

ИСТОЧНИКИ ОДИНОЧНЫХ ФОТОНОВ ДЛЯ КВАНТОВОЙ КРИПТОГРАФИИ: *AB INITIO* ИССЛЕДОВАНИЕ ОДИНОЧНЫХ NV⁻ЦЕНТРОВ В НАНОАЛМАЗЕ

В.А. ПУШКАРЧУК, С.Я. КИЛИН, А.П. НИЗОВЦЕВ,
А.Л. ПУШКАРЧУК, В.Е. БОРИСЕНКО, А.Б. ФИЛОНОВ

Благодаря активно ведущимся в мире работам по разработке "аппаратных" средств для квантовой криптографии, основной особенностью которой является обеспечиваемая физическими законами природы невозможность перехвата передаваемой информации, в последние годы был реализован ряд предложенных протоколов и на мировом рынке появились первые, коммерчески реализуемые квантово-криптографические системы [1].

Центральным элементом таких систем является источник излучения, позволяющий генерировать одиночные фотоны в нужные моменты

времени. В качестве кандидатов для этого изучаются различные одиночные квантовые объекты в твердых телах (см. например, спецвыпуск журнала [2]), среди которых одним из наиболее перспективных являются одиночные дефекты "азот-вакансия" (NV^- -центры) в нанокристаллах алмаза, которые являются исключительно фотостабильными даже при комнатной температуре. Для оптимизации их работы в качестве генераторов одиночных фотонов исключительно важно детально знать фотофизические, структурные, спиновые и пр. свойства NV^- -центров в наноалмазах [3].

В связи с этим в данной работе проведено комплексное теоретическое исследование электронных и спиновых свойств различных нанокристаллов углеродасодержащих NV^- -центры. Моделирование свойств указанных кластеров проводили в рамках *ab initio* и полуэмпирических квантовохимических методов. Для расчета выбирались бездефектные и с наличием NV^- -центров углеродные кластеры как пассивированные водородом ($C_{38}H_{42}$, $C_{71}H_{84}$, $C_{86}H_{78}$) так и со свободной поверхностью (C_{38} , C_{71} , C_{86}). Исследование свойств негидрогенизированных нанокластеров углерода проводилось впервые. Показано, что в случае углеродных нанокристаллов, пассивированных атомами водорода, формируются алмазоподобные кластеры. Атомарное строение нанокристаллов, непассивированных атомами водорода зависит от числа атомов и начальных геометрических параметров кластера и в некоторых случаях образуются кластеры с фуллерено-подобной поверхностью. В случае нанокристаллов алмаза, пассивированных атомами водорода сверхтонкое взаимодействие обусловлено локализацией спиновой плотности на ядрах атомов являющихся ближайшими соседями NV^- -центра. Для углеродных нанокристаллов, непассивированных атомами водорода, сверхтонкое взаимодействие обусловлено локализацией спиновой плотности на ядрах атомов формирующих поверхность нанокристалла.

Литература

1. J.Ouellette // The Industrial Physicist, Dec.-Jan. 2004 24.
2. New J. Of Physics, 2004, 6.
3. Пушкарчук В.А., Килин С.Я., Низовцев А.П., Пушкарчук А.Л., Борисенко В.Е., von Borczyskowski С., Филонов А.Б. // Оптика и спектроскопия, (принята к публикации).