

УДК 548.571; 539.143.43; 535.343.2

А. П. Низовцев<sup>1,2</sup>, А. Л. Пушкарчук<sup>2,3</sup>, С. А. Кутень<sup>4</sup>,  
D. Lyakhov<sup>5</sup>, D.L. Michels<sup>5</sup>, Н.И. Каргин<sup>2</sup>, С.Я. Килин<sup>1</sup>

**СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КЛАСТЕРАХ АЛМАЗА  
С НЕЙТРАЛЬНЫМИ ЦЕНТРАМИ ОКРАСКИ SiV, GeV, SnV и PbV:  
МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

<sup>1</sup> Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68,  
220072 Минск, Беларусь

[apniz@dragon.bas-net.by](mailto:apniz@dragon.bas-net.by), [sergei\\_kilin@yahoo.com](mailto:sergei_kilin@yahoo.com)

<sup>2</sup> Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,  
Каширское ш., 31, 11540 Москва, Россия

[apniz@dragon.bas-net.by](mailto:apniz@dragon.bas-net.by), [alexp51@bk.ru](mailto:alexp51@bk.ru), [NIKargin@mephi.ru](mailto:NIKargin@mephi.ru)

<sup>3</sup> Институт физико-органической химии НАН Беларуси, ул. Сурганова, 13,  
220072, Минск, Беларусь

[alexp51@bk.ru](mailto:alexp51@bk.ru)

<sup>4</sup> Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская 11, 220030, Минск, Беларусь

[semen\\_kuten@list.ru](mailto:semen_kuten@list.ru)

<sup>5</sup> King Abdullah University of Science and Technology (KAUST), Thuwal 23955-6900,  
Saudi Arabia

[dmitry.lyakhov@kaust.edu.sa](mailto:dmitry.lyakhov@kaust.edu.sa), [dominik.michels@kaust.edu.sa](mailto:dominik.michels@kaust.edu.sa)

В связи с разработкой квантовых технологий второго поколения в последние годы большое внимание уделяется изучению гибридных электронно-ядерных спиновых систем в алмазе [1], состоящих из парамагнитных центров окраски, связанных сверхтонким взаимодействием (СТВ) с ядерными спинами изотопических атомов  $^{13}\text{C}$ , присутствующими в решетке естественного алмаза в количестве  $\sim 1.1\%$ . Наиболее известными и хорошо изученными представителями таких систем являются центры “азот-вакансия” (NV центры) и их комплексы NV- $^{13}\text{C}$  с атомами  $^{13}\text{C}$ . Недавно были обнаружены и идентифицированы другие центры окраски в алмазе, обладающие даже лучшими характеристиками для различных квантово-технологических приложений. Среди них значительное внимание привлекли связанные с вакансиями элементы IV группы (E=Si, Ge, Sn, Pb) [2] поскольку большая часть их флуоресценции приходится на узкую ( $\sim 1$  нм) бесфононную линию, тогда как для NV центра эта доля составляет всего  $\sim 4\%$ . Предыдущие исследования этих дефектов в основном были сосредоточены на отрицательно заряженных центрах  $\text{EV}^-$ , основное состояние которых имеет электронный спин  $S=1/2$ . Однако для них времена спиновой когерентности слишком малы для практических приложений, за исключением работы при субкельвиновых температурах.

Между тем, существуют нейтральные аналоги этих дефектов, имеющие орбитальное синглетное основное состояние с электронным спином  $S=1$  [3-6], имеющие значительно большие времена спиновой когерентности. В частности, было показано [4,5], что нейтральный центр  $\text{SiV}^0$  имеет время спиновой когерентности порядка секунды при гелиевых температурах. Считается [6], что

все аналогичные нейтральные примесно-вакансионные центры должны иметь такие присущие им большие времена когерентности, что делает их интересными для квантово-технологических приложений. К настоящему времени изучены в основном электронные и оптические характеристики таких центров [4-6]. Данные СТВ известны только для ближайших к Si атомов  $^{29}\text{Si}$  и  $^{13}\text{C}$  в центре  $\text{SiV}^0$  [3]. Между тем, существенной предпосылкой для высокоточного манипулирования спином в этих системах является полное знание характеристик СТВ. Их теоретическое предсказание для указанных связанных электронно-ядерных спиновых систем  $\text{EV}^0\text{-}^{13}\text{C}$  в алмазе является целью настоящей работы.

Используя теорию функционала плотности (DFT) мы выполнили моделирование пассивированных водородом кластеров алмаза  $\text{C}_{84}[\text{EV}^0]\text{H}_{78}$  ( $\text{E}=\text{Si, Ge, Sn, Pb}$ ), содержащих нейтральные центры окраски  $\text{SiV}^0$ ,  $\text{GeV}^0$ ,  $\text{SnV}^0$  и  $\text{PbV}^0$ , и рассчитали матрицы  $A_{\text{KL}}$  ( $\text{K,L}=\text{X,Y,Z}$ ), описывающие сверхтонкие взаимодействия (СТВ) электронных спинов центров с ядерными спинами атомов  $^{13}\text{C}$ , расположенных во всех возможных узлах решетки в исследуемых кластерах. Показано, что уровень теории DFT/B3LYP/ЭПР-ii/TZVPP(Si)/decontract обеспечивает получение характеристик СТВ для ядерных спинов  $^{13}\text{C}$ , являющихся ближайшими соседями атома Si в кластере, близких к имеющимся экспериментальным данным [3]. Используя этот уровень DFT, мы также рассчитали неизвестные тензоры СТВ для всех возможных систем  $\text{EV}^0\text{-}^{13}\text{C}$  в исследованных кластерах.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект 21-42-04416. All simulations were performed on KAUST's Ibex HPC. The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Skylake nodes.

- [1] Awschalom D. D. Quantum technologies with optically interfaced solid-state spins // Awschalom D. D., Hanson R., Wrachtrup J., Zhou B. B. / Nature Photonics. -2018. - Vol. 516. – P. 516.
- [2] Chen D. Building Blocks for Quantum Network Based on Group-IV Split-Vacancy Centers in Diamond. // Chen D., Zheludev N., Gao W. / Adv. Quantum Technol. – 2019. – P. 1900069.
- [3] Edmonds A. M. Electron paramagnetic resonance studies of silicon-related defects in diamond. // Edmonds A. M., Newton M. E., Martineau P. M., Twitchen D. J., Williams S. D. / Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 77. – P. 245205.
- [4] B. L. Green. Neutral Silicon-Vacancy Center in Diamond: Spin Polarization and Lifetimes. / B. L. Green, S. Mottishaw, B. G. Breeze, A. M. Edmonds, U. F. S. D'Haenens-Johansson, M. W. Doherty, S. D. Williams, D. J. Twitchen, and M. E. Newton // Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol. 119. - P. 096402.
- [5] Rose B. Observation of an environmentally insensitive solid-state spin defect in diamond / Rose B., Huang D., Zhang Z.-H., Stevenson P., Tyryshkin A., Sangtawesin S., Srinivasan S., Loudin L., Markham M., Edmonds A., Twitchen D., Lyon S., de Leon N. D. // Science. – 2018. – Vol. 361. – P. 60-63.
- [6] G. Thiering G. The  $(\mathbf{e}_g \times \mathbf{e}_u) \times \mathbf{E}_g$  product Jahn–Teller effect in the neutral group-IV vacancy quantum bits in diamond // G. Thiering G., A.Gali. / npj Computational Materials. – 2019. – Vol. 5. – P. 18.