

## TAŠKINIAI DEFEKTAI BORO NITRIDE KAIP PAVIENIŲ FOTONŲ ŠALTINIS

Mažena Mackoit, Leigh Weston, Darshana Wickramaratne, Audrius Alkauskas, Chris G. van de Walle

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

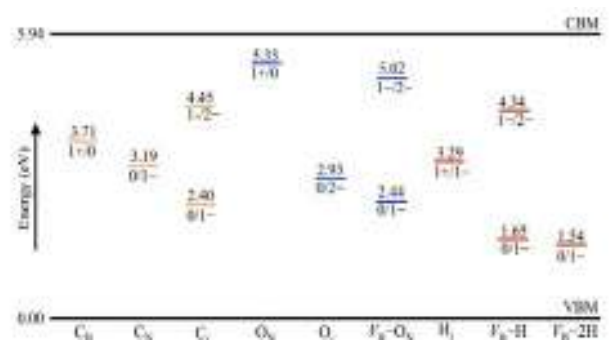
Taškiniams defektams susidomėta dėl jų galimo pritaikymo kvantiniam informacijos apdorojimui. Nors nuo 2004 m. dominuojančiu defektu šioje srityje yra NV centras deimante, tačiau jo naudojimas turės technologinių trūkumų ateities taikymuose (aukštos kokybės didelių kristalų auginimas, sudėtingas deterministiškas defektų įvedimas). Todėl pradėtos kitų alternatyvių kandidatų paieškos.

Vienas iš jų yra heksagoninis boro nitridas (*h*-BN). *h*-BN draustinis tarpas žymiai didesnis negu kitų 2D medžiagų [1], todėl šioje medžiagoje galima būtų sukurti gilius ir optiškai aktyvius defektų centrus. Pirmieji eksperimentiniai tą demonstruojantys darbai pasirodė 2016 m. [2-4]. Fluorescuojantys defektai, stebėti kambario temperatūroje *h*-BN, atvėrė naujas galimybes fotoniniams lustams, kurie generuotų identiškus fotonus iš pavienių taškinių šaltinių. Praktiniam taikymui labai svarbu išmokti valdyti pavienių defektus, todėl būtina geriau suprasti kvantinių emiterių fizikinę prigimtį (pasirinktos medžiagos ir defektų vaidmenį, aplinkos poveikį), tam reikalingas išsamesnis kvantinio emiterio charakterizavimas.

Elektroninė taškinių defektų struktūra heksagoniniame boro nitride buvo ištirta pasitelkus tankio funkcionalo teoriją. Rezultatai rodo, kad vakansijų formavimosi energijos yra labai aukštos, todėl mažiau tikėtina, kad tokie defektai susiformuos mūsų medžiagoje esant termodinaminei pusiausvyrai ir tipinėms auginimo sąlygoms. Kita vertus, vakansijos turi žymiai didesnius migracijos barjerus ir gali susikurti nepusiausvyromis koncentracijomis. Tarpmazginiai defektai turi žemas formavimosi energijas, bet jie pernelyg mobilūs, kad būtų stabilūs kambario temperatūroje, todėl taškinių defekto chemija *h*-BN turėtų būti susijusi su priemaišomis (pvz.: anglis, deguonis arba vandenilis) [4].

Nors izoliuoti taškiniai defektai *h*-BN turi itin dideles formavimosi energijas, bet esant priemaišoms aplinkoje (t.y. susidarius kompleksui

su deguonimi arba vandeniliu) jų formavimosi energijos ženkliai pamažėja, tokie defektai gali susiformuoti didelėmis koncentracijomis esant termodinaminei pusiausvyrai.



1 pav. Krūvio-būsenos perėjimo lygmenys priemaišoms esančioms *h*-BN [4].

Remiantis mūsų rezultatais, mes galime atmesti kelis pasiūlytus kandidatus kaip galimus pavienių fotonų šaltinius *h*-BN. Dažnai šioje medžiagoje stebima emisija ties ~ 4.1 eV negali būti paaiškinta rekombinacijos vykstančios giliame C<sub>N</sub> akceptoriuje modeliu kaip buvo manoma iki šiol. Remiantis rezultatais buvo pasiūlyti kiti alternatyvūs kandidatai galintys paaiškinti stebimą emisiją. Taip pat aptariame galimus defektų šaltinius stebėti pavienių fotonų emisijai *h*-BN 1.6-2.2 eV diapazone.

### Literatūra

1. G. Cassabo, P. Valvin, B. Gil, Nat. Photonics 10, 262, (2016).
2. T. T. Tran, K. Bray, M. J. Ford, M. Toth, and I. Aharonovich, Nat. Nanotechnol. 11, 37 (2016).
3. Z. Shotan, H. Jayakumar, C. R. Conside, M. Mackoit, H. Fedder, J. Wrachtrup, A. Alkauskas, M. W. Doherty, V. M. Menon, and C. A. Meriles, ACS Photonics 3, 2490 (2016).
4. L. Weston, D. Wickramaratne, M. Mackoit, A. Alkauskas, C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B 97, 214104 (2018).