

固体中のスピン中心におけるコヒーレンス時間のスケーリング

[°]S. Kanai^{1,4}, F. J. Heremans^{5,6}, H. Seo⁷, G. Wolfowicz^{5,6}, C. P. Anderson^{6,8}, S. E. Sullivan⁵,

M. Onizhuk⁹, G. Galli^{5,6,9}, D. D. Awschalom^{5,6,8}, and H. Ohno^{1,3,4,10,11}

¹Laboratory for Nanoelectronics and Spintronics, RIEC, Tohoku University, ²DEFS, Tohoku University,

³CSIS, Tohoku University, ⁴CSRN, Tohoku University, ⁵CME/MSD, Argonne National Laboratory,

⁶Pritzker School of Molecular Engineering, University of Chicago, ⁷Department of Physics and Department of Energy Systems Research, Ajou University, ⁸Department of Physics, University of Chicago, ⁹Department of Chemistry, University of Chicago, ¹⁰CIES, Tohoku University, ¹¹WPI-AIMR, Tohoku University

*skanai@tohoku.ac.jp

固体中のスピン欠陥中心において様々な量子機能が実現され、その更なる高度化と量子材料の拡大が重要課題である[1]。量子スピンコヒーレンス時間 T_2 は量子機能性を特徴付ける最も基本的な物性であり、近年、Cluster correlation expansion (CCE) と呼ばれる近似手法により、ダイヤモンドや SiC を母体とするワイドギャップ半導体中の電子スピン中心における T_2 の理論予測が現実的な時間(数時間～数日)で実行可能であり、かつ CCE 計算による T_2 の理論予測値が T_2 の実験値を再現することが報告された[2]。本研究では、CCE 計算に基づいた T_2 の新たなスケーリング則とその量子材料探索への応用を報告する[3]。

T_2 は母体材料により支配的な影響を受ける。我々は T_2 の実験値が知られているダイヤモンド、SiC、Si、ZnO を母体とするスピン中心について、2 次 CCE を用いて T_2 を計算し、計算値と実験報告値がオーダでよく一致することを確認した。また、30 mT 以上の外部磁場下では、化合物中の核スピン浴同士の結合が解けること、更に 10^{22} cm^{-3} 程度以下の濃度の非零核スピンを持つ単体中のスピン浴における T_2 はその結晶構造に依存せず、核スピン濃度 n の -1.0 乗に比例することを明らかにした。CCE 計算によりこの濃度依存性の比例係数を全安定核種について調べ、電子スピン $S=1/2$ 、電子スピンの g 因子 $g_e=2$ を有するスピン中心において T_2 が $1.5 \times 10^{18} \times |g|^{-1.6} I^{-1.1} n^{-1.0}$ (秒) と統一的に記述できることが分かった。ここで g は核スピンの g 因子、 I は核スピン量子数、 n は単位を cm^{-3} とする。本スケーリング則を $S \neq 1/2$ 及び $g_e \neq 1/2$ へ一般化したところ、上記材料における T_2 の実験報告値を再現した。これは、CCE による計算コストなしに、定量的な T_2 予測とそれを用いた量子材料探索が可能であることを意味する。例えば、データベース上の 1 eV 以上のバンドギャップを持つ 12,000 種の安定化合物の T_2 を計算したところ、 $T_2 > 1 \text{ ms}$ を有する化合物が 700 種存在し、その中で非カルコゲナイドは SiC のみであること等が示された[3]。

本研究の一部は Center for Novel Pathways to Quantum Coherence in Materials, an Energy Frontier Research Center funded by the U.S. DOE/BES、National Quantum Information Science Research Centers、NRF by MSIT (Nos. 2018R1C1B6008980/2018R1A4A1024157/2019M3E4A1078666)、AFOSR FA9550-19-1-0358、及び JSPS (Nos. 19H05622/19KK0130/20H02178)の支援を受けた。

[1] G. Wolfowicz, C.P. Anderson, J.F. Heremans *et al.*, Nat. Rev. Mater. 1-20 (2021). [2] H. Seo *et al.*, Nat. Commun. 7, 12935 (2017). [3] S. Kanai *et al.*, arXiv 2102.02986 (2021).