

Virpesinės izoliuotų taškinų defektų savybės

Vibrational properties of isolated point defects in semiconductors

Lukas Razinkovas, Audrius Alkauskas

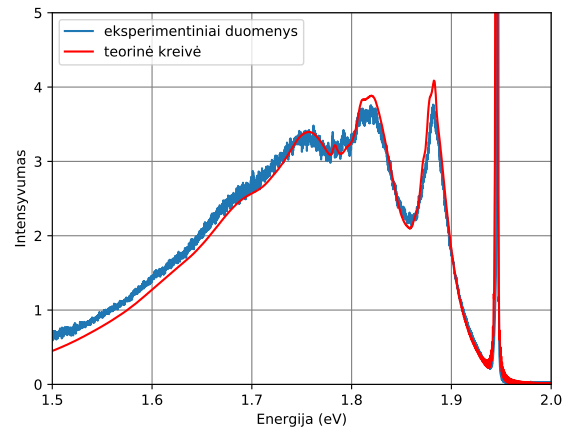
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

lukas.razinkovas@ftmc.lt

Taškiniai defektai stipriai keičia puslaidininkinių medžiagų savybes. Šie pokyčiai praktiniams pritaikymams kartais būna žalingi, o kartais naudingi. Kalbant apie jų naudingumą, neseniai buvo atrasta, kad tam tikri plačiajuosčių puslaidininkinių taškiniai defektai kambario temperatūroje išlaiko stabilias koherentes sukinines būsenas. Jas galima sukurti, nuskaityti ir keisti, veikiant optiniais ir mikrobanginiais sužadimais [1]. Su šiomis savybėmis atsiveria labai daug įdomių praktinio taikymo galimybių. Viena iš jų yra defektų pritaikymas kvantinės informacijos apdorojimui defekto sukinį naudojant kaip kvantinę bitą. Kita – šiuos defektus panaudoti kaip pavienių fotonų emiterius. Geriausiai žinomas tokio tipo defektas yra deimanto NV^{-1} centras [2].

Siekiant pritaikyti šiuos defektus kaip sukininius kubitus, labai svarbu yra suprasti virpesinę defekto struktūrą. Ši struktūra lemia tokias savybes kaip optinis sukinio inicializavimas ir kvantinis našumas pavienių fotonų emiteriuose. Naudojant modernius tankio funkcionalo teorijos skaičiavimus galima teoriškai apskaičiuoti šią virpesinę struktūrą. Deja, tiesioginiai virpesinės struktūros skaičiavimai nėra patikimi dėl nedidelių sistemų dydžių, neatitinkančių realios fizikinės situacijos.

Šiame darbe yra pristatoma nauja skaičiavimo metodologija, kurios dėka galima suskaičiuoti iš esmės izoliuotų defektų virpesinę struktūrą [3]. Ši metodologija yra pagrįsta prielaida, jog kristaluose tarpatominės sąveikos yra trumpasiekės. To rezultate tarpatominės sąveikos konstantas, suskaičiuotas mažos sistemos modelyje, galima panaudoti didelės vieno defekto virpesinės struktūros skaičiavimams. Remiantis šia metodologija gauti rezultatai buvo pritaikyti skaičiuojant liuminescencinę NV^{-1} centro deimante liniją (1 pav.). Gauta linija labai gerai sutampa su eksperimentiniais rezultatais ir patvirtina šios metodologijos patikimumą.



1 pav. Liuminescencinė NV^{-1} centro deimante linija.

Reikšminiai žodžiai: taškiniai defektai, tankio funkcionalo teorija

Literatūra

- [1] J. R. Weber *et al.*, "Quantum computing with defects", Proc. Nat. Acad. Sci. **107**, 8513 (2010)
- [2] M. W. Doherty *et al.*, "The nitrogen-vacancy colour centre in diamond", Phys. Rep. **528**, 1 (2013)
- [3] A. Alkauskas *et al.*, "First-principles theory of the luminescence lineshape for the triplet transition in diamond NV centres", New J. of Phys. **16**, 073026 (2014)