

Boro vakansijų ir boro vakansijų kompleksų heksagoniniame boro nitride optinės savybės

Optical properties of boron vacancies and boron vacancy complexes in hexagonal boron nitride

Mažena Mackoiti¹, Audrius Alkauskas¹, Leigh Weston², Darshana Wickramaratne², Marcus W. Doherty³,
Chris G. Van de Walle²

¹Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva

²Materials Department, University of California, Santa Barbara, California 93106-5050, USA

³Laser Physics Centre, Research School of Physics and Engineering, Australian National University, Canberra,
Australian Capital Territory 0200, Australia

mazena.mackoiti@ftmc.lt

Heksagoninis boro nitridas (*h*-BN) - sluoksniuota sp^2 hibridizacijos medžiaga. *h*-BN pasižymi puikiu cheminiu ir šiluminiu stabilumu, o dėl gardelės konstantos atitikimo su grafenu, ši medžiaga plačiai naudojama kaip padėklas dvimatei elektronikai. Neseniai parodyta, kad *h*-BN draustinis tarpas siekia ~ 6 eV [1]. Paskutiniai pasiekimai pavienių kristalų, mono- ir multisluosnių auginimo technikoje prisidėjo prie dar aktyvesnių šios medžiagos tyrimų kaip potencialaus kandidato elektronikos ir optoelektronikos taikymuose.

Paskutiniu metu mokslininkams pavyko stebėti pavienių fotonų emisiją (SPE) *h*-BN kambario sąlygomis. *Tran ir kt.* nustatė SPE iš spalvinių centrų *h*-BN emituojančių ties ~ 2 eV [2]. Kiti matavimai atskleidė platų spalvinių centrų befononinių linijų (ZPL) ir vibroninių savybių pasiskirstymą. Tokia fluorescencija (FL) stebėta žadinant su 532 nm ir su 405 nm ZPL diapazone nuo 1.6 eV iki 2.25 eV (560 – 775 nm) [3–5].

Šiame darbe buvo atlikti skaičiavimai paremti tankio funkcionalo teorija (DFT) boro vakansijoms ir boro vakansijų kompleksams su deguonimi heksagoniniame boro nitride. Parodyta, kad sąveika su deguonimi ženkliai sumažina boro vakansijos formavimosi energiją. Dėl to sistemoje, kurioje esama deguonies, labiau tikėtinas kompleksų susidarymas, negu paprastų boro vakansijų.

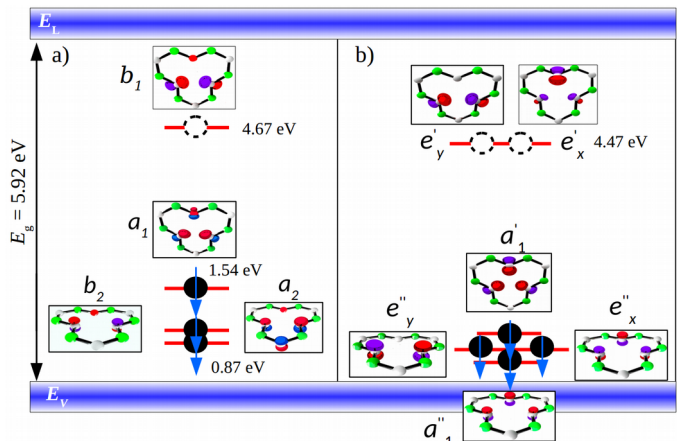
Iširta, kad elektroninės defekto būsenos gali būti σ - arba π -tipų. Dėl to galime turėti skirtingas pagrindinės ir sužadintos būsenų konfiguracijas. Visų pirma, vidinė liuminescencija tarp defekto orbitalių gali būti poliarizuota tiek plokštumoje, tiek statmenai plokštumai. Taip pat šiame darbe pateikiami sužadavimo energijų ir su jomis susijusių Franck–Condon poslinkių įvertinimai, susiejant gautas vertes su naujausiais eksperimentiniais rezultatais. Gautos relaksacijos energijos yra didelės, nes įkrauto ir sužadinto komplekso geometrijos stipriai pakinta.

Įvertinti optiniai ZPL tokiose defektuose vykty giliai infraraudonoje srityje (1.6 - 1.35 eV), o jų relaksavimo energijos būtų didelės (0.35 – 1.2 eV), todėl jie negali paaiškinti stebimos $E_{ZPL} \approx 2$ eV emisijos. Nors a_2b_1 perėjimas atitiktų ZPL iš pavienių defektų kristaliniame *h*-BN $E_{ZPL} \approx 1.6$ eV [5], jo sugertis turėtų

vykti gilioje UV srityje ~ 3.4 eV (kas panašu į [4]).

1 lentelė. Galimi optiniai perėjimai skirtingose V_B-O_N komplekso būsenose ir aproksimuotos jų FL ZPL vertės.

V_B-O_N būseną	Optiniai perėjimai	E_{ZPL} , eV	λ , nm
neutrali	b_2a_1	1.40	885
	b_2b_1	3.09	400
	a_2a_1	1.40	885
įkrauta	b_2b_1	1.63	760
	a_2b_1	1.63	760
	a_1b_1	1.35	918



1 pav. Elektroninės įkrautų a) $V_B-O_N^-$ ir b) V_B^- defektų struktūros.

Reikšminiai žodžiai: pavienių fotonų šaltiniai, heksagoninis boro nitridas, taškiniai defektai, DFT

Literatūra

- [1] G. Cassabois, P. Valvin, B. Gil, *Nat. Photonics*, **10** 262 (2016).
- [2] T. T. Tran, C. Elbadawi, D. Totonjian, et al., *ACS Nano*, **10** 7331, (2016).
- [3] N. R. Jungwirth, B. Calderon, Y. Ji, et al., *Nano Lett.*, **16** 6052 (2016).
- [4] Z. Shotan, H. Jayakumar, C. R. Conside, et al., *ACS Photonics*, **3** 12, (2016).
- [5] T. T. Tran, C. Zachreson, A. M. Berhane et al., *Phys. Rev. Appl.* **5**, 034005 (2016).