

03

Корреляция спиновой плотности с электронно-ядерными взаимодействиями и временем когерентности NV-центров в 6H-SiC

© Ю.Е. Ермакова¹, Д.В. Шуртакова¹, Ф.Ф. Мурзаханов¹, И.Н. Грачева¹, М.А. Садовникова¹,
Е.Н. Мохов², Г.В. Мамин¹, М.Р. Гафуров^{1,3}

¹ Институт физики, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Москва, Россия

E-mail: yliyaermakova@gym5cheb.ru

Поступила в Редакцию 22 апреля 2026 г.

В окончательной редакции 28 апреля 2026 г.

Принята к публикации 28 апреля 2026 г.

Методами высокочастотного (94 GHz) импульсного электронного парамагнитного резонанса и двойного электронно-ядерного резонанса исследованы спиновые и когерентные свойства NV-центров, локализованных в квазикубической (k_2k_1) и гексагональной (hh) позициях кристаллической решетки карбида кремния 6H-SiC. С использованием теории функционала плотности выполнен расчет распределения спиновой плотности для двух структурно-неэквивалентных конфигураций азот-вакансионного дефекта. Установлено, что степень пространственной делокализации неспаренного электрона существенно влияет на параметры электронно-ядерного взаимодействия и время спиновой релаксации: позиция hh характеризуется более локализованным распределением спиновой плотности и меньшей суммарной намагниченностью в расчете на одну элементарную ячейку ($1.03 \mu_B$ для hh -конфигурации и $1.49 \mu_B$ для конфигурации k_2k_1), что приводит к ослаблению диполь-дипольного взаимодействия с ядерным спиновым окружением и увеличению времени фазовой когерентности T_2 приблизительно на 13%. Совместное применение спектроскопии электронного парамагнитного резонанса, двойного электронно-ядерного резонанса и квантово-химического моделирования позволяет установить взаимосвязь между микроструктурой дефекта и его когерентными свойствами, что важно для обоснованного выбора позиций NV-центров в 6H-SiC при создании элементов квантовой памяти и спин-фотонных интерфейсов.

Ключевые слова: спиновая плотность, электронный парамагнитный резонанс, время фазовой когерентности, электронно-ядерное взаимодействие, карбид кремния, азот-вакансионный центр.

DOI: 10.61011/FTT.2026.04.63317.9512

1. Введение

Высокоспиновые дефекты ($S \geq 1$) в широкозонных полупроводниковых матрицах, обладающие магнитными и оптическими свойствами, которые позволяют осуществлять инициализацию, манипулирование и считывание квантового состояния при комнатной температуре, рассматриваются в качестве одной из наиболее перспективных платформ для реализации квантовых технологий. Приложение сильного внешнего магнитного поля позволяет выделить отдельные спиновые состояния. Изолированная таким образом двухуровневая система может выступать в качестве кубита. Одним из наиболее детально исследованных спиновых дефектов данного класса является отрицательно заряженный азот-вакансионный (NV^-) центр в алмазе, для которого характерно длительное время когерентности с возможностью оптической инициализации и считывания спинового состояния с последующей интеграцией в наноразмерные сенсорные устройства [1–3].

В отличие от кубитов на основе захваченных ионов, ультрахолодных атомов или сверхпроводящих джозефсоновских контактов, спиновые дефекты в твердотельных матрицах могут быть детектированы и потенциально манипулируемы при комнатной температуре под селективным воздействием оптического, микроволнового и радиочастотного излучения [4]. Методология контролируемого формирования точечных дефектов в кристаллической решетке хорошо отработана, для чего применяются облучение фемтосекундными лазерными импульсами, ионная имплантация или воздействие высокоэнергетических частиц (электронов, протонов, нейтронов) с последующим термическим отжигом [5,6].

На основе NV-центров в алмазе уже реализованы прототипы квантовых сенсоров магнитных и электрических полей, температуры и давления с нанометровым пространственным разрешением [7,8]. Однако данная платформа обладает рядом технологических ограничений, связанных со сложностью синтеза монокристаллов алмаза промышленного размера (диаметром более 25 mm) и

трудностями их интеграции в стандартную кремниевую микроэлектронику. В качестве альтернативной матрицы для спиновых дефектов активно исследуется кристалл карбида кремния (SiC), в котором могут быть сформированы различные точечные дефекты, включая азот-вакансионные центры (NV), дивакансии (VV) и вакансии кремния (V_{Si}). В отличие от алмаза, технология выращивания высококачественных монокристаллов и эпитаксиальных пленок SiC диаметром до 200 мм хорошо развита, данный материал широко применяется в силовой и высокотемпературной микроэлектронике [9,10].

Карбид кремния SiC существует более чем в 250 политипных модификациях, среди которых с фундаментальной и прикладной точек зрения наибольший интерес представляют кубический политип 3C и гексагональные 4H и 6H [11]. Разнообразие кристаллографических „упаковок“ в различных политипах приводит к образованию структурно-неэквивалентных кристаллографических позиций для атомов кремния и углерода, различающихся локальным координационным окружением и точечной группой симметрии. Важно отметить, что линии люминесценции центров окраски в основных политипах кристалла карбида кремния 3C, 4H и 6H смещены в инфракрасную область спектра ($\lambda_{ZPL} \approx 1.25 \mu\text{m}$) [11,12], тогда как для алмаза эта линия находится в видимой области ($\lambda_{ZPL} = 637 \text{ nm}$ [13]). Данное обстоятельство является преимуществом карбида кремния с точки зрения использования платформы для квантовой коммуникации, так как излучение центров окраски может эффективно передаваться по стандартным оптоволоконным линиям с минимальными потерями [12,14]. Установлено, что микроструктура и электронные свойства NV-центров в карбиде кремния и в алмазе демонстрируют значительное сходство. Это позволяет рассматривать их в качестве структурных и функциональных „близнецов“ [15]. В кристалле 6H-SiC для NV-центров была достигнута степень оптической спиновой поляризации порядка 99.9% при лазерном возбуждении с длиной волны 980 nm, что имеет принципиальное значение для создания эффективных спин-фотонных интерфейсов с минимальными потерями при переносе квантовой информации. С учетом перспектив использования платформы карбида кремния, содержащего азот-вакансионные центры, в области квантовых технологий представляется важным получение наиболее полной информации о свойствах электронной и ядерной подсистем дефекта, а также о временах релаксации, определяющих стабильность квантового состояния.

Методы электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и двойного электронно-ядерного резонанса (ДЭЯР) в сочетании с результатами квантово-химических расчетов представляют собой наиболее информативные подходы для исследования указанных характеристик, а также для определения параметров спинового гамильтониана дефекта [16]. Применение импульсных последовательностей ДЭЯР позволяет детально исследовать электронно-ядерную связь спинового

центра как с ближайшим атомным окружением, так и с удаленными координационными сферами, а также количественно определить величины сверхтонкого и квадрупольного взаимодействий [17]. Полученные данные необходимы для проектирования гибридных электронно-ядерных квантовых регистров, в которых квантовая информация может переноситься с электронной спиновой подсистемы на ядерные спины, обладающие существенно более длительными временами когерентности, что открывает возможности для реализации квантовой памяти.

В настоящей работе методами высокочастотной (94 GHz) импульсной ЭПР и ДЭЯР спектроскопии в сочетании с расчетами в рамках теории функционала плотности на примере двух структурно-неэквивалентных позиций азот-вакансионного центра в кристалле 6H-SiC исследовано влияние распределения спиновой плотности в пределах суперъячейки на времена фазовой когерентности и параметры сверхтонкого и квадрупольного взаимодействий. Особое внимание уделено сравнению конфигураций k_2k_1 и hh , для которых впервые проведен систематический анализ взаимосвязи между локальной симметрией дефекта, степенью локализации электронной волновой функции и когерентными свойствами.

2. Материалы и методы

В качестве объекта исследования использован объемный монокристалл 6H- ^{28}SiC , обогащенный немагнитным изотопом кремния ^{28}Si ($I = 0$), выращенный методом высокотемпературной сублимации из газовой фазы. Концентрация примеси азота в исходном кристалле составляла $C \approx 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Для создания вакансионных дефектов кристалл подвергался облучению электронами с энергией 2 MeV и дозой $4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$. Последующий термический отжиг в атмосфере аргона при температуре $T = 900^\circ\text{C}$ в течение 2 h обеспечил формирование стабильных азот-вакансионных центров [18]. Для проведения ЭПР-исследований в W-диапазоне из монокристалла был вырезан прямоугольный образец размерами $450 \times 450 \times 670 \mu\text{m}$.

Спектры электронного парамагнитного резонанса регистрировались на импульсном спектрометре Bruker Elexsys E680, работающем в W-диапазоне ($\nu = 94 \text{ GHz}$) и оснащенный проточным гелиевым криостатом фирмы Oxford Instruments (Англия) с температурным контроллером, обеспечивающим точность установки температуры $\pm 0.01 \text{ K}$. Все измерения проводились в условиях непрерывного оптического возбуждения образцов лазерным источником с длиной волны $\lambda = 980 \text{ nm}$. Для измерения времени фазовой когерентности применялась стандартная импульсная последовательность Хана ($\pi/2 - \tau - \pi - \tau - \text{ЭСЭ}$), где длительность $\pi/2$ -импульса составляла 32 ns, π -импульса — 64 ns, а начальная задержка между импульсами была 1.5 μs .

Для проведения измерений методом двойного электронно-ядерного резонанса использовалась трехимпульсная схема Мимса ($\pi/2-\tau-\pi/2-T-\pi/2-\tau-\text{ЭСЭ}$), в которой последовательность из трех микроволновых $\pi/2$ -импульсов необходима для детектирования стимулированного эхо-сигнала. Инициирование ядерных резонансных переходов осуществлялось с помощью радиочастотного импульса длительностью $72\ \mu\text{s}$, расположенного между вторым и третьим микроволновыми импульсами. В качестве источника радиочастотного излучения применялся блок с выходной мощностью $P = 1.5\ \text{kW}$ и возможностью развертки частоты в диапазоне от $150\ \text{kHz}$ до $250\ \text{MHz}$.

Расчеты электронной структуры парамагнитных центров, распределения спиновой плотности и параметров электронно-ядерного взаимодействия выполнялись методом теории функционала плотности с использованием обменно-корреляционного функционала Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) в программном пакете Quantum ESPRESSO. Спин-поляризованные расчеты проводились с использованием суперъячейки, представляющей собой кристаллическую структуру, состоящую из 64 элементарных ячеек $6H\text{-SiC}$. Геометрическая оптимизация структуры выполнялась в режиме „relax“ с сохранением границ суперъячейки и с использованием сетки k -точек Монкхорста–Пака размером $1 \times 1 \times 1$. Структурная релаксация проводилась с пороговым значением кинетической энергии плоской волны $50\ \text{Ry}$ и пороговым значением плотности заряда $200\ \text{Ry}$. Для расчета параметров электронно-ядерного взаимодействия, включая компоненты тензоров сверхтонкого и квадрупольного взаимодействий, использовался модуль GPAW, реализованный в пакете Quantum ESPRESSO.

3. Результаты и обсуждение

В спектре электронного парамагнитного резонанса кристалла $6H\text{-SiC}$ наблюдаются сигналы, соответствующие азот-вакансионным центрам аксиальной симметрии, локализованным в двух квазикубических (k_2k_1 и k_1k_2) и одной гексагональной (hh) кристаллографических позициях. На рис. 1 представлена схема кристаллической решетки $6H\text{-SiC}$ с указанием атомных позиций для конфигураций NV_{hh} и $NV_{k_2k_1}$ [19]. Азот-вакансионный центр характеризуется электронным спином $S = 1$ и расщеплением в нулевом магнитном поле D , что приводит к формированию триплетного основного состояния и соответствующей тонкой структуре спектра ЭПР, состоящей из низкополевой и высокополевой компонент. На рис. 2 представлен спектр ЭПР, зарегистрированный в режиме детектирования электронного спинового эха (ЭСЭ) для низкополевой компоненты тонкой структуры центров hh (расщепление в нулевом поле $D = 1337\ \text{MHz}$) и k_2k_1 ($D = 1299\ \text{MHz}$) [17]. Наблюдаемые сигналы являются фотоиндуцированными, так как регистрируются исключительно при непрерывном

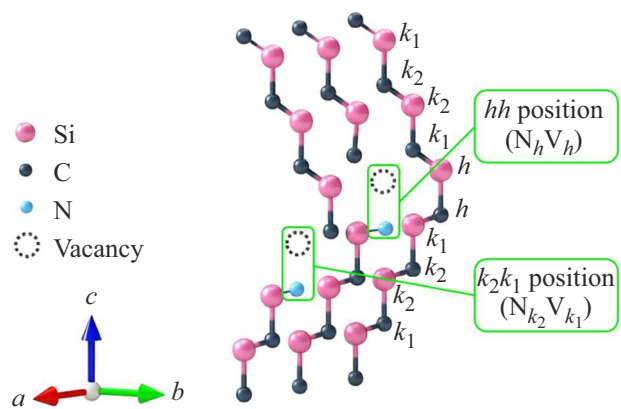


Рис. 1. Кристаллическая решетка $6H\text{-SiC}$ с указанием позиций для NV_{hh} и $NV_{k_2k_1}$ центров.

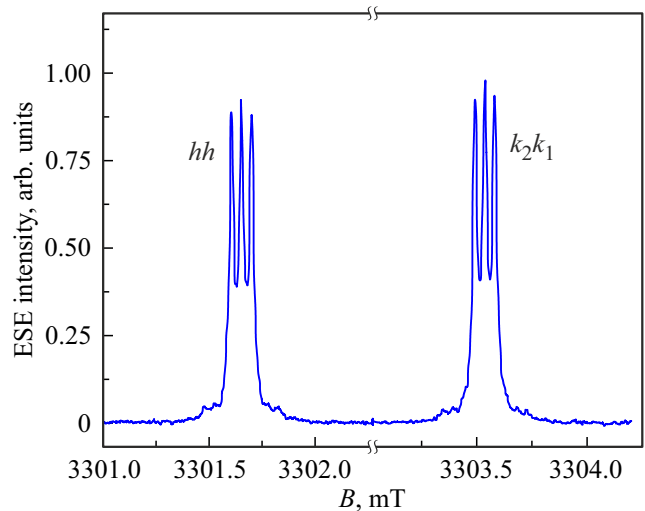


Рис. 2. Спектр импульсного ЭПР кристалла $6H\text{-SiC}$ в режиме детектирования ЭСЭ низкополевой компоненты тонкой структуры спиновых азот-вакансионных дефектов при $T = 297\ \text{K}$ при параллельной ориентации оси c кристалла и внешнего магнитного поля.

оптическом возбуждении образца излучением с длиной волны $980\ \text{nm}$. Положения резонансных линий для каждой кристаллографической позиции определяются значениями g -фактора и параметра нулевого расщепления D , которые были ранее определены с высокой точностью в работе [20]. Благодаря высокой степени структурного совершенства кристалла $6H\text{-SiC}$ и однородному распределению парамагнитных центров, линии ЭПР характеризуются исключительно малой шириной на полувысоте, составляющей порядка $450\ \text{kHz}$. Наблюдаемая дополнительная сверхтонкая структура, проявляющаяся в виде трех равноудаленных компонент для каждой кристаллографической позиции, обусловлена магнитным взаимодействием неспаренного электрона дефекта с ближайшим ядром изотопа ^{14}N , обладающим спином $I = 1$.

Для реализации квантовых технологий принципиальное значение имеет стабильность кубитов, количественно характеризуемая временем фазовой когерентности T_2 . Длительное время спин-спиновой релаксации обеспечивает сохранение упорядоченной ориентации спинов — квантового свойства, чувствительного к воздействию внешних магнитных полей [21]. Среди основных механизмов, приводящих к потере фазовой когерентности в процессе временной эволюции спиновой намагниченности, следует выделить спин-спиновую релаксацию, а также процессы спектральной и спиновой диффузии.

Время спин-спиновой релаксации, определяемое вкладом магнитного диполь-дипольного взаимодействия, зависит от расстояний между взаимодействующими спинами как $\sim 1/r^3$, а также от величин их магнитных моментов. В разбавленных парамагнитных системах значение T_2 увеличивается при снижении концентрации как парамагнитных центров окраски, так и окружающих магнитных ядер (^{29}Si и ^{13}C). В условиях, когда существенную роль играет ядерная спиновая диффузия, пониженное содержание изотопов ^{29}Si с ненулевыми ядерными спинами в исследуемых образцах $6H\text{-}^{28}\text{SiC}$ приводит к уменьшению скорости потери фазовой когерентности дефекта. Процессы спиновой диффузии могут также индуцироваться влиянием структурно-неэквивалентных центров, наличием дислокаций кристаллической решетки или формированием кластеров парамагнитных частиц с близкими, но неидентичными околорезонансными условиями вследствие неоднородного диполь-дипольного уширения. Совместное влияние механизмов спиновой диффузии и спин-спиновой релаксации проявляется в степенной экспоненциальной зависимости спада поперечной намагниченности от времени вида: $\exp[-(t/T_2)^n]$ [22,23]. Параметры данного процесса, а именно характерное ориентационно-зависимое время спиновой диффузии T_{SD} и степенной показатель n , представляют собой сложные функции концентрации ядерных спинов, их пространственного распределения и взаимного расположения относительно электронного спина дефекта. Ранее было показано, что при температуре $T = 20\text{ K}$ и характерном времени $T_2 = 210.3\ \mu\text{s}$ время спиновой диффузии для NV-центров в $6H\text{-SiC}$ составляет $T_{SD} = 111.8\ \mu\text{s}$ [24].

Ядерные спины с ненулевым магнитным моментом, создающие флуктуирующие локальные магнитные поля, формируют дополнительный канал релаксации, связанный с переносом намагниченности от электронного спина дефекта в ядерное окружение („ядерная спиновая ванна“) посредством механизмов спиновой диффузии. Подавление гетероядерных перекрестных спиновых взаимодействий (источников локального магнитного шума) может быть достигнуто за счет приложения сильного внешнего магнитного поля. В условиях сильных полей спиновая декогеренция обусловлена преимущественно процессами одновременного переворота пар ядерных спинов. В работе [25] было продемонстрировано, что, в отличие от гомоядерных спиновых пар (пары $^{13}\text{C}\text{--}^{13}\text{C}$

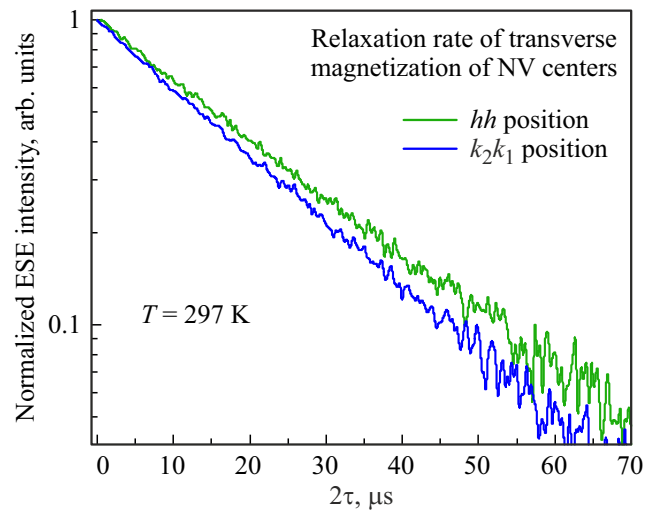


Рис. 3. Кривые спада поперечной намагниченности NV-центров в кристалле $6H\text{-SiC}$ в полулогарифмическом масштабе. Для NV-центра в позиции k_2k_1 значение $T_2 = 19.8 \pm 0.1\ \mu\text{s}$, для центра в позиции hh — $T_2 = 22.3 \pm 0.1\ \mu\text{s}$.

и $^{29}\text{Si}\text{--}^{29}\text{Si}$), вероятность переворота гетероядерной спиновой пары ($^{29}\text{Si}\text{--}^{13}\text{C}$) существенно подавляется в сильных магнитных полях, что является ключевым фактором для понимания увеличенных времен T_2 дефектных центров в карбиде кремния по сравнению с измерениями в слабых магнитных полях.

Для исследуемого образца $6H\text{-SiC}$ зависимости поперечной спиновой намагниченности NV-центров от времени, измеренные при температуре кристалла, близкой к комнатной ($T = 297\text{ K}$), представлены на рис. 3. Экспериментальные кривые с высокой точностью аппроксимируются моноэкспоненциальной функцией. Для азот-вакансионного центра в квазикубической позиции k_2k_1 получено значение $T_2 = 19.8 \pm 0.1\ \mu\text{s}$, тогда как для центра в гексагональной позиции hh время фазовой когерентности составляет $T_2 = 22.3 \pm 0.1\ \mu\text{s}$. Наблюдаемое различие во временах релаксации между двумя позициями, составляющее приблизительно 13%, не может быть объяснено лишь вариацией концентрации дефектов, так как образец характеризуется высокой структурной однородностью. Физическая природа данного различия связана с особенностями локального кристаллографического окружения центра окраски и симметрией спиновых дефектов. Точечная симметрия позиции определяет характер распределения спиновой плотности в области дефекта: более высокая степень локализации электронной волновой функции уменьшает пространственное перекрытие с магнитными ядрами окружения, что приводит к ослаблению диполь-дипольного взаимодействия и увеличению времени фазовой когерентности. Кроме того, величина эффективного магнитного момента дефекта непосредственно определяет интенсивность диполь-дипольного взаимодействия, причем ее увеличе-

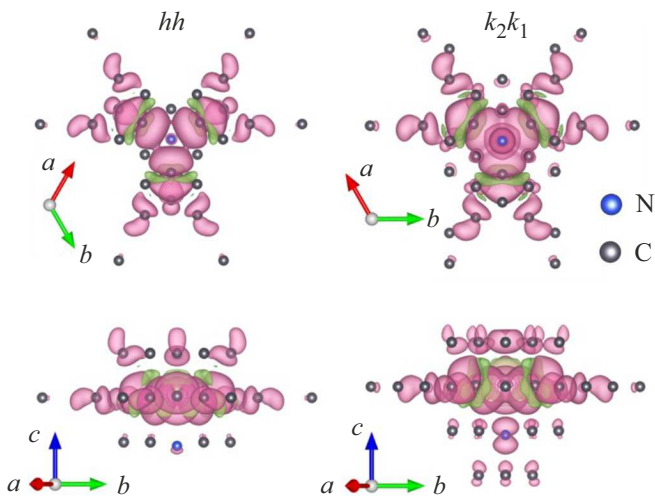


Рис. 4. Распределение спиновой плотности вокруг NV-центра в кристалле 6H-SiC для двух неэквивалентных позиций, изображенное при одинаковом уровне изосфер (isosphere level).

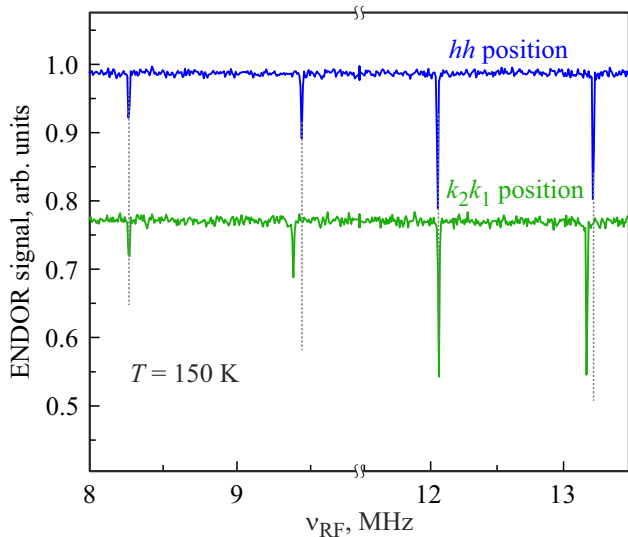


Рис. 5. Спектры высокочастотного двойного электронно-ядерного резонанса NV-центров в 6H-SiC для двух разных кристаллографических позиций при параллельной ориентации оси c кристалла относительно внешнего магнитного поля при T = 150 K.

ние усиливает связь с ядерным окружением и уменьшает время спин-спиновой релаксации.

Наличие в ближайшем окружении спиновой вакансии магнитного ядра ^{14}N ($I = 1$, природная распространенность 99.69%) приводит к формированию дополнительной сверхтонкой и квадрупольной структуры энергетических уровней дефекта. Метод двойного электронно-ядерного резонанса позволяет детектировать расщепления порядка ~ 10 kHz, которые не разрешаются в обычных спектрах ЭПР вследствие неоднородного уширения линий. На рис. 5 представлены спектры ДЭЯР ($T = 150$ K) для двух кристаллографиче-

Таблица 1. Экспериментальные значения сверхтонких и квадрупольных величин NV-центра в 6H-SiC

Тип центра	$A_{ }$, MHz	Cq , MHz
NV_{hh}	1.176	2.528
$\text{NV}_{k_2k_1}$	1.112	2.528

ских позиций азот-вакансионных центров в кристалле 6H-SiC, зарегистрированные в области ларморовской частоты ядер ^{14}N $\nu_L = 10.2$ MHz (соответствует внешнему магнитному полю $B_0 = 3.4$ T) при ориентации оси c кристалла вдоль внешнего магнитного поля. Спектры ДЭЯР центра NV^- содержат четыре узкие резонансные линии, соответствующие ядерным магнитным переходам между подуровнями, расщепленными сверхтонким ($\nu_2 - \nu_1 = \nu_4 - \nu_3 = A_{zz}$) и квадрупольным ($\nu_3 - \nu_1 = \nu_4 - \nu_2 = Q$) взаимодействиями. Анализ положения резонансных линий в спектрах ДЭЯР позволил определить параметры сверхтонкого и квадрупольного взаимодействий для NV^- -центров в двух кристаллографических позициях. Соответствующие параметры приведены в табл. 1. Для сравнения в табл. 2 приведены результаты теоретических расчетов компонент тензоров сверхтонкого и квадрупольного взаимодействий, которые были выполнены в рамках теории функционала плотности. В случае азот-вакансионного центра аксиальная компонента тензора A_{zz} порядка 1.1 MHz существенно меньше ядерной ларморовской частоты ^{14}N ($\nu_L = 10.2$ MHz), поэтому сверхтонкое взаимодействие электронного спина с ядром азота в данной системе относится к режиму „слабой связи“.

Согласно выражению для изотропной компоненты сверхтонкого взаимодействия $A_{iso} = \frac{4\pi}{3} \frac{g_e g_N \mu_B \mu_N}{S} \rho_N$, где S — полный спин электрона, ρ_N — спиновая плотность на ядре, величина A_{iso} прямо пропорциональна значению спиновой плотности на ядре азота. В случае азот-вакансионного центра распределение спиновой плотности на атоме азота является незначительным, вследствие чего константа сверхтонкого взаимодействия оказывается малой по сравнению с ларморовской частотой ^{14}N (см. табл. 1). На основе предложенного в работе вычислительного подхода возможна оценка спиновой плотности на ядре азота. Принимая во внимание известные значения констант сверхтонкого взаимодействия для свободного изолированного атома азота ($a = 1811$ MHz и $b = 55.52$ MHz), для NV^- -центра в 6H-SiC установлено, что значение спиновой плотности на ядре азота не превышает $\rho_N < 0.170(5)\%$ от полной спиновой плотности дефекта в кристаллической решетке [15].

Экспериментально определенная величина изотропной компоненты сверхтонкого взаимодействия для позиции hh превышает соответствующее значение для конфигурации k_2k_1 на 64 kHz (табл. 1), что согласуется с результатами теоретических расчетов (табл. 2),

Таблица 2. Теоретические значения константы СТВ и квадрупольного взаимодействия NV центров в 6H-SiC

Центр	A_{xx} , MHz	A_{yy} , MHz	A_{zz} , MHz	A_{iso} , MHz	$A_{ }$, MHz	Cq , MHz
NV_{hh}^-	-0.0333	-0.0534	0.0867	-1.2120	1.1333	-2.6570
$NV_{k_2k_1}^-$	-0.0628	-0.0660	0.1289	-1.1176	0.9887	-2.6951

предсказывающими более высокую степень локализации спиновой плотности на ядре азота для центра NV_{hh} . Таким образом, расчеты распределения спиновой плотности центра окраски в пределах кристаллической решетки позволяют не только качественно, но и количественно оценить параметры электронно-ядерных взаимодействий, что подтверждает корректность выбранной теоретической модели и открывает возможности для предсказания различных свойств дефектов в других кристаллографических позициях и политипах карбида кремния.

4. Заключение

Методами высокочастотной (94 GHz) импульсной ЭПР ($T = 297$ K) и ДЭЯР ($T = 150$ K) спектроскопии измерены времена фазовой когерентности, определены параметры сверхтонкого и квадрупольного взаимодействий азот-вакансионных центров, локализованных в структурно-неэквивалентных квазикубической (k_2k_1) и гексагональной (hh) позициях кристаллической решетки карбида кремния 6H-SiC. Впервые проведен сравнительный анализ распределения спиновой плотности для двух конфигураций дефекта с использованием теории функционала плотности. Установлено, что различие времен фазовой когерентности между позициями ($\Delta T_2 \approx 2.5 \mu s$) количественно коррелирует со степенью локализации электронной волновой функции: более высокая симметрия гексагональной позиции hh обеспечивает меньшую делокализацию неспаренного электрона, снижение суммарной намагниченности на $\sim 45\%$ и ослабление диполь-дипольного взаимодействия с ядерным спиновым окружением. Экспериментально определенные константы сверхтонкого взаимодействия согласуются с результатами квантово-химических расчетов: позиция hh характеризуется большей спиновой плотностью на ядре азота, что подтверждает адекватность теоретической модели распределения электронной плотности и корректность интерпретации механизмов релаксации.

Полученные данные позволяют обоснованно подходить к выбору кристаллографических позиций азот-вакансионных центров в 6H-SiC при проектировании элементов квантовых технологий: конфигурация hh предпочтительна для задач, требующих максимальной длительности когерентного состояния, тогда как позиция k_2k_1 может быть использована в случаях, когда необходимо более сильное сверхтонкое взаимодействие для реализации протоколов управления ядерными спина-

ми. Продемонстрированная эффективность комбинированного подхода, сочетающего результаты импульсной ЭПР/ДЭЯР спектроскопии и расчетов теории функционала плотности, для микроскопической характеристики спиновых дефектов в перспективных полупроводниковых матрицах открывает возможности для целенаправленного поиска и оптимизации центров с заданными когерентными свойствами.

Финансирование работы

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности № FZSM-2024-0010

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных конкурирующих финансовых интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

- [1] G. Wolfowicz, F.J. Heremans, C.P. Anderson, S. Kanai, H. Seo, A. Gali, G. Galli, D.D. Awschalom. *Nat. Rev. Mater.* **6**, 906 (2021).
- [2] T. Takui, L. Berliner, G. Hanson. *Electron spin resonance (ESR) based quantum computing*. Springer, N.Y. (2016). V. 31.
- [3] M. Niora, A. Mzyk, K. Berg-Sørensen. *J. Phys. Photonics* **8**, 012007 (2026).
- [4] W.F. Koehl, B.B. Buckley, F.J. Heremans, G. Calusine, D.D. Awschalom. *Nature* **479**, 7371, 84 (2011).
- [5] N.P. De Leon, K.M. Itoh, D. Kim, K.K. Mehta, T.E. Northup, H. Paik, B.S. Palmer, N. Samarth, S. Sangtawesin, D.W. Steuerman. *Science* **372**, 6539 (2021).
- [6] I. Capan. *Appl. Sci.* **15**, 10, 5606 (2025).
- [7] G. Balasubramanian, A. Lazariev, S.R. Arumugam, Deywen Duan. *Curr. Opin. Chem. Biol.* **20**, 69 (2014).
- [8] J. Rovny, S. Gopalakrishnan, A.C. Bleszynski Jayich, P. Maletinsky, E. Demler, N.P. de Leon. *Nat. Rev. Phys.* **6**, 753 (2024).
- [9] W.F. Koehl, B.B. Buckley, F.J. Heremans, G. Calusine, D.D. Awschalom. *Nature* **479**, 84 (2011).
- [10] M. Fraga, R. Pessoa. *Micromachines* **11**, 9, 799 (2020).
- [11] A. Hashemi, C. Linderälrv, A.V. Krashennnikov, T. Ala-Nissila, P. Erhart, H.P. Komsa. *Phys. Rev. B* **103**, 12, 125203 (2021).
- [12] K. Khazen, H.J. von Bardeleben. *Front. Quantum Sci. Technol.* **2**, 1115039 (2023).

- [13] B. Dong, C. Shi, Z. Xu, K. Wang, H. Luo, F. Sun, P. Wang, E. Wu, K. Zhang, J. Liu, Y. Song, Y. Fan. *Diam. Relat. Mater.* **116**, 108389 (2021).
- [14] A. Csóré, H.J. Von Bardeleben, J.L. Cantin, A. Gali. *Phys. Rev. B* **96**, 8, 085204 (2017).
- [15] G.D. Cheng, Y.P. Wan, S.Y. Yan. *Comput. Mat. Sci.* **154**, 60 (2018).
- [16] Yu. Ermakova, E. Dmitrieva, I. Gracheva, D. Shurtakova, M. Sadovnikova, F. Murzakhanov, G. Mamin, S. Nagalyuk, E. Mokhov, M. Gafurov. *Appl. Nano* **6**, 4, 23 (2025).
- [17] L.R. Latypova, I.N. Gracheva, D.V. Shurtakova, F.F. Murzakhanov, M.A. Sadovnikova, G.V. Mamin, M.R. Gafurov. *J. Phys. Chem. C* **128**, 18559 (2024).
- [18] H.J. von Bardeleben, J.L. Cantin, A. Csóré, A. Gali, E. Rauls, U. Gerstmann. *Phys. Rev. B* **94**, 121202(R) (2016).
- [19] Kh. Khazen, H.J. von Bardeleben, S.A. Zargaleh, J.L. Cantin, Mu Zhao, Weibo Gao, T. Biktagirov, U. Gerstmann. *Phys. Rev. B* **100**, 20, 205202 (2019).
- [20] F.F. Murzakhanov, M.A. Sadovnikova, G.V. Mamin, D.V. Shurtakova, E.N. Mokhov, O.P. Kazarova, M.R. Gafurov. *JETP Letters* **119**, 8, 593 (2024).
- [21] A. Hernández-Mínguez, A.V. Poshakinskiy, M. Hollenbach, P.V. Santos, G.V. Astakhov. *Sci. Adv.* **7**, 44 (2021).
- [22] R.E. George, W. Witzel, H. Riemann, N.V. Abrosimov, N. Nötzel, M.L. Thewalt, J.J. Morton. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 6, 067601 (2010).
- [23] A.M. Tyryshkin, J.J.L. Morton, S.C. Benjamin, A. Ardavan, G.A.D. Briggs, J.W. Ager, S.A. Lyon. *J. Phys. Condens. Matter* **18**, 21, 783 (2006).
- [24] F.F. Murzakhanov, G.V. Mamin, E.V. Dmitrieva, I.N. Gracheva, Y.E. Ermakova, M.R. Gafurov. *J. Phys. Chem. C* **129**, 28, 12946 (2025).
- [25] V.A. Soltamov, B.V. Yavkin, A.N. Anisimov, H. Singh, A.P. Bundakova, G.V. Mamin, S.B. Orlinskii, E.N. Mokhov, D. Suter, P.G. Baranov. *Phys. Rev. B* **103**, 19, 195201 (2021).

Редактор А.Н. Смирнов