

**НОВЫЕ ПАРАМАГНИТНЫЕ ЦЕНТРЫ ОКРАСКИ
SiV, GeV и SnV В АЛМАЗЕ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ:
ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

**А. П. Низовцев¹, С. Я. Килин¹, А. Л. Пушкарчук^{2,3}
С. А. Кутень³, В. А. Пушкарчук⁴, Ф. Железко⁵**

¹Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, г. Минск
kilin@dragon.bas-net.by, apniz@ifanbel.bas-net.by

²Институт физико-органической химии НАН Беларуси, г. Минск,
alex51@bk.ru

³Институт ядерных проблем Белорусского государственного
университета, г. Минск, kuten@inp.bsu.by

⁴БГУИР, г. Минск, Республика Беларусь, vadim@nv-center.com

⁵Institute for Quantum Optics, Ulm University, Germany

Методом DFT рассчитаны структурные, электронные и спиновые характеристики парамагнитных центров окраски (ПЦО) «кремний-вакансия» (SiV центр), «германий-вакансия» (GeV центр) и «олово-вакансия» (SnV центр) в алмазе и ближайшим к вакансии атомом ¹³C. Изучена эволюция электронной и спиновых характеристик таких систем, в зависимости от их структуры.

Возможность создавать, контролировать и считывать когерентность многоспиновых систем в твердых телах принципиально важна для создания устройств квантовой обработки информации, квантовой магнитометрии, метрологии и т. п. Особенно перспективными для этих целей являются [1] системы электронных и ядерных спинов в алмазе, где электронный спин $S = 1$ центра окраски «азот–вакансия» (NV-центра).

Вместе с тем, в различных лабораториях активно проводится поиск других аналогичных парамагнитных центров окраски в алмазе, способных по своим свойствам и перспективам применения сравниться или даже превзойти таковые для NV центров. В частности, уже достаточно давно были обнаружены, идентифицированы и наблюдаются в качестве одиночных ПЦО «кремний–вакансия» центр SiV [2], ведется

активное исследование «германий–вакансия» центра (GeV) [3] и «олово–вакансия» центра (SnV центр) [4].

Для моделирования использовались кластеры $C_{128}[SiV]H_{98}$, $C_{128}[GeV]H_{98}$ и $C_{128}[SnV]H_{98}$, в которых ПЦО были расположены в центральной части кластера (рис. 1). Для сравнения рассматривался также бездефектный кластер $C_{130}H_{98}$. После оптимизации геометрической структуры кластеров были рассчитаны электронная структура и распределение спиновой плотности по кластеру методом DFT с использованием функционала B3LYP1 и базиса MINI/6-31G. Расчеты производились для однократно отрицательно заряженного кластера в дублетном основном состоянии, соответствующим спину $S = 1/2$. Результаты расчета структуры изучаемых кластеров приведены на рис. 1.

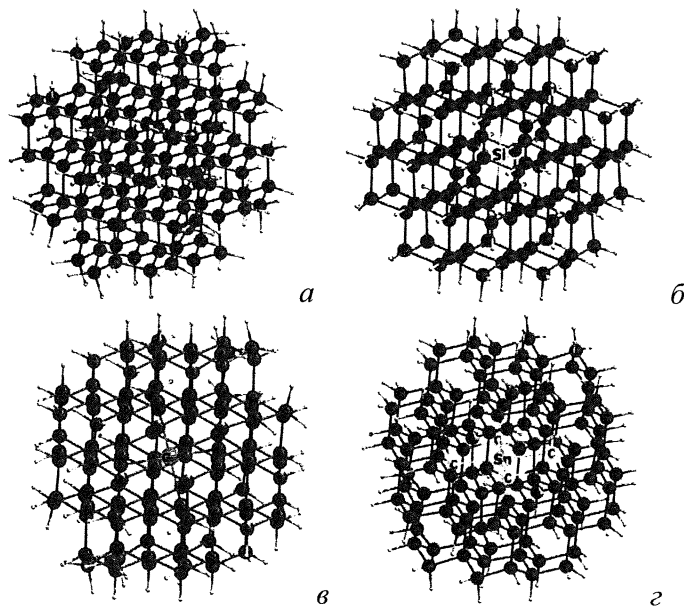


Рис. 1. Кластеры $C_{130}H_{98}$ (а), $C_{128}[SiV]H_{98}$ (б), $C_{128}[GeV]H_{98}$ (в), $C_{128}[SnV]H_{98}$ (г) после оптимизации геометрии методом DFT

На рис. 2 приведены результаты расчета электронной структуры изучаемых кластеров в рамках метода DFT. По оси OY приведены значения энергий МО в эВ. Стрелками отмечены заселенные электронами МО, направления стрелок обозначают соответствующую ориентацию спина.

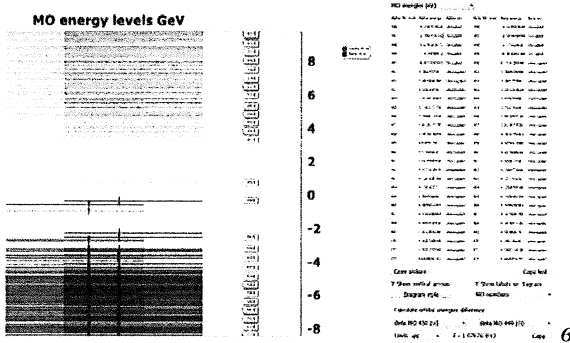
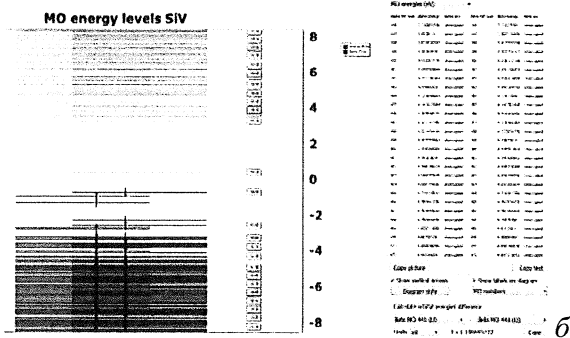
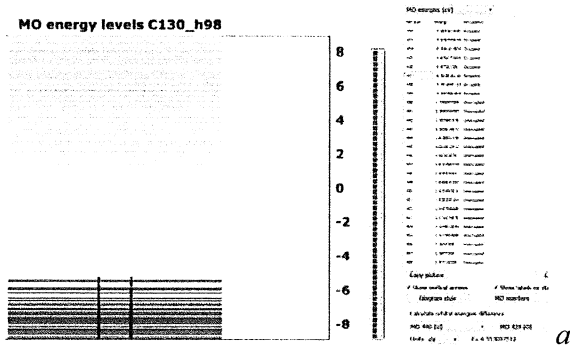


Рис. 2. Электронная структура кластера $C_{130}H_{98}$ (а), $C_{128}[SiV]H_{98}$ (б), $C_{128}[GeV]H_{98}$ (в)

На рис. 3 представлены результаты расчета распределения спиновой плотности ρ^S для изучаемых кластеров в виде 3D изоповерхностей, рассчитанные методом DFT.



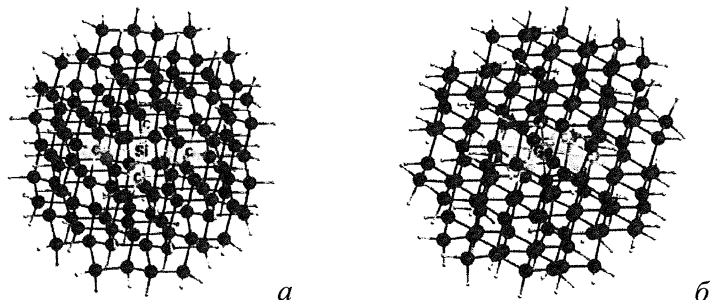


Рис. 3. Распределение спиновой плотности для кластеров $C_{128}[\text{SiV}]\text{H}_{98}$ (а), $C_{128}[\text{GeV}]\text{H}_{98}$ (б)

Заключение. В работе показано, что SiV, GeV, и SnV центры в наноструктурированном алмазе имеют электронные и спиновые характеристики достаточные для организации квантовой обработки информации на первых соседях ПЦО. Следовательно, данные центры необходимо использовать при конструировании квантовых процессоров, а также при создании сенсоров магнитного поля и температуры наноалмаза.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Конвергенция–2020».

Литература

1. Jelezko F. and Wrachtrup J. NV defect centres in diamond: a review // Phys. Status Solidi A. 2006. Vol. 203. P. 3207.
2. Wang C. et al. Single photon emission from SiV centres in diamond produced by ion implantation // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2006. Vol. 39. P. 37.
3. Екимов Е. А., Кондрин М. В. Примесно-вакансионные комплексы в алмазе: перспективы синтеза и применений // УФН. 2017. Т. 187, № 6. С. 577–598.
4. Takayuki Iwasaki, Yoshiyuki Miyamoto, Takashi Taniguchi, Petr Siyushev, Mathias H. Metsch, Fedor Jelezko, and Mutsuko Hatano Tin-Vacancy Quantum Emitters in Diamond // Phys. Rev. Lett. 2017. Vol. 119. P. 253601.