

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук
Отделение физики твердого тела
Лаборатория микроволновой спектроскопии кристаллов

Бреев Илья Дмитриевич

Спин-зависимые оптические и механические свойства вакансионных центров
в гексагональном карбиде кремния и гетероструктурах на его основе

НАУЧНЫЙ ДОКЛАД

Направление подготовки: 1.3 Физические науки

Специальность: 1.3.8 Физика конденсированного состояния

Санкт-Петербург

2022

Научный руководитель:

Анисимов Андрей Николаевич, кандидат физ.-мат. наук, научный сотрудник,
ФТИ им. А.Ф. Иоффе

Рецензенты:

Бадалян Андрей Гагикович, кандидат физ.-мат. наук, старший научный
сотрудник, ФТИ им. А.Ф. Иоффе

Власов Игорь Иванович, кандидат физ.-мат. наук, заведующий лаборатории
углеродной нанофотоники, ФГБУН Институт общей физики им. А.М.

Прохорова РАН

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования

В последнее десятилетие тенденция к миниатюризации элементной базы микроэлектроники привела к практическому достижению квантового предела для размеров транзистора, при котором каждая операция проходит при участии счетного числа носителей заряда [1]. Это обстоятельство инициировало поисковые исследования для нахождения материалов и объектов в них, способных служить квантовыми битами для эпохи новой, квантовой электроники. Помимо возможного увеличения вычислительной мощности электронных устройств за счёт увеличения плотности транзисторов, квантовые вычисления позволяют осуществлять операции принципиально невозможные для классического компьютера [2]. Кроме того, открытие квантовых битов привело к созданию области квантовой криптографии, с помощью методов которой в скором времени множество классических методов шифрования информации станут неактуальными [3]. Параллельно с этим шёл процесс увеличения качества и удешевления цены датчиков физических полей, которые с успехом внедрялись во множество современных технологических устройств, научное оборудование и военные разработки [4]. Новые объекты, подходящие на роль квантовых битов (кубитов), нашли свое применение и в области квантовой сенсорики, благодаря своим фундаментальным свойствам и прямой связи с макроскопическими параметрами окружения.

В числе многообещающих кандидатов на роль кубитов – оптически активные центры окраски в твердых телах. Электронные спины центров окраски могут служить наноразмерными квантовыми сенсорами, а при помощи ядерных спинов возможно осуществлять хранение спинового состояния и осуществлять взаимное квантовое запутывание кубитов, необходимое для протоколов квантовых вычислений и криптографии. Если совместить эти возможности с эффективным спин-фотонным интерфейсом, они смогут

обеспечить быстрые оптические манипуляции спиновым состоянием, запутывание множества спиновых систем на большом расстоянии и реализацию квантовых сетей.

В ходе исследований были обнаружены системы, обладающими множеством подходящих характеристик для использования в качестве кубитов. Среди них – NV-центр в алмазе, вакансия кремния в алмазе, дивакансии в карбиде кремния. Однако все эти системы не могут выполнить все требования для надежной работы кубитов. В частности, их спиновая система сильно зависит от внешнего электрического поля. И среди таких систем в выгодном свете предстают вакансионные центры кремния в гексагональном карбиде кремния, или V_{Si} -центры, исследованию которых посвящена данная работа.

Цель исследования

В ходе выполнения работы необходимо было провести серию экспериментальных исследований гексагональных политипов карбида кремния и гетероструктур на его основе, содержащих V_{Si} -центры, и установить зависимость спиновых центров от механических напряжений, определить их оптические свойства, а также особенности поведения спиновой системы при низких температурах.

Научная новизна и практическая значимость

В работе впервые было исследовано распределение механических напряжений на интерфейсе гетероструктур AlN/4H-SiC и AlN/6H-SiC с субмикронным пространственным разрешением и обнаружены механические напряжения на интерфейсе вплоть до 1,7 ГПа, а также предложена модель их образования.

В работе впервые установлена зависимость расщепления в нулевом магнитном поле спиновой системы V_{Si} -центров в карбиде кремния 4H-SiC и 6H-SiC от статических механических напряжений и предложена

теоретическая модель связи спинового Гамильтониана с механическими напряжениями.

Для 6H-SiC впервые была установлена поляризация излучения V_{Si} -центров, а также направление преимущественного излучения и сделаны теоретические выводы о структуре возбужденного состояния и энергетическом порядке расположения спиновых подуровней для разных V_{Si} -центров.

Было обнаружено критическое температурное поведение V_{Si} -центров в 6H-SiC в окрестности критической температуры $T_c = 16$ К, а также предложены причины такого поведения. Кроме того, была продемонстрирована слабая зависимости неоднородного времени спин-спиновой релаксации V_{Si} -центров в 6H-SiC от температуры.

Полученные результаты раскрывают потенциал для использования V_{Si} -центров в карбиде кремния 4H-SiC и 6H-SiC в качестве кубитов и квантовых сенсоров. Демонстрируется зависимость V_{Si} -центров от механических напряжений, что позволяет учесть дрейф их спиновых свойств при промышленном производстве, а также использовать механические напряжения для управления и настройки спинового состояния V_{Si} -центров. Исследования оптических свойств позволяет сделать вывод о структуре возбужденного состояния, что является ключевой информацией для определения полной картины оптического цикла накачки и релаксации, а также позволяет выбрать спиновые центры, наиболее подходящие для использования в планарных фотонных кристаллах. Критическое температурное поведение V_{Si} -центров в 6H-SiC является ключевым фактором для точного понимания механизма оптического выстраивания спиновых подуровней. Кроме того, распределение механических напряжений на интерфейсе гетероструктур AlN/4H-SiC и AlN/6H-SiC представляет интерес для улучшения процессов роста больших монокристаллов AlN на подложках SiC.

Аппробация результатов

Результаты исследования были представлены на всероссийских и международных конференциях:

1. «Оптическая квантовая термометрия и магнитометрия, основанная на антипересечении и кросс релаксации спиновых центров окраски в карбиде кремния», постерный доклад, международная конференция «Физика.Спб», Санкт-Петербург, Россия, 23.10.2018 – 25.10.2018
2. «Спектроскопия анти-пересечения и кросс-релаксации в кристаллах карбида кремния и её применение в квантовой термометрии и магнитометрии», устная презентация, 2ое место за лучший доклад, XX Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, Санкт-Петербург, Россия, 26.11.2018 – 30.11.2018
3. «Оптически детектируемый магнитный резонанс без приложения СВЧ поля на спиновых центрах окраски в кристаллах карбида кремния и его применение для измерения температуры», устный доклад, Международная зимняя школа по физике полупроводников, Санкт-Петербург, Россия, 28.02.2019-04.03.2019
4. «Physical Foundations of Submicron Quantum Probing of Magnetic Fields and Temperatures with Application of Spin Centers in SiC», устный доклад, International conference on quantum optics and quantum information, Minsk, Belarus, 13.05.2019-17.05.2019
5. "Raman scattering in AlN crystals grown on SiC and AlN substrates by sublimation method", постерный доклад, 4th International Workshop on Ultraviolet Materials and Devices, St. Petersburg, Russia, 08.09.19-13.09.19
6. «Квантовые сенсоры температуры на основе спиновых центров окраски в SiC», постерный доклад, Третья международная конференция «Физика — наукам о жизни», Санкт-Петербург, 14.10.19–18.10.19
7. «Оптическая конфокальная спектроскопия SiC и AlN методом комбинационного рассеяния света и оптически детектируемого магнитного резонанса», постерный доклад, международная

конференция «Физика.Спб», Санкт-Петербург, Россия, 22.10.2019 – 24.10.2019

8. «Исследование механических напряжений в области интерфейса в гетероструктурах AlN/SiC методами КРС и ОДМР», XXV международный симпозиум «Нанопизика и нанозлектроника», Нижний Новгород, Россия, 9.03.2021-12.03.2021, стендовый доклад
9. Бреев И.Д., Лихачев К.В., Яковлева В.В., Баранов П.Г., Анисимов А.Н., «Спиновые особенности оптически активных центров в карбиде кремния (SiC) и гетероструктурах на его основе», 2-я конференция Физика конденсированных состояний, Черноголовка, Россия, 31.05.2021-04.06-2021, устный доклад
10. «Исследование воздействия механических напряжений в области интерфейса в гетероструктурах AlN/SiC на спиновые свойства VSi-центров.», международная конференция Физика.СПб 2021, Санкт-Петербург, Россия, 18.10.2021-22.10.2021, стендовый доклад
11. «Investigation of SiC nanoparticles with V-centers using PL scanning and ODMR», международная конференция Metanano 2021, онлайн, 13.09.21-17.09.21, стендовый доклад

Публикации

Список работ, опубликованных в ходе исследований в рецензируемых журналах:

1. Anisimov A.N., Soltamov V.A., Breev I.D. et al. «All-optical quantum thermometry based on spin-level cross-relaxation and multicenter entanglement under ambient conditions in SiC», AIP Advances 8, 085304 (2018)
2. Анисимов А.Н., Солтамов В.А., Бреев И.Д. и др. «Физические основы применения сканирующего зонда со спиновыми центрами в SiC для субмикронного квантового зондирования магнитных полей и температур», Письма в ЖЭТФ, том 108, вып. 9, с. 643 – 649, 2018 г.

3. Бреев И.Д., Анисимов А.Н., Вольфсон А.А., Казарова О.П., Мохов Е.Н., «Комбинационное рассеяние света в кристаллах AlN, выращенных методом сублимации на затравках SiC и AlN», Физика и техника полупроводников, том 53, вып. 11, 1593-96(2019)
4. Анисимов А.Н., Бабунц Р.А., Бреев И.Д., Бундакова А.П., Ильин И.В., Музафарова М.В., Баранов П.Г., «Сканирующий оптический квантовый магнитометр, основанный на явлении выжигания провалов», Письма в ЖТФ, том 45, вып. 10, 22-26(2019)
5. Breev I.D., Anisimov A.N., Baranov P.G., Mokhov E.N., « Optical confocal spectroscopy of SiC and AlN interfaces using Raman scattering and Optically Detected Magnetic Resonance», Journal of Physics Conference Series, 1400, 6 (2019)
6. Breev I.D., Anisimov A.N., Babunts R.A., Baranov P.G., « Optically Detected Magnetic Resonance Spectroscopy in Silicon Carbide using Temperature Sweep», Journal of Applied Spectroscopy, 87, 1, 25-28(2020)
7. Анисимов А.Н., Бабунц Р.А., Бреев И.Д. и др., «Высокотемпературные спиновые манипуляции на центрах окраски в ромбическом полилите карбида кремния 21R-SiC», Письма ЖЭТФ, т.112, 12, 813-819(2020)
8. Бреев И.Д., Яковлева В.Д., Кудрявцев О.С., Баранов П.Г., Мохов Е.Н., Анисимов А.Н., «Спектроскопия комбинационного рассеяния, инфракрасного поглощения и люминесценции нитрида алюминия, легированного бериллием», ФТП, т. 55, в. 3, с. 251 (2021)
9. Титков С.В., Яковлева В.В., Бреев И.Д., Анисимов А.Н., Баранов П.Г., Дорофеева А.И., Бортников Н.С., «Распределение азотно-вакансионных центров NV- в кубических кристаллах алмаза из россыпей анабара по данным ОДМР- и ФЛ-томографии», Доклады РАН. Науки о Земле, т. 496, в. 1, с. 45 (2021)
10. Breev I.D., Likhachev K.V., Yakovleva V.V., Hubner R., Astakhov G.V., Baranov P.G., Mokhov E.N., Anisimov A.N., «Stress distribution at the

- AlN/SiC heterointerface probed by Raman spectroscopy», *Journal of Applied Physics* 129, iss. 5, #055304 (2021)
11. Нагалюк С.С., Мохов Е.Н., Казарова О.П., Бер Б.Я., Анисимов А.А., Бреев И.Д., «Возникновение зеленой окраски в кристаллах AlN, выращенных на затравках SiC», *ФТП*, т.55, 6, 513-517 (2021)
 12. Singh H., Anisimov A.N., Breev I.D., Baranov P.G., Suter D., «Optical spin initialization of spin-3/2 silicon vacancy centers in 6H-SiC at room temperature», *Physical review. B, Condensed matter* 103(10):104103 (2021)
 13. Breev I.D., Poshakinskiy A.V., Yakovleva V.V., Nagalyuk S.S., Mokhov E.N., Hubner R., Astakhov G.V., Baranov P.G., Anisimov A.N., «Stress-controlled zero-field spin splitting in silicon carbide», *Appl. Phys. Lett.* 118, 084003 (2021)
 14. Р.А. Бабунц, А.Н. Анисимов, И.Д. Бреев, А.С. Гурин, А.П. Бундакова, М.В. Музафарова, Е.Н. Мохов, П.Г. Баранов, «Полностью оптическая регистрация сверхтонких электронно-ядерных взаимодействий в спиновых центрах в кристаллах 6H-SiC с модифицированным изотопным составом ^{13}C », *Письма в ЖЭТФ* 114, вып. 8, 533 – 540 (2021)
 15. V.A. Soltamov, B.V. Yavkin, G.V. Mamin, S.B. Orlinskii, I.D. Breev, A.P. Bundakova, R.A. Babunts, A.N. Anisimov, P.G. Baranov, «Electron nuclear interactions in spin-3/2 color centers in silicon carbide: A high-field pulse EPR and ENDOR study», *Phys. Rev. B* 104, iss. 12, #125205 (2021)
 16. И.Д. Бреев, К.В. Лихачев, В.В. Яковлева, И.П. Вейшторг, А.М. Скоморохов, С.С. Нагалюк, Е.Н. Мохов, Г.В. Астахов, П.Г. Баранов, А.Н. Анисимов, «Влияние механических напряжений на расщепление спиновых подуровней в 4H-SiC», *Письма в ЖЭТФ* 114, вып. 5, 323-327 (2021)
 17. Breev I.D., Shang Z., Poshakinskiy A.V. et. Al., «Inverted fine structure of a 6H-SiC qubit enabling robust spin-photon interface», *npj Quantum Inf.*, v.8, 1, 23 (2022)

Содержание работы

Распределение механических напряжений на гетероинтерфейсе AlN/SiC исследуемое спектроскопией КРС

В последние годы, исследование широкозонных полупроводниковых гетероструктур (AlN, SiC) с разными показателями преломления представляет интерес для приборов силовой электроники [5], и фотонных кристаллов в ультрафиолетовом спектральном диапазоне [6]. Для таких задач, крайне важным является понимание интерфейсов между материалами, выращенных в разных условиях.

Более того, SiC может являться носителем спиновых кубитов [7], в частности V_{Si} -центров [8], которые представляют большой интерес для спинтроники и квантовых технологий. Параметры таких спиновых кубитов, включая расщепление в нулевом поле и положение нуль фононной линии (НФЛ) неоднородно уширены из-за локальных изменений деформаций кристалла SiC и локального заряда [9, 10]. Так как AlN является сильным пьезоэлектрическим материалом, с помощью него возможно локально контролировать деформацию на гетероинтерфейсе AlN/SiC, с помощью приложения электрического напряжения.

Было изучено поведение пиков комбинационного рассеяния света (КРС) в 4H-SiC поперёк гетероинтерфейса и по всей глубине слоя 4H-SiC в 4 различных геометриях комбинационного рассеяния света (КРС). Больше всего нас интересовал диапазон поперечных оптических (ТО) фононных мод 760-810 см^{-1} . На Рис. 1 (а), спектры КРС слоя 4H-SiC, включенного в гетероструктуру 4H-SiC/AlN показаны для 4 геометрий КРС: $Y(X; X)\bar{Y}$ (черная пунктирная линия с 1 точкой), $Y(X; Z)\bar{Y}$ (красная пунктирная линия), $Y(Z; Z)\bar{Y}$ (зеленая пунктирная линия с двумя точками) и $Y(Z; X)\bar{Y}$ (синяя сплошная линия), где есть три фононные моды КРС в диапазоне ТО: E_2 ТО (x

$= 1/2$), A_1 TO ($x = 1$), и E_1 TO ($x = 0$). Была проведена аппроксимация пиков КРС 4Н-SiC в диапазоне ТО функцией Фогта. На Рис. 1 (b) – (d) изображены положения пиков КРС для гетероструктуры AlN/4Н-SiC в 4 геометриях КРС.

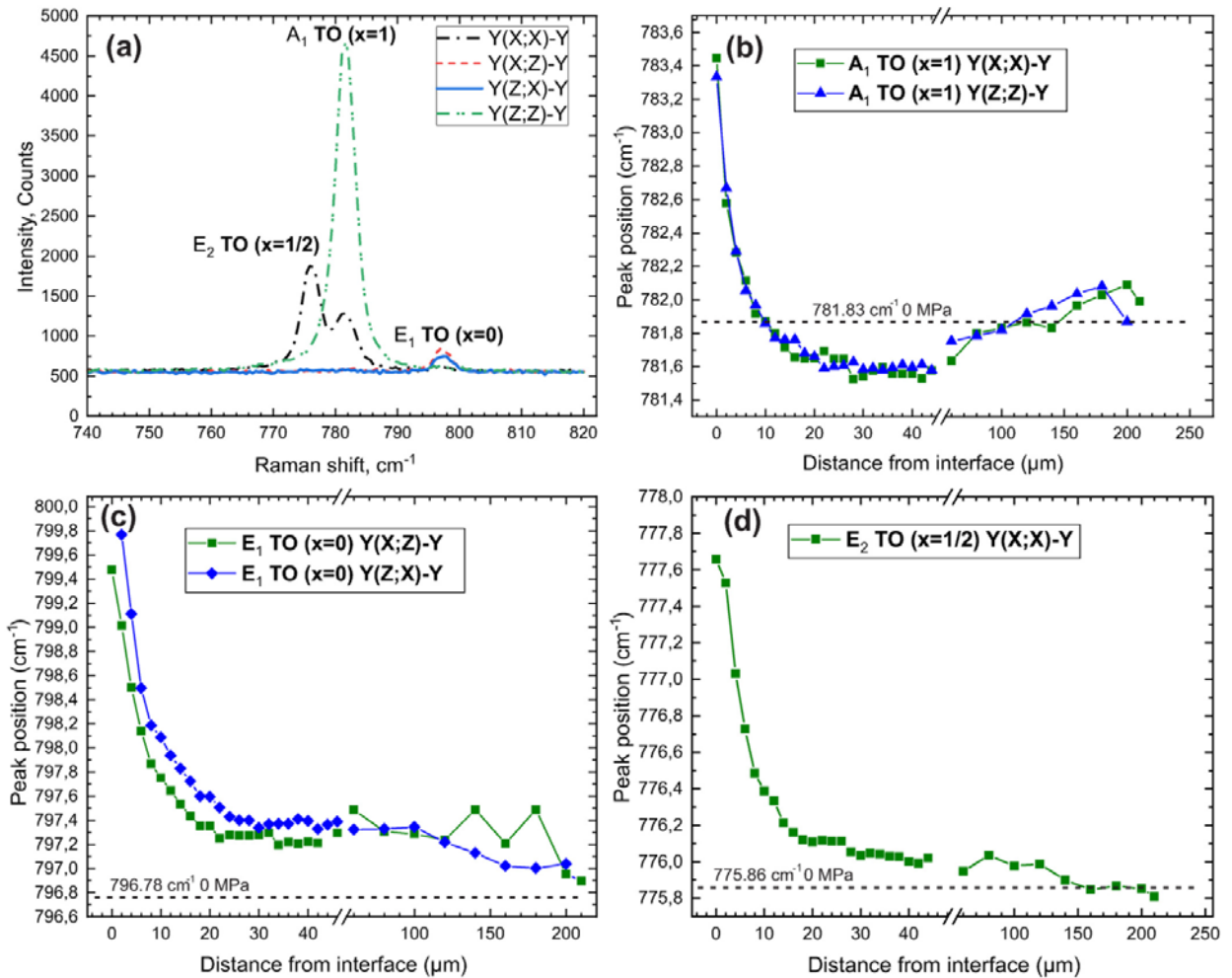


Рис. 1. (a) Спектры КРС для 4Н-SiC включенного в гетероструктуру AlN/4Н-SiC в 4 геометриях рассеяния КРС изображенных разными цветами. Соответствующие фоннные моды показаны для каждого пика КРС. (b)-(d) Поведение пиков КРС поперёк интерфейса и по всей глубине слоя 4Н-SiC для фоннных мод (b) A_1 TO ($x = 1$), (c) E_1 TO ($x = 0$), и (d) E_2 TO ($x = 1/2$).

В похожем ключе, было исследовано поведение пиков КРС в 6Н-SiC поперёк гетероинтерфейса AlN/6Н-SiC и по всей глубине слоя 6Н-SiC в 4 разных геометриях рассеяния КРС. На Рис. 2 (a), показаны спектры КРС слоя 6Н-SiC для 4 геометрий рассеяния: $Y(X;X)\bar{Y}$ (черная пунктирная линия с 1 точкой), $Y(X;Z)\bar{Y}$ (красная пунктирная линия), $Y(Z;Z)\bar{Y}$ (синяя пунктирная линия с

двумя точками) и $Y(Z;X)\bar{Y}$ (зеленая сплошная линия). Активность разных фоновых мод в разных геометриях рассеяния показана в таблице внутри графика, она определяется правилами поляризации КРС для кристаллографической симметрии C_{6v}^4 в 6H-SiC [11]. Наблюдается 4 фоновые моды КРС в диапазоне ТО: E_2 ТО ($x = 1$), E_2 ТО ($x = 1/3$), A_1 ТО ($x = 0$), и E_1 ТО ($x = 0$). Как и для 4H-SiC, значения положений пиков КРС были получены для ненапряженного кристалла 6H-SiC, они показаны черными пунктирными линиями на Рис. 2 (b)-(d). Также, были получены спектры КРС 6H-SiC поперек гетероинтерфейса и по всей глубине слоя 6H-SiC. Затем, была проведена процедура аппроксимации пиков КРС 6H-SiC функцией Фогта. На Рис. 2 представлены исследования поведения пиков КРС 6H-SiC в гетероструктуре AlN/6H-SiC для 4 геометрий рассеяния (Рис. 2 (b)–(d)).

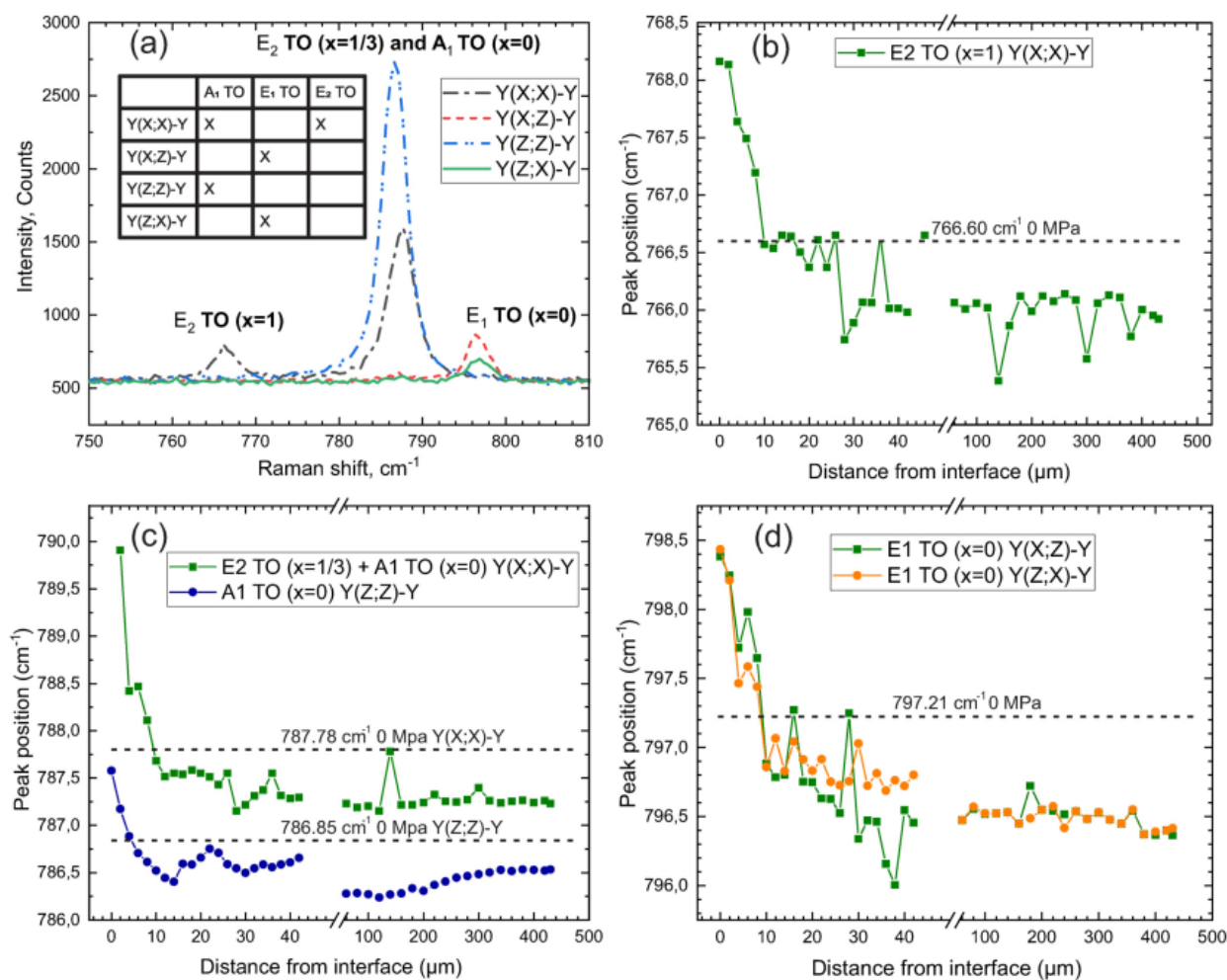


Рис. 2. (а) Спектры КРС для 6Н-SiC включенного в гетероструктуру AlN/6Н-SiC в 4 геометриях рассеяния КРС. Активность фоновых мод в разных геометриях показана в таблице на вставке. Соответствующие фоновые моды показаны для каждого пика КРС. (b)-(d) Поведение пиков КРС поперёк интерфейса и по всей глубине слоя 6Н-SiC для фоновых мод (b) E_2 TO ($x = 1$), (c) дважды вырожденного 788 cm^{-1} пика, состоящего из фоновых мод E_2 TO ($x = 1/3$) и A_1 TO ($x = 0$), и (d) E_1 TO ($x = 0$).

Были зарегистрированы спектры КРС в слое AlN в геометрии рассеяния X(Y)-X. Цветными линиями изображена аппроксимация пиков КРС функцией Фогта для определения их параметров. На Рис. 3 представлен анализ положения и полуширины пика КРС фоновой моды E_2 high в зависимости от расстояния до интерфейса по всей глубине слоя AlN в гетероструктурах AlN/4H-SiC и AlN/6H-SiC.

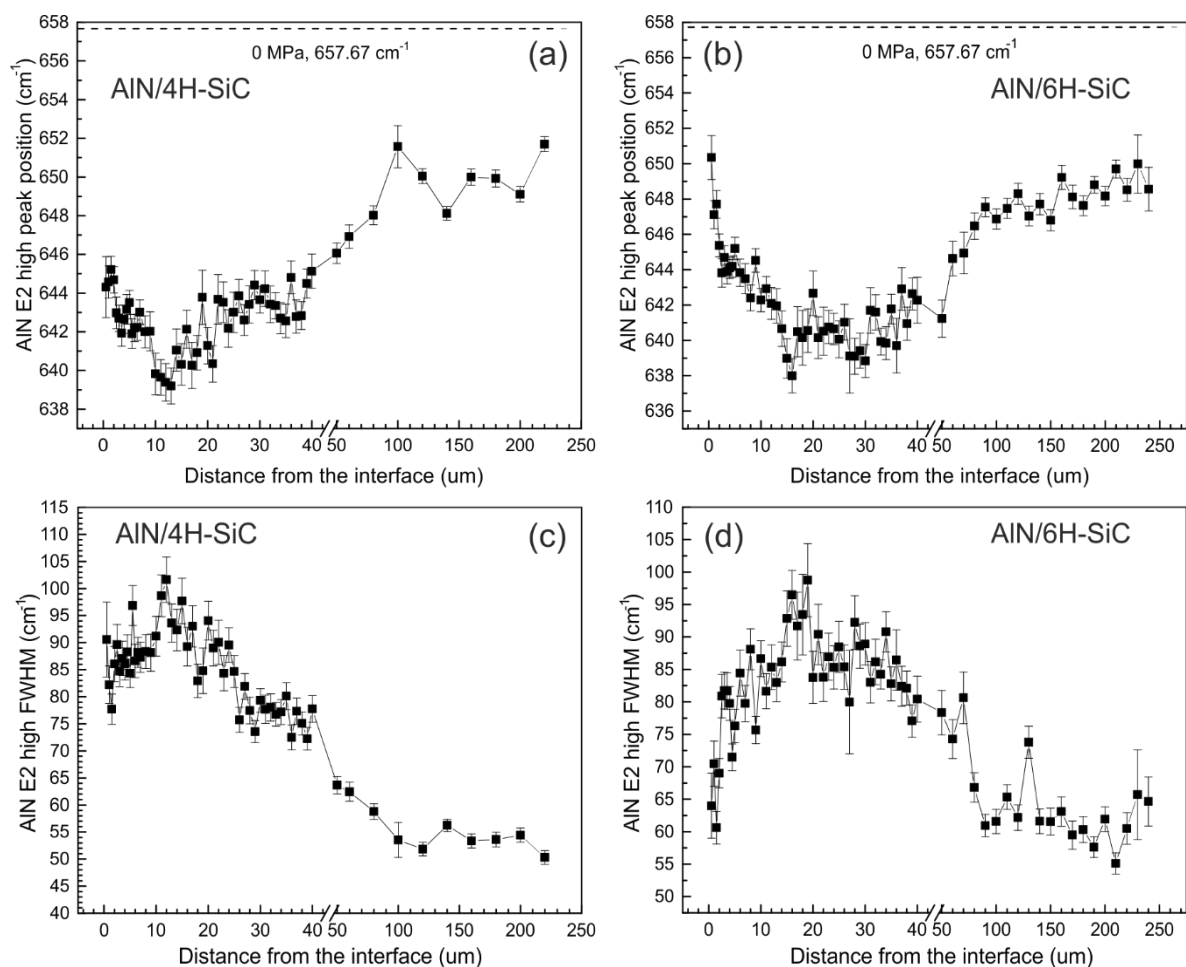


Рис. 3. Исследования пиков КРС в слоях AlN в гетероструктурах AlN/4H-SiC и AlN/6H-SiC. Положение пика фонной моды E_2 high AlN в зависимости от расстояния до интерфейса в гетероструктуре (a) AlN/4H-SiC (b) AlN/6H-SiC. Величина полуширины пика фонной моды E_2 high AlN в зависимости от расстояния до интерфейса в гетероструктуре (a) AlN/4H-SiC (b) AlN/6H-SiC.

Итоговая оценка компоненты тензора напряжений $\sigma_{in-plane}$ изображена на Рис. 4 (b). На вставке показаны спектры КРС в 6H-SiC, изображающие сдвиг пиков у интерфейса и в глубине. Максимальная величина компоненты тензора механических напряжений $\sigma_{in-plane}$ в слое 6H-SiC около интерфейса составляет около -800 Мпа и спадает в e раз на расстоянии примерно 4 мкм от интерфейса, что было вычислено по аппроксимации экспонентой.

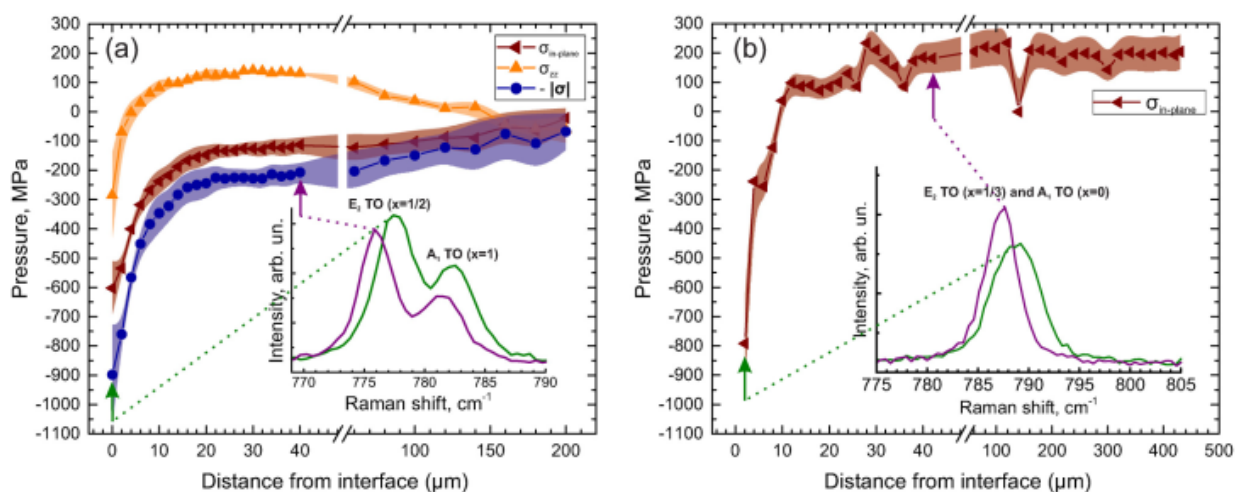


Рис. 4. (a) Распределение величины компонент тензора механических напряжений $\sigma_{in-plane}$ (бордовые треугольники), σ_{zz} (оранжевые треугольники), и распределение отрицательного модуля тензора напряжений $-|\sigma|$ (темно синие круги) вдоль всей глубины слоя 4H-SiC в гетероструктуре AlN/4H-SiC с диапазонами ошибки, изображенными как закрашенные цвета области на заднем плане. На вставке показаны спектры КРС в слое 4H-SiC у интерфейса и в глубине. (b) Распределение компоненты тензора механических напряжений $\sigma_{in-plane}$ (бордовые треугольники) вдоль всей глубины слоя 6H-SiC в гетероструктуре AlN/6H-SiC с диапазонами ошибки,

изображенными как закрашенные светло-бордовым цветом области на заднем плане. На вставке показаны спектры КРС в слое 6H-SiC у интерфейса и в глубине.

Используя тензор эластических констант \mathbf{C} и компоненты тензора напряжений для слоя 4H-SiC в гетероструктуре AlN/4H-SiC из Рис. 4 (а), мы вычислили $\epsilon_{in-plane}$ и ϵ_{zz} .

Результаты этих вычислений представлены на Рис. 5 для компонент тензора деформаций $\epsilon_{in-plane}$ (бордовые треугольники) и ϵ_{zz} (оранжевые треугольники) вместе с диапазонами ошибки, изображенными цветными областями на заднем фоне.

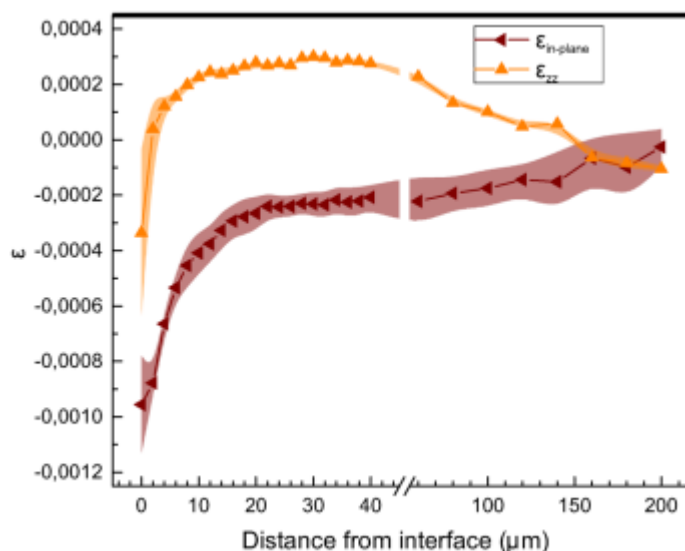


Рис. 5. Эволюция компонент тензора деформации $\epsilon_{in-plane} = \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ (бордовые треугольники) и ϵ_{zz} (оранжевые треугольники) с расстоянием от интерфейса AlN/4H-SiC в слое 4H-SiC, вычисленные по компонентам тензора механических напряжений.

Влияние механических напряжений на расщепление спиновых подуровней в SiC

Вакансионные центры кремния V_{Si} -центры в объемном и нанокристаллическом карбиде кремния являются перспективными для квантовой обработки информации [12], нанофотоники [13], и сенсорики [14]

из-за того, что демонстрируют длинные времена когерентности [13], высокий контраст считывания [15] и высокую спектральную стабильность [16] и могут представлять основу для реализации квантовых повторителей [17, 18]. Для квантовых сенсоров и телекоммуникаций необходима возможность тонкой настройки спиновых и оптических свойств V_{Si} -центров. Самый часто употребляемый подход основан на использовании Штарковского сдвига нуль-фононной линии (НФЛ) и расщепления в нулевом поле [19, 20].

В данной главе было показано экспериментально влияние механических напряжений в кристаллах SiC на спиновые свойства V_{Si} -центров, а именно на величину расщепления в нулевом поле в основном и возбужденном состояниях, а также была построена теоретическая модель связи этих параметров.

На Рис. 6 (а) и 6 (с) изображены спектры оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР), полученные при комнатной температуре на расстоянии 20 мкм от гетероинтерфейса AlN/6H-SiC и прямо на нём, соответственно. Мы можем ясно видеть два пика, обозначенные как $V1/V3$ и $V2$, которые относят к V_{Si} -центрам с разным кристаллографическим окружением [21]. Мы отмечаем, что хотя пик $V1/V3$ может быть связан с разными V_{Si} -центрами, они не могут быть различены в спектрах ОДМР. Спектральное положение пика ОДМР в нулевом магнитном поле определяется константой расщепления в нулевом поле $\nu = 2|D|/h$ для соответствующего V_{Si} -центра. Чтобы найти положение пиков ОДМР и определить $2|D|$ для каждого V_{Si} центра мы провели аппроксимацию функцией Гаусса, как показано на Рис. 6 (а) и 6 (с) сплошными линиями. На Рис. 6 (b) показана величина $2|D|$ для центров $V1/V3$ и $V2$ как функция расстояния от гетероинтерфейса. Мы также измерили независимо положения пиков ОДМР для центров $V1/V3$ и $V2$ в ненапряженном кристалле 6H-SiC (т.е. без слоя AlN) в таких же условиях, эти положения показаны вертикальными пунктирными линиями на Рис. 6.

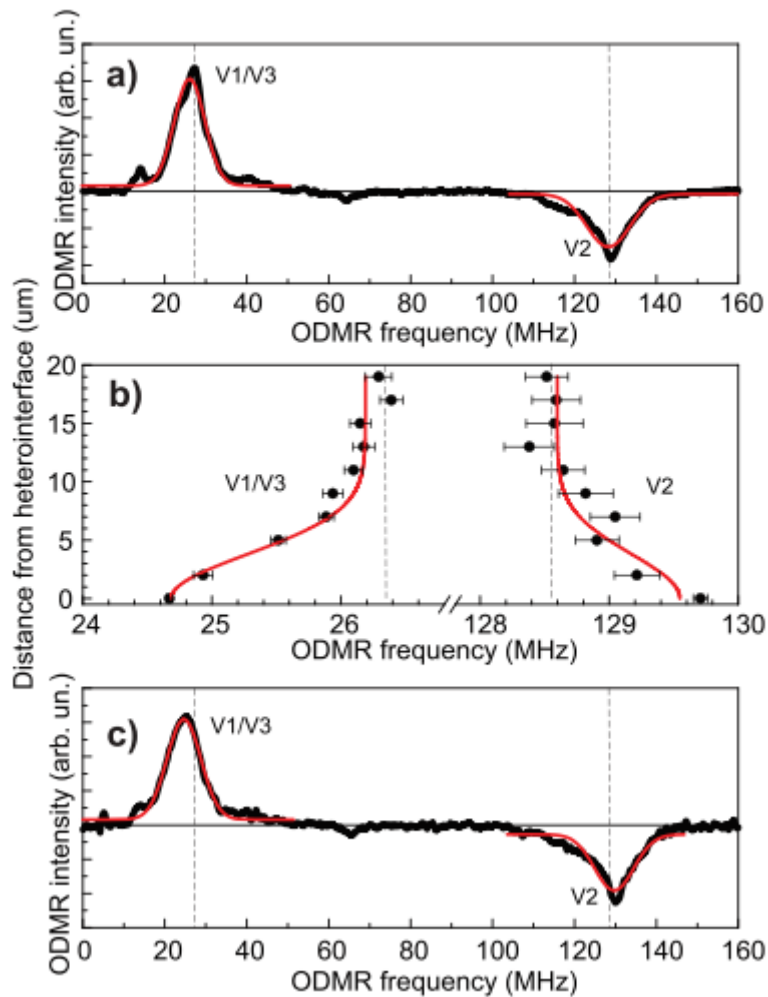


Рис. 6. (а) Спектр ОДМР 6H-SiC на расстоянии 20 мкм от гетероинтерфейса AlN/6H-SiC. (b) Символами показаны положения пиков ОДМР как функция расстояния от гетероинтерфейса. Пики ОДМР V1/V3 и V2 сдвинуты на -1,5 и 1,0 МГц, соответственно. Красная линия нарисована для наглядности. (с) Спектр ОДМР 6H-SiC на гетероинтерфейсе AlN/6H-SiC. Вертикальными пунктирными линиями показаны положения пиков ОДМР в ненапряженном кристалле 6H-SiC. Красными линиями в (а) и (с) показаны аппроксимационные функцией Гаусса экспериментальные данные.

На гетероинтерфейсе, пик ОДМР V1/V3 сдвинут в сторону меньших частот, в то время как пик ОДМР V2 сдвинут в сторону высоких частот по сравнению с значениями в ненапряженном кристалле 6H-SiC. Константы расщепления в нулевом поле для этих центров имеют противоположный знак [22]; он отрицательный для V1/V3 и положительный для V2 (Рис. 6).

Учитывая, что кристалл 6H-SiC сжат на гетероинтерфейсе (т.е. компоненты напряжений σ_{\parallel} и σ_{\perp} отрицательные), наблюдаемые сдвиги линий ОДМР соответствуют положительному изменению δD , вызванному деформацией. Мы определили константу спин-деформационного взаимодействия $\mathcal{E} = 0,75$ ГГц/деформация для V1/V3 центров и $\mathcal{E} = 0,5$ ГГц/деформация для V2 центров.

Были зарегистрированы спектры анти-пересечения уровней (АПУ) основных состояний V_{Si} -центров V3/V1 и V2 в гетероструктуре AlN/6H-SiC на интерфейсе и на расстоянии 20 мкм от интерфейса в слое 6H-SiC, они изображены на Рис. 7 точками черного и красного цветов, соответственно. Была проведена аппроксимация резонансных сигналов первой производной функции Гаусса, которая изображена черной и красной линиями на Рис. 7 для спектра АПУ на интерфейсе гетероструктуры и в глубине слоя 6H-SiC, соответственно. Был обнаружен сдвиг резонансных линий при приближении области регистрации спектра к интерфейсу, величина сдвигов показана на Рис. 7 у соответствующих им резонансных сигналов.

Также, впервые были получены спектры АПУ возбужденных состояний V_{Si} -центров V3/V1 и V2 в гетероструктуре AlN/6H-SiC на интерфейсе и на расстоянии 20 мкм от интерфейса в слое 6H-SiC, они изображены на Рис. 8 точками красного и черного цветов, соответственно. Была проведена аппроксимация резонансных сигналов первой производной функции Гаусса, которая изображена красной и черной линиями на Рис. 8 для спектра АПУ на интерфейсе гетероструктуры и в глубине слоя 6H-SiC, соответственно. Был обнаружен сдвиг резонансных линий при приближении области регистрации спектра к интерфейсу, величина сдвигов показана на Рис. 8 у соответствующих им резонансных сигналов.

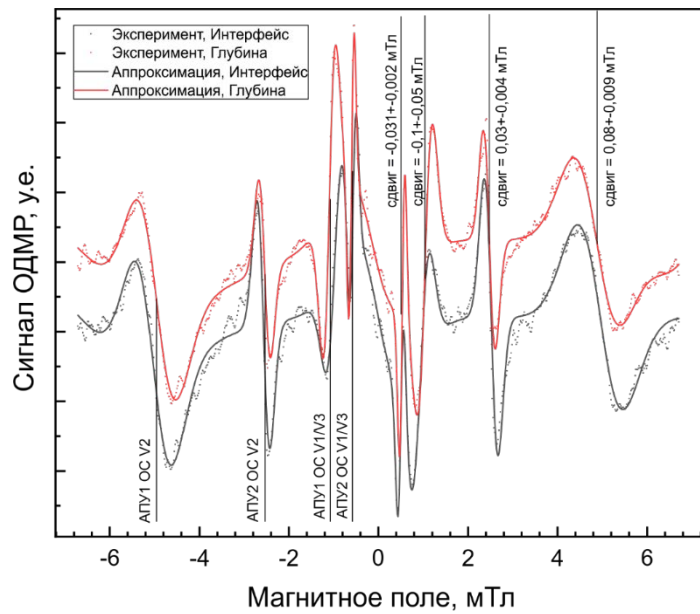


Рис. 7. Спектры АПУ основных состояний для слоя 6H-SiC в гетероструктуре AlN/6H-SiC в глубине (красным) и на интерфейсе (черным). Приведена аппроксимация спектров линиями соответствующих цветов. Для резонансных линий указано конкретное антипересечение и абсолютная величина сдвига.

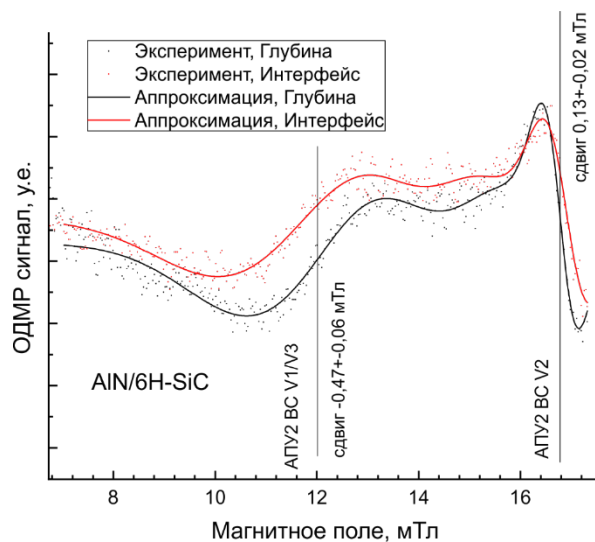


Рис. 8. Спектры АПУ возбужденных состояний для слоя 6H-SiC в гетероструктуре AlN/6H-SiC в глубине (черным) и на интерфейсе (красным). Приведена аппроксимация спектров линиями соответствующих цветов. Для резонансных линий указано конкретное антипересечение и абсолютная величина сдвига.

резонансных линий указано конкретное антипересечение и абсолютная величина сдвига.

Можно установить, что АПУ возбужденного состояния центров V1/V3 испытывает сдвиг в сторону меньших полей, эквивалентный изменению частоты резонанса ОДМР на -13 ± 2 МГц, а АПУ возбужденного состояния центра V2 испытывает сдвиг в сторону больших полей, эквивалентный изменению частоты резонанса ОДМР на $3,6 \pm 0,6$ МГц. Это является свидетельством противоположного знака расщепления в нулевом поле данных возбужденных состояний.

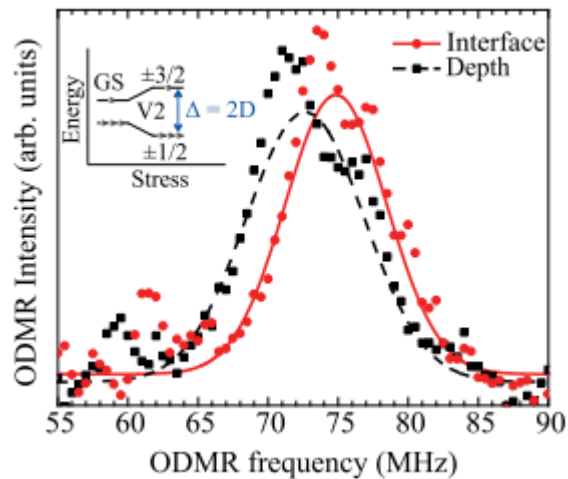


Рис. 9. Спектр ОДМР центра V2 в 4H-SiC вблизи гетерограницы. Красная линия – спектр, полученный на гетерогранице AlN/SiC; черная линия – спектр, полученный на расстоянии 25 мкм от гетерограницы AlN/SiC. Слева на вставке показано расщепление основного состояния спиновых подуровней V_{Si} в нулевом магнитном поле Δ . Регистрация спектров происходит при комнатной температуре.

На Рис. 9 изображены спектры ОДМР, зарегистрированные при комнатной температуре на гетерогранице AlN/4H-SiC и на расстоянии 25 мкм от нее. Положение резонанса, относящегося к вакансионным центрам V2 [21], определяется расщеплением спиновых подуровней в нулевом магнитном

поле $\nu = |\Delta| / \hbar$. Для определения положения центра ОДМР резонанса была проведена аппроксимация функцией Гаусса.

Вблизи гетерограницы ОДМР резонанс центра V2 сдвигается в область более высоких частот по сравнению с ОДМР резонансом на свободной поверхности 4H-SiC. Используя положение линии ОДМР и значений компонент тензора деформаций, были рассчитаны компоненты тензора спин-деформационного взаимодействия $E = -0.1 \pm 0.25$ ГГц/деформация, $E' = -0.8 \pm 0.15$ ГГц/деформация и $D_0 = 36 \pm 0.15$ МГц.

Исследование оптических свойств спиновых центров в 6H-SiC.

Поиск твердотельных платформ для интегральной квантовой фотоники со спиновыми кубитами приводит к кандидатуре V_{Si} -центров в карбиде кремния. Они демонстрирует привлекательные квантовые характеристики [10], могут использоваться как квантовые эмиттеры [23] и имеют крайне длинное время когерентности [24, 25]. Благодаря этому V_{Si} -центры могут быть органично интегрированы в фотонные структуры [26, 18] с налаженным спин-фотонным интерфейсом [27]. Помимо этого, были теоретически предложены схемы спин-фотонного запутывания, основывающиеся на тонкой структуре возбужденного состояния и спин-зависимом оптическом переходе в основное состояние [28], которые, однако, ещё не были практически реализованы. Для создания спин-фотонных систем на основе V_{Si} -центров необходимо знать их оптические свойства.

Была измерена ориентационная зависимость поляризации V_{Si} центра в 6H-SiC при комнатной температуре (Рис. 10). Фотолюминесценция (ФЛ), собранная с грани кристалла n, то есть, вдоль оси c, является неполяризованной (Рис. 10 (а)). В отличие от этого, ФЛ собранная грани кристалла m, то есть перпендикулярно оси c, является частично поляризованной вдоль оси c (Рис. 10 (б)). При комнатной температуре, излучение от разных V_{Si} -центров накладывается спектрально, и становится невозможно его различить. Чтобы разделить спектральные вклады от разных

V_{Si} -центров, мы используем спектроскопию с приложением микроволновой частоты [29]. На Рис. 10 (c) и (d) представлены ОДМР спектры с пиком при 28 МГц, соответствующим центру $V1/V3$ и отрицательный пик при 128 МГц, соответствующим центру $V2$ [10]. Излучение центра $V2$ $\Delta\PhiЛ/\PhiЛ$ явно линейно поляризовано, с вектором поляризации $e_z \parallel c$ (вставка на Рис. 10 (d)). Поляризация $V3/V1$ центров не может быть отделена при комнатной температуре и их суммарный вклад в $\Delta\PhiЛ/\PhiЛ$ предпочтительно поляризован вдоль перпендикулярного направления, с векторами поляризации $e_x, e_y \perp c$.

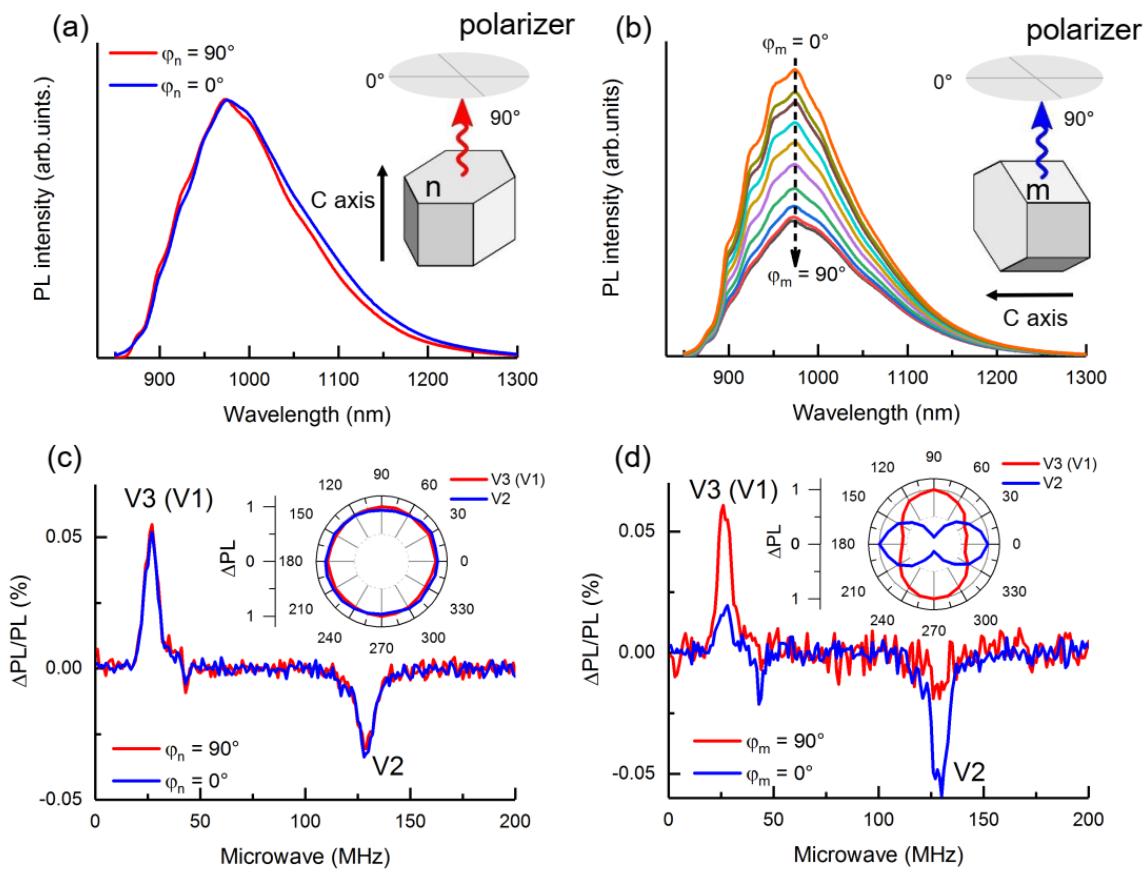


Рис. 10. Поляризационная зависимость ФЛ V_{Si} -центров в 6H-SiC при комнатной температуре. (a), (b) Спектры ФЛ V_{Si} -центров полученные со стороны n (перпендикулярно к оси c) и стороны m (параллельно оси c), соответственно, собранные через линейный поляризатор. На вставке изображена геометрия эксперимента и ориентация поляризатора. (c), (d) ОДМР спектры центров $V3(V1)$ и $V2$ при углах $\phi_{n,m} = 0^\circ$ (синяя линия) и $\phi_{n,m} = 90^\circ$ (красная линия) ориентации поляризатора. Вставка:

Нормированные графики в полярных координатах $\Delta\Phi_L(\varphi_{n,m})$ для стороны n (c) и стороны m (d), соответственно.

После вычитания фона, НФЛ центра V2 демонстрирует практически 100% поляризации с $e_z \parallel c$ (Рис. 11(c)). Аппроксимация даёт параметр степени поляризации $\cos 2\theta = 0.96$ ($\theta = 8^\circ \approx 0^\circ$). НФЛ центра V3 ортогонально поляризован $e_x, e_y \perp c$ с небольшим, но не исчезающим вкладом $e_z \parallel c$ (Рис. 11(d)). Аппроксимация даёт $\cos 2\theta = -0.89$ ($\theta = 76^\circ \approx 90^\circ$). Мы убедились, что наблюдаемая поляризация ФЛ не зависит от поляризации возбуждающего лазера (сплошные и полые символы на Рис. 11 (b-d)). Более того, мы наблюдаем практически такие же угловые зависимости при $t = 100$ К, что обозначает, что они не связаны с термической населенностью в возбужденном состоянии (ВС), что таким образом указывает на собственные свойства соответствующих V_{Si} -центров.

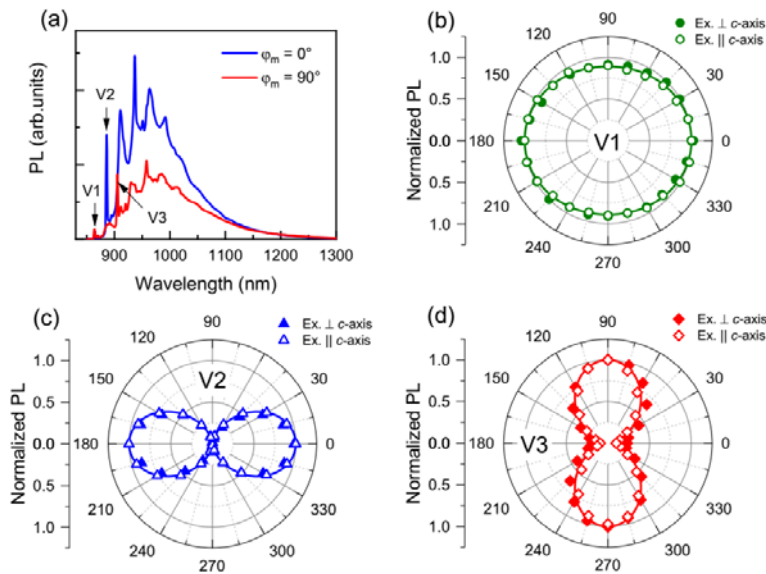


Рис. 11. Поляризационные зависимости НФЛ V_{Si} центров в 6H-SiC при $T = 15$ К. (a) ФЛ спектры, полученные со стороны m при углах поляризатора $\varphi_m = 0^\circ$ (синяя линия) и $\varphi_m = 90^\circ$ (красная линия) относительно оси c. (b), (c), (d) Поляризационные зависимости интенсивностей НФЛ центров V1, V2 и V3 в полярных координатах, соответственно. Сплошные и полые символы – экспериментальные данные для поляризации возбуждающего

излучения перпендикулярной и параллельной оси c . Сплошные линии – аппроксимация формулой (4.1) с параметром $\cos 2\theta$ равным 0.06, 0.96 и -0.89 для НФЛ центров V1, V2 и V3, соответственно.

Температурная зависимость свойств V_{Si} -центров

V_{Si} -центры в карбиде кремния считаются одними из самых перспективных кандидатов для внедрения в материальную базу квантовой информатики, так как они демонстрируют долгие времена когерентности при температуре вплоть до комнатной [10].

В этой главе было исследовано температурное поведение V_{Si} -центров в 6H-SiC при помощи метода спектроскопии анти-пересечения уровней и ЭПР, а также был проведен анализ времен когерентности при разных температурах.

На Рисунке 5.1 показаны спектры анти-пересечения уровней V_{Si} -центров в 6H-SiC при двух температурах. Узкие резонансы АПУОС (анти-пересечения уровней основного состояния) в малых магнитных полях позволяют определить расщепление в нулевом поле $2D$ для основного состояния [30]. Более широкие резонансы АПУВС (анти-пересечения уровней возбужденного состояния) демонстрируют температурную зависимость и позволяют определить расщепление в нулевом поле $2D'$ для возбужденного состояния, а также линейный температурный коэффициент изменения расщепления $\beta = 2dD'/dT$ [31]. Все эти параметры представлены в таблице 1.

Таблица 1. Температурная зависимость расщепления в нулевом поле в основном ($2D$) и возбужденном ($2D'$) состояниях. Температурный сдвиг получен из $\beta = 2dD'/dT$ при комнатной температуре из АПУВС [31].

Центр	$2D$	$2D' @ 300 \text{ K}$	$\beta @ 300 \text{ K}$
V2	128 МГц	1050 МГц	-1,16 МГц/К
V3	-28 МГц	-350 МГц	0,84 МГц/К

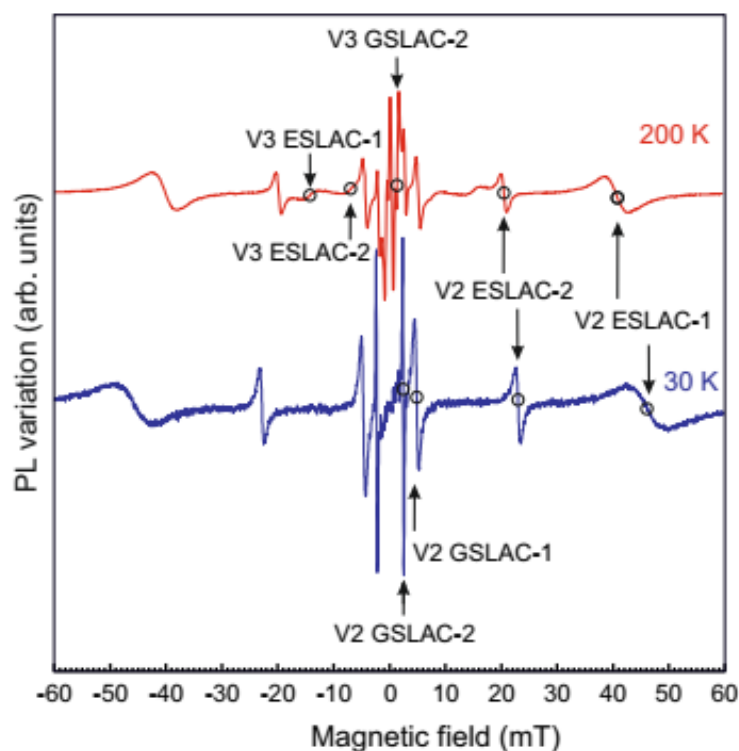


Рис. 12. Изменение интенсивности ФЛ с магнитным полем. Стрелки обозначают АПУОС и АПУВС для V3 (левая часть) и V2 (правая часть).

Следует отметить, что АПУВС центра V3 на Рис. 12 имеет небольшую амплитуду, но ясно наблюдается, несмотря на то, что квадруплет 4A_2 лежит энергетически выше, чем октуплет 4E из-за инвертированной структуры возбужденного состояния для V3. Возможной причиной такого поведения является то, что при нерезонансном возбуждении центры V3 находятся какое-то время в состоянии 4A_2 в процессе цикла возбуждения-релаксации [32].

Чтобы исследовать эффект температуры на спиновые свойства, мы зарегистрировали спектры ОДМР в диапазоне 5-300 К. На Рис. 13 представлены спектры ОДМР V_{Si} -центров в 6H-SiC в диапазоне температуры 5 – 25 К в окрестности критической температуры T_c для диапазона частот резонанса основного состояния центра V3 в 6H-SiC. По мере того, как температура спадает ниже 20 К сигнал ОДМР спадает, и форма резонансной

линии становится сильно асимметричной. Ниже 10 К резонанс снова принимает симметричную форму, но его знак становится отрицательным. При это интенсивность ФЛ (не показана) остаётся практически постоянной.

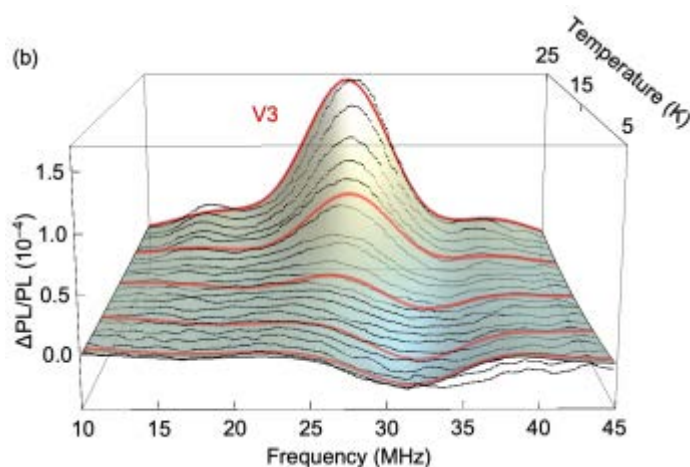


Рис. 13. Зависимость сигнала ОДМР от температуры. Температурное изменение сигнала ОДМР для центра V3 в 6H-SiC в окрестности критической температуры, где меняется знак сигнала. Точки – экспериментальные данные, поверхность и красные линии – результаты аппроксимации уравнением 16. Лучшие параметры аппроксимации $T_c = 16$ К и $\gamma = 1,4$ К/МГц.

Также были исследовано изменение спектров Электронного Парамагнитного Резонанса (ЭПР) в X-диапазоне центра V3 в 6H-SiC в окрестности критической температуры T_c , результаты изображены на Рис. 14. Наблюдается изменение положения резонанса центра V3 и изменение его фазы, а также усиление сигнала центральной линии с его уширением. Изменение фазы сигнала от центра V3 мы связываем с изменением цикла оптической накачки и релаксации, которое приводит к изменению предпочтительного направления оптического выстраивания центров в основном состоянии.

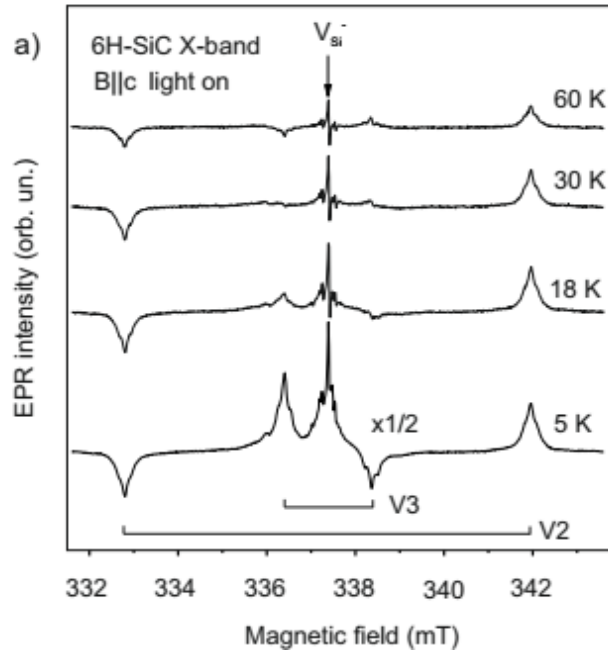


Рис. 14. (а) Температурная зависимость спектров ЭПР в X-диапазоне для семейства центров $S=3/2$ в 6H-SiC под оптическим возбуждением. Магнитное поле направлено вдоль оси c . Вертикальные линии показывают положение линий ЭПР центров V2 и V3(V1).

Для квантовых спин-фотонных приложений, важно продемонстрировать когерентный контроль центра V3 при низких температурах ниже T_c . На Рис. 15 показаны осцилляции Раби спина центра V3, которые записаны при оптимальном значении радиочастоты 32 МГц при $T = 5$ К с мощностью 26 Вт. Для сравнения мы измерили осцилляции Раби для спина центра V2, имеющего обычную структуру возбужденного состояния при такой же температуре. В этом случае мы использовали радиочастоту 128 МГц с мощностью 20 Вт, что соответствует спиновому резонансу V2. Экспериментальные данные хорошо аппроксимируются функцией

$$S_{MW}(\tau) - S_0(\tau) = A + B \cos(\omega\tau + \varphi) e^{-\tau/T_2^*}, \quad (5.4)$$

Где S_{MW} и S_0 – усредненные сигналы ФЛ, измеренные с и без приложения радиочастотного импульса, соответственно. Полученное время неоднородной спин-спиновой релаксации T_2^* составляет 219 ± 16 нс и 129 ± 20 для центров V2 и V3, соответственно. Эти величины похожи на ранее

обнаруженные значения для экспериментов при комнатной температуре в 6H-SiC [33], которые составляли 204,81 нс и 99,29 нс, соответственно.

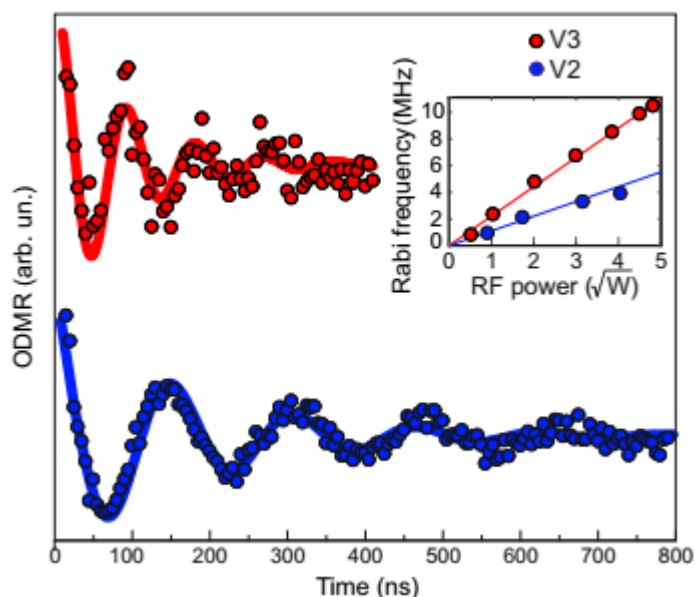


Рис. 15. Осцилляции Раби записанные при 5 К для центров V2 и V3 в 6H-SiC. Символами изображены экспериментальные данные, линии показывают аппроксимацию уравнением 5.4. Вставка: Частота осцилляций Раби в зависимости от мощности радиочастоты.

Заключение

В результате данной работы, проведенной за 4 года обучения в аспирантуре, были достигнуты следующие результаты:

1. Было исследовано распределение механических напряжений на интерфейсе гетероструктур AlN/4H-SiC и AlN/6H-SiC с субмикронным пространственным разрешением и обнаружены механические напряжения на интерфейсе вплоть до 1,7 ГПа, а также предложена модель их образования.
2. Была установлена зависимость расщепления в нулевом магнитном поле спиновой системы V_{Si} -центров в карбиде кремния 4H-SiC и 6H-SiC от статических механических напряжений и предложена теоретическая модель связи спинового Гамильтониана с механическими напряжениями.

3. Была исследована поляризация излучения V_{Si} -центров, а также направление преимущественного излучения и сделаны теоретические выводы о структуре возбужденного состояния и энергетическом порядке расположения спиновых подуровней для разных V_{Si} -центров.
4. Было обнаружено критическое температурное поведение V_{Si} -центров в 6H-SiC в окрестности критической температуры $T_c = 16$ К, а также предложены причины такого поведения. Кроме того, была продемонстрирована слабая зависимости неоднородного времени спин-спиновой релаксации V_{Si} -центров в 6H-SiC от температуры.

Полученные результаты демонстрируют многие уникальные характеристики V_{Si} -центров в карбиде кремния гексагональных политипов и гетероструктурах на его основе, которые являются ключевыми для их использования в качестве квантовых сенсоров и элементной базы квантовых технологий.

Список литературы

- [1] W. Mitchel, «The chips are down for Moore's law,» *Nature*, т. 530, № 7589, p. 144–147, 2016.
- [2] J. R. Weber, W. F. Koehl и J. B. Varley, «Quantum computing with defects,» *PNAS*, т. 107, № 19, pp. 8513-8518, 2010.
- [3] S. Pirandola, U. L. Andersen и L. Banchi, «Advances in quantum cryptography,» *Adv. Opt. Photon.*, т. 12, № 4, p. 1012–1236, 2020.
- [4] C. L. Degen, F. Reinhard и P. Cappellaro, «Quantum sensing,» *Reviews of Modern Physics*, т. 89, № 3, p. 035002, 2017.
- [5] E. A. Panyutin, S. S. Sharofidinov и Т. А. Orlova, «Biplanar epitaxial AlN/SiC/(n, p)SiC structures for high-temperature functional electronic

devices,» *Tech. Phys.*, т. 65, p. 428, 2020.

- [6] D. Néel, I. Roland и X. Checoury, «Aluminum nitride photonic crystals and microdiscs for ultra-violet nanophotonics,» *Adv. Nat. Sci. Nanosci. Nanotechnol.*, т. 5, p. 023001, 2014.
- [7] N. T. Son, C. P. Anderson и A. Bourassa, «Developing silicon carbide for quantum spintronics,» *Appl. Phys. Lett.*, т. 116, p. 190501, 2020.
- [8] H. Kraus, V. A. Soltamov и D. Riedel, «Room-temperature quantum microwave emitters based on spin defects in silicon carbide,» *Nat. Phys.*, т. 10, p. 157–162, 2014.
- [9] D. Riedel, F. Fuchs и H. Kraus, «Resonant addressing and manipulation of silicon vacancy qubits in silicon carbide,» *Phys. Rev. Lett.*, т. 109, p. 226402, 2012.
- [10] P. G. Baranov, A. P. Bundakova и A. A. Soltamova, «Silicon vacancy in SiC as a promising quantum system for single defect and single-photon spectroscopy,» *Phys. Rev. B*, т. 83, p. 125203, 2011.
- [11] M. I. Aroyo, J. M. Perez-Mato и D. Orobengoa, «Crystallography online: Bilbao crystallographic server,» *Bulg. Chem. Commun.*, т. 43, p. 183–197, 2011.
- [12] G. V. Astakhov и V. Dyakonov, *Defects in Advanced Electronic Materials and Novel Low Dimensional Structures. Defects for Quantum Information Processing in SiC*, Woodhead Publishing, 2018, p. 211–240.
- [13] D. M. Lukin, M. A. Guidry и J. Vuc̑kovic', «Integrated quantum photonics with silicon carbide: Challenges and prospects arXiv:2010.15700 (2020).,» *arXiv:2010.15700*, 2020.
- [14] S. A. Tarasenko, A. V. Poshakinskiy и D. Simin, «Spin and Optical Properties

of Silicon Vacancies in Silicon Carbide – A Review,» *Phys. Status Solidi B*, т. 255, p. 1700258, 2018.

- [15] R. Nagy, M. Widmann и M. Niethammer, «Quantum Properties of Dichroic Silicon Vacancies in Silicon Carbide,» *Phys. Rev. Appl.*, т. 9, p. 034022, 2018.
- [16] R. Nagy, M. Niethammer и M. Widmann, «High-fidelity spin and optical control of single silicon-vacancy centres in silicon carbide,» *Nat. Commun.*, т. 10, p. 1954, 2019.
- [17] N. Morioka, C. Babin и R. Nagy, «Spin-controlled generation of indistinguishable and distinguishable photons from silicon vacancy centres in silicon carbide,» *Nature Communications*, т. 11, p. 2516, 2020.
- [18] D. M. Lukin, C. Dory и M. A. Guidry, «4H-silicon-carbide-on-insulator for integrated quantum and nonlinear photonics,» *Nat. Photonics*, т. 14, p. 330, 2020.
- [19] A. L. Falk, P. V. Klimov и B. B. Buckley, «Electrically and Mechanically Tunable Electron Spins in Silicon Carbide Color Centers,» *Phys. Rev. Lett.*, т. 112, p. 187601, 2014.
- [20] D. M. Lukin, A. D. White и R. Trivedi, «Spectrally reconfigurable quantum emitters enabled by optimized fast modulation,» *npj Quantum Information*, т. 6, p. 80, 2020.
- [21] S. B. Orlinski, J. Schmidt и E. N. Mokhov, «Silicon and carbon vacancies in neutron-irradiated SiC: A high-field electron paramagnetic resonance study,» *Phys. Rev. B*, т. 67, p. 125207, 2003.
- [22] T. Biktagirov, W. G. Schmidt и U. Gerstmann, «Polytypism driven zero-field splitting of silicon vacancies in 6H-SiC,» *Phys. Rev. B*, т. 98, p. 195204, 2018.
- [23] H. Kraus, «Room-temperature quantum microwave emitters based on spin

defects in silicon carbide,» *Nat. Phys.*, т. 10, p. 157–162, 2014.

- [24] M. Widmann, «Coherent control of single spins in silicon carbide at room temperature,» *Nat. Mater.*, т. 14, p. 164–168, 2015.
- [25] V. A. Soltamov, «Excitation and coherent control of spin qubit modes in silicon carbide at room temperature,» *Nat. Commun.*, т. 10, p. 1678, 2019.
- [26] M. Radulaski, «Scalable Quantum Photonics with Single Color Centers in Silicon Carbide,» *Nano Lett.*, т. 17, p. 1782–1786, 2017.
- [27] P. Udvarhelyi, «Spectrally Stable Defect Qubits with no Inversion Symmetry for Robust Spin-To-Photon Interface,» *Phys. Rev. Appl.*, т. 11, p. 044022, 2019.
- [28] S. E. Economou и P. Dev, «Spin-photon entanglement interfaces in silicon carbide defect centers,» *Nanotechnology*, т. 27, p. 504001, 2016.
- [29] Z. Shang, «Microwave-Assisted Spectroscopy of Vacancy-Related Spin Centers in Hexagonal SiC,» *Phys. Rev. Appl.*, т. 15, p. 034059, 2021.
- [30] D. Simin, V. A. Soltamov и A. V. Poshakinskiy, «All-Optical dc Nanotesla Magnetometry Using Silicon Vacancy Fine Structure in Isotopically Purified Silicon Carbide,» *Phys. Rev. X*, т. 6, p. 031014, 2016.
- [31] A. N. Anisimov, D. Simin и V. A. Soltamov, «Optical thermometry based on level anticrossing in silicon carbide,» *Scientific Reports*, т. 6, p. 33301, 2016.
- [32] W. Dong, M. W. Doherty и S. E. Economou, «Spin polarization through intersystem crossing in the silicon vacancy of silicon carbide,» *Physical Review B*, т. 99, p. 184102, 2019.
- [33] S. Harpreet, A. N. Anisimov и S. S. Nagalyuk, «Experimental characterization of spin-3/2 silicon vacancy centers in 6H-SiC,» *PHYSICAL REVIEW B*, т. 101, p. 134110, 2020.

