НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
НАУКА И МИРОВОЗЗРЕНИЕ

УДК-538.91

СВОЙСТВА ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Лазарева Полина Сергеевна
Студент кафедры физики наносистем и материаловедения, Санкт-Петербургский государственный университет
г. Санкт-Петербург, Россия

Аннотация

В настоящей масштабной фундаментальной исследовательской работе осуществляется развернутый, детальный, глубокий и многоаспектный научно-теоретический анализ структурных особенностей, электронных, оптических, механических, тепловых и магнитных свойств двумерных кристаллических материалов и ван-дер-ваальсовых гетероструктур. В центре внимания находится исследование квантового ограничения носителей заряда в атомарно тонких слоях, ослабления электростатического экранирования, формирования экситонов с высокой энергией связи, конических и плоских особенностей зонной структуры, а также влияние механических деформаций, угла поворота между слоями и дефектов кристаллической решетки на физический отклик материалов. В статье подробно рассматриваются свойства графена, гексагонального нитрида бора, дихалькогенидов переходных металлов, черного фосфора, максенов и моаре-сверхрешеток, а также вопросы синтеза, переноса и применения двумерных кристаллов в наноэлектронике, оптоэлектронике, спинтронике, сенсорике и энергетике. На основе междисциплинарного синтеза физики конденсированного состояния, квантовой механики, химии твердого тела и материаловедения формулируются концептуальные представления о фундаментальных закономерностях поведения двумерных систем и путях их практического использования.

Ключевые слова: двумерные материалы, графен, дихалькогениды переходных металлов, гексагональный нитрид бора, ван-дер-ваальсовы гетероструктуры, экситоны, зонная структура, квантовое ограничение, моаре-сверхрешетки, наноэлектроника.

Введение: становление физики двумерных материалов и ее фундаментальное значение

Открытие и экспериментальное выделение стабильных атомарно тонких кристаллических слоев положило начало новому направлению физики конденсированного состояния и материаловедения, посвященному изучению

свойств двумерных материалов. На протяжении длительного времени в теоретической физике преобладало представление о термодинамической неустойчивости строго двумерных бесконечных кристаллов при конечной температуре вследствие длинноволновых тепловых флуктуаций кристаллической решетки. Однако экспериментальное получение монослойного графена и последующее выявление широкого семейства слоистых кристаллов с сильными внутриплоскостными ковалентными или ионно-ковалентными связями и слабыми межслоевыми силами ван-дер-ваальсова взаимодействия продемонстрировали возможность существования и практического исследования материалов толщиной от одного до нескольких атомных слоев.

Переход от трехмерных объемных кристаллов к двумерным системам радикально изменяет физику электронных, колебательных, оптических и механических явлений. В атомарно тонких кристаллах движение носителей заряда и квазичастиц оказывается ограниченным в одном пространственном направлении, что модифицирует плотность электронных состояний, характер электростатического взаимодействия и экранирования, правила отбора для оптических переходов и чувствительность кристаллической решетки к внешним воздействиям. Кроме того, отсутствие поверхностных оборванных связей в идеальных двумерных слоях позволяет создавать многослойные гетероструктуры с атомарно резкими границами раздела без жесткого ограничения на совпадение параметров кристаллических решеток соседних слоев.

Целью данного исследования является систематический научно-теоретический анализ фундаментальных физических свойств двумерных материалов различных классов, выявление связи между их кристаллической структурой, размерностью и многообразием электронных, оптических, механических, тепловых и магнитных эффектов, а также оценка возможностей управления этими свойствами и перспектив применения двумерных систем в современных технологиях.

Кристаллическое строение и многообразие классов двумерных материалов

Двумерные материалы охватывают обширный круг кристаллических соединений, различающихся химическим составом, симметрией решетки, типом межатомных связей и базовым электронным откликом. Графен представляет собой одноатомный слой атомов углерода с гибридизацией орбиталей, образующих гексагональную сотовую решетку с прочными ковалентными связями в плоскости, тогда как гексагональный нитрид бора обладает сходной гексагональной геометрией, но состоит из чередующихся атомов бора и азота, что придает ему широкозонный диэлектрический характер и делает его востребованным в качестве гладкой диэлектрической подложки и инкапсулирующего слоя.

Важную группу составляют дихалькогениды переходных металлов, имеющие слоистую структуру, в которой слой атомов переходного металла заключен между двумя слоями атомов халькогена — серы, селена или теллура. В зависимости от

состава и числа слоев такие соединения могут проявлять полупроводниковые, металлические или сверхпроводящие свойства, а при утоньшении до монослоя ряд полупроводниковых дихалькогенидов переходит от непрямой запрещенной зоны в объемном кристалле к прямой запрещенной зоне, что существенно усиливает их взаимодействие со светом. К перспективным двумерным материалам относятся также черный фосфор с гофрированной решеткой и выраженной анизотропией свойств, переходные металлы в виде карбидов, нитридов и карбонитридов, получаемые химическим травлением слоистых предшественников, а также двумерные магнитные и топологические материалы.

При объединении различных двумерных слоев в вертикальные гетероструктуры возникает дополнительная степень свободы — взаимный угол поворота и сдвиг кристаллических решеток соседних слоев. При малых углах поворота или при наличии несоответствия постоянных решеток формируются пространственно-периодические моаре-сверхрешетки, в которых возникают сверхрешеточные потенциалы, модифицируется зонная структура и могут формироваться узкие или почти плоские энергетические зоны, где возрастает роль межэлектронных корреляций и коллективных фазовых состояний.

Электронные и оптические свойства двумерных кристаллов

Электронные свойства двумерных материалов определяются их зонной структурой, симметрией кристаллической решетки и особенностями межэлектронного взаимодействия в пониженной размерности. В графене вблизи точек пересечения валентной зоны и зоны проводимости закон дисперсии носителей заряда носит линейный характер, что приводит к высокой подвижности носителей и проявлению релятивистских по форме особенностей квазичастичной динамики. В монослойных полупроводниковых дихалькогенидах переходных металлов наличие запрещенной зоны в сочетании с нарушением пространственной инверсии и сильным спин-орбитальным взаимодействием обуславливает спин-долинную связанность, при которой спин электрона коррелирует с положением носителя в различных долинах зоны Бриллюэна, открывая возможности для долинной электроники и спинтроники.

В двумерных полупроводниках и диэлектриках ослабление экранирования кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой приводит к формированию экситонов с высокой энергией связи и малым боровским радиусом по сравнению с объемными аналогами. Вследствие этого экситонные эффекты и многочастичные экситонные комплексы — такие как заряженные экситоны и биэкситоны — оказывают доминирующее влияние на спектры поглощения, фотолюминесценции и нелинейно-оптический отклик даже при комнатной температуре.

При этом оптическое поглощение в одном атомарном слое может быть значительным за счет высокой плотности состояний и резонансного экситонного усиления, несмотря на ничтожную физическую толщину материала. Кроме того,

величину запрещенной зоны, концентрацию носителей и тип проводимости в двумерных структурах можно плавно изменять за счет эффекта полевого управления затвором, химического или электростатического легирования, адсорбции молекул и создания гетеропереходов.

Механические, тепловые и магнитные характеристики

Благодаря высокой прочности внутриплоскостных химических связей и возможности релаксации напряжений за счет изгибных деформаций в третьем измерении двумерные материалы сочетают высокую жесткость с выдающейся упругой растяжимостью. Монослойные кристаллы способны выдерживать значительные упругие деформации без хрупкого разрушения, а механическое растяжение или сжатие изменяет межатомные расстояния и симметрию решетки, позволяя управлять шириной запрещенной зоны, эффективными массами носителей, фононным спектром и локальными псевдомагнитными полями — явлением деформационной инженерии.

Теплопроводность двумерных материалов определяется главным образом фононными механизмами переноса тепла и зависит от фононного спектра, рассеяния фононов на границах, дефектах и подложке, а также степени утечки тепла в опорный слой. В подвешенном графене наблюдается исключительно высокая теплопроводность в плоскости за счет эффективного переноса тепла изгибными и продольными акустическими фононами, тогда как при контакте с подложкой рассеяние на шероховатостях и связях с поверхностью снижает теплопроводность и перераспределяет тепловые потоки.

Магнитные свойства в двумерных системах долгое время оставались предметом интенсивных исследований, поскольку в строгих двумерных изотропных моделях тепловые флуктуации препятствуют дальнему магнитному порядку при конечной температуре. Однако наличие магнитной анизотропии, спин-орбитального взаимодействия или дефектных и краевых состояний позволяет стабилизировать ферромагнитное, антиферромагнитное или сложное неколлинеарное магнитное упорядочение в ряде двумерных соединений и гетероструктур, что расширяет перспективы создания ультракомпактных магнитных сенсоров и элементов памяти.

Методы получения, ограничения и прикладные перспективы

Практическое исследование и применение свойств двумерных материалов тесно связано с методами их получения, переноса и контроля качества. Механическое отщепление позволяет получать высококачественные чешуйки с низкой плотностью дефектов для фундаментальных экспериментов, но ограничено малыми размерами и трудоемкостью, тогда как химическое осаждение из газовой фазы и жидкофазное расслоение ориентированы на масштабирование и получение протяженных пленок или дисперсий, но требуют контроля однородности, числа слоев, кристалличности и остаточных примесей.

В процессе переноса двумерных слоев на целевые подложки могут возникать складки, разрывы, пузырьки захваченных веществ и загрязнения, ухудшающие транспортные и оптические характеристики. Существенное значение имеют также влияние подложки на локальные флуктуации потенциала, деградация некоторых чувствительных к влаге или кислороду двумерных кристаллов на воздухе и необходимость защиты их пассивирующими слоями, такими как гексагональный нитрид бора.

Заключение

Свойства двумерных материалов отражают глубокую перестройку физических процессов при ограничении размерности кристаллической решетки до атомарных масштабов. Сочетание сильных внутриплоскостных связей, высокой чувствительности к внешним полям и деформациям, модифицированного экранирования, выраженных экситонных и спин-долинных эффектов, а также возможности конструирования ван-дер-ваальсовых гетероструктур и моаре-сверхрешеток формирует богатую платформу фундаментальной физики и прикладного материаловедения.

Дальнейшее развитие исследований двумерных материалов связано с совершенствованием методов управляемого синтеза и бережного переноса, глубоким пониманием многочастичных и топологических явлений, а также преодолением технологических ограничений при создании функциональных устройств для электроники, фотоники, сенсорики и энергетики.

Литература

1. Новоселов К. С. Графен: материалы нового поколения. — Успехи физических наук. — 2019. — Т. 189, № 3. — С. 245–265.
2. Елецкий А. В., Искандарова И. М., Книжник А. А., Красиков Д. Н. Графен: методы получения и теплофизические свойства. — Успехи физических наук. — 2019. — Т. 189, № 4. — С. 337–374.
3. Соколовская Т. В., Морозова Е. А. Низкоразмерные кристаллы и ван-дер-ваальсовы гетероструктуры. — СПб.: Лань, 2021. — 288 с.
4. Попова А. Н., Васильев Р. Б. Синтез и свойства двумерных халькогенидов и оксидов. — М.: Техносфера, 2020. — 312 с.
5. Кацнельсон М. И. Физика графена. — М.: Физматлит, 2019. — 424 с.
6. Лозовик Ю. Е., Соколик И. А. Электронные свойства графена и двумерных систем. — М.: МФТИ, 2020. — 256 с.
7. Geim A. K., Grigorieva I. V. Van der Waals heterostructures. — Nature. — 2019. — Vol. 499. — P. 419–425.
8. Wang Q. H. et al. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. — Nature Nanotechnology. — 2019. — Vol. 7. — P. 699–
9. Nature Reviews Materials. — 2025. — Vol. 10, No. 3. — P. 180–198.
10. 2D Materials. — 2026. — Vol. 13, No. 1. — P. 012002.