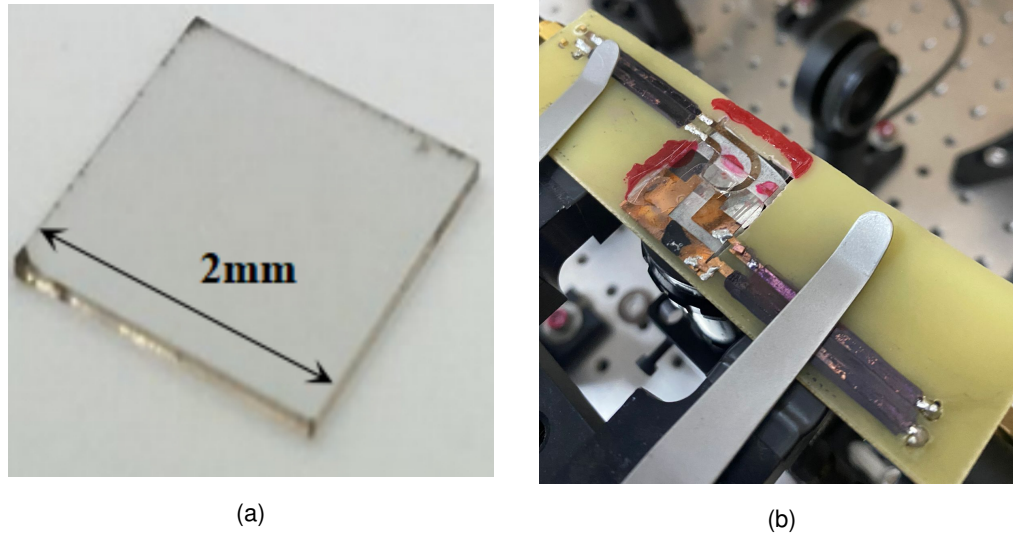


Figura XXIV. (a) Muestra de diamante ultrapuro con una capa ultradelgada de centros NV. (b) Muestra posicionada junto a la antena en el portamuestra.

La figura (a) ha sido adaptada de [56], mientras que la figura (b) es original del autor.

y 16 nm bajo la superficie. Posteriormente, la muestra fue sometida a un tratamiento térmico a 800°C en condiciones de vacío, facilitando la migración de vacancias y su captura por los átomos de nitrógeno implantados. Este proceso permitió que aproximadamente el 0,8 % del nitrógeno implantado se convirtiera en centros NV^- , resultando en una densidad estimada de $10^3 \text{ NV}/\mu\text{m}^2$.

El diamante monocristalino, orientado en la dirección (100), con bordes alineados a los ejes $[1, 0, 0]$, $[0, 1, 0]$, y $[0, 0, 1]$, fue utilizado como marco de referencia en el laboratorio. La muestra, de grado electrónico, fue adelgazada y pulida hasta alcanzar unas dimensiones de $2 \times 2 \times 0,1 \text{ mm}^3$ (véase Figura XXIVa). Esta fue posicionada en el portamuestra junto con la antena, tal como se muestra en la Figura XXIVb.

Construcción de antena

Las antenas de microondas fueron fabricadas de manera casera. Para ello, se depositó una capa de cobre de 100 nm de grosor sobre la superficie de una delgada lámina de vidrio mediante la técnica de sputtering (véase Figura XXVa). A continuación, se aplicó un patrón impreso del circuito (véase Figura XXVb) sobre la superficie de cobre utilizando una técnica

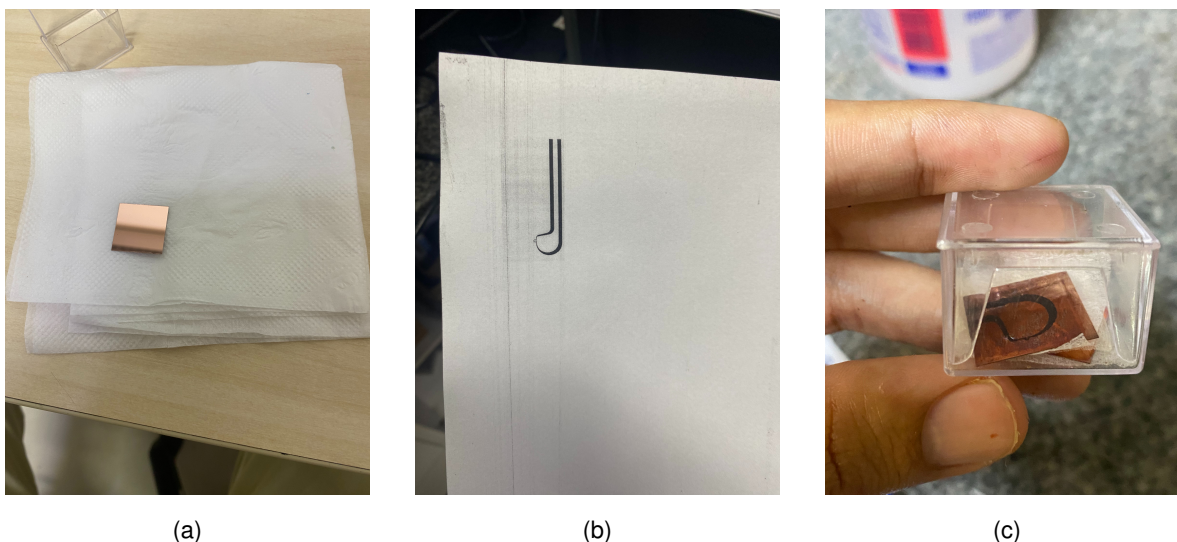


Figura XXV. (a) Película de cobre de 100 nm de grosor depositado sobre una lámina de vidrio. (b) Circuito impreso en papel glossy. (c) Circuito transferido a la película de cobre.

Imagen original del autor.

de transferencia térmica con una plancha caliente (véase Figura XXVc). El cobre no deseado fue eliminado sumergiendo la placa en una solución de cloruro férrico durante 30 segundos para el grabado químico. Posteriormente, la tinta residual en la placa fue removida utilizando unas gotas de disolvente (tíner) y agua. Finalmente, el circuito de cobre resultante se conectó a líneas de cobre más gruesas, grabadas en placas de circuito impreso convencionales, donde se instalaron conectores SMA para la alimentación de microondas (véase Figura XXIVb).

La antena, ubicada debajo de la muestra, genera un campo de microondas espacialmente uniforme, cercano a los 2.87 GHz, dentro del área definida por el diseño en forma de omega.

Software requerido

En la toma y análisis de medidas experimentales se usaron herramientas computacionales. El SpinCore PulseBlaster Interpreter fue utilizado para programar y controlar generadores de pulsos (PulseBlaster), simplificando la creación de secuencias complejas de pulsos. En este caso, se usó para gestionar la placa digital rápida (SpinScore Pulso Blaster, PBESR-PRO-300) sin necesidad de un conocimiento de la electrónica subyacente [58]. Además, se utilizó

el software FlyCapture 2.2.12.3.31 de Point Grey Research, diseñado para controlar cámaras industriales y científicas, lo que permitió ajustar parámetros como la exposición y el balance de blancos, y fue empleado para la captura de datos con una cámara CCD [59]. Por último, Python fue utilizado tanto para automatizar la adquisición de datos como para realizar el análisis posterior, optimizando el flujo de trabajo experimental [60].

Secuencia de pulsos, recopilación y construcción del espectro ODMR

Para obtener el espectro ODMR, se aplicó un pulso de microondas simultáneamente con la excitación de la muestra mediante un láser verde, mientras la fluorescencia (PL) fue registrada con una cámara CCD. En la condición sin campo estático, la frecuencia de las microondas se varió entre 2855 y 2885 MHz, con incrementos de 1.0 MHz. En la condición con un campo estático generado por un imán de neodimio, la variación de la frecuencia cubrió un rango de 2600 a 3140 MHz, también con un paso de 1.0 MHz. Para cada frecuencia se capturaron 64 imágenes, lo que resultó en un total de 1984 imágenes para el caso sin campo y 34,624 imágenes para el caso con campo. Los espectros ODMR se construyeron sumando los píxeles de cada imagen y promediando los valores obtenidos para cada frecuencia a partir de las 64 imágenes correspondientes.

Ambos espectros ODMR fueron ajustados mediante una suma de funciones lorentzianas. En el caso sin campo, este ajuste permitió calcular los parámetros de la división de campo cero en el eje D_{gs} y fuera del eje E . Para el espectro con campo estático, se determinaron las frecuencias de resonancia, lo que permitió estimar el módulo del campo magnético estático.

La adquisición y procesamiento de imágenes fueron completamente automatizados mediante scripts en Python. Además, el porcentaje de error de fluorescencia fue calculado durante el procesamiento con el uso de las 64 imágenes para cada frecuencia.

C. Resultados

Construido el sistema óptico y la antena para aplicar simultáneamente luz verde y microondas sobre la muestra, el procedimiento fue variar la frecuencia de los microondas mientras se registraba la fluorescencia mediante una cámara CCD. Este registro permitió, tras un

proceso de posprocesamiento de imágenes, obtener los espectros ODMR. El diagrama que resume el experimento se presenta en la Figura XXVI.

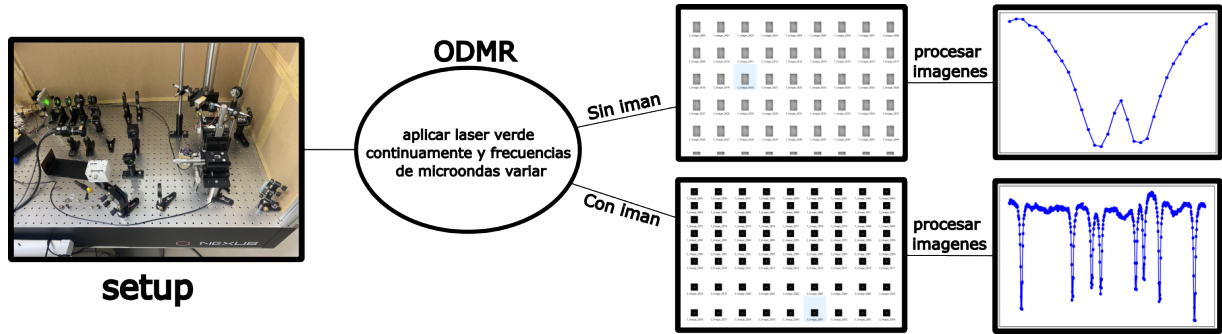


Figura XXVI. Diagrama de flujo del experimento ODMR.

Imagen realizada por el autor.

ODMR sin campo

El ajuste del espectro ODMR del centro NV, sin la presencia de un campo estático aplicado por el imán de neodimio, sigue un perfil lorentziano (véase figura XXVII) por lo tanto, la expresión que describe la señal normalizada de fluorescencia está dada por:

$$\frac{I(\nu)}{I(0)} = 1 - f(\nu) \quad f(\nu) = C_1 \left(\frac{\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}{(\nu - \nu_+)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} \right) + C_2 \left(\frac{\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}{(\nu - \nu_-)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} \right) \quad (60)$$

donde Γ es el “ancho a media altura”(FWHM, por sus siglas en inglés) de cada valle lorentziano, C_1 y C_2 representan el contraste, que es la disminución fraccional en intensidad cuando los microondas están en resonancia, ν_+ y ν_- son las frecuencias de resonancia, y $\frac{I(\nu)}{I(0)}$ representa la intensidad de fluorescencia normalizada, aquí la intensidad de fluorescencia lejos de las transiciones de resonancia se denota como $I(0)$.

A partir del perfil ajustado del espectro, se pueden hallar las frecuencias de transición $\nu_{\pm} = D \pm E$ y calcular los siguientes parámetros:

$$D = \frac{\nu_+ + \nu_-}{2} = 2871,75 \text{ MHz} \quad (61)$$

$$E = \frac{\nu_+ - \nu_-}{2} = 3,75 \text{ MHz} \quad (62)$$

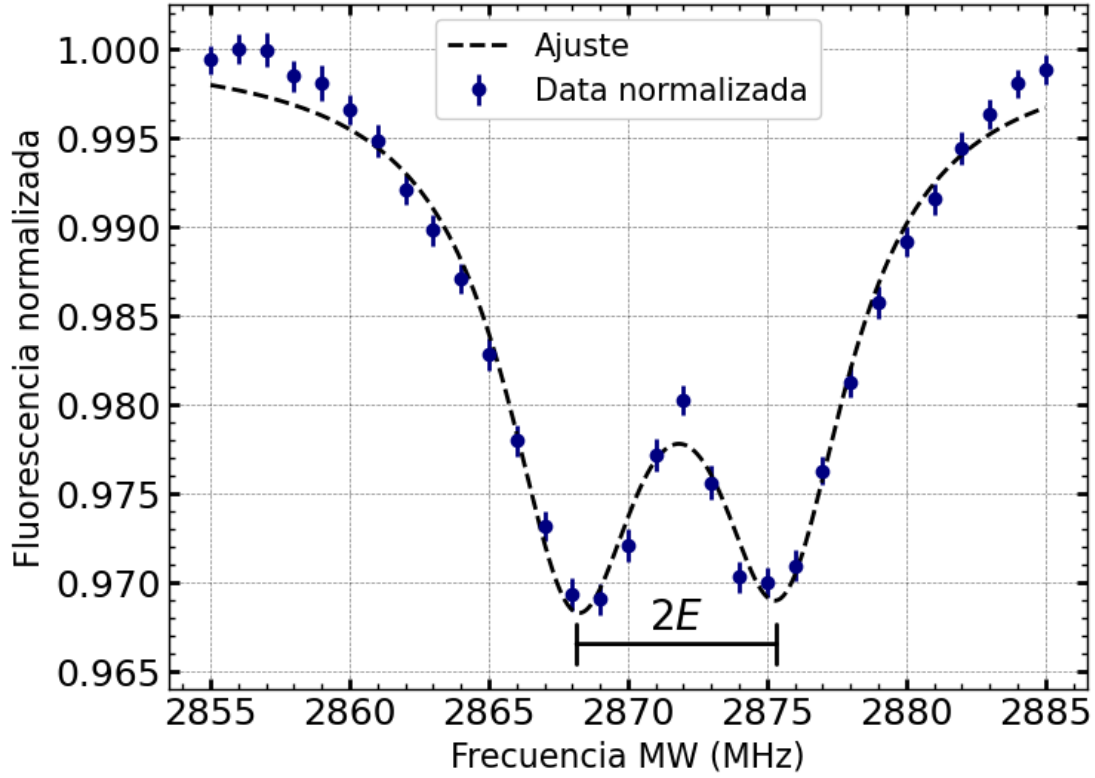


Figura XXVII. Espectro ODMR de fluorescencia normalizada sin campo magnético estático aplicado. Imagen realizada por el autor.

ODMR con campo

El perfil de ajuste del espectro ODMR del centro NV, con un campo magnético estático aplicado mediante un imán de neodimio (véase figura XXVIII), sigue una suma de funciones lorentzianas:

$$\frac{I(f)}{I(0)} = 1 - \sum_i C_i \left(\frac{\left(\frac{\Gamma_i}{2}\right)^2}{(f - f_{0,i})^2 + \left(\frac{\Gamma_i}{2}\right)^2} \right) \quad (63)$$

donde C_i es el contraste en el valle de resonancia correspondiente al índice i , Γ_i representa el “ancho a media altura”(FWHM) de la función lorentziana en el pico i , y $f_{0,i}$ es la frecuencia de resonancia asociada al valle i .

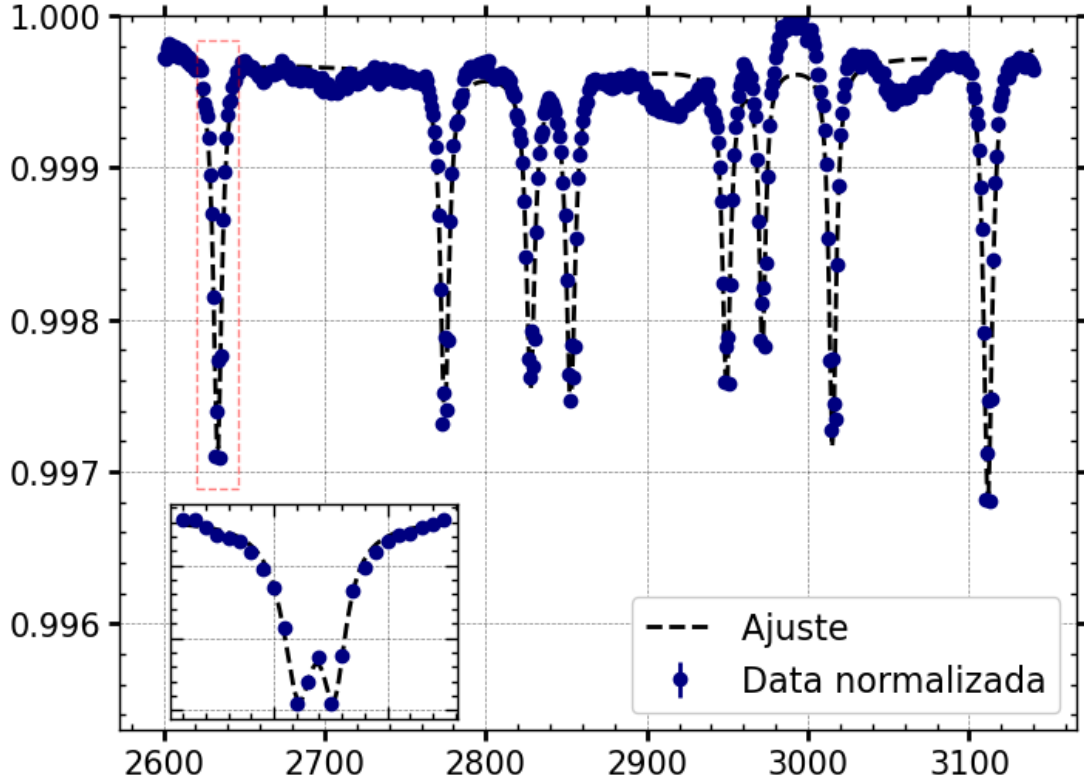


Figura XXVIII. Espectro ODMR de fluorescencia normalizada con campo magnético estático aplicado. Las frecuencias de resonancia etiquetadas de izquierda a derecha son: $f_{-1} = 2635$ MHz, $f_{-2} = 2773$ MHz, $f_{-3} = 2827$ MHz, $f_{-4} = 2852$ MHz, $f_{+4} = 2951$ MHz, $f_{+3} = 2973$ MHz, $f_{+2} = 3014$ MHz, $f_{+1} = 3113$ MHz. La subfigura es una imagen ampliada alrededor de la frecuencia 2635 MHz. Imagen realizada por el autor.

De las frecuencias de resonancia se puede calcular el campo magnético estático que actúa en el conjunto de centros NV debido al imán con la ecuación siguiente

$$B = \frac{h}{g_e \mu_B} \left(\frac{1}{3} [(f_{+i}^2 + f_{-i}^2 - f_{+i} f_{-i} - D^2)] - E^2 \right)^{1/2} \quad (64)$$

donde i toma valores $\{1, 2, 3, 4\}$. Luego de los 4 pares se obtuvo un valor de campo promedio $B = 8,69 \pm 0,13$ mT

D. Discusiones

Durante el barrido de frecuencias, al acercarse a los 2.870 GHz, se observa una caída en la fluorescencia con un contraste total del 3%, como se muestra en la figura XXVII. Este

contraste se debe al acoplamiento y las proporciones de ramificaciones entre los estados $m_s = 0$ y $m_s = \pm 1$ hacia y fuera del sistema singlete de los centros NV. Específicamente, la población en el estado $m_s = \pm 1$ experimenta menos ciclos radiativos de fluorescencia en comparación con el estado $m_s = 0$. Para aumentar este contraste, lo que equivale a inducir más transiciones de espín de $m_s = 0$ a $m_s = \pm 1$, se pueden aplicar dos estrategias:

1. **Aumento de la potencia de microondas:** La microonda impulsa las transiciones entre los subestados del estado fundamental. Cuanto mayor sea la potencia aplicada, más población del estado $m_s = 0$ se puede transferir a los estados $m_s = \pm 1$, lo que resulta en una mayor caída de la fluorescencia (PL) y, por ende, en un mayor contraste. Esta estrategia puede ser explorado y estudiado en futuros experimentos.
2. **Reducción de la potencia del láser de excitación:** Al disminuir la potencia del láser, se reduce la tasa de bombeo, lo que permite que más población del estado $m_s = 0$ se transfiera a los estados $m_s = \pm 1$ antes de ser bombeada de nuevo al estado excitado. Esto se puede controlar mediante un AOM, permitiendo ajustar la cantidad de luz que llega a la muestra con precisión.

Un espectro ODMR proporciona información sobre la deformación local en la red del diamante. En la figura XXVII, esta deformación se observa en la separación de los dos valles, cuantificada por $2E = 7,2$ MHz. Esta deformación está asociada a la presencia de campos eléctricos residuales que afectan la estructura local del cristal. Sin embargo, esta separación ya no es visible en el espectro ODMR mostrado en la figura XXVIII, ya que la separación por el campo magnético externo predomina sobre la deformación local. Sin embargo, sí puede observarse la interacción hiperfina con el espín nuclear del ^{15}N , como se evidencia en la subfigura XXVIII, donde aparecen los dos valles correspondientes a la estructura hiperfina.

Es importante destacar que los espectros ODMR de las figuras XXVII y XXVIII representan la respuesta combinada de cuatro grupos de espines NV que se excitan simultáneamente. En el caso del espectro de la figura XXVIII, un campo magnético externo estático de $B = 8,69$ MHz induce un desdoblamiento Zeeman de los estados $m_s = \pm 1$ en cada uno de estos cuatro grupos, generando dos frecuencias de resonancia por grupo. Como resultado, al haber cuatro orientaciones posibles de los centros NV, se observan ocho resonancias en total.

La separación Δf entre los niveles $m_s = -1$ y $m_s = +1$ en cada orientación es proporcional al campo magnético, de acuerdo con la relación $\Delta f = 2\gamma B_{\text{proy}}$, donde $\gamma = 28 \text{ GHz/T}$ es la razón giromagnética, y B_{proy} es la proyección del campo magnético a lo largo del eje de cuantización (definido a lo largo de la línea que conecta el átomo de nitrógeno y la vacante en el centro NV). Esta separación de resonancias permite medir el campo magnético y determinar su dirección promedio. Los dispositivos que emplean centros NV para medir campos magnéticos se basan en esta propiedad.

El procedimiento experimental utilizado aquí presenta limitaciones significativas para su aplicación como magnetómetro por las siguientes razones:

- El espectro ODMR obtenido no se detecta en tiempo real, en cambio, tomó como un día entero capturar y procesar los resultados obtenidos
- Existe 24 posibles formas de asociar las cuatro posibles orientaciones del NV en la muestra a los cuatro pares de resonancias. La asignación particular depende del campo magnético estático usado, esto significa que el sistema no está calibrado.
- La magnitud del campo magnético obtenida es solo un valor promedio. Para realizar un mapeo detallado, se requiere una mayor resolución en la cámara CCD empleada.

Sin embargo, este experimento permite hacer comparaciones con otros trabajos y brinda una idea de la sensibilidad alcanzada como magnetómetro. En la figura XXIX, el espectro ODMR de la figura XXVIII se compara con el obtenido en el experimento de Tetienne et al. [7]. La principal diferencia es el contraste: el espectro propio (línea azul) tiene un contraste máximo de aproximadamente 0.28 %, mientras que el otro espectro (línea naranja) alcanza cerca de 1.8 % de contraste. El ancho a media altura (FWHM) es de 9.35 MHz en el espectro azul y 8.32 MHz en el espectro naranja. El mayor contraste en [7] se debe al uso de un láser de alta potencia, cámara CCD refrigerada y ≈ 300 repeticiones de medición. En cambio, en el presente experimento se usó una cámara CCD a temperatura ambiente y 64 repeticiones, lo que explica la diferencia. La anterior explicación aplica para el parámetro FWHM, sin embargo, este también depende de la homogeneidad del campo magnético y la calidad de los centros NV en el material, así eso puede explicar el FWHM relativamente cercano. Por lo tanto, se podría

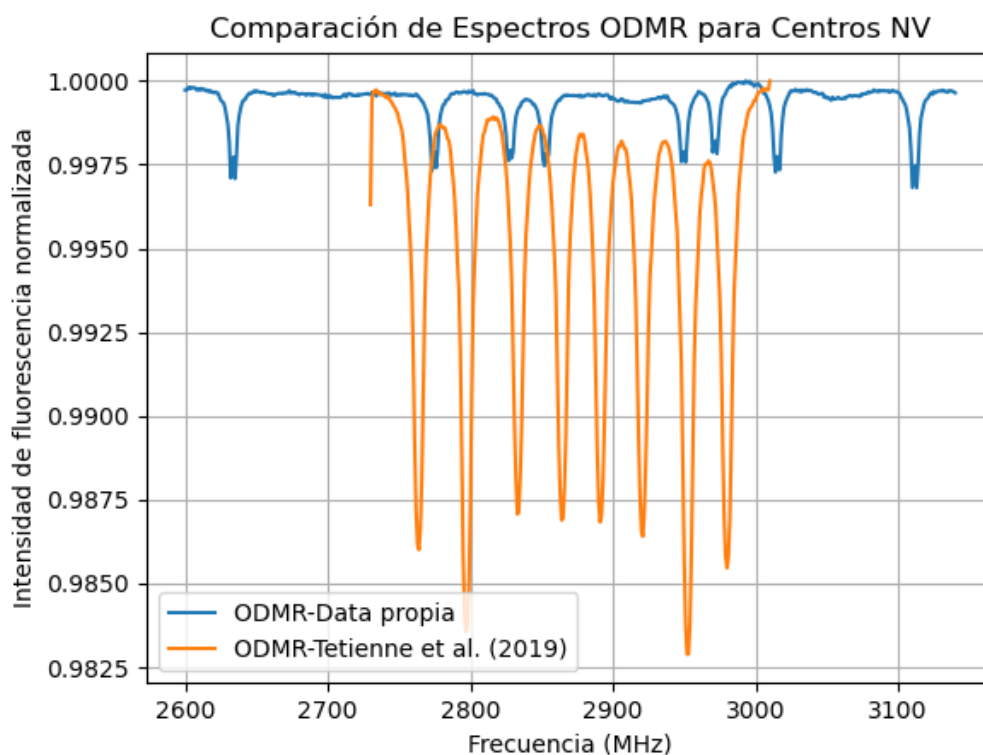


Figura XXIX. Comparación de espectros ODMR.

El rango de frecuencias para la línea naranja es de 2730 MHz a 3010 MHz. Imagen realizada por el autor.

mejorar el contraste y reducir el FWHM obtenido en la figura XXVIII mediante condiciones experimentales optimizadas y mejoras en la calidad de la muestra, lo cual permitiría alcanzar sensibilidades más competitivas.

Finalmente, los resultados obtenidos han demostrado el efecto de un campo magnético estático B en el espectro ODMR de un conjunto de centros NV orientados en cuatro posibles direcciones dentro de una muestra de diamante. A partir de esto, surge la pregunta sobre cómo los procedimientos utilizados y los resultados alcanzados pueden ser aprovechados en futuros experimentos. Dos posibles direcciones para investigaciones futuras son: (1) la implementación de secuencias de pulsos de microondas y láser verde controlados mediante señales TTL generadas por el Pulse Blaster, lo que permitiría manipular coherentemente los estados de espín y observar fenómenos como las oscilaciones de Rabi; y (2) la mejora en la resolución de las imágenes de la cámara CCD para obtener imágenes detalladas del campo magnético

y realizar un mapeo más preciso del mismo. Estos estudios se consideran los próximos pasos lógicos para explorar y ampliar el potencial de las mediciones ODMR en aplicaciones prácticas de detección magnética y manipulación cuántica.

V. Conclusiones

Habiendo planteado los objetivos en la introducción, en este apartado se presentan los hallazgos y conclusiones más relevantes.

Con respecto a la **simulación de la fotodinámica del centro NV**, se obtuvieron los siguientes resultados:

- La simulación fotodinámica muestra que el fenómeno de polarización óptica del centro NV puede optimizarse mediante el parámetro k , el cual está directamente relacionado con la potencia del láser verde de excitación.
- La fluorescencia en función del campo magnético exhibe cambios abruptos, lo que sugiere la existencia de regiones particularmente sensibles a variaciones de campo magnético.
- El fenómeno de saturación de fluorescencia a altas potencias de láser de excitación es reproducido en la simulación, lo que sugiere una posible relación cuantitativa entre la potencia del láser y el parámetro k .
- La simulación fotodinámica confirma la disminución de la fluorescencia con el incremento del módulo del campo magnético, en concordancia con lo observado experimentalmente.

Respecto a la implementación del experimento de **Resonancia Magnética Detectada Ópticamente (ODMR)**, se obtuvieron las siguientes conclusiones:

- Se obtuvo el espectro ODMR sin campo magnético externo, mostrando dos valles cuya separación se atribuye a deformaciones locales en la red cristalina del diamante.
- Se obtuvo el espectro ODMR en presencia de un campo magnético externo, observándose ocho valles asociados a las cuatro orientaciones cristalográficas del eje NV en la muestra de diamante utilizada.

- Se identificaron posibles mejoras en el contraste y en el ancho a media altura (FWHM) del espectro ODMR. Estas optimizaciones podrían lograrse mediante el uso de condiciones experimentales más precisas, como el empleo de una cámara CCD refrigerada y el uso de muestras de diamante de mayor calidad con una mejor distribución de centros NV.

VI. Bibliografía

- [1] M. W. Doherty, N. B. Manson, P. Delaney, F. Jelezko, J. Wrachtrup, and L. C. Hollenberg, “The nitrogen-vacancy colour centre in diamond,” *Phys. Rep.*, vol. 528, no. 1, pp. 1–45, April 2013.
- [2] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, 1st ed. Oxford, UK: Oxford University Press, 2002.
- [3] V. Acosta and P. Hemmer, “Nitrogen-vacancy centers: Physics and applications,” *MRS Bull.*, vol. 38, no. 2, pp. 127–130, February 2013.
- [4] L. Rondin, J.-P. Tetienne, T. Hingant, J.-F. Roch, P. Maletinsky, and V. Jacques, “Magnetometry with nitrogen-vacancy defects in diamond,” *Rep. Prog. Phys.*, vol. 77, no. 5, p. 056503, May 2014.
- [5] M. Capelli, “Investigation of artificial diamonds for optical sensing with ensemble of nitrogen-vacancy centres,” Tesis doctoral, RMIT Univ., Melbourne, Australia, 2019.
- [6] L. Childress and R. Hanson, “Diamond nv centers for quantum computing and quantum networks,” *MRS Bull.*, vol. 38, no. 2, pp. 134–138, February 2013.
- [7] J.-P. Tetienne, N. Donschuk, D. A. Broadway, S. E. Lillie, T. Teraji, D. A. Simpson, A. Stacey, and L. C. L. Hollenberg, “Apparent delocalization of the current density in metallic wires observed with diamond nitrogen-vacancy magnetometry,” *Phys. Rev. B*, vol. 99, no. 1, p. 014436, January 2019.
- [8] S. H. Simon, *The Oxford Solid State Basics*, 1st ed. Oxford, UK: Oxford University Press, 2013.

- [9] M. Radtke, E. Bernardi, A. Slablab, R. Nelz, and E. Neu, “Nanoscale sensing based on nitrogen vacancy centers in single crystal diamond and nanodiamonds: achievements and challenges,” *Nano Futures*, vol. 3, no. 4, p. 042004, December 2019.
- [10] F. A. López, “Defectos reticulares en sólidos,” *Bol. Soc. Esp. Ceram. Vidr.*, vol. 14, no. 1, pp. 25–32, January 1975.
- [11] C. Kittel and P. McEuen, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, 2018.
- [12] K. Momma and F. Izumi, “Vesta 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data,” *J. Appl. Crystallogr.*, vol. 44, no. 6, pp. 1272–1276, October 2011.
- [13] V. K. Sewani, H. H. Vallabhapurapu, Y. Yang, H. R. Fergau, C. Adambukulam, B. C. Johnson, J. J. Pla, and A. Laucht, “Coherent control of nv- centers in diamond in a quantum teaching lab,” *Am. J. Phys.*, vol. 88, no. 12, pp. 1156–1169, December 2020.
- [14] H. Zhang, C. Belvin, W. Li, J. Wang, J. Wainwright, R. Berg, and J. Bridger, “Little bits of diamond: Optically detected magnetic resonance of nitrogen-vacancy centers,” *Am. J. Phys.*, vol. 86, no. 3, pp. 225–236, March 2018.
- [15] F. Treussart and I. I. Vlasov, “Photoluminescence of color centers in nanodiamonds,” in *Nanodiamonds: Advanced Material Analysis, Properties and Applications*, 1st ed., J.-C. Arnault, Ed. Amsterdam, Netherlands: Elsevier, 2017, pp. 155–181.
- [16] A. Mzyk, Y. Ong, A. R. Ortiz Moreno, S. K. Padamati, Y. Zhang, C. A. Reyes-San-Martin, and R. Schirhagl, “Diamond color centers in diamonds for chemical and biochemical analysis and visualization,” *Anal. Chem.*, vol. 94, no. 1, pp. 225–249, January 2021.
- [17] J. F. Barry, J. M. Schloss, E. Bauch, M. J. Turner, C. A. Hart, L. M. Pham, and R. L. Walsworth, “Sensitivity optimization for nv-diamond magnetometry,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 92, no. 1, p. 015004, March 2020.
- [18] I. Hincks, C. Granade, and D. G. Cory, “Statistical inference with quantum measurements: methodologies for nitrogen vacancy centers in diamond,” *New J. Phys.*, vol. 20, no. 1, p. 013022, January 2018.

- [19] D. A. Hopper, H. J. Shulevitz, and L. C. Bassett, “Spin readout techniques of the nitrogen-vacancy center in diamond,” *Micromachines*, vol. 9, no. 9, p. 437, August 2018.
- [20] J.-P. Tetienne, L. Rondin, P. Spinicelli, M. Chipaux, T. Debuisschert, J.-F. Roch, and V. Jacques, “Magnetic-field-dependent photodynamics of single nv defects in diamond: an application to qualitative all-optical magnetic imaging,” *New J. Phys.*, vol. 14, no. 10, p. 103033, October 2012.
- [21] A. Gupta, L. Hacquebard, and L. Childress, “Efficient signal processing for time-resolved fluorescence detection of nitrogen-vacancy spins in diamond,” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 33, no. 3, pp. B28–B34, March 2016.
- [22] R. Schirhagl, K. Chang, M. Loretz, and C. L. Degen, “Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond: Nanoscale Sensors for Physics and Biology,” *Annu. Rev. Phys. Chem.*, vol. 65, no. 1, pp. 83–105, July 2014.
- [23] D. Manzano, “A short introduction to the lindblad master equation,” *AIP Advances*, vol. 10, no. 2, p. 025106, February 2020.
- [24] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications*, 3rd ed. Berlin, Germany: Springer Science & Business Media, 2012.
- [25] L. Chirolli and G. Burkard, “Decoherence in solid-state qubits,” *Adv. Phys.*, vol. 57, no. 3, pp. 225–285, July 2008.
- [26] F. Campaioli, J. H. Cole, and H. Hapuarachchi, “A tutorial on quantum master equations: Tips and tricks for quantum optics, quantum computing and beyond,” *PRX Quantum*, vol. 5, no. 2, p. 020202, June 2024.
- [27] L. Robledo, H. Bernien, T. van der Sar, and R. Hanson, “Spin dynamics in the optical cycle of single nitrogen-vacancy centres in diamond,” *New J. Phys.*, vol. 13, no. 2, p. 025013, February 2011.
- [28] J. Happacher, D. A. Broadway, J. Bocquel, P. Reiser, A. Jimenéz, M. A. Tschudin, L. Thiel, D. Rohner, M. I. G. Puigibert, B. Shields, J. R. Maze, V. Jacques, and P. Maletinsky, “Low-

- temperature photophysics of single nitrogen-vacancy centers in diamond,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 128, no. 17, p. 177401, April 2022.
- [29] J. Happacher, J. Bocquel, H. T. Dinani, M. A. Tschudin, P. Reiser, D. A. Broadway, J. R. Maze, and P. Maletinsky, “Temperature-dependent photophysics of single nv centers in diamond,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 131, no. 8, p. 086904, August 2023.
- [30] J. Zhang, H. Yuan, N. Zhang, L. Xu, G. Bian, P. Fan, M. Li, Z. Zhan, and K. Yu, “A modified spin pulsed readout method for nv center ensembles reducing optical noise,” *IEEE Trans. Instrum. Meas.*, vol. 69, no. 7, pp. 4370–4378, July 2020.
- [31] T. Liu, J. Zhang, H. Yuan, L. Xu, G. Bian, P. Fan, M. Li, Y. Liu, S. Xia, C. Xu, and X. Xiao, “A pulsed time-varying method for improving the spin readout efficiency of nitrogen vacancy centers,” *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 54, no. 39, p. 395002, July 2021.
- [32] J. Klatzow, J. N. Becker, P. M. Ledingham, C. Weinzetl, K. T. Kaczmarek, D. J. Saunders, J. Nunn, I. A. Walmsley, R. Uzdin, and E. Poem, “Experimental demonstration of quantum effects in the operation of microscopic heat engines,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 122, no. 11, p. 110601, March 2019.
- [33] L. Botsch, N. Raatz, S. Pezzagna, R. Staacke, R. John, B. Abel, P. D. Esquinazi, J. Meijer, and S. Diziain, “Vectorial calibration of superconducting magnets with a quantum magnetic sensor,” *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 91, no. 12, p. 125003, December 2020.
- [34] Y. Matsuzaki, H. Morishita, T. Shimooka, T. Tashima, K. Kakuyanagi, K. Semba, W. J. Munro, H. Yamaguchi, N. Mizuochi, and S. Saito, “Optically detected magnetic resonance of high-density ensemble of nv- centers in diamond,” *J. Phys.: Condens. Matter.*, vol. 28, no. 27, p. 275302, May 2016.
- [35] J. P. Harrison *et al.*, “Photodynamics of the nitrogen-vacancy colour centre in diamond,” Thesis doctoral, The Australian National Univ., Canberra, Australia, 2006.
- [36] L. Stefan, “Scanning magnetometry with single-spin sensors,” Thesis doctoral, Univ. de Bristol, Bristol, Reino Unido, 2020.

- [37] E. Bourgeois, M. Gulka, and M. Nesladek, "Photoelectric detection and quantum readout of nitrogen-vacancy center spin states in diamond," *Adv. Opt. Mater.*, vol. 8, no. 12, p. 1902132, June 2020.
- [38] A. Alcalá, "Simulations centers nv magnetometry and lindblad equation," February 2024, [Online]. Available: <https://github.com/alonso121198/Simulations-centers-NV-magnetometry-and-Lindblad-Equation>.
- [39] P. Rembold, N. Oshnik, M. M. Müller, S. Montangero, T. Calarco, and E. Neu, "Introduction to quantum optimal control for quantum sensing with nitrogen-vacancy centers in diamond," *AVS Quantum Sci.*, vol. 2, no. 2, pp. 024 701–1–024 701–20, May 2020.
- [40] S. Hong, M. S. Grinolds, L. M. Pham, D. Le Sage, L. Luan, R. L. Walsworth, and A. Yacoby, "Nanoscale magnetometry with nv centers in diamond," *MRS Bull.*, vol. 38, no. 2, pp. 155–161, February 2013.
- [41] J. Zhang, L. Xu, G. Bian, P. Fan, M. Li, W. Liu, and H. Yuan, "Diamond nitrogen-vacancy center magnetometry: Advances and challenges," 2020. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2010.10231>
- [42] E. Abe and K. Sasaki, "Tutorial: Magnetic resonance with nitrogen-vacancy centers in diamond—microwave engineering, materials science, and magnetometry," *J. Appl. Phys.*, vol. 123, no. 16, p. 161101, April 2018.
- [43] M. Chipaux, A. Tallaie, J. Achard, S. Pezzagna, J. Meijer, V. Jacques, J.-F. Roch, and T. Debuisschert, "Magnetic imaging with an ensemble of nitrogen-vacancy centers in diamond," *Eur. Phys. J. D*, vol. 69, no. 10, pp. 1–10, October 2015.
- [44] G. Balasubramanian, I. Chan, R. Kolesov, M. Al-Hmoud, J. Tisler, C. Shin, C. Kim, A. Wojcik, P. R. Hemmer, A. Krueger *et al.*, "Nanoscale imaging magnetometry with diamond spins under ambient conditions," *Nature*, vol. 455, no. 7213, pp. 648–651, October 2008.
- [45] J. M. Schloss, J. F. Barry, M. J. Turner, and R. L. Walsworth, "Simultaneous broadband vector magnetometry using solid-state spins," *Phys. Rev. Appl.*, vol. 10, no. 3, p. 034044, September 2018.

- [46] D. Le Sage, K. Arai, D. R. Glenn, S. J. DeVience, L. M. Pham, L. Rahn-Lee, M. D. Lukin, A. Yacoby, A. Komeili, and R. L. Walsworth, “Optical magnetic imaging of living cells,” *Nature*, vol. 496, no. 7446, pp. 486–489, April 2013.
- [47] J.-P. Tetienne, N. Dontschuk, D. A. Broadway, A. Stacey, D. A. Simpson, and L. C. Hollenberg, “Quantum imaging of current flow in graphene,” *Sci. Adv.*, vol. 3, no. 4, p. e1602429, April 2017.
- [48] P. Reuschel, A. M. Flatae, F. Sledz, and M. Agio, *Optically Detected Magnetic Resonance (ODMR)*, Department of Physics, University of Siegen, Fecha no disponible, manual del curso de laboratorio de maestría. [Online]. Available: https://www.physik.uni-siegen.de/nano-optics/education/teaching/lab_courses/odmr_manual_v1.3.1.pdf
- [49] Y. Yang, H. H. Vallabhapurapu, V. K. Sewani, M. Isarov, H. R. Firgau, C. Adambukulam, B. C. Johnson, J. J. Pla, and A. Laucht, “Observing hyperfine interactions of nv- centers in diamond in an advanced quantum teaching lab,” *Am. J. Phys.*, vol. 90, no. 7, pp. 550–560, July 2022.
- [50] H. Babashah, H. Shirzad, E. Losero, V. Goblot, C. Galland, and M. Chipaux, “Optically detected magnetic resonance with an open source platform,” *SciPost Phys. Core*, vol. 6, no. 4, p. 065, November 2023.
- [51] V. M. Acosta, *Optical Magnetometry with Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond*, 1st ed. Berkeley, USA: University of California, Berkeley, 2011.
- [52] E. D. C. Sánchez, “Nanoscale magnetometry with a microcontroller-based magnetometer using a single nitrogen-vacancy defect in nanodiamond,” Tesis doctoral, Univ. Federal de Pernambuco, Recife, Brasil, 2020.
- [53] E. D. Coronel Sánchez, “Optically detected magnetic resonance in nanodiamonds with single nitrogen-vacancy defects,” Trabajo fin de máster, Univ. Federal de Pernambuco, Recife, Brasil, 2016.
- [54] O. Muhieddine, “Optically detected magnetic resonance with negatively-charged nitrogen vacancy centres in diamond,” Tesis doctoral, Macquarie Univ., Sydney, Australia, 2022.

- [55] L. M. Pham, “Magnetic field sensing with nitrogen-vacancy color centers in diamond,” Tesis doctoral, Harvard Univ., Cambridge, MA, USA, 2013.
- [56] C. Oncebay Segura, “Diamond studies for applications in quantum technologies,” Tesis doctoral, Inst. de Física de São Carlos, São Carlos, Brasil, 2019.
- [57] L. N. S. Andrade, “Optical measurements of electron spin coherence of nitrogen-vacancy centers in diamond,” Trabajo fin de máster, Inst. de Física de São Carlos, São Carlos, Brasil, 2021.
- [58] I. SpinCore Technologies, “Spinscore,” December 2023, [Online]. Available: <http://www.spincore.com/support/SPBI/Doc/>.
- [59] F. Systems, “Flycapture,” November 2023, [Online]. Available: <https://www.flir.com/products/flycapture-sdk/>.
- [60] P. S. Foundation, “Python official website,” October 2023, [Online]. Available: <https://www.python.org/>.