NV 中心ダイヤモンドにおける電子配置と NV 構造の関係

Relationship between electronic configuration and N-V alignment in NV center diamond

三重大院工, ○(M1) 松下 和寛, 名和 憲嗣, 佐野 和博, 中村 浩次

Mie Univ., °Kazuhiro Matsushita, Kenji Nawa, Kazuhiro Sano, Kohji Nakamura

E-mail: 421M616@m.mie-u.ac.jp

ダイヤモンド中の格子欠陥である窒素-空孔(Nitrogen-Vacancy; NV)中心は室温及び大気中で単一スピン(S=1)を有し、このスピン状態が磁場や電場、温度など様々な外部環境による検出や制御が可能であることから、ナノセンシングへの応用が期待されている。NV 中心ダイヤモンドでは、N 原子及び V サイト周りの C 原子のスピンが組み合わさることにより、あたかも単一のスピンとして振る舞い、アップスピン状態とダウンスピン状態の 2 つの量子スピン準位が存在する。本研究では、これら量子スピン準位の変調可能性を調べることを目的に、N-V 構造の位置を変化させながら N 原子や V 近傍の C 原子の電子配置の制御を理論的観点から試みた。

第一原理計算には、局所密度近似に基づく全電子フルポテンシャル線形化補強平面波法[1]を用いた。Murnaghan 状態方程式より平衡格子定数は 3.474Åが得られ、純粋ダイヤモンドの格子定数(3.567Å)と比較しておよそ 2.6%小さくなった。N 原子と V サイトの対を有する全 63 原子のユニットセルにおいて電子構造計算を行った結果、全体で $1\mu_B$ のスピン磁気モーメントを有し、先行研究の通り、N 原子と V サイト周りの C 原子が寄与していることを確認した。次に、NV 周りの電子配置を変化させるために、N 原子と V サイトを遠ざけた時の電子状態を計算した。例えば、V サイトが N 原子の第二近接サイトに位置したとき、V サイト周りの 4 つの C 原子でスピン分極が見られ、全体として $3\mu_B$ の大きなスピン磁気モーメントが得られた。一方で、N 原子のスピンは分極しなかった。さらに N-V が対を形成したときが最安定となり、その他の NV 構造とのエネルギー差は約 2.7eV であった。発表では、各 NV 構造での NV 中心ダイヤモンドの電子配置に対する C 原子の役割について考察する。

[1] K. Nakamura, T. Ito, A. J. Freeman, L. Zhong, and J. Fernandez-de-Castro, Phys. Rev. B 67, 014420 (2003)

© 2021年 応用物理学会