

ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ ИНТЕРФЕЙСНОЙ СТРУКТУРЫ, СФОРМИРОВАННОЙ ПРИ КОНТАКТЕ ПЛАНАРНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ ГРАФЕНА, СИЛИЦЕНА И ГЕРМАНЕНА НА ПОВЕРХНОСТЯХ D-МЕТАЛЛОВ

Митрофанова Н.С.¹, Гусева А.Б.¹, Курбанова Э.Д.²

¹Институт материаловедения и металлургии УрФУ, г. Екатеринбург,

²Институт Металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург,

Natashka10102@[mail.ru](mailto:Natashka10102@mail.ru)

На основе компьютерного моделирования термической эволюции 2 и 3 D нанокластеров d-металлов выявлены особенности зарождения и активации кинетических процессов, определяющих температуры начала структурных трансформаций и потери термической неустойчивости функциональных элементов, происходящих в двумерных системах нанокластеров переходных металлов, размещенных на графеновых (Pd, Ag, Cu), силициновых (Ag, Pt) и германеновых (Pt, Au) подложках и образующих с ними в результате контакта специфическую поверхность раздела (интерфейс) с разными по величине энергиями связи.

На основе прогностических компьютерных моделей [1] и успешный опыт применения техники лучевой эпитаксии и газофазного синтеза с формированием структур монослоев и стопок графена приемлемых размеров стимулировали попытки получения таким же методом двумерных кристаллов других полупроводников - Si, Sn и Ge [2]. Подобные функциональные гетероструктуры (свитчеры, транзисторы и т.д.) могут быть сформированы (как и уже имеющиеся для графена), в контактных областях при эпитаксиальном осаждении атомов Si, Ge и даже Sn на металлические подложки, воспроизводя взаимоналожение несоизмеримых по периоду гексагональных решеток, соответственно, синтезируемых силицена, германена и станена с поверхностями металлов.

Таким образом, успешно синтезирован силицен с устойчивой структурой только на поверхностях (111) и (001)-Ag. Структура оказалась не вполне планарной (при суммарной толщине интерфейса Si-Me 1,6нм), а ребристой (волнистой), но не настолько с выраженными sp^2/sp^3 гибридованными координациями, как в случае модельных ребристых Si-сфероидов (аналогов фуллерена). Согласно анализу данных оптических экспериментов углового фотоэлектронного спектра (APPEs) и спектра низкоэнергетических потерь отраженными электронами (REELS) найдено подтверждение, sp^2/sp^3 гибридизации. На основе спектрометрии (APPEs) для полученных CVD-осаждением нанолент силицена была установлено также, как и для графена наличие характерной особенности спектра состояний в зоне Бриллюэна – конуса Дирака (образуемого 3D пространственным

пересечением π^* и π зон). Установлена на основе анализа СТМ- и LEED (низко-энергетической электронной дисперсии) координационная специфика структуры силицена, по типу рингкластерной суперрешетки кремния периодичности 3×3 на поверхности (111)- Ag (с решеткой периодичности 1×1). Предлагались и другие варианты расшифровки рингкластерной структуры монослоя силицена на основе периодичности с элементарными суперячейками $(13^{1/2} \times 13^{1/2}) R^0 13,9$ и $(2,3^{1/2} \times 2,3^{1/3}) R 30^0$, схожими с идентифицированными при анализе структуры германена, синтезированного на субстратах Pt и Au (рисунок 1)[2].

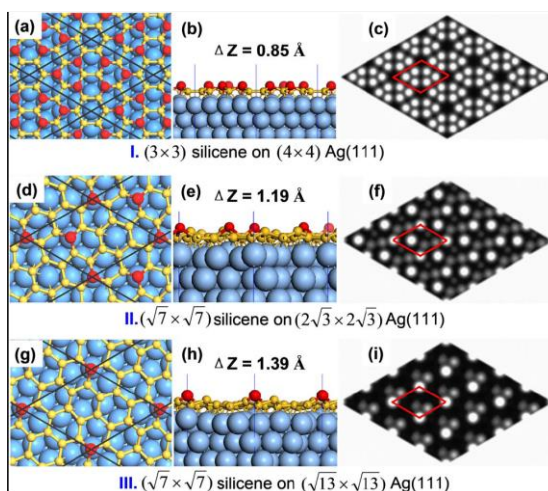


Рис.1 Характер размещения атомных структур (I-III типа) силицена (размещенные на суперструктурах Ag) и соответствующие им модельные СТМ-образы (с, f, h): (a), (d), (g) и вид сверху; (b), (e), (h) – вид сбоку; ΔZ – отклонение по отношению к поверхности (111) Ag, размеры атомов максимально удаленных (~ 0.2 нм) даны с увеличением и темно-окрашенные [2].

Но в отличие от графена формирование планарных π -связей в силиcene не является энергетически конкурентным в сравнении с более сильными взаимодействиями состояний $3p$ -Si и $4d$ -Ag. Наряду с орбитальным взаимодействием pz -Si и $4d$ -Ag имеет место частичная sp^2 -гибридизация в рингкластерах Si_N , формируемых на поверхности (111)-Ag. Двойной характер sp^2 -гибридизации Si определяют специфическую стабильность силицена на основе не только одной или двух координаций в сравнении с таковой графена. Было выяснено, что при сравнении структуры германена с основной структурой фазы силицена на (111)-Ag, отмеченной как $3 \times 3/4 \times 4$, согласованность которой с ячейками на (111)-Ag, как и в случае интерфейса германена на поверхности (111)- Au параметры наблюдаемой гексагональной решетки были завышены. При этом наблюдалось соответствие такой ячейки суперструктуре $7^{1/2} \times 7^{1/2} R(19.1^\circ)$ на (111)-Ag интерфейса силицена, что и показал дифракционный снимок, полученный в рамках наблюдений LEED.

При этом присутствие дополнительных рефлексов свидетельствует о сосуществовании трех основных фаз, показанных на рис.2(с): $19^{1/2} \times 19^{1/2} R(23,4^\circ)$, 5×5 и вышеупомянутой $7^{1/2} \times 7^{1/2} R(19.1^\circ)$, имеющей отношение к базисным векторам 1×1 для поверхности (111) Au. При формировании силицена, германена а в последствии и станена [3], как известно, на процесс оказывает влияние гибридизация sp^2/sp^3 орбиталей, поскольку у них стабильных аллотропных аналогов с sp^2 –графена нет. Идентификация структуры германена была произведена экспериментально при изучении графиков синхротронного излучения подсистем из осажденных атомов Ge (3d) и субстрата Au (4f). Параллельно были проведены расчеты в рамках модифицированной теории функционала плотности с оценкой стабильности композиционной системы Ge/Au [3]. Самыми удивительными оказались результаты квантовомеханических расчетов в рамках теории функционала плотности и квантового аналога МД-моделирования характеристик «станена»- 2D-кристалла олова, а также станана, то есть станена, границы которого с ненасыщенными связями пассивированы атомами водорода, по сути - аналога графана. Как и стехиометрические 3D-кристаллы Bi_2Si_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , 2D-кристаллы HgTe (материалы со свойствами квантовой ямы) в соответствии с данными прогностических расчетов, 2D-кристалл Sn также может быть отнесен по электронным свойствам и состоянию к материалам TIs –топологическим квантово-спиновым изоляторам [4]. TIs-электронные состояния отличает от обычных то, что объемная часть этих материалов (к примеру в виде проволок) по свойствам является изолятором (с шириной запрещенной зоны $\sim 0.3\text{эВ}$), а их поверхности (и края особенно со спиралевидной атомной структурой) – металлы, зонная структура которых защищена «временной – реверсивной симметрией» Если прогнозы оправдаются, то технологи обретут для разработок в области слабо точной электроники ТИ-сверхпроводники (проволоки) с бездиссипативным транспортом электрзаряда (с шириной запрещенной зоны в $\sim 0,3\text{эВ}$) с термостабильностью сверхпроводимости до 100°C [4].

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ:

1. Polukhin V.A. et al. Russ. Metallurgy (Metally). 8. P.633 (2014).
2. Brumfiel G. Nature 495. 153 (2013)
3. M. E. Dávila, L Xian, S Cahangirov et al. New J. Phys. 16 P.095002 (2014)
4. Yong Xu, Binghai Yan, Hai-Jun Zhang et al. Large-Gap Quantum Spin Hall Insulators in Tin Films. Phys. Rev. LETT. 111, 136804 (2013)