

## 고체 양자 결함 기반 양자 물질의 미시적 이해

최민석\*

인하대학교 물리학과, 인천 22212, 대한민국

*\*minseok.choi@inha.ac.kr*

광대역 갭 물질 내 고체 양자 결함은 양자 정보 기술의 핵심 플랫폼이다. 본 강연에서는 밀도 범함수 이론(Density Functional Theory, DFT) 계산을 통해 다양한 호스트 물질 속 결함의 미시적 특성을 규명한 연구들을 소개한다.

첫 번째 주제는 다이아몬드 내 음전하 질소-공공( $NV^-$ ) 센터의 기초 물성 및 압력 의존적 거동이다.  $NV^-$  센터는 양자 센싱과 큐비트 구현의 유력한 후보로, photoionization threshold, zero-phonon line 에너지, zero-field splitting이 압력에 따라 체계적으로 변화함을 보인다. 본 연구는 이러한 변화를 미시적 수준에서 규명함으로써,  $NV^-$  센터를 압력 양자 센서로 활용하기 위한 이론적 기반을 제시한다.

강연 후반부에서는 양자 소자 응용에 유망한 다른 호스트 물질들을 다룬다. 특히 Er이 도핑된 결정은 텔레콤 파장 대역에서 광자를 방출하고,  $Er^{3+}$  전자 스핀의 결맞음 시간이 23 ms에 달해 장거리 양자 네트워킹을 위한 양자 중계기 소자로서 큰 가능성을 지닌다. 다만, 호스트 물질 내에 존재하는 고유 결함은 전하 잡음, 자기 잡음, 국소 변형을 유발하거나 비복사 재결합 경로를 형성하는 등 소자 성능을 저하시킬 수 있다. 이에 본 연구에서는 주요 호스트 물질의 고유 결함이 Er의 광학 활성 및 스핀 특성에 미치는 영향을 DFT 계산을 통해 체계적으로 분석한 결과를 소개한다.