13

Исследование ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе графена и дихалькогенидов переходных металлов ($MoTe_2$ и WSe_2) методами сканирующей зондовой микроскопии

© А.Д. Родиончикова,[1,2] Л.В. Котова,[1] И.Э. Калантаевский,[3] М.С. Дунаевский[1]

[1] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[2] Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“ им. В.И. Ульянова (Ленина),
Санкт-Петербург, Россия
[3] Университет ИТМО,
Санкт-Петербург, Россия
e-mail: a.d.rodionchikova@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 19 марта 2026 г.
В окончательной редакции 17 июля 2026 г.
Принято к публикации 1 сентября 2026 г.

Методами сканирующей зондовой микроскопии измерены зависимости работы выхода от толщины слоев $MoTe_2$ и WSe_2 на графене. Установлено, что с увеличением количества слоев работа выхода изменяется на 40−50 meV, выходя на насыщение при достижении значений, характерных для работы выхода объемного материала. Также исследовано влияние механических деформаций в слоях $MoTe_2$ на поверхностный потенциал. Оценка деформационного потенциала составила ~ 40 mV на 1% деформации. Продемонстрирована возможность управления электронными свойствами двумерных материалов путем варьирования их толщины и внесения деформаций, что перспективно для разработки новых оптоэлектронных устройств.

Ключевые слова: сканирующая зондовая микроскопия, Кельвин-зонд микроскопия, ван-дер-ваальсовы гетероструктуры, дихалькогениды переходных металлов, графен, карбид кремния.

DOI: 10.61011/JTF.2027.01.64196.73-26

Введение

Двумерные ($2D$) материалы, такие как графен и дихалькогениды переходных металлов (ДХПМ), представляют собой уникальный класс соединений, чьи электронные и оптические свойства можно регулировать путем изменения числа слоев и углами поворота между ними [1]. Комбинируя различные $2D$-материалы посредством слабых сил ван-дер-ваальса, можно создавать гетероструктуры с заданными свойствами, формируя так называемые ван-дер-ваальсовы гетероструктуры [2].

Наиболее известным $2D$-материалом является графен, монослой которого отличается нулевой эффективной массой носителей заряда. Однако для создания эффективных оптоэлектронных устройств требуются прямозонные полупроводники, в то время как у графена запрещенная зона отсутствует. В связи с этим активное внимание исследователей привлекли ДХПМ, монослои которых обладают прямой запрещенной зоной, что является критическим требованием для создания фотоприемных и светоизлучающих устройств [3]. Среди ДХПМ особый интерес представляют $MoTe_2$ и WSe_2, поскольку в настоящее время они остаются одними из наименее изученных представителей этого класса. Ключевыми параметрами, определяющими функциональность таких материалов в устройствах, являются работа выхода и поверхностный потенциал, которые существенно зависят от толщины слоя и наличия деформаций.

Кельвин-зонд микроскопия (КЗМ) является двухпроходной методикой, особенность которой заключается в повторном сканировании поверхности. Этот подход позволяет исследовать локальные электронные свойства с высоким пространственным разрешением. Метод КЗМ дает возможность измерять поверхностный потенциал и, как следствие, определять работу выхода тонких чешуек $2D$-материалов [4].

В настоящей работе методами сканирующей зондовой микроскопии проведено исследование ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе графена, выращенного на карбиде кремния (Gr/SiC), и слоев $MoTe_2$ и WSe_2. Основными задачами были установление зависимости работы выхода от толщины для $MoTe_2$ и WSe_2, а также исследование влияния механических деформаций на поверхностный потенциал в слоях $MoTe_2$. Полученные результаты демонстрируют возможность управления электронными свойствами $2D$-материалов, что имеет важное значение для проектирования устройств новой оптоэлектроники.

1. Описание образцов и методов исследования

В настоящей работе было проведено исследование ван-дер-ваальсовых гетероструктур, состоящих из под-

ложки графен/карбид кремния и нанесенных на нее чешуек ДХПМ $MoTe_2$ и WSe_2.

Первоначально методом высокотемпературного отжига на поверхности карбида кремния был получен однослойный графен с некоторым содержанием двуслойного графена. Суть этого метода заключается в том, что при сильном нагреве поверхности SiC происходит разложение его поверхностных слоев, и атомы кремния испаряются, а оставшийся слой углерода организуется в графеновые слои [5]. В результате формировались образцы, топография поверхности которых представляла собой набор гладких атомарных террас, разделенных ступенями высотой ~ 1 nm, что соответствует политипу 4H-SiC.

Чешуйки ДХПМ ($MoTe_2$ и WSe_2) были нанесены на подложку Gr/SiC методом механической эксфолиации. Перед проведением зондовых исследований с помощью оптической микроскопии (по различию в оптическом контрасте) производился отбор наиболее подходящих чешуек толщиной от нескольких до 10–20 монослоев.

Химический состав и структура перенесенных чешуек были подтверждены методом рамановской спектроскопии. Измерения проводились на спектрометре Horiba LabRAM HR. Для гетероструктур $MoTe_2$/Gr/SiC наблюдалась характерная полоса при 234 cm^{-1}, соответствующая фононам (LO) в $MoTe_2$. В случае образцов WSe_2/Gr/SiC был зарегистрирован интенсивный фононный пик (LO) при 250 cm^{-1}, характеризующий материал WSe_2 [6]. Равномерное распределение интенсивности этих пиков по площади чешуек свидетельствует об однородности перенесенных материалов.

Все зондовые измерения проводились на сканирующем зондовом микроскопе NtegraAura. Для измерений использовались зонды NSG10 без покрытия с радиусом закругления 6 nm [7].

Для анализа подложки применялся метод регистрации фазы в полуконтактном режиме. Этот метод основан на том, что при взаимодействии зонда с поверхностью образца в зависимости от локальных адгезионных и упругих свойств материала происходит сдвиг фазы колебаний кантилевера [8]. При сканировании поверхности изменение адгезии приводит к изменениям фазового сдвига, которые регистрируются в виде карты распределения $j(x, y)$. Преимущество этого метода заключается в высокой чувствительности и пространственном разрешении, что позволяет визуализировать распределение материалов различного химического состава по поверхности, которые слабо различимы на топографических изображениях.

Измерения поверхностного потенциала и работы выхода проводились методом КЗМ. КЗМ является двухпроходной методикой. В первом проходе регистрируется топография поверхности в полуконтактом режиме, а во втором — зонд движется вдоль траектории первого прохода на заданной фиксированной высоте над поверхностью, что обеспечивает прецизионное измерение поверхностного потенциала.

2. Экспериментальные результаты

2.1. Структуры $MoTe_2$/Gr/SiC и WSe_2/Gr/SiC

Вначале была выполнена детальная визуализации областей однослойного и двуслойного графена на подложке SiC. Для этого был использован метод регистрации фазы, поскольку он обладает более высоким пространственным разрешением по сравнению с КЗМ [8]. Преимущество данного подхода обусловлено локализованным характером взаимодействия зонда с поверхностью, что позволяет эффективно различать как тонкие топографические особенности, так и области с различной адгезией. Как показано на рис. 1, фазовое изображение позволяет четко визуализировать области однослойного (1L, темные области) и двуслойного (2L, светлые области) графена. Данный анализ был необходим для выбора подложек с содержанием двуслойного графена около 30 % для последующего переноса на нее слоев $MoTe_2$ и WSe_2.

Также было проведено измерение методом КЗМ, на основе которого получен профиль поверхностного потенциала. Измеренная разность потенциала на однослойном и двухслойном графене составила ~ 130 mV, что соответствует литературным данным [9]. Известно, что поверхностный потенциал (и работа выхода) тонких слоев графена демонстрирует нелинейную зависимость от толщины с выходом на насыщение [10]. Данный размерный эффект связывают с переходом от двумерной электронной структуры к объемной. В настоящей работе проверялось наличие аналогичного эффекта для тонких чешуек $MoTe_2$ и WSe_2.

С использованием методов сканирующей зондовой микроскопии была получена топография поверхности чешуек ДХПМ, что позволило определить их толщину. Дополнительно применялся метод КЗМ, с помощью которого были измерены значения поверхностного потенциала для данного набора чешуек. Полученные дан-

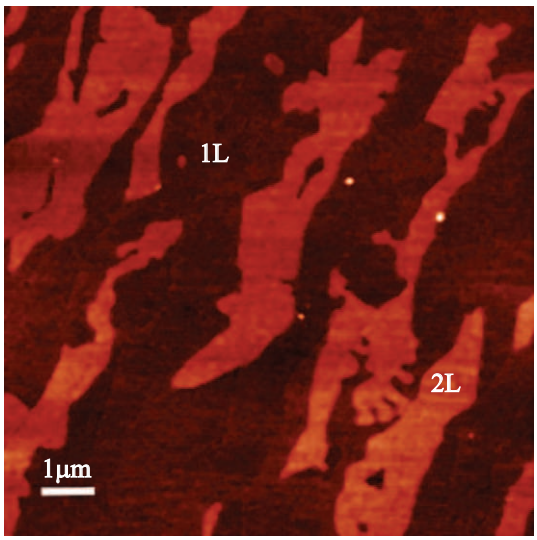


Рис. 1. Фазовое изображение подложки графен/4H-SiC.

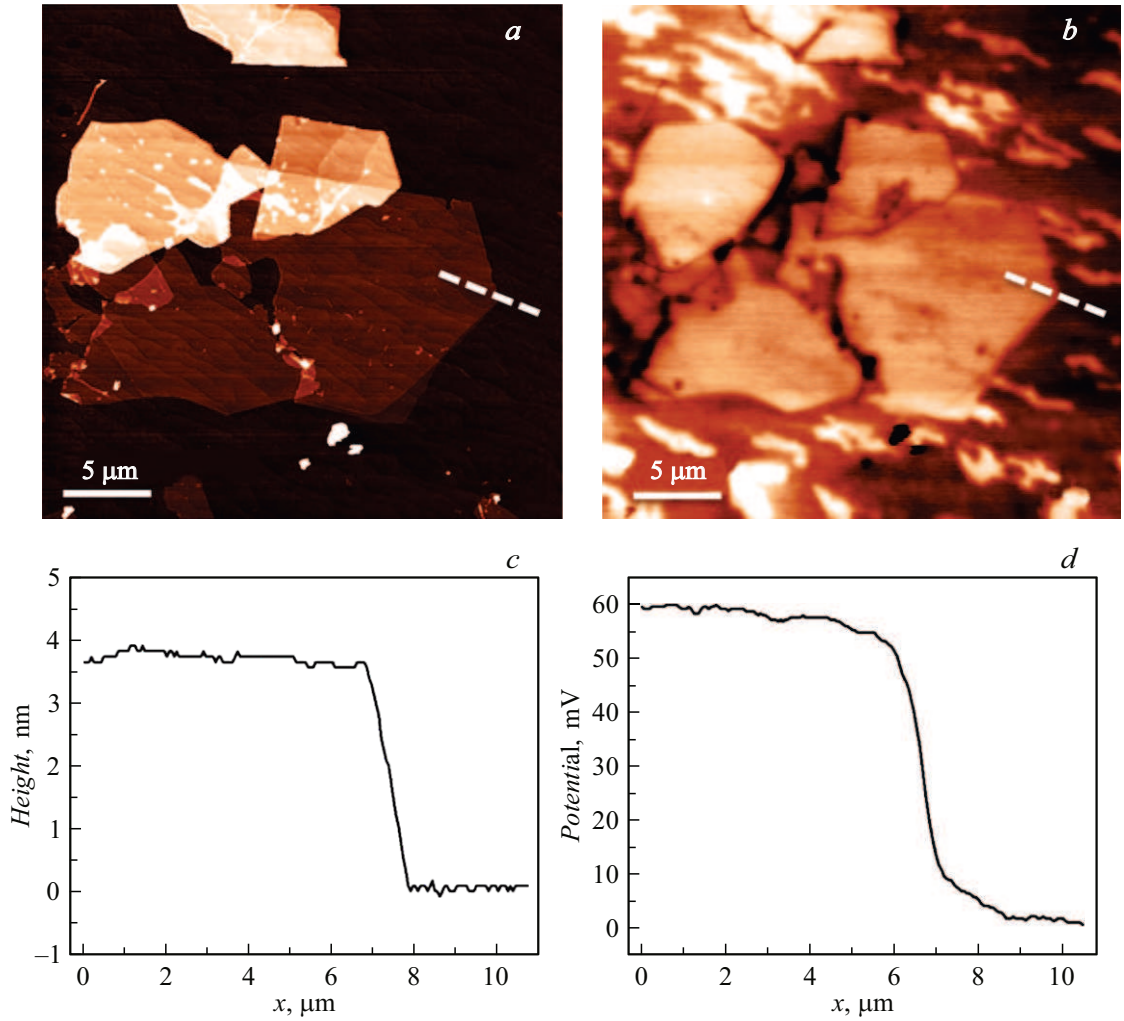


Рис. 2. *a* — топография толстых чешуек $MoTe_2$; *b* — распределение поверхностного потенциала толстых чешуек $MoTe_2$, полученное методом КЗМ; *c* — профиль топографии и *d* — профиль поверхностного потенциала в местах, обозначенных пунктирными линиями на *a* и *b*.

ные были обработаны и использованы для построения зависимости работы выхода $W(h)$ от толщины чешуйки.

На рис. 2 и 3 представлены СЗМ изображения чешуек $MoTe_2$ различной толщины, где рис. 2 соответствует более толстому, а рис. 3 — более тонкому слою. Измерение толщины чешуек проводилось путем анализа топографических профилей, полученных при построении сечений, показанных на рис. 2, *a*, 3, *a*. Подобным образом проводились измерения поверхностного потенциала (рис. 2, *b*, 3, *b*) в тех же областях, где были выполнены топографические сечения. Результаты измерений представлены в виде топографических профилей (рис. 2, *c*, 3, *c*) и распределения поверхностного потенциала (рис. 2, *d*, 3, *d*).

В результате проведения подобных измерений для ряда чешуек $MoTe_2$ с различной толщиной была получена зависимость их поверхностного потенциала от толщины. На основе полученных данных поверхностный потенциал был пересчитан в величину работы выхода. Для этого было выполнено дополнительное измерение. Методика определения работы выхода была следующей:

1) первоначально измерялся потенциал Uc на калибровочной структуре с известным значением работы выхода Wc. В качестве калибровочной структуры использовался образец пиролитического графита ВОПГ, для которого работа выхода составляет около 4.5 eV [11];

2) затем проводились измерения потенциала Us на исследуемой структуре;

3) после чего искомое значение работы выхода Ws образца рассчитывалось по формуле (1) [4]:

$$Ws = Wc + e(Us - Uc), \qquad (1)$$

где e — элементарный заряд.

Стоит отметить, что работа выхода ВОПГ может изменяться со временем при нахождении в воздушной среде [11]. Для того чтобы избежать возникновения слоев загрязнения, искажающих калибровочный потенциал на поверхности, мы „освежали“ ВОПГ методом

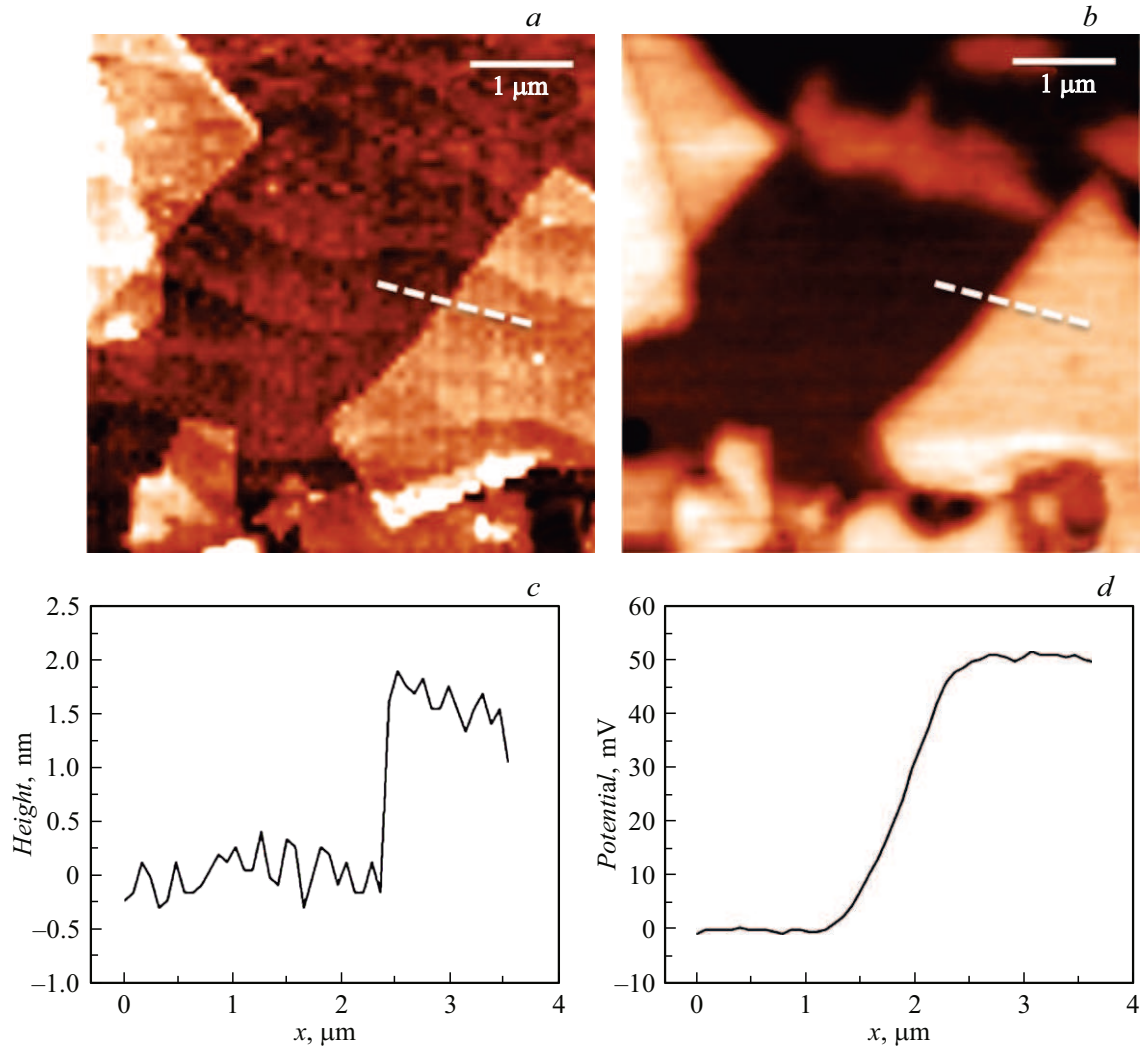


Рис. 3. *a* — топография тонких чешуек $MoTe_2$; *b* — распределение поверхностного потенциала тонких чешуек $MoTe_2$, полученное методом КЗМ; *c* — профиль топографии и *d* — профиль поверхностного потенциала в местах, обозначенных пунктирными линиями на *a* и *b*.

механической эксфолиации (отслаивание верхних слоев скотчем).

Анализ экспериментальных данных показал, что с увеличением толщины чешуйки ее работа выхода постепенно возрастает. Однако в дальнейшем темп роста замедляется, и зависимость выходит на насыщение (рис. 4, *a*). Такая закономерность качественно согласуется с приведенными выше результатами для графена, где также наблюдалась нелинейная зависимость работы выхода от толщины с выходом на насыщение.

Наблюдаемое поведение может быть объяснено тем, что в случае тонких слоев ДХПМ доминирующий вклад в изменение работы выхода вносит изменение зонной структуры. Однако по мере увеличения количества слоев усиливается влияние объемных свойств материала, что, в свою очередь, приводит к насыщению зависимости работы выхода от толщины.

Аналогичное исследование было проведено для WSe_2, которое показывает схожую зависимость, однако наблюдается обратный эффект. В случае WSe_2 с увеличением толщины чешуйки его работа выхода уменьшается, а потом также выходит на насыщение (рис. 4, *b*).

Рассчитанные значения работ выхода были сопоставлены с данными, полученными методом теории функционала плотности (DFT) для $MoTe_2$ и WSe_2 (рис. 4), взятыми из литературы [12]. Полученная зависимость демонстрирует согласие между экспериментальными данными и результатами расчетов методом DFT.

Для $MoTe_2$ и WSe_2 наблюдаются противоположные тенденции изменения работы выхода с толщиной из-за разного характера зависимости краев зон от количества слоев [12]. В случае $MoTe_2$ работа выхода немного растет с увеличением числа слоев, поскольку абсолютная энергия потолка валентной зоны значительно уменьшается. В то же время для WSe_2 работа выхода слабо изменяется, так как понижение потолка валентной зоны с толщиной почти полностью компенсируется смещением дна зоны проводимости.

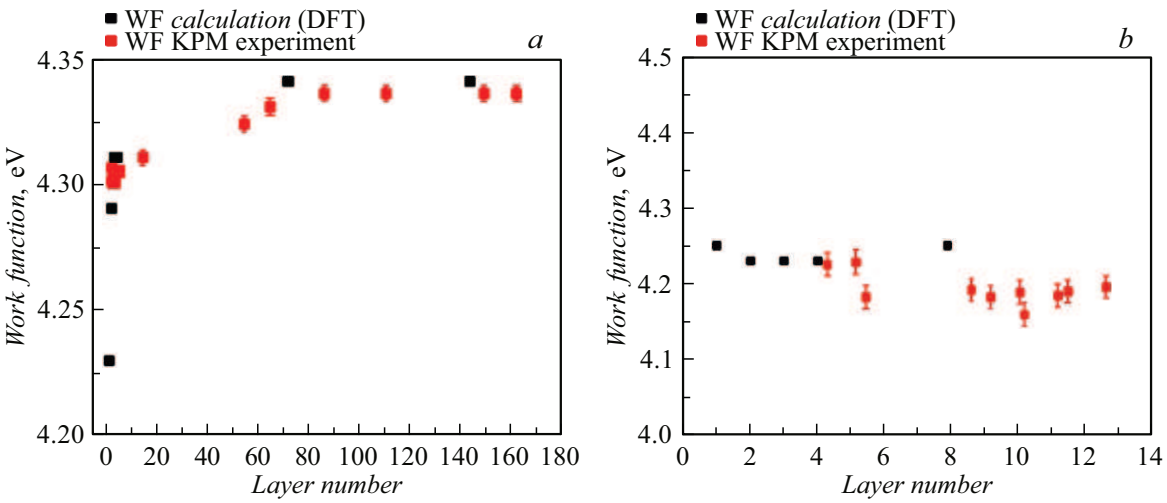


Рис. 4. *a* — зависимость работы выхода $MoTe_2$ от толщины слоев; *b* — зависимость работы выхода WSe_2 от толщины слоев. Черные квадраты — работа выхода, рассчитанная методом DFT. Красные квадраты — работа выхода, полученная экспериментально методом КЗМ.

2.2. Складки на $MoTe_2$

Для ряда перенесенных пленок $MoTe_2$ наблюдалось образование складок (англ. wrinkles), представляющих собой участки изогнутого материала. Поверхностный потенциал в таких областях отличается от значений на плоских недеформированных участках, что указывает на зависимость потенциала от радиуса кривизны. Схематическое изображение складки приведено на рис. 5, *a*.

Для количественного анализа была применена простая геометрическая модель, в которой вершина складки аппроксимируется фрагментом сферы (рис. 5, *b*). Из геометрических соображений, связывающих высоту складки h, ее ширину L и радиус кривизны R, получено следующее выражение (2):

$$R = \frac{L^2}{8h}. \qquad (2)$$

Данная формула согласуется с соотношениями, представленными в литературе для оценки деформации, накапливающейся в верхней части складки [13].

На рис. 6 приведены экспериментальные данные для двух складок с различным радиусом кривизны. На рис. 6, *a, b* пунктирными линиями отмечены сечения для складки с большим (a1, b1) и малым (a2, b2) радиусом закругления. Профили топографии (рис. 6, *c, e*) позволили определить геометрические параметры h и L для каждой складки в соответствии с моделью, представленной на рис. 5, *b*. Сравнение профилей потенциала (рис. 6, *d, f*) показывает, что складка с меньшим радиусом кривизны характеризуется более значительным изменением поверхностного потенциала ΔUs.

Подобные измерения были выполнены для ряда складок, и на основе полученных данных построена зависимость поверхностного потенциала от кривизны. Механические напряжения, возникающие при изгибе, способны

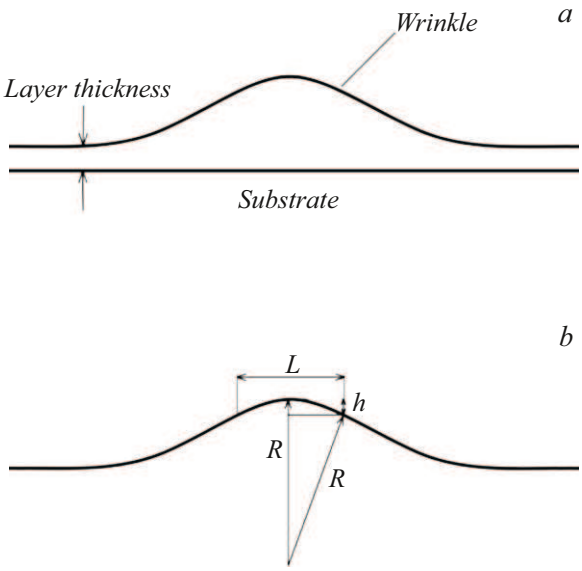


Рис. 5. *a* — схематическое изображение складки; *b* — геометрическая схема для определения радиуса кривизны.

влиять на положение дна зоны проводимости и потолка валентной зоны в полупроводнике. В случае изгиба чешуйки может наблюдаться схожий эффект.

Для оценки влияния деформации на поверхностный потенциал выполнено преобразование кривизны в деформацию. При этом учтено, что характерная величина упругих деформаций составляет $\sim 2\frac{d}{R}$, где d — толщина недеформированной пленки. Относительная погрешность измерения деформации оценивалась на основе точности определения высоты и ширины складки по топографическим профилям и составляла около 10% для исследованных объектов. Полученная зависимость представлена на рис. 7, из которого видно, что по-

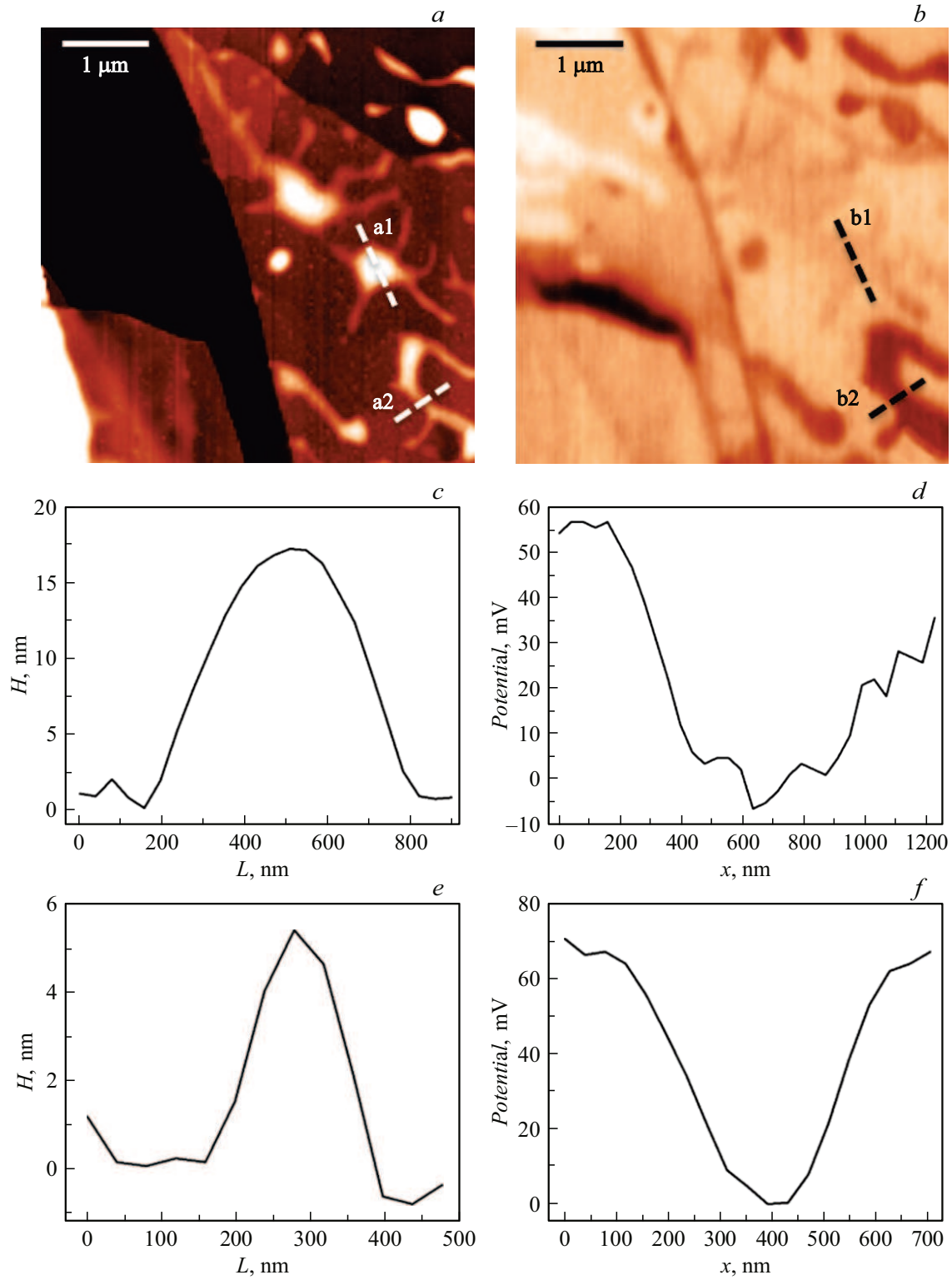


Рис. 6. Сравнительный анализ складок $MoTe_2$ с различным радиусом кривизны: *a* — топография складки; *b* — распределение поверхностного потенциала складки, полученное методом КЗМ; *c, d* — профили топографии (*c*) и поверхностного потенциала (*d*), соответствующие сечениям a1 и b1 на складке с большим радиусом кривизны. *e,f* — профили топографии (*e*) и поверхностного потенциала (*f*), соответствующие сечениям a2 и b2 на складке с малым радиусом кривизны.

тенциал складки возрастает пропорционально величине деформации.

Таким образом, была проведена оценка деформации, а также определена величина деформационного потен-

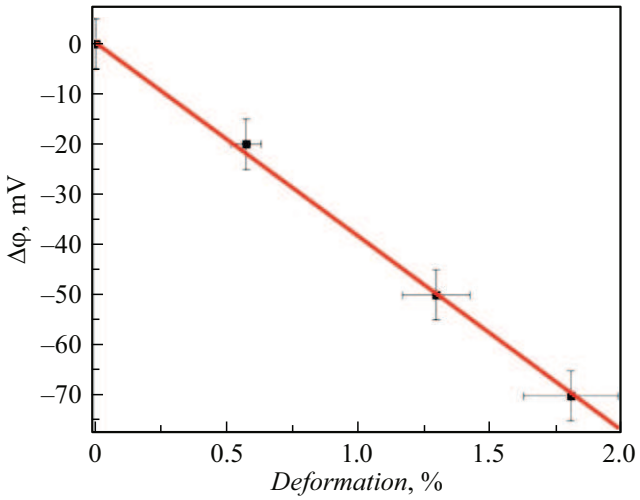


Рис. 7. Зависимость поверхностного потенциала складки от деформации.

циала. Исходя из полученной зависимости обнаружено, что значения поверхностного потенциала в изогнутых (деформированных) чешуйках отличаются от потенциала плоских (недеформированных) участков. Значение деформационного потенциала составляет около 40 mV на 1% деформации, что качественно согласуется с результатами других исследований [14].

Стоит отметить, что предложенная в настоящей работе геометрическая модель является упрощенной и позволяет получить лишь основные качественные закономерности. Для более точного описания упругого поля складок, включая его „тонкую“ структуру, перспективным представляется использование аппарата непрерывных распределений виртуальных круговых петель дислокаций и дисклинаций, разработанного в работе [15].

Заключение

В работе методом КЗМ исследована зависимость работы выхода от толщины слоев в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах на основе графена (Gr/SiC) и ДХПМ $MoTe_2$ и WSe_2.

Установлено, что работа выхода $MoTe_2$ и WSe_2 существенно зависит от их толщины (в диапазоне от 3–4 до 100 монослоев), изменяясь на 40–50 meV. Для $MoTe_2$ наблюдается рост работы выхода с увеличением числа слоев, тогда как для WSe_2 выявлена противоположная тенденция. В обоих случаях зависимость носит нелинейный характер и выходит на насыщение при достижении значений, характерных для объемного материала. Полученные зависимости качественно согласуются с результатами DFT-расчетов, взятыми из литературы, что подтверждает корректность экспериментальной методики.

Кроме того, исследовано влияние механических деформаций на поверхностный потенциал в слоях $MoTe_2$. Показано, что в областях сильных изгибов (складок) поверхностный потенциал существенно отличается от значений на плоских недеформированных участках. Значение деформационного потенциала составляет ~ 40 mV на 1% деформации, что также согласуется с результатами других исследований.

Таким образом, продемонстрированы способы управления электронными свойствами ДХПМ в гетероструктурах. Полученные результаты могут быть полезны для проектирования и оптимизации характеристик оптоэлектронных устройств на основе ван-дер-ваальсовых гетероструктур.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] Z. Hennighausen, S. Kar. Electronic Structure, **3** (1), 014004 (2021). DOI: 10.1088/2516-1075/abd957
[2] K.S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, A.H. Castro Neto. Science, **353** (6298), aac9439 (2016). DOI: 10.1126/science.aac9439
[3] C. Li, Q. Cao, F. Wang, Y. Xiao, Y. Li, J.-J. Delaunay, H. Zhu. Chem. Soc. Rev., **47** (13), 4981 (2018). DOI: 10.1039/c8cs00067k
[4] B.R. Borodin, M.S. Dunaevskiy, F.A. Benimetskiy, S.P. Lebedev, A.A. Lebedev, P.A. Alekseev. J. Phys.: Conf. Ser., **1124** (8), 081031 (2018). DOI: 10.1088/1742-6596/1124/8/081031
[5] A.A. Lebedev, V.Yu. Davydov, D.Yu. Usachov, S.P. Lebedev, A.N. Smirnov, I.A. Eliseyev, M.S. Dunaevskiy, E.V. Gushchina, K.A. Bokai, J. Pezoldt. Semiconductors, **52** (14), 1882 (2018). DOI: 10.1134/S1063782618140154
[6] В.Ю. Аксенов, А.В. Анкудинов, А.С. Власов, М.С. Дунаевский, В.Н. Жмерик, Д.В. Лебедев, К.В. Лихачев, В.А. Перескокова, А.М. Минтаиров. ФТП, **58** (8), 401 (2024). DOI: 10.61011/FTP.2024.08.59198.6252H [V.Yu. Axenov, A.V. Ankudinov, A.S. Vlasov, M.S. Dunaevsky, V.N. Jmerik, D.V. Lebedev, K.V. Likhachev, V.A. Pereskokova, A.M. Mintairov. Semiconductors, **58** (8), 369 (2024). DOI: 10.61011/SC.2024.08.59886.6252H]
[7] Электронный ресурс. https://tipsnano.ru/catalog/afm-standard/semicontact/nsg10/
[8] А.Д. Родончикова, М.С. Дунаевский, Е.В. Гущина, С.Ю. Приображенский, С.П. Лебедев, А.А. Лебедев. Письма в ЖТФ, **52** (6), 18 (2026). DOI: 10.61011/PJTF.2026.06.62458.20513 [A.D. Rodionchikova, M.S. Dunaevskiy, E.V. Gushchina, S.Iu. Priobrazhenskii, S.P. Lebedev, A.A. Lebedev. Tech. Phys. Lett., **52** (3), 67 (2026). DOI: 10.61011/TPL.2026.03.63067.20513]
[9] T. Filleter, K.V. Emtsev, Th. Seyller, R. Bennewitz. Appl. Phys. Lett., **93** (13), 133117 (2008). DOI: 10.1063/1.2993341
[10] S.S. Datta, D.R. Strachan, E.J. Mele, A.T. Charlie Johnson. Nano Lett., **9** (1), 7 (2009). DOI: 10.1021/nl8009044
[11] R. Bai, N.L. Tolman, Z. Peng, H. Liu. Langmuir, **39** (34), 12159 (2023). DOI: 10.1021/acs.langmuir.3c01459
[12] H. Kim, H.J. Choi. Phys. Rev. B, **103** (8), 085404 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.085404

[13] A.R. Khan, T. Lu, W. Ma, Y. Lu, Y. Liu. Adv. Electron. Mater., **6** (4), 1901381 (2020). DOI: 10.1002/aelm.201901381
[14] Y. Yu, C.-D. Dong, R. Binder, S. Schumacher, C.-Z. Ning. ACS Nano, **17** (5), 4230 (2023). DOI: 10.1021/acsnano.2c01665
[15] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. ФТТ, **45** (9), 1626 (2003). DOI: 10.1134/1.1611238 [A.L. Kolesnikova, A.E. Romanov. Phys. Solid State, **45** (9), 1706 (2003). DOI: 10.1134/1.1611238]