

Для решения поставленной задачи был спроектирован модуль управления установкой «КЛАВИ-Р» (структурная схема представлена на рис. 1), в состав которого входят:

- тактирующий генератор, синхронизирующий работу фоторегистрирующей системы и ускорителя электронов;
- необходимая коммутация, для связи генератора с ПК и с установкой;
- соответствующее программное обеспечение.

В качестве тактирующего генератора было принято использовать отладочную плату stm32f401c-disco на базе контроллера на stm32f401vc с ARM-ядром Cortex-M4F.

В результате работы написана программа для генерации тактирующих импульсов платой stm32f401c-disco. Написана программа интерфейс для управления тактирующим генератором с ПК. Собран преобразователь уровней UART-RS-232 для коммутации платы и ПК. Спроектирован усилитель мощности для усиления тактирующих сигналов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (стипендия Президента РФ – 2015) и УрФУ (грант молодым ученым - кандидатам наук).

ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ АТОМНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СТРУКТУР ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ИНТЕРФЕЙСОВ ГРАФЕНА И СИЛИЦЕНА НА ПОДЛОЖКАХ МЕТАЛЛОВ

Митрофанова Н.С.^{1*}, Курбанова Э.Д.², Ригмант Л.К.², Полухин В.А.^{1,2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: Natashka10102@mail.ru

THERMOSTABILITY OF ATOMIC AND ELECTRONIC STRUCTURE WITH THE INTERFACE FORMATION OF GRAPHENE AND SILICON ON A SUBSTRATES METALS

Mitrofanova N.S.^{1*}, Kurbanova E.D.², Rigmant E.D.², Polukhin V.A.^{1,2}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of metallurgy, Ural branch, Russia

Annotation. Analyzing MD simulation data on the thermic evolution of G/M, Si/M interface there are have been established the specificities and criteria of functional stability of atomic, electron (conserving Dirac cone) structures, as main condition of exelant electronic properties (superconductivity including).

С развитием метода химического газофазного осаждения (CVD), а также лучевой эпитаксии металлов на заранее приготовленные (CVD-методом) подложки – этими методами успешно проведен синтез материалов – со специфическими контактными поверхностями раздела графен/Me на плоскостях ГПУ (001) Co и Ru, для ГЦК (111) Ni, Pt, Pd, а также Ir. Наиболее полно экспериментально исследованы системы контактных пар металлов Ir-, Ru-, Pd-графен [1].

Этот успешный опыт применения техники лучевой эпитаксии и газофазного синтеза с формированием структур монолистов и стопок графена приемлемых размеров стимулировали попытки получения таким же методом двумерных кристаллов других полупроводников – G и Si [2]. Как и в случае графена поверхность раздела (интерфейс) сформировалась в результате сорбции (адсорбции или хемосорбции) во многом благодаря нанодиапазону и особому характеру межплоскостного взаимодействия. Из анализа внешней поверхности силицена моделируемых структур (таблица) очевидно, что двойные кольца формируются с разным количеством атомов Si, $1/3$, $1/7$ или 1 с существенным снижением в ряду анализируемых структур, дефектов, нарушающих планарность силицена – усилением волнистости (ΔZ).

В отличие от адсорбционных интерфейсов графена (при контактах с Al и d-металлами Cu, Ag, Pt, Au) при формировании хемосорбционных интерфейсов графена с подложками Ni, Ti, Co, Pd посредством гибридизации состояний p_z - и d-состояний наблюдается разрушение уникальной электронной структуры – конуса Дирака графена с потерей специфических свойств проводимости. Легированием интерфейса графен/Ni его межслойным расклинивающим интеркалированием щелочными металлами (Na, K, Cs), sp-металлами (на примере Al) и даже d-металлами (Au, Cu) с целью ослабления хемосорбционных связей графена с подложкой Ni удалось восстановить для графена электронные состояния конуса Дирака. Такой же подход – легирование с межслойной интеркаляцией щелочными металлами реализован для интерфейсных состояний силицен/металл (субстраты M: Ag, Pt, Au, Cu, Ir, а также Al Mg) выполнен МД-моделированием с оцененными в рамках ab-initio DFT- теории межчастичными взаимодействиями.

Наиболее эффективно интеркаляционное ослабление интерфейсных связей силицена с вышеуказанными металлами достигалось с формированием подслоя (в поверхности раздела) из щелочных атомов при размещении их под Si-гексагонами силицена. Так что расстояние щелочных атомов от плоскости силицена (d_1), примеру для Na составляло 0.255нм, а до атомов металла подложки (d_2) от 0.251 до 0.317нм), (таблица). Таким образом, энергия связи E_c Ir-Si равна работе расклинивания интерфейса (0.70 эВ/атом Si) – с последующей интеркаляцией в создающуюся полость K с энергией интеркалирования, E_{int} (3.31 эВ/атом Si) возникающая при образовании связей между интеркалированным металлом с силиценом, с одной стороны и Me-подложки с другой стороны, что сопровождается сдвигом энергии Ферми $\Delta E_F = -0.62$ эВ по отношению E_F интерфейса Si/M [3].

Таблица. Полученные квантово-механическими расчетами, МД-моделированием и экспериментально для интерфейсов G/M и Si/M величины энергии когезии, E_c , в расчете на один атом C или Si, транспорта заряда (допинг) Δq , значения равновесных межатомных расстояний между контактными слоями, d_c и $d_{M/Si}$; сдвиг энергии ΔE_F при выравнивании уровней Ферми G/M и G/Si; a_c, c_h – параметры решеток металлов.

Сорбция металл/графен	Физическая адсорбция (допинг)						Хемосорбция (с перекрыванием π -d связей)			
	Al	Ag	Au	Cu	Pt	Ir	Pd	Ru	Co	Ni
Me	Al	Ag	Au	Cu	Pt	Ir	Pd	Ru	Co	Ni
E_c , эВ/атом	0,03	0,03	0,03	0,03	0,04	0,03	0,09	0,14	0,41	0,13
$-\Delta q, 10^2 \cdot e$	0,3	0,7	0,78	0,81	-	-	0,13	-	0,23	0,21
d , нм	0,34	0,32	0,33	0,3	0,32	0,31	0,28	0,23	0,214	0,21
ΔE_F , эВ	0,51	0,35	0,20	0,19	0,15	0,13	-	-	-	0,07
a_c, c_h нм	0.40	0.40	0.40	0.36	0.39	0.38	0.38	0.27	0.251	0.35
Сорбция металл/графен										
Me	Pt	Au	Ir	Ag	Al	Mg	Cu			
$\Delta P_{M/Si}$, эВ	4.55	4.56	5.05	4.36	4.12	3.98	4.45			
E_c , эВ	1.74	0.63	1.69	0.41	0.35	0.39	0.41			
$d_{M/Si}$	0.197	0.181	0.195	0.139	0.212	0.152	0.157			
ΔZ , нм	0.033	0.021	0.083	0.116	0.029	0.152	0.125			
$\pm \Delta q$	0.06	0.04	0.13	-0.07	0.06	-0.21	-0.04			
a_c нм	0.734	0.763	0.718	0.734	0.758	0.642	0.763			
Me	Pt	Au	Ir	Ag	Al	Mg	Cu			

1. Полухин В.А. Курбанова Э.Д., Зависимость термостабильности интерфейсных состояний d-металлов (Cu, Pd, Ti, Ni) и Al с графеном от характера сорбции и диффузионной подвижности в контактной зоне, ЖФХ. Т. 89 № 3, С. (3–21), (2015).
2. Vogt P. De Padova . Quaresima . Avila J, Frantzeskakis E, Asensio M. Resta A. Ealet B and Le Lay G. Silicene, Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon, Phys. Rev. Lett, Vol. 108, P. 15550 (1-5), (2012).
3. Quhe R. Yuan Y. Zheng J., Does the Dirac Cone Exist in Silicene on Metal Substrates, Scientific Reports, Vol. 4, P. 5476 (1-8), (2014).