Розуван Тамара Станіславівна, тимчасово не працює: &laquo;Оптичні властивості і електронна будова поверхневих наноструктур з різним типом атомного впорядкування&raquo; (01.04.05 - оптика, лазерна фізика). Спецрада Д 26.001.23 у Київському національному університеті імені Тараса Шевчен&shy;ка

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

На правах рукопису

Розуван Тамара Станіславівна

УДК 535.016

ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ І ЕЛЕКТРОННА БУДОВА

ПОВЕРХНЕВИХ НАНОСТРУКТУР

З РІЗНИМ ТИПОМ АТОМНОГО ВПОРЯДКУВАННЯ.

01.04.05 – Оптика, лазерна фізика

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата

фізико-математичних наук

Науковий керівник

Поперенко Леонід Володимирович

докт. фіз.-мат.наук, проф.

Київ – 2017

2

ЗМІСТ

ВСТУП …………………………………………………………………... 4

РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ…………………………………… 11

1.1 Оптичні і структурні властивості вуглецевих алотропів:

вуглецеві нанотрубки, графени………………………………..……….. 11

1.2 Оптичні і морфологічні структурні властивості кремнію………… 15

1.3 Оптичні і поверхневі структурні властивості хрому……………… 18

1.4 Оптичні і поверхневі структурні властивості міді………………… 20

РОЗДІЛ 2. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕННЯ ДОСЛІДЖЕНЬ………... 24

2.1 Спектральний еліпсометричний метод і установка для

дослідження оптичних сталих

n()

і

k()…………………………… 24

2.2 Скануюча тунельна , атомно-силова та магнітно-силова

мікроскопія наноструктур………………………………………………. 26

2.3 Квантовомеханічні обчислення параметрів молекул на основі

наближених розв’язків стаціонарного рівняння Шредінгера……….... 28

РОЗДІЛ 3. ОПТИЧНІ І МОРФОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ

НАНОСТРУКТУРОВАНИХ УТВОРЕНЬ ВУГЛЕЦЮ………….... 34

3.1. Спектри поглинання та скануюча тунельна мікроскопія

вуглецевих нанотрубок…………………………………………………. 34

3.2 Експериментальне і теоретичне визначення просторового

розподілу електронної густини вуглецевої нанотрубки……………… 38

3.3. Параксіальний розв’язок рівняння Шредінгера для

де-Бройлівських хвиль електронів у вуглецевих нанотрубках……….. 42

3.4 Експериментальне вивчення типу провідності вуглецевих

нанотрубок та типу кристалічної гратки напівпровідникової

нанотрубки……………………………………………………………….. 47

3.5 Оптичні властивості і просторовий розподіл електронної густини

шарів графену на мідній підкладці …………………………………….. 51

3

3.6 Оптична анізотропія наноструктурованої поверхні піролітичного

графіту…………………………………………………………………….

РОЗДІЛ 4. ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ

НАНОСТРУКТУРОВАНИХ ПОВЕРХОНЬ КРЕМНІЮ, ХРОМУ

ТА ОКСИДІВ НА ПОВЕРХНІ МІДІ…………………………………

62

69

4.1. Вплив шорсткості поверхні і шару оксиду на оптичні константи

кремнію виміряні за еліпсометричною методикою…………………... 69

4.2 Вивчення прострової структури наноострівців на поверхні

кремнію…………………………………………………………………... 75

4.3. Магнітне нановпорядкування в полікристалічному і

монокристалічному хрому…………………………………………….... 80

4.4. Визначення розподілу густини електронних станів та оптичних

дисперсійних кривих оптичної провідності хрому з різним типом

впорядкування кристалічної гратки та спінової

структури……………………………………………………………..….. 85

4.5. Вивчення просторового розподілу оксидованих нанокластерів

на поверхні міді………………………………………………………….. 90

4.6. Особливості просторового розподілу густини електронних

станів та дисперсійних кривих густини електронних станів

оксидованих нанокластерів на поверхні

міді…………………………………………………………………….…. 93

ВИСНОВКИ…………………………………………………………….. 98

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ……………………………. 100

4

ВСТУП

Актуальність теми

Одним з напрямків сучасної оптики, що активно розвивається, є напрям,

що пов’язаний з дослідженням нанооб’єктів на металевій чи

напівпровідниковій поверхні або дослідження наноструктурованих під дією

зовнішніх чинників поверхонь. Наразі знайдено можливості створення

широкого класу таких об’єктів: наноострівців, нанотрубок, матеріалів з

пониженою розмірністю (графенів). Розвиток цього напрямку тісно повязаний з

практичними аспектами створення електронних та електронно-оптичних

пристроїв з розмірами робочих елементів в нанометровому діапазоні. З точки

зору класичної оптики такого типу дослідження мають дві фундаментальні

особливості. По-перше, врахувати розміри наноструктур, з якими взаємодіє

світло, на декілька порядків менші від довжини хвилі світла, що ставить задачу

подальшого розвитку певних оптичних підходів для описання взаємодії світла і

речовини. По-друге, розглядати взаємодію електромагнітної хвилі з металом чи

напівпровідником і індуковані нею носії електричного заряду у просторово

локалізованих об’ємах того ж самого порядку малості, як і їх де-Бройлівська

довжина хвилі. Це автоматично призводить до врахування квантово-механічних

явищ (наприклад, тунельний ефект), які можуть кардинально змінювати фізичні

параметри поверхні.

Зв’язок роботи з науковими програмами, планами, темами

Робота виконувалась в рамках наукової теми №11БФ051-01

“Фундаментальні дослідження в галузі фізики конденсованого стану і

елементарних частинок, астрономії і матеріалознавства для створення основ

новітніх технологій”, номер державної реєстрації 0111U004954.

5

Мета і задачі дослідження

Мета досліджень, представлених у дисертації, є: 1) з’ясування

взаємозв’язку специфіки атомної будови наноструктур з дисперсійними

залежностями густини електронних станів в приповерхневому шарі. 2)

встановлення енергетичної схеми наноструктурованих поверхонь, сформованих

під дією хімічних процесів та магнітних сил.

Основним завданням роботи було 1) встановлення енергетичної схеми

наноструктурованих поверхонь, сформованих в тому числі під дією хімічних

процесів та магнітних сил, ; 2) з’ясування впливу квантовомеханічних процесів,

в тому числі процесів, повязаних з проходженням де-Бройлівських хвиль

електрона на форму спектрів (дисперсію густин електронних станів)

наноструктурованих поверхонь.

Для виконання поставлених завдань було заплановано:

- провести спектрально- та кутово-залежні еліпсометричні виміри

наноструктурованих поверхонь;

- провести атомно-силову та скануючу тунельну мікроскопію

нанооб’єктів на поверхнях з різним типом провідності з метою

експериментального вивчення їх атомної будови;

- теоретично розрахувати енергетичні зони наноструктур на поверхні з

використанням квантово-механічних методик функціоналу густини та

варіаційних методик в базисних фунціях наближеного розвязку рівняння

Шредінгера за методикою Хартрі-Фока.

Об’єкт дослідження – взаємодія оптичного випромінювання з

наноструктурами та наноструктурованими поверхнями різного типу

провідності на поверхні провідних тіл.

Предмет дослідження – вуглецеві наноструктури на поверхні

піролітичного графіту, нанотрубки та графени на поверхні міді а також

наноструктурована поверхня хрому, кремнію і оксидованої поверхні міді.

Методи дослідження

6

- спектральна та кутово-залежна еліпсометрія наноструктурованих

поверхонь напівпровідників та металів;

- атомно-силова та скануюча тунельна мікроскопія наноструктурованих

поверхонь для експериментального вивчення фізичних процесів на цих

поверхнях;

- теоретичний розрахунок енергетичних зон поверхневих наноструктур з

використанням методик функціоналу густини з базисними функціями

наближених розв’язків рівняння Шредінгера за методикою Хартрі-Фока.

Наукова новизна одержаних результатів полягає у наступному:

1. Проведено комплексне (оптичне, атомно-силове,

тунельно-мікроскопічне та теоретичне) дослідження вуглецевих

наноструктур та поверхневих наноструктур для міді, хрому і кремнію, що

дозволило виявити оптичну анізотропію вуглецевих наноструктур.

2. З’ясовано, що розмір і форма наноструктур суттєво впливають на

оптичні і інші фізичні властивості досліджених об’єктів, а саме, призводять

до оптичної анізотропії наноструктурованої поверхні, а морфологія

наноострівців та нанокластерів на поверхні провідного середовища

визначається структурою його кристалічної гратки.

3. Встановлено, що навіть при нанотовщинах поверхневого шару на

металах і напівпровідниках вже не можна при визначенні їхніх оптичних

сталих користуватися класичними формулами металооптики для

напівнескінченного середовища, а необхідно використовувати формули, які

враховують наявність такого тонкого поверхневого шару.

4. Встановлено, що плазмові коливання електронів в металі суттєво

впливають на оптичну провідність графену, нанесеного на мідну поверхню, в

межах власної смуги поглинання графіту, де оптична провідність графену

різко зростає.

7

5. Експериментально виявлено відмінність між металевими і

напівпровідниковими вуглецевими нанотрубками, яка пов’язана з

особливостями їх атомного впорядкування.

6. Виявлено вплив квантово-механічних процесів, пов’язаних з

поводженням де-Бройлівських хвиль електронів, на дисперсію густин

електронних станів наноструктурованих поверхонь.

7. Вперше отримано розв’язок стаціонарного рівняння Шредінгера для

вільного електрона у параксіальному наближенні, з якого слідує, що

де-Бройлівські хвилі вільних електронів на поверхні провідних тіл існують у

вигляді хвиль з Гаусівським профілем просторового розподілу амплітуди. Це

призводить до більш детального формулювання квантово-механічного

принципу невизначеності, який встановлює величину просторової роздільної

здатності вимірів скануючої тунельної мікроскопії.

Практичне значення одержаних результатів

Розроблена теоретична модель розрахунку електронних станів

(застосована до вуглецевих нанотрубок, а також до нанокластерів на поверхні

хрому і міді) може бути використана в курсі лекцій з оптики твердого тіла та

оптичного матеріалознавства для студентів фізичних факультетів університетів.

Спектральні дослідження оптичних сталих графену дозволять

оптимізувати коефіцієнт пропускання тонкої плівки графену, яка складатиме

основу при конструюванні удосконаленого прозорого дисплею для

комп’ютерів.

Особистий внесок здобувача полягає у підготовці зразків до вимірів;

проведення екперименту; вимірюванні спектральних та кутових розподілів

еліпсометричних параметрів зразків з наноструктурами; розрахунку зонної

діаграми досліджуваних структур та оцінці енергій оптичних переходів; участі

в обговоренні експериментальних результатів, підготовці матеріалів та

виголошенні доповідей на ряді конференцій; в написанні та підготовці до друку

наукових статей.

8

Апробація результатів дисертації

Матеріали дисертаційної роботи доповідалися на 15-й міжнародній

науковій конференції молодих вчених “Optics and High Technology Material

Science SPO-2014”, 23-26 жовтня 2014 року, Київ, Україна, міжнародній

школі-семінарі “Spectroscopy of molecules and crystals” 27 вересня – 4 жовтня

2015 року, Мукачево, Україна, 16-й міжнародній науковій конференції молодих

вчених “Optics and High Technology Material Science SPO 2015” 22-25 жовтня

2015 року, Київ, Україна, 17-й міжнародній науковій конференції молодих

вчених “Optics and High Technology Material Science SPO 2016” 27-30 жовтня

2016 року, Київ, Україна.

Публікації

За матеріалами дисертації опубліковано 11 наукових робіт, у тому числі 7

статей та тези 4-х доповідей на наукових конференціях.

Структура та обсяг роботи

Дисертація складається із вступу, 4 розділів, висновків та списку

використаних джерел. Вона викладена на 115 сторінках, включає в себе 49

рисунків та список використаних джерел з 176 найменувань.

У вступі обґрунтовується актуальність теми, вибір напрямку та методів

досліджень, формулюється мета та задачі дисертаційної роботи, відображається

наукова новизна та практичне значення отриманих результатів.

Перший розділ присвячено огляду літературних даних про оптичні і

структурні властивості вуглецевих алотропів (вуглецеві нанотрубки, графени),

а також кремнію, хрому та міді. Аналіз літературних даних показав, що оптичні

властивості наноструктурованих поверхонь широкого класу провідних тіл

залежать від атомної будови та морфології наноутворень на їх поверхні.

У другому розділі описано обрані експериментальні та теоретичні

методики вимірювання. Методики включають в себе спектральну та кутово-

9

залежну еліпсометрію, атомно-силову, магнітно-силову та скануючи тунельну

мікроскопію а також теоретичні методики (молекулярного калкулюсу) щодо

отримання наближених розв’язків стаціонарного рівняння Шредінгера для

певних молекул та над надкомірок кристалів.

У третьому розділі розглянуто оптичні і морфологічні властивості

наноструктурованих утворень вуглецю (вуглецевих нанотрубок, графенів,

піролітичного графіту). Експериментально зареєстровано вуглецеві нанотрубки

з металевою та напівпровідниковою провідністю. Показано, що де-Бройлівська

хвиля електрона в поверхневих шарах розповсюджується як Гаусова хвиля.

Також було зафіксовано оптичну анізотропію в наноструктурованих поверхнях

піролітичного графіту. Виявлено підсилення квантової смуги поглинання в

шарі графену,вирощеному на товстій мідній плівці.

Четвертий розділ присвячено дослідженню оптичних і морфологічних

властивостей наноструктурованих поверхонь хрому, кремнію та оксидів на

поверхні міді. Встановлено, що морфологія наноструктур на поверхні кремнію

та міді визначається симетрією кристалічної гратки в приповерхневих шарах

цих матеріалів. Також, на прикладі хрому, показано, що неідеальності його

кристалічної структури призводять до порушення антиферомагнітного

нановпорядкування на поверхні полікристалічного хрому.

Висновки включають в себе тезисний виклад найбільш важливих

результатів дисертації.

В рамках наукової метології окремі розділи дисертації об’єднані з метою

підпорядкування предмету та задачі дослідження поставленим об’єкту та меті.

З цієї точки зору дві базові експериментальні методики дисертації, а саме

еліпсометрія та скануючи тунельна мікроскопія базуються на взаємодії хвиль з

поверхнею. Так еліпсометрія вивчає фазові властивості відбитих

електромагнітних хвиль від поверхні. В той же час тунельна мікроскопія

аналізує амплітудні властивості де-Бройлівських хвиль електрону (з довжинами

на порядки меншими від довжин хвилі світла) за умови існування тунелюваннячисто квантово-механічного ефекту. З точки зору теорії дифракції різниця в

10

довжинах хвиль світла та де-Бройлівських хвиль визначає широкий діапазон

можливих розмірів об’єктів, які досліджуються.

Предмет дослідження в дисертації вибирався з точки зору максимально

можливого узагальнення експериментальних підходів. Це досягалось з однієї

сторони деталізацією вивчення певного типу речовин (в даному випадку

алотропів вуглецю в третьому розділі) і вибором зразків з широким спектром

фізичних властивостей з іншої сторони (четвертий розділ дисертації).

Так, наприклад, графіт може розглядатись як сукупність графенових

атомних площин, а вуглецева нанотрубка як циліндр з графеновими стінками.

Цей вплив топології кристалічної структури алотропів вуглецю на їх фізичні

властивості є об’єднавчою ідеєю третього розділу дисертації. Водночас

поверхневі лінійчаті наноструктури видозмінюють властивості поверхні

графіту. Вивчення подібних наноструктур в четвертому розділі дисертації на

поверхнях з різними типами електричної провідності (провідники та

напівпровідники) та різними фізичними властивостями (включаючи магнітні) є

подальшим розвитком базисних ідей третього розділу.

З теоретичної точки зору всі експерименти дисертації супроводжувались

моделюванням в рамках сучасної оптики та квантової механіки.

ВИСНОВКИ

Вдисертаціївпершепроведенокомплекснеоптичнеатомносилове

тунельномікроскопічнетатеоретичнедослідженнявуглецевихнаноструктур

таповерхневихнаноструктурдлямідіхромуікремніюПроведені

експериментальнітатеоретичнідослідженнядозволилизробититаківисновки

Показанощосформованінаповерхнінаноструктуривидозмінюють

фізичнітаоптичнівластивостіцієїповерхнізокремапризводятьдопояви

оптичноїанізотропіїКутовіеліпсометричнівимірюваннятатеоретичні

розрахункидозволилипояснитизв’язоказимутальнихеліпсометричних

залежностейзтипомсиметріїкристалічноїграткиувипадкупіролітичного

графіту

Експериментальновиявленовідмінністьміжметалевимиі

напівпровідниковимивуглецевиминанотрубкамиякапов’язаназ

особливостямиїхньогоатомноговпорядкуванняМорфологіясформованих

наноострівцівтаіншихнаноутвореньнаповерхніпровідногосередовища

визначаєтьсяструктуроюйогокристалічноїграткиТиппровідності

наноутвореньможевидозмінюватисьвзалежностівідїхкристалічноїбудови

Показанощонавітьпринанотовщинахповерхневогошаруна

металахінапівпровідникахнеможнапривизначенніїхоптичнихсталих

користуватисякласичнимиформуламиметалооптикидлянапівскінченного

середовищаанеобхіднокористуватисяформуламияківраховуютьнаявність

поверхневихшарівіпроцесибагатопроменевоїінтерференціївцихшарах

Показанощоплазмовіколиванняелектроніввметалівпливаютьна

оптичнупровідністьграфенунанесеногонаміднуповерхнювмежахвласної

смугипоглинанняграфітущопризводитьдорізкогозбільшенняоптичної

провідностіграфенувційсмузі

ПромодельованопроходженняхвильдеБройлязГаусівським

розподіломвеличинїхніхамплітудчерезметалевітанапівпровідникові

вуглецевінанотрубкиівиявленощоперебігквантовомеханічнихпроцесів



пов’язанихзпроходженнямдеБройлівськиххвильелектроніввпливаєна

дисперсіюгустинелектроннихстанівнаноструктурованихповерхонь

Впершезнайденоупараксіальномунаближеннірозв’язок

стаціонарногорівнянняШредінгерадлявільногоелектронаколи

деБройлівськіхвилівільнихелектронівнаповерхніпровіднихтіл

розповсюджуютьсяувиглядіхвильзГаусівськимпрофілемамплітудиЦе

призводитьдобільшдетальногоформулюванняквантовомеханічного

принципуневизначеностіякимвстановлюєтьсявеличинапросторової

роздільноїздатностівимірюваньметодомскануючоїтунельноїмікроскопії