

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

Разгулов А.А.<sup>1</sup>, Ляпин С.Г.<sup>1</sup>, Новиков А.П.<sup>1</sup>, Екимов Е.А.<sup>1</sup>

aleksandr.razgulov@phystech.edu

<sup>1</sup> 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 квазилокальной колебательной моды (КЛКМ), EP1 EP2 – энергии нелокализованных колебаний (т.е. колебаний, естественных для алмазной решётки самой по себе),  $\alpha$  – производная энергии соответствующего колебания по давлению,  $\alpha/(E_i)$  – 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  $\alpha/EQ$  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  $\alpha/EQ$  КЛКМ для обоих центров практически совпадают между собой и существенно отличаются от значений, полученных экспериментально. В то же время, значения  $\alpha/EQ$ , 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.

	(EQ) <sub>exp</sub> [meV]	(EQ) <sub>DFT</sub> [meV]	$\alpha / (EQ)_{exp}$ [%/GPa]	$\alpha / (EQ)_{DFT}$ [%/GPa]	$\alpha(P_1)/EP_1$ [%/GPa]	$\alpha(P_2)/EP_2$ [%/GPa]
SiV	65	64.04	1%	0.29%	-	-
GeV	44	39.47	0.53%	0.28%	0.28	0.29

Работа была поддержана грантом РФФ № 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