

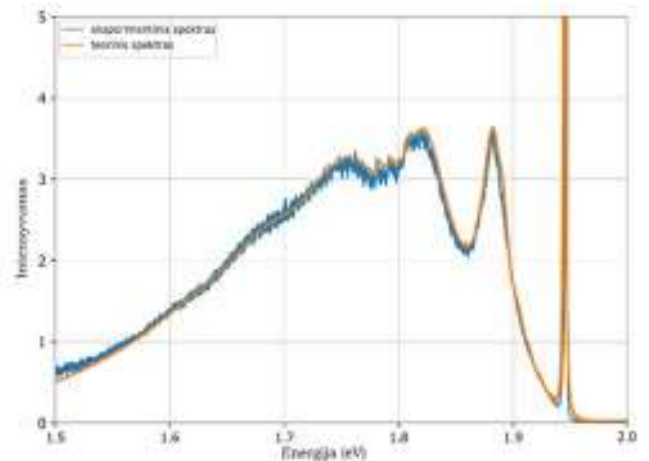
## DEFEKTŲ LIUMINESCENCIJOS LINIJOS MODELIAVIMAS *ab-initio* METODAIS

Lukas Razinkovas, Audrius Alkauskas

Fizinių ir technologijos mokslų centras, Fundamentinių tyrimų skyrius  
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: lukas.razinkovas@ftmc.lt

Šiuolaikiniai *ab-initio* teoriniai skaičiavimai leidžia suskaičiuoti atomų ir mažų molekulių optinius spektrus tikslumu, dažnai viršijančiu eksperimentinių spektrų rezoliuciją. Deja, to paties negalima pasakyti apie giliuosius kristalų defektus. Visų pirma dėl to, kad kristalo su defektu sistema yra daug didesnė, o tai lemia sudėtingesnius teorinius skaičiavimus. Taip pat iki šiol iš eksperimentinių spektrų pavyko tiksliai identifikuoti tik kelis giliuosius defektus. Vienas jų yra neigiamai įkrautas deimanto NV centras [1].

Šiame darbe vystoma tankio funkcionalo teorijos (angl. *Density Functional Theory*) skaičiavimais grįsta metodologija, leidžianti teoriškai nagrinėti tokių defektų optinius spektrus. Tiriant deimanto NV centrą, nustatyta, kad siekiant tiksliai aprašyti elektron-fononinę defekto sąveiką, reikia atlikti skaičiavimus didesnėse nei kelių tūkstančių atomų gardelėse. Tokios didelės gardelės konstravimui naudojama tarpatominių jėgų įterpimo metodologija [2]. Taip pat tyrimo metu nustatyta, kad Jahn-Teller aktyvios  $e$  simetrijos modos turi įtakos suskaičiuotų spektrų pavidalui ir jų sąveika su elektronine sistema nesiredukuoja į vienos efektyvios modos modelį. Tuo tikslu sukurta aproksimacinė schema, kurios pagalba tolydus kristalo išsigimusių modų spektras redukuojamas į kelių efektyvių modų sistemą. Naudojant šias metodologijas, gautas labai geras teorinio spektro sutapimas su išmatuotu eksperimente (1 pav.).



1 pav. Deimanto NV centro liuminescencijos linija.

### Literatūra

1. M. W. Doherty et al., Phys. Rep. 528, 1 (2013).
2. A. Alkauskas et al., New J. Phys. 16, 073206 (2014).