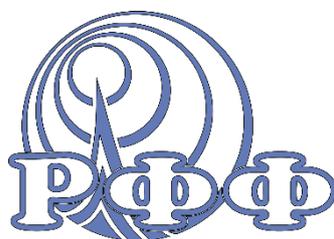


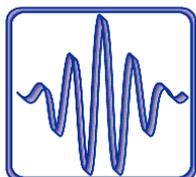


Национальный
исследовательский

**Томский
государственный
университет**



Радиофизический факультет



9-я Международная научно-практическая конференция
Актуальные проблемы радиофизики
АПР-2021

Сборник трудов конференции

при поддержке:



20-22 октября 2021 года
г. Томск

Моделирование эпитаксиального формирования двумерных материалов с учетом зависимости поверхностной энергии от толщины

Винарский Владимир Петрович

Андрей Павлович Коханенко, Кирилл Александрович Лозовой
Национальный исследовательский Томский государственный университет
E-mail: vinarskiy2017@gmail.com

В данной работе исследуется рост двумерных и нульмерных наноструктур. В процессе выращивания наноструктур методом молекулярно-лучевой эпитаксии происходит фазовый переход из газообразного состояния в твердое. Любой фазовый переход есть сложный многостадийный процесс. В данной работе будет уделено внимание четырём основным процессам, приводящимся по порядку стадий роста: зарождение островков, независимый рост островков, слияние островков и трёхмерный рост плёнки. При построении модели будет учитываться обнаруженная в ряде недавних работ зависимость поверхностной энергии растущего двумерного слоя от его толщины [1]. В данном случае имеется интерес к определению времени и условий роста материалов в зависимости от требуемых параметров наноструктур.

Графеноподобные аллотропные модификации различных элементов (например, силицен, германен, станен и др.) 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, энергоёмких источников питания, термоэлектрических генераторов, квантовых компьютеров [2, 3].

Основным методом синтеза двумерных материалов является их формирование из неравновесных гетероэпитаксиальных систем в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии [4]. 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 [5]. Поэтому в настоящее время работы по созданию приборов нового поколения на основе двумерных кристаллов находятся на стадии отработки технологии получения таких двумерных структур, выбора подложки, сурфактантов, последовательности нанесения слоев.

В данной работе рассматривается режим полной конденсации, реализуемый в методе молекулярно-лучевой эпитаксии, где подавляющее большинство атомов, осаждённых на поверхность из газообразной фазы, встраивается в растущую твердотельную плёнку. Десорбированными же обратно в газообразную фазу атомами можно пренебречь.

В настоящей работе представлена физико-математическая модель эпитаксиального синтеза двумерных материалов с учетом зависимости поверхностной энергии от толщины. Рассматриваются различные стадии формирования двумерного слоя толщиной от одного до нескольких монослоёв, а также появления двумерных и трехмерных островков. Особое внимание уделяется установлению возможностей преодоления нуклеации островков и предотвращения нежелательного перехода от двумерного к трехмерному росту. Определены временные зависимости пересыщения, скорости нуклеации и плотности островков при подобных режимах эпитаксиального роста. Результаты работы непосредственно применимы для определения условий синтеза качественных 2D-кристаллов и создания на их основе новых приборов с необходимыми характеристиками для наноэлектроники и нанофотоники.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-72-10031).

Список публикаций:

- [1] Дубровский В.Г. // *Теоретические основы технологии полупроводниковых наноструктур*. Санкт-Петербург: Университет ИТМО, 2019. - 225 с.
- [2] Tao L., Cinquanta E., Chiappe D. et al. // *Nature Nanotechnology*, V. 10. 2015. P.227.
- [3] Li X., Tao L., Chen Z. et al. // *Applied Physics Review*, V. 4. 2017. P.021306.
- [4] Izhnin I.I., Kurbanov K.R., Lozovoy K.A. et al. // *Applied Nanoscience*, V. 10. 2020. P. 4375.
- [5] Molle A., Goldberger J., Houssa M. et al. // *Nature Materials*, V. 16. 2017. P.163.