Влияние гидростатического давления на энергии колебательных мод SiV и GeV центров в алмазе

Разгулов А.А. [1] , *Ляпин С.Г.* [1] , *Новиков А.П.* [1] , *Екимов Е.А.* [1]

aleksandr.razgulov@phystech.edu

[1] Институт физики высоких давлений им. Верещагина РАН, Москва, Россия

За прошедшие десятилетия в научной периодике прочно обосновались исследования центров окраски в алмазе, что во многом обусловлено перспективами их практического применения. Тем не менее, некоторые фундаментальные свойства центров окраски всё ещё остаются малоизученными. В частности, одним из таких белых пятен в корпусе знаний о SiV и GeV центрах являются данные о влиянии гидростатического давления на структуру их фононных крыльев (ФК). Вместе с тем, эта информация может быть полезна как для улучшения существующих теоретических подходов к описанию колебательных мод бивакансионных центров, так и в свете разработки способов контроля и управления параметрами их фотолюминесценции (ФЛ).Основные результаты барических исследований ФК SiV GeV центров представлены в таблице. Здесь EQ обозначает энергию квазилокального колебательной моды (КЛКМ), EP1 EP2 – энергии нелокализованных колебаний (т.е. колебаний, естественных для алмазной решётки самой по себе), α – производная энергии соответствующего колебания по давлению, α/(Ei) – относительный барический коэффициент i-ой колебательной моды (иными словами – её “чувствительность” к давлению). Индексы exp и DFT обозначают значения, полученные в рамках эксперимента (настоящая работа) и в результате DFT расчётов (работа [1]). Анализ результатов, представленных в таблице, приводит к довольно интригующим выводам, в частности:

1. Относительный барический коэффициент α/EQ КЛКМ SiV практически вдвое превышает аналогичный коэффициент КЛКМ GeV, что кажется контринтуитивным результатом в виду изоморфности этих центров, одинаковой симметрии КЛКМ GeV и SiV, и того обстоятельства, что для энергий бесфононных линий картина является обратной;
2. Рассчитанные методом DFT значения относительных барических коэффициентов α/EQ КЛКМ для обоих центров практически совпадают между собой и существенно отличаются от значений, полученных экспериментально. В то же время, значения α/EQ, рассчитанные для КЛКМ, совпадают со значениями, полученными экспериментально для нелокализованных колебаний Pi.Кроме того, существенное отличие чувствительностей КЛКМ и колебательных мод, связанных с пиками P1 и P2 ФК GeV центра, может быть интерпретировано как ещё одно косвенное доказательство различий в их природе.

	$(E_Q)_{exp}$ [meV]	$(E_Q)_{DFT}$ [meV]	$\alpha/(E_Q)_{exp}$ [%/GPa]	$\alpha/(E_Q)_{DFT}$ [%/GPa]	$\alpha(P_1)/E_{P1}$ [%/GPa]	$\alpha(P_2)/E_{P2}$ [%/GPa]
SiV	65	64.04	1%	0.29%	-	-
GeV	44	39.47	0.53%	0.28%	0.28	0.29

Работа была поддержана грантом РНФ № 24-12-00037.

Ссылки

1. Е.А. Екимов, С.Г. Ляпин, А.А. Разгулов, М.В. Кондрин, ЖЭТФ (2019), 156, с 925
2. E. Londero, G. Thiering, L. Razinkovas, A. Gali, A. Alkauskas,. Phys. Rev. B (2018), 035306