

УДК 538.9

**РЕКОНСТРУКЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ
В $\text{MoSe}_2\text{-WSe}_2$ –ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С КОНЕЧНЫМИ РАЗМЕРАМИ**
Вовк И.А. (Университет ИТМО), Баймуратов А.С. (Мюнхенский университет имени
Людвига и Максимилиана, Германия)
Научный руководитель – д.ф.-м.н. Рухленко И.Д.
(Университет ИТМО)

Был разработан теоретический подход для расчёта реконструкции под действием ван-дер-ваальсовых и упругих сил, действующих на кристаллическую решётку слоистой структуры, с учётом конечных размеров структуры. Разработанный подход был применён для исследования реконструкции в $\text{MoSe}_2\text{-WSe}_2$ –гетероструктуре вблизи её границ.

Введение. Двумерные дихалькогениды переходных металлов со структурной формулой MX_2 ($\text{M} = \text{Mo}, \text{W}; \text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) представляют собой новый класс полупроводниковых соединений, который может найти широкое применение в нанофотонике. Имея молекулярную толщину, монослои дихалькогенидов переходных металлов могут быть собраны в двумерные гетероструктуры посредством ван-дер-ваальсова взаимодействия. Наличие угла поворота слоёв друг относительно друга или несоответствия постоянных решётки приводит к формированию муарового паттерна, модифицирующего свойства гетероструктуры на наномасштабе. При этом интерпретация экспериментальных результатов в ряде случаев требует отказа от приближения бесконечно жёсткой кристаллической решётки слоёв. Дело в том, что кристаллическая решётка дихалькогенидов переходных металлов в муаровых гетероструктурах претерпевает реконструкцию, направленную на минимизацию полной механической энергии системы. В идеальных условиях реконструкция в муаровых гетероструктурах приводит к периодической доменной структуре. Влияние механических напряжений и границ на картину реконструкции и оптические свойства гетероструктур на основе двумерных дихалькогенидов переходных металлов остаётся неясным.

Основная часть. Была разработана модель реконструкции кристаллической решётки для двухслойных гетероструктур с конечными размерами вблизи треугольной границы. На основании построенной модели была произведена численная оптимизация реконструкции кристаллической решётки в $\text{MoSe}_2\text{-WSe}_2$ –гетероструктурах. В серии расчётов варьировались начальные условия и параметры гетероструктуры и определялись локальные минимумы энергии и пространственная картина реконструкции. Было подтверждено образование крупных доменов вблизи границ $\text{MoSe}_2\text{-WSe}_2$ –гетероструктуры и прослежена зависимость картины реконструкции от угла поворота между слоями гетероструктуры. Полученные результаты находятся в согласии с данными, полученными с помощью сканирующей электронной микроскопии для $\text{MoSe}_2\text{-WSe}_2$ –гетероструктур.

Выводы. Результаты исследования могут быть использованы для проектирования экситонных свойств ван-дер-ваальсовых гетероструктур на наномасштабе.

Вовк И.А. (автор)

Рухленко И.Д. (научный руководитель)