

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ РМ6 СТРУКТУРНЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДВУХ SiV ЦЕНТРОВ В НАНОАЛМАЗЕ КАК ВОЗМОЖНОГО ЭЛЕМЕНТА КВАНТОВОЙ АНТЕННЫ

В.А. Пушкарчук¹, А.П. Низовцев², Д.С. Могилевцев², С.Я. Килин²,
А.Л. Пушкарчук³, С.А. Кутень⁴, А.А. Хрущинский⁴

¹Учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», Минск, Беларусь

²Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

³Институт физико-органической химии НАН Беларуси, Минск, Беларусь

⁴Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь

Квантовые антенны, как устройства, формирующие свет на уровне одиночных квантов, уже стали ключевыми элементами нанооптики и наноэлектроники. Квантовые антенны активно изучаются на предмет возможного применения в квантовых коммуникациях, квантовой визуализации и зондировании, а также в сборе энергии. Однако конструкция и оптимизация этих излучающих/приемных устройств еще недостаточно разработаны по сравнению с известными способами для обычных радиочастотных антенн [1]. Нами была предложена общая концепция квантовой антенны, как устройства, использующего такое свойство, как дискретность энергетических уровней излучателя. В качестве эмиттерной модели рассматриваются «кремниевые-вакансионные» центры (SiV^-) в нанодиамазе. В данной модели квантовый излучатель, состоящий из двух двухуровневых эмиттеров, может быть реализован с помощью пары центров окраски в алмазе, в частности – отрицательно заряженных центров «кремний-вакансия» SiV^- . В связи с этим, нами выполнено прямое компьютерное моделирование методами квантовой химии системы двух SiV^- центров, расположенных недалеко друг от друга в кластере алмаза. В работе квантово-химическим методом РМ6 изучен пассивированный водородом кластер $\text{C}_{313}[\text{2SiV}^- \text{H}^{172}]$, моделирующий нанодиамаз, содержащий два заряженных отрицательно центра SiV^- . Для оценки оптической активности электронов, локализованных в области SiV^- центров, были проведены расчеты с использованием метода TD-SCF РМ6. Для кластера $\text{C}_{313}[\text{2SiV}^- \text{H}^{172}]$ был рассчитан спектр поглощения. Показано что, в запрещенной зоне двухцентровых кластеров формируются дублетные состояния,

соответствующие симметричным и антисимметричным состояниям пары Дикке взаимодействующих излучателей и, следовательно, возможно создание квантового излучателя, состоящего из пары эмиттеров, которыми являются два SiV^- центра.

Список литературы

1. Slepyan G.Y., Vlasenko S., Mogilevtsev D. Quantum Antennas // Adv. Quantum Technol. 2020. Vol. 3. P. 1900120.