

実験系に即した ^{13}C と相互作用するダイヤモンド色中心の電子状態モデルの検討

Toward Modeling of Electronic States of Color Centers in Diamond with ^{13}C spins

富士通研究所¹, [○] 石黒 哲郎¹, 宮武 哲也¹, 岩井 俊樹¹, 河口 研一¹,
土肥 義康¹, 佐藤 信太郎¹

Fujitsu Laboratories Ltd.¹, [○] Tetsuro Ishiguro¹, Tetsuya Miyatake¹, Toshiki Iwai¹,
Kenichi Kawaguchi¹, Yoshiyasu Doi¹, Shintaro Sato¹

Email: ishiguro-tetsu@fujitsu.com

量子コンピュータ用途の固体量子材料として NV、IV-V 中心をはじめとするダイヤモンド色中心の利用が提案されている。効率の観点から近年注目されている IV-V 色中心については、 ^{13}C 核スピンを組み合わせた複合量子ビットも提案されている^[1]。しかし、複合量子ビットを設計・制御するために必須となる系の電子状態モデルはまだ確立されておらず、実機による検証も十分ではない。そこで今回、イオン注入により形成した IV-V 色中心を利用し、想定される系の電子状態の計算モデルと、ダイヤモンド材料の実験値とを照合し、IV-V 色中心の物性値を取得する手法を提案するとともに、精度の高い電子状態モデルの構築を目指す。

はじめに、母材となるダイヤモンド基板の選定とそこに含まれる残留不純物の同定を行った。高品質 CVD ダイヤモンドを用いれば、主不純物の窒素は<5ppb 未満に抑えられ、色中心に強い影響を及ぼし得る波長 500~700 nm で光学遷移を生じる欠陥形成が十分に抑えられることを低温カソードルミネッセンススペクトルにて確認した。

次に、SnV 色中心と ^{13}C が共存する系に対して、基底エネルギー準位の詳細検討を以下の計算モデルを用いて行った。

$$\hat{H}_{eff,z}^g = -(p^g \lambda_0^g + K_{JT}) \hat{L}_z \hat{S}_z + \mu_B p^g g_L^g \hat{L}_z B_z - 2\delta_p^g g_L^g \hat{S}_z B_z + A_g^{\parallel} \hat{S}_z \hat{I}_z + A_g^{\perp} [\hat{S}_x \hat{I}_x + \hat{S}_y \hat{I}_y] + \gamma_{strain}$$

上式の右辺第一項はスピン軌道相互作用 (SO) および Jahn-Teller 効果 (JT) の寄与、第二項と第三項は軌道 ($L = 1$) およびスピン ($S = 1/2$) に対する Zeeman 効果、第四項と第五項は核スピン ($I = 1/2$) との相互作用項、第六項は歪の

寄与を示す。想定環境は、 ^{13}C 以外のバックグラウンド不純物の影響が及ばない条件すなわち、実験系において例えば、上述のダイヤモンド基板に濃度 ($\sim 10^{10}/\text{cm}^2$) 以上の SnV 色中心が存在する場合に相当する。また、ここでは簡単のため、場により平均化された単一の ^{13}C の寄与があるとしている。色中心に隣接する ^{13}C との相互作用 ($A_g^{\parallel} \sim A_g^{\perp}$) を横軸にとり、微細構造分裂 (基底最低エネルギー準位: $|m_l, m_s\rangle = |-3/2, \pm 1/2\rangle$) を見積もった結果を Figure 1 に示す。SO、JT のパラメータは文献^{[2],[3]}を参照した。 ^{13}C の寄与による分裂量は数百 MHz のオーダーと見積もられ、相互作用係数はラマン分光および角度分解電子スピン共鳴等の分光測定を実施することにより取得が可能である。また、分裂状態の詳細な解析によって ^{13}C の寄与の程度 (色中心との距離や結合する総スピン数) を見積もり、IV-V 色中心における電子状態の更なる高精度化の見通しを得た。

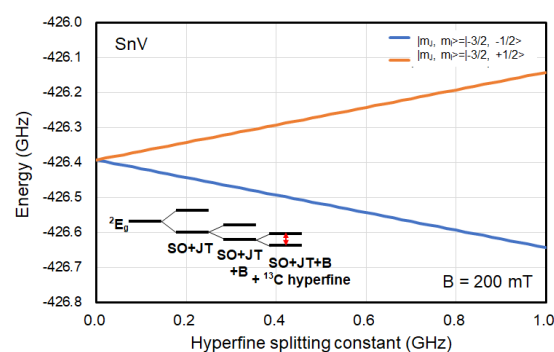


Figure 1 Calculated hyperfine splitting in SnV with ^{13}C

- [1] C. E. Bradley et al. PHYS. REV. X 9, 031045 (2019).
- [2] G. Thiering et al. PHYS. REV. X 8, 021063 (2018).
- [3] A. P. Nizovtsev et al. Semiconductors, 54, 12,1685 (2020).