**Влияние давления на фононные крылья SiV и GeV центров в алмазе**

***Разгулов А.А., Ляпин С.Г., Новиков А.П., Екимов Е.A.***

*младший научный сотрудник*

Институт физики высоких давлений им. Верещагина РАН, Москва, Россия

*e-mail:* [*aleksandr.razgulov@phystech.edu*](mailto:aleksandr.razgulov@phystech.edu)

За прошедшие десятилетия исследования центров окраски в алмазе прочно обосновались в научной периодике. Тем не менее, ряд фундаментальных свойств центров окраски всё ещё остается terra incognita. Барические характеристики пиков фононных крыльев GeV и SiV центров являются одним из таких белых пятен в корпусе знаний о фундаментальных свойствах SiV и GeV центров. Вместе с тем, информация об этих барических характеристиках может быть полезна как для улучшения существующих теоретических подходов к описанию колебательных мод бивакансионных центров, так и в свете разработки способов контроля и управления параметрами их фотолюминесценции (ФЛ).

Основные результаты барических исследований ФК SiV GeV центров представлены в таблице. Здесь EQ обозначает энергию квазилокального колебательной моды (КЛКМ), EP1 EP2 – энергии нелокализованных колебаний алмазной решетки, α – барический коэффициент энергии соответствующего колебания, α/(Ei) – относительный барический коэффициент i-ой колебательной моды (иными словами – её чувствительность к давлению). Индексы exp и DFT обозначают значения, полученные в рамках эксперимента (настоящая работа) и в результате DFT расчётов (работа [1]). Анализ результатов, представленный в таблице, приводит к двум интригующим выводам:

1. Чувствительность КЛКМ SiV практически вдвое превышает чувствительность КЛКМ GeV, что кажется контринтуитивным результатом в виду изоморфности этих центров, одинаковой симметрии КЛКМ GeV и SiV, и того обстоятельства, что для энергий бесфононных линий картина является обратной;
2. Рассчитанные методом DFT значения чувствительностей КЛКМ для обоих центров практически совпадают между собой и существенно отличаются от экспериментальных значений для обоих центров (при этом ошибка выходит далеко за границы точности DFT-метода).

Кроме того, существенное отличие чувствительностей КЛКМ и колебательных мод, связанных с пиками P1 и P2 ФК GeV центра, может быть интерпретировано как ещё одно косвенное доказательство различий в их природе.

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | (EQ)exp  [meV] | (EQ)DFT  [meV] | α /( EQ)exp  [%/GPa] | α /( EQ)DFT  [%/GPa] | α(P1)/EP1 [%/GPa] | α(P2)/EP2  [%/GPa] |
| SiV | 65 | 64.04 | 1% | 0.29% | - | - |
| GeV | 44 | 39.47 | 0.53% | 0.28% | 0.28 | 0.29 |

**Список литературы**

1. Е.А. Екимов, С.Г. Ляпин, А.А. Разгулов, М.В. Кондрин, ЖЭТФ (2019), 156, с 925