

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2019 г. по 30.06.2020 г.

по проекту «Разработка физико-математических моделей эпитаксиального формирования 2D-кристаллов силицена и германена для нанoeлектроники и нанофотоники»,

поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 19-72-00019

Руководитель: канд. физ.-мат. наук Лозовой Кирилл Александрович

Двумерными материалами обычно называют структуры толщиной в один или несколько атомных слоев [Ezawa M., et al. Focus on silicene and other 2D materials // *New Journal of Physics*. – 2015. – V. 17. – P. 090201 (1–3)]. В противоположность объемным материалам 2D-кристаллы имеют очень высокое отношение площади поверхности к объему. В связи с этим, энергетическая структура, большинство электрических и оптических параметров двумерных материалов определяются их поверхностными свойствами и являются очень чувствительными к внешним воздействиям.

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 [Molle A., et al. Buckled two-dimensional Xene sheets // *Nature Materials*. – 2017. – V. 16. – P. 163–169.]. Все это приводит, например, к очень высокой подвижности носителей заряда, а станен является одним из главных претендентов на создание сверхэффективных недорогих межсоединений интегральных микросхем. Кроме того, при определенных условиях в этих материалах проявляется квантовый спиновый эффект Холла при температурах значительно выше температуры жидкого азота и они являются топологическими изоляторами и высокотемпературными сверхпроводниками, что делает возможным создание на их основе приборов нового поколения: топологических транзисторов, высокочувствительных газовых сенсоров, энергоемких источников питания, термоэлектрических генераторов, квантовых компьютеров. Еще одним важным преимуществом силицена и германена является прямая совместимость с существующей высокоразвитой кремниевой технологией.

Основным методом производства 2D-кристаллов является их самопроизвольное формирование в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии. При этом на сегодняшний день существует лишь качественное описание процессов, происходящих при росте двумерных материалов, и отсутствуют теоретические модели, способные численно описать лежащее в основе синтеза 2D-материалов явление послойного роста. Кроме того, отсутствуют модели, которые бы позволили предсказать условия и описать особенности негативного процесса перехода от

последующего к островковому росту, нарушающего двумерность синтезируемого материала.

При этом критически важными оказываются такие характеристики получаемых структур, как количество слоев, их состав, величина упругих напряжений, наличие или отсутствие дефектов и примесей [Li X., et al. Graphene and related two-dimensional materials: Structure-property relationships for electronics and optoelectronics // *Applied Physics Review*. – 2017. – V. 4. – P. 021306 (1–31)]. Эти структурные характеристики непосредственно влияют на свойства 2D-материалов (например, возможность реализации в таком материале сверхпроводимости и топологических свойств [Liao M., et al. Superconductivity in few-layer stanene // *Nature Physics*. – 2018. – V. 14. – P. 344–348.]) и, следовательно, определяют параметры полупроводниковых приборов на их основе.

В данном проекте исследуются особенности эпитаксиального формирования силицена и германена на различных подложках.

На первом этапе работы были проведены предварительные ростовые эксперименты по синтезу материала с двумерными слоями кремния и германия на различных подложках. Синтез образцов гетероструктур производился с помощью сверхвысоковакуумной системы для получения тонких эпитаксиальных пленок «Катунь-100».

Были отработаны все технологические процессы синтеза гетероструктур с двумерными слоями кремния и германия и проведен анализ степени влияния условий эпитаксии в установке молекулярно-лучевой эпитаксии «Катунь–100» на особенности режимов роста двумерных наноструктур. Исследование морфологии поверхности синтезированных структур осуществлялось методами дифракции быстрых электронов и атомно-силовой микроскопии.

На основе имеющегося у коллектива исполнителей проекта научного задела, а также на основании новых полученных результатов разрабатывалась физико-математическая модель эпитаксиального роста двумерных кристаллов силицена и германена с учетом зависимости поверхностных энергий от толщины двумерного слоя и с учетом возможной нуклеации островков.

В результате, на первом этапе работы по проекту разработаны физико-математические модели роста двумерных кристаллов, учитывающие различные энергетические факторы роста и изменение условий синтеза, а также предложены способы предотвращения зарождения на их поверхности трехмерных островков.

Разработана методика и написана программа для расчета параметров двумерных структур силицена и германена с учетом зависимости поверхностных энергий от толщины двумерного слоя и с учетом возможной нуклеации островков.

По результатам проделанной работы в отчетном периоде опубликованы 2 статьи в зарубежных рецензируемых журналах, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus: *Surface Coatings & Technology* (Q1, импакт-фактор: 3.192) и *Applied Nanoscience* (Q2, импакт-фактор: 3.198).