

Моделирование эпитаксиального формирования двумерных материалов на основе кремния и германия

К.А. Лозовой*, В.П. Винарский, А.П. Коханенко

Томский государственный университет, ул. Ленина, 36, Томск, 634050

*lka@sibmail.com

В настоящей работе строится физико-математическая модель эпитаксиального синтеза на различных подложках двумерных материалов IV группы — силицена и германена. Рассматриваются различные стадии формирования двумерного слоя толщиной от одного до нескольких монослоев, а также появления двумерных островков. Особое внимание уделяется установлению возможностей преодоления нуклеации островков и предотвращения нежелательного перехода от двумерного к трехмерному росту.

Графеноподобные материалы IV группы элементов, такие как силицен, германен и станен, с двумерной шестиугольной решеткой привлекают повышенное внимание исследователей последние несколько лет в связи с их экзотическими электронными и оптическими свойствами, обусловленными практически нулевой запрещенной зоной, малостью эффективных масс и такой же симметрией как у графена. Уникальные свойства графеноподобных 2D-материалов делают возможным создание на их основе совершенно новых типов приборов: топологических транзисторов, высокочувствительных газовых сенсоров, энергоемких источников питания, термоэлектрических генераторов, квантовых компьютеров [1, 2].

Основным методом синтеза двумерных материалов является их формирование из неравновесных гетероэпитаксиальных систем в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии [3]. Для всевозможных применений в современной нано- и оптоэлектронике необходимо создавать гетероструктуры с двумерными слоями с различными свойствами. В случае формирования двумерных кристаллов определяющее значение имеют толщина слоя материала, шероховатость поверхности, распределение упругих напряжений, наличие или отсутствие дефектов. При этом критически важным оказывается именно количество и качество осажденных монослоев, так как это определяет, например, возможность реализации в таком материале сверхпроводимости и топологических свойств [4]. Поэтому в настоящее время работы по созданию приборов нового поколения на основе двумерных кристаллов силицена, германена и станена находятся на стадии отработки

технологии получения таких двумерных структур, выбора подложки, сурфактантов, последовательности нанесения слоев.

В настоящей работе строится физико-математическая модель эпитаксиального синтеза на различных подложках двумерных материалов IV группы – силицена и германена. Рассматриваются различные стадии формирования двумерного слоя толщиной от одного до нескольких монослоев, а также появления двумерных островков. Особое внимание уделяется установлению возможностей преодоления нуклеации островков и предотвращения нежелательного перехода от двумерного к трехмерному росту. Результаты работы непосредственно применимы для определения условий синтеза качественных 2D-кристаллов силицена и германена и создания на их основе новых приборов с необходимыми характеристиками для нанозлектроники и нанозфотоники.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта № 19-72-00019.

Литература

1. Tao L., Cinquanta E., Chiappe D. *et al.* // Nature Nanotechnology, V. 10, 227 (2015).
2. Li X., Tao L., Chen Z. *et al.* // Applied Physics Review, V. 4, 021306 (2017).
3. Izhnin I.I., Kurbanov K.R., Lozovoy K.A. *et al.* // Applied Nanoscience, V. 10, 4375 (2020).
4. Molle A., Goldberger J., Houssa M. *et al.* // Nature Materials, V. 16, 163 (2017).