

Санкт-Петербургский Государственный Университет  
Физический Факультет  
Кафедра Электроники Твёрдого Тела



На правах рукописи

Богданов Иван Витальевич

**"Влияние кислорода на взаимодействие гексагонального  
нитрида бора с металлом"**

Направление 03.04.02 —

«Физика»

Диссертация на соискание учёной степени  
магистра физических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук, профессор  
Усачев Дмитрий Юрьевич

Рецензент:  
доктор физико-математических наук, профессор  
Смирнов Александр Николаевич

Санкт-Петербург — 2019

## Оглавление

	Стр.
<b>Введение . . . . .</b>	<b>3</b>
<b>Глава 1. Литературный обзор . . . . .</b>	<b>5</b>
1.1 Структуры кристаллов и кристаллических поверхностей . . . . .	5
1.1.1 Двумерная кристаллическая решетка . . . . .	5
1.1.2 Электронная структура кристаллов и кристаллических поверхностей . . . . .	8
1.2 Низкоразмерные структуры . . . . .	10
1.3 Гексагональный нитрид бора . . . . .	10
<b>Глава 2. Экспериментальные методы исследования         низкоразмерных наноструктур . . . . .</b>	<b>11</b>
<b>Глава 3. Взаимодействие h-BN на Co(0001) с атомарным         кислородом . . . . .</b>	<b>12</b>
3.1 Характеристика структуры образца . . . . .	12
3.2 Экспериментальные спектры и их обсуждение . . . . .	13
3.2.1 Спектры фотоэлектронной спектроскопии . . . . .	14
3.2.2 Спектры поглощения NEXAFS . . . . .	19
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>21</b>
<b>Список литературы . . . . .</b>	<b>22</b>

## Введение

**Актуальность темы исследования.** В современной физике поверхности одной из основных задач является создание низкоразмерных систем. После того, как графен был предсказан теоретически [1–3], а позже получен экспериментально [4], интерес к низкоразмерным системам резко возрос среди ученых. Причиной этому является серьезный потенциал для использования в перспективных низкоразмерных устройствах, таких как квантовые компьютеры [5], молекулярные переключатели [6, 7]. К наиболее интересным низкоразмерным нанобъектам относятся структуры на основе двумерных гексагональных кристаллов графена и нитрида бора. Гексагональный нитрида бора имеет огромный потенциал применения в различных электрооптических приборах, например, ультрафиолетовые лазеры, свето-диоды, фотодетекторы [8], а так же в конфигурациях вида *graphen/h-BN/metal* [9–11]. Данная работа посвящена гексагональному нитриду бора(h-BN).

Как и графен, гексагональный нитрид бора может быть получен путем каталитического разложения молекул прекурсора из газообразной фазы на активной подложке(метод CVD), в случае h-BN это боразин [12, 13]. Нитрид бора выращенный на металлической подложке методом CVD может деформироваться периодическим образом, это показано в работах [14–17]. Рассогласование структуры нитрида бора и подложки вместе с взаимодействием  $2p\pi$ -состояний атомов монослоя и  $pd$ -состояниями атомов переходного металла приводят к тому, что системы образуются из химически неэквивалентных участков нитрида бора и подложки. Эти участки расположенные с пространственной периодичностью относительно друг друга, формируют двумерную сверхрешетку. Такие сверхрешетки становятся интересными объектами для изучения возможности управлять физическими свойствами монослоя нитрида бора с помощью адсорбции и/или интеркаляции атомов или молекул [18].

**Целью** данной работы является исследование процесса окисления монослоя гексагонального нитрида бора при помощи **методов** рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии(X-Ray Photoelectron Spectroscopy, XPS), дифракции медленных электронов(Low Energy Electron Diffraction, LEED) и

рентгеновской спектроскопии поглощения в области ближней тонкой структуры (Near-Edge X-Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy, NEXAFS spectroscopy).

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Приготовление высококачественного монослоя h-BN на монокристаллической поверхности Co(0001) и его характеристика методами спектроскопии и дифракции медленных электронов.
2. Осуществление поэтапного окисления h-BN/Co(0001) в результате воздействия атомарного кислорода.
3. Исследование состояния системы на каждом этапе окисления методами спектроскопии.
4. Анализ полученных спектров поглощения и фотоэмиссии основных уровней и получение информации о механизме взаимодействия атомарного кислорода и системы h-BN/Co(0001).

## Глава 1. Литературный обзор

### 1.1 Структуры кристаллов и кристаллических поверхностей

#### 1.1.1 Двумерная кристаллическая решетка

Наличие на поверхности кристаллической структуры означает, что вся поверхность может быть получена путем периодического повторения одинаковых структурных единиц. Для ее описания используют понятие кристаллической решетки. Кристаллическая решетка это набор узлов, расположенных таким образом, что каждый узел имеет одинаковое и однообразным способом ориентированное окружение рис. 1.1. Группу атомов, относящуюся к данному узлу,

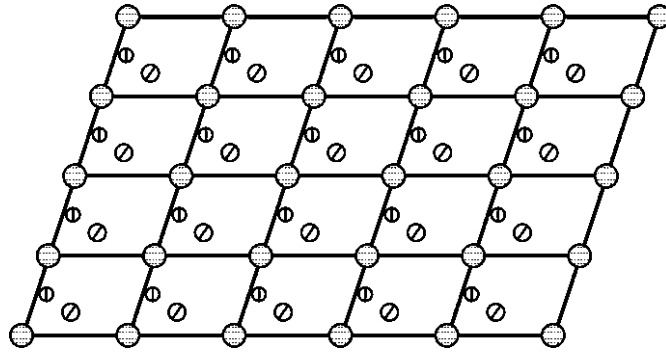


Рисунок 1.1 — Кристаллическая решетка с базисом, состоящим из трех атомов называют базисом. В общем случае узел кристаллической решетки не обязательно совмещать с каким-либо атомом, но обычно это делают из соображений удобства. Различают простые решетки, базис которых состоит из одного атома, и сложные, к каждому узлу которых относятся два или более атомов [19].

Основным свойством кристаллической решетки является наличие трансляционной симметрии. Для двумерной решетки это значит, что она совмещается сама с собой при перемещении на вектор трансляции решетки:

$$\vec{t}_{hk} = h \cdot \vec{t}_x + k \cdot \vec{t}_y \quad (1.1)$$

где  $\vec{t}_x$  и  $\vec{t}_y$  - основные вектора трансляции, а  $h$  и  $k$  - любые целые числа. Обычно в качестве основных векторов выбирают наименьшие по длине. Так, в случае решетки, изображенной на рис 1.2, отдают предпочтение вектору  $\vec{t}_x^{(1)}$  перед  $\vec{t}_x^{(2)}$ .

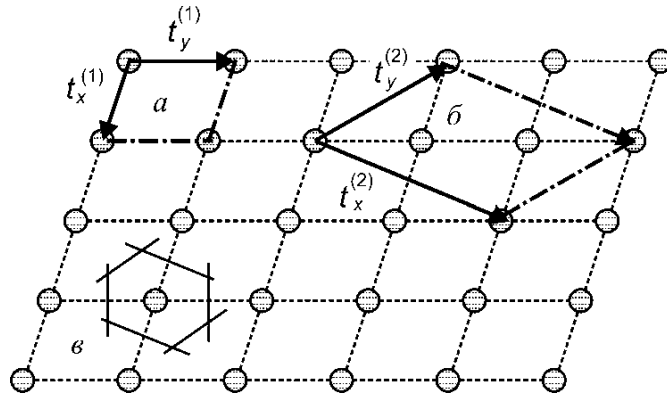


Рисунок 1.2 — Возможные варианты выбора основных векторов трансляции и элементарной ячейки. а - примитивная ячейка; б - элементарная ячейка; в - ячейка Вигнера-Зейтца

Элемент решетки, трансляцией которого на различные вектора  $\vec{t}_{hk}$  может быть получена вся решетка целиком, называют элементарной ячейкой. Частным случаем элементарной ячейки является примитивная, имеющая минимальную из всех возможных площадь.

Другой способ конструирования примитивной ячейки заключается в выделении такой области решетки, все точки которой расположены ближе к фиксированному узлу (центр ячейки), чем к любому другому. Такую ячейку называют ячейкой Вигнера-Зейтца рис. 1.2в.

Кроме трансляционной симметрии двумерные решетки могут обладать некоторым числом операций точечной и осевой симметрии. По симметрии все кристаллические решетки, их еще называют решетками Браве, можно разделить на 5 типов:

- Косоугольная решетка с произвольным соотношением длин основных векторов 1.3а;
- Прямоугольная, инвариантна относительно плоскости зеркального отражения 1.3б;
- Прямоугольная центрированная, имеет базис из двух или более атомов 1.3в;
- Квадратная решетка, имеет ось четвертого порядка 1.3г;
- Гексагональная решетка, инвариантна к повороту на  $2\pi/6$  1.3д;

Поверхности монокристаллов принято обозначать индексами Миллера, соответствующими плоскости, параллельной поверхности. В случае плотноупакованных граней этого вполне достаточно, чтобы представить себе расположение

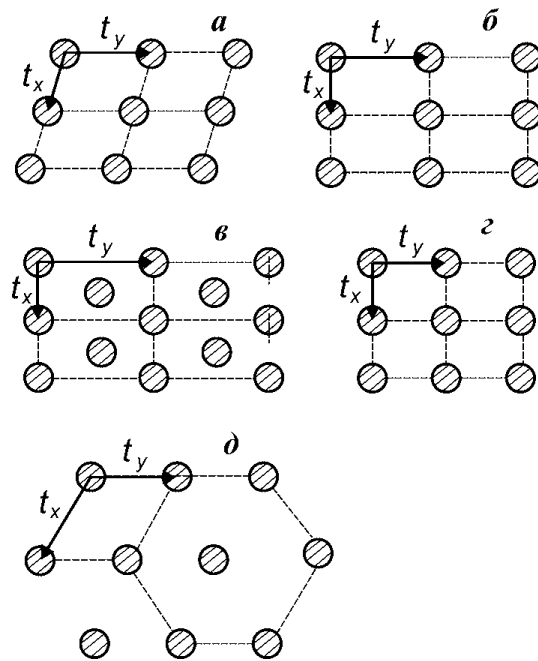


Рисунок 1.3 — Типы двумерных решеток: а - косоугольная; б - прямоугольная; в - прямоугольная центрированная; г - квадратная; д - гексагональная

атомов, если оно не отличается от имеющегося в объеме. На рис. 1.4 приведено расположение атомов для некоторых кристаллических структур. Например, достаточно очевидно расположение атомов на грани(100) кристалла, имеющего гранецентрированную кубическую структуру: элементарная ячейка имеет квадратную форму. Если смотреть сверху, то видны атомы второго слоя. В случае грани(111) имеется гексагональная упаковка, что обеспечивает максимальную плотность атомов, причем сверху просматриваются не только атомы следующего слоя, но и третьего [19].

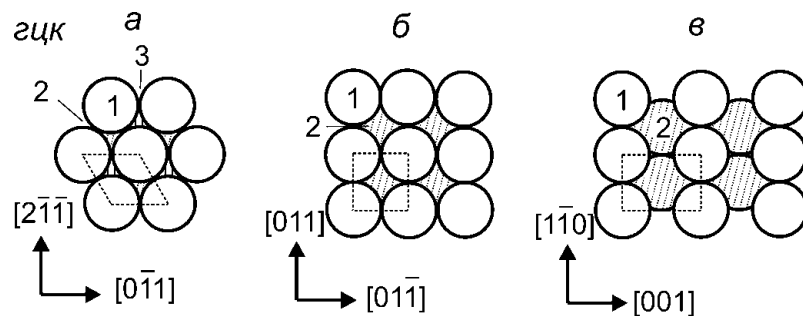


Рисунок 1.4 — Расположение атомов на плотноупакованных гранях кристаллов, имеющих гранецентрированную кубическую структуру(гцк), вид сверху: а-(111); б-(100); в-(110); 1-атомы первого слоя; 2-второго; 3-третьего.

### 1.1.2 Электронная структура кристаллов и кристаллических поверхностей

Для описания электронной структуры кристаллов или кристаллических поверхностей, обладающих пространственной периодичностью используется зонная модель [20]. В общем случае задача об электронах твердого тела является многоэлектронной задачей, потому что полный гамильтониан в твердых телах содержит не только одноэлектронные потенциалы, описывающие взаимодействие легкого электрона с массивным ядром, но и потенциалы взаимодействия электронов между собой [21]. В приближении свободных электронов такое взаимодействие описывается с помощью эффективного одноэлектронного потенциала  $U(\vec{r})$ . Вне зависимости от формы этого потенциала, для идеального периодического кристалла он будет удовлетворять условию периодичности:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}) \quad (1.2)$$

для всех векторов  $\vec{R}$ , принадлежащих решетке Браве.

В рамках одноэлектронной модели движение электрона в кристалле описывается уравнением Шредингера:

$$H\psi = \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right) \psi = \varepsilon \psi \quad (1.3)$$

где  $U(\vec{r})$  - эффективный потенциал, удовлетворяющий условию 1.2.

Следствием периодичности потенциала является очень важное свойство стационарных состояний - теорема Блоха. Согласно этой теореме собственные состояния оператора  $H$  можно выбрать таким образом, чтобы с каждым из них был связан некоторый волновой вектор  $\vec{k}$  и для любого  $\vec{R}$  в решетке Браве выполнялось равенство:

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi(\vec{r}) \quad (1.4)$$

При этом  $\psi(\vec{r})$  представима в виде Блоховской волны:

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} u(\vec{r}) \quad (1.5)$$

где

$$u(\vec{r} + \vec{R}) = u(\vec{r}) \quad (1.6)$$



Введенный вектор  $\vec{k}$  является квантовым числом, которое характеризует трансляционную симметрию периодического потенциала. В общей задаче о движении в периодическом потенциале он играет ту же роль, что и волновой вектор  $\vec{k}$  свободного электрона в теории Зоммерфельда [20]. Однако, нужно заметить, что в отличие от состояний свободного электрона, в периодическом потенциале одно и то же состояние электрона характеризуется бесконечным набором векторов  $\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''$  и т. д., отличающихся друг от друга на вектор  $\vec{K}$  обратной решетки (см. 1.4). По этой причине вектор  $\vec{k}$  называют квазиволновым вектором, а  $\hbar\vec{k}$  - соответствующим квазиимпульсом. Так как для двух значений  $\vec{k}$ , отличающихся друг от друга на вектор обратной решетки, все волновые функции и энергетические уровни совпадают, для полного описания всей совокупности уровней достаточно ограничить область значений  $\vec{k}$  одной элементарной ячейкой. Зоной Бриллюэна называют область обратного пространства, которое включает в себя все множество неэквивалентных значений квазиволнового вектора. Для обратной решетки первая зона Бриллюэна совпадает с ячейкой Вигнера-Зейтца [20]. По теореме Блоха можно показать, что энергетические уровни электрона в периодическом потенциале могут быть описаны с помощью непрерывных функций  $\varepsilon_n(\vec{k})$  ( $n$  - номер энергетической зоны), каждая из которых имеет периодичность обратной решетки. Структуру твердого тела определяют именно эти функции [21].

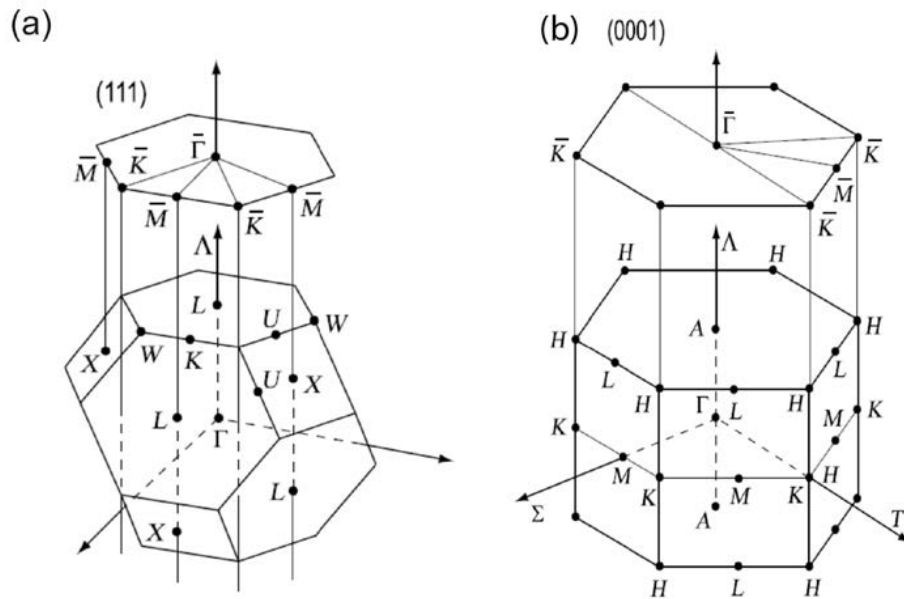


Рисунок 1.5 — Связь между двумерной зоной Бриллюэна плоскости(111) fcc кристалла (a), плоскости (0001) гексагонального кристалла (b) и объемной зоной Бриллюэна [22]

Для анализа систем с пространственной периодичностью концепция зон Бриллюэна играет очень важную роль. На рис. 1.5 показаны двумерные зоны Бриллюэна для плотноупакованной грани (111) гранецентрированного кубического (fcc) кристалла и грани (0001) гексагонального кристалла. Так же на этом рисунке показана их связь с объемными Зонами Бриллюэна [22].

## **1.2 Низкоразмерные структуры**

### **1.3 Гексагональный нитрид бора**

## Глава 2. Экспериментальные методы исследования низкоразмерных наноструктур

## Глава 3. Взаимодействие h-BN на Co(0001) с атомарным кислородом

Теоретические исследования показывают, что взаимодействие монослоя гексагонального нитрида бора с атомарным кислородом приводит к изменению электронных и магнитных свойств материала [18,23]. Важным обстоятельством является то, каким именно образом кислород вступает во взаимодействие с ML h-BN, а именно: встраиваются атомы кислорода в решетку h-BN, или интеркалируют под монослой, не образуя связей с ним, или же являются адатомами на поверхности монослоя. Также интересно как атомы кислорода влияют на электронную структуру гексагонального нитрида бора. Таким образом, в данной работе был исследован механизм взаимодействия атомарного кислорода с ML h-BN, выращенного на поверхности кобальта Co(0001). Посредством серии экспериментов на Российско-Германском канале вывода СИ синхротрона BESSY II в Берлине были получены экспериментальные данные XPS, NEXAFS а так же LEED. Результаты и выводы по полученным данным представлены в данной работе.

### 3.1 Характеристика структуры образца

После формирования гексагонального нитрида бора на поверхности кобальта, для контроля качества поверхности, была получена картина дифракции медленных электронов рис. 3.1. Постоянные решеток Co(0001) и h-BN практически совпадают, поэтому монослой гексагонального нитрида бора ровно ложится на поверхность кобальта и не образует структуру Муара. Картина ДМЭ демонстрирует четко выраженную гексагональную структуру (1x1) рефлексов. Это говорит о том, что выращенный кристалл h-BN имеет высокое качество, а также строго ориентирован относительно подложки.



Рисунок 3.1 — LEED картина соответствующая поверхностной фазе  $\text{h-BN/Co}(0001)$  ( $E_p = 70\text{eV}$ ).

### 3.2 Экспериментальные спектры и их обсуждение

Полученная конфигурация  $\text{h-BN/Co}(0001)$  была подвергнута окислению. Окисление проходило поэтапно, на каждом этапе производилось прогревание образца при температуре  $300\text{ }^\circ\text{C}$ , под давлением кислорода  $10^{-5}$  мбар:

1. Первый шаг. Окисление при давлении кислорода  $10^{-5}$  мбар в течение 10 минут.
2. Второй шаг. Окисление при давлении кислорода  $10^{-5}$  мбар в течение 10 минут.
3. Третий шаг. Окисление при давлении кислорода  $10^{-5}$  мбар в течение 10 минут.
4. Четвертый шаг. Окисление при давлении кислорода  $10^{-5}$  мбар в течение 10 минут.
5. Пятый шаг. Окисление при давлении кислорода  $10^{-5}$  мбар в течение 10 минут.
6. Шестой шаг. Окисление при давлении кислорода  $10^{-5}$  мбар в течение 30 минут.
7. Седьмой шаг. Окисление при давлении кислорода  $10^{-5}$  мбар в течение 60 минут.

Таким образом суммарное время окисления структуры составило 140 минут. На каждом этапе снимались фотоэлектронные спектры(XPS) и спектры поглощения(NEXAFS). Далее в работе представлены результаты обработки данных спектров.

### 3.2.1 Спектры фотоэлектронной спектроскопии

На рис. 3.2 представлена серия фотоэлектронных спектров поверхности h-BN/Co(0001). Каждая кривая соответствует этапу окислирования, таким образом, первая кривая характеризует поверхность до окисления, а последняя после 140 минут. Видно, что вначале отсутствует пик кислорода O1s, который

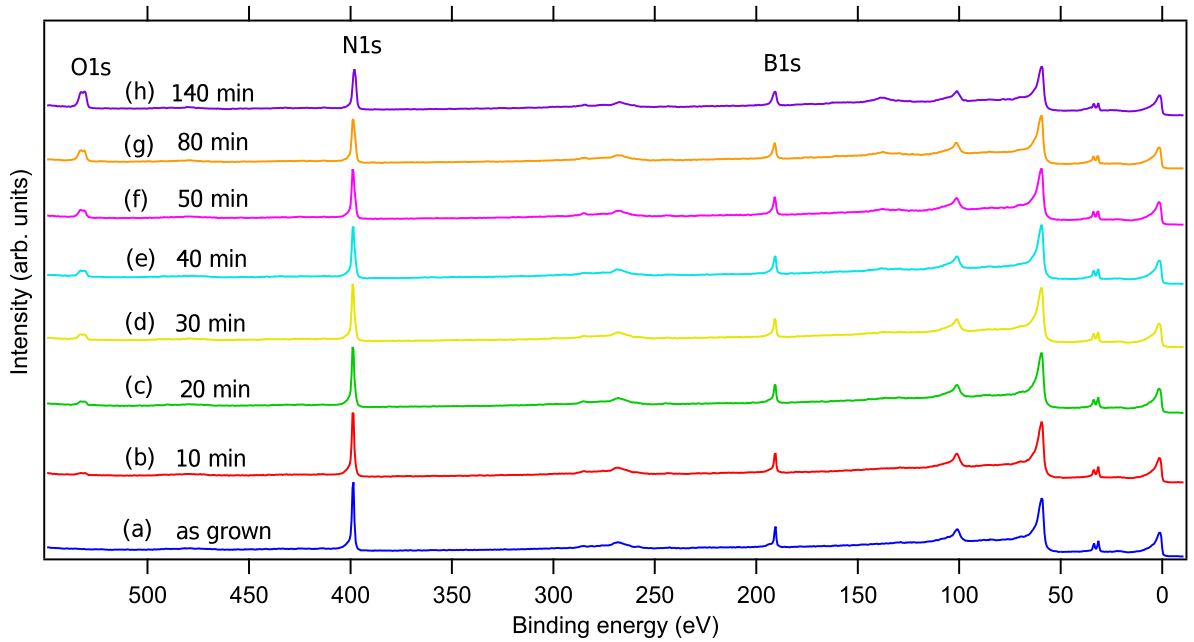


Рисунок 3.2 — Обзорные фотоэлектронные спектры h-BN/Co(0001) в процессе окисления, записанные с энергией возбуждающих квантов 650 eV

появляется уже на первом этапе после 10 минут окисления поверхности и растет со временем. Так же можно заметить, что интенсивность пика азота N1s убывает в течение окисления, в то время, как интенсивность пика бора B1s остается неизменной. Зависимость концентраций азота, бора и кислорода на поверхности h-BN/Co(0001) от времени представлена на рис. 3.3. На чистой поверхности образца до окисления кислород отсутствует, а на бор с азотом приходится по 50% концентрации. Далее, с окислением поверхности, концентрация кислорода увеличивается и доходит до отметки в 8,5%. В процессе окисления концентрация азота уменьшается на 16,5%. Концентрация бора остается постоянной. Представленные зависимости демонстрируют, что количество азота в кристаллической решетке гексагонального нитрида бора убывает, а кислорода возрастает. Такое же поведение системы h-BN/Ir(111) при окислении наблюдалось в работе [24]. Здесь можно сделать предположение, что атомы кислорода

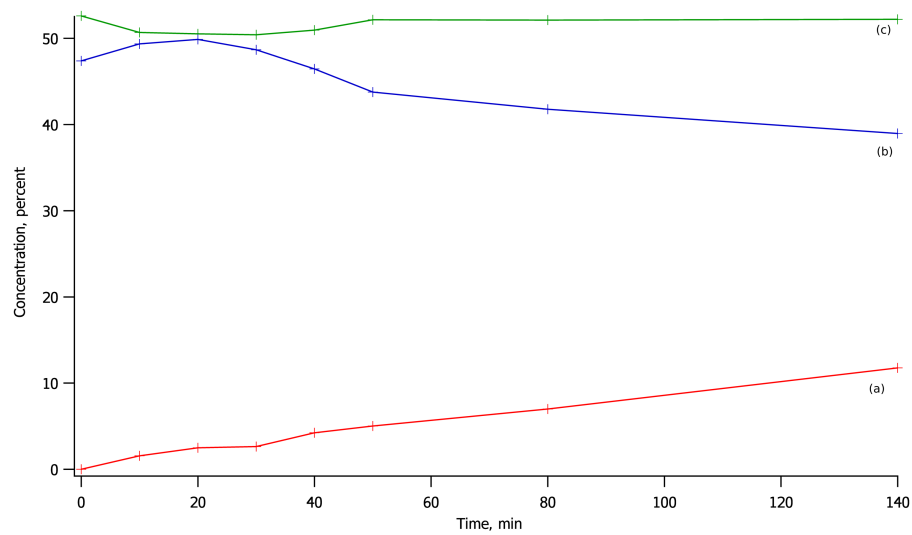


Рисунок 3.3 — Зависимость концентраций от времени (a) кислорода, (b) азота, (c) бора.

встраиваются в кристаллическую решетку нитрида бора, замещая атомы азота.

Далее мы рассмотрели пики интенсивностей B1s, N1s и O1s в отдельности и наблюдали их эволюцию от первого этапа с чистой поверхностью до последнего этапа после 140 минут окисления. На рис. 3.4 представлены интенсивности фотоэмиссии пиков B1s и N1s. Пик  $b_1$  на рисунке 3.4(i) с энергией связи 190.4 eV соответствует основному пику чистого h-BN сильно связанного с Co(0001). Уже после 10 минут окисления появляется два пика  $b_2$  с энергией связи 191.3 eV и  $b_3$  с энергией связи 190.2 eV. Пик  $b_3$  имеет меньшую энергию связи, чем  $b_1$  и появляется в результате интеркаляции кислорода под монослой нитрида бора. Энергия связи уменьшается, потому что атомы кислорода экранируют атомы бора. Пик  $b_2$  относительно  $b_1$  сдвинут в область больших энергий связи. Этот пик связан со встраиванием атомарного кислорода в решетку гексагонального нитрида бора, с замещением атома азота на атом кислорода, и образованием локальной структуры  $\text{BN}_2\text{O}$  [25]. Кислород является более электроотрицательным, чем азот, поэтому энергия связи увеличивается. Компонента  $b_4$  появляется только после 40 минут окисления и может быть связана с образованием  $\text{BO}_3$ , где уже все три атома азота замещены атомами кислорода, в следствии чего энергия связи увеличивается еще сильнее. После 140 минут окисления пик  $b_1$  теряет свою интенсивность, а пики  $b_2$  и  $b_3$  становятся преобладающими. Это говорит нам о том, что на поверхности h-BN

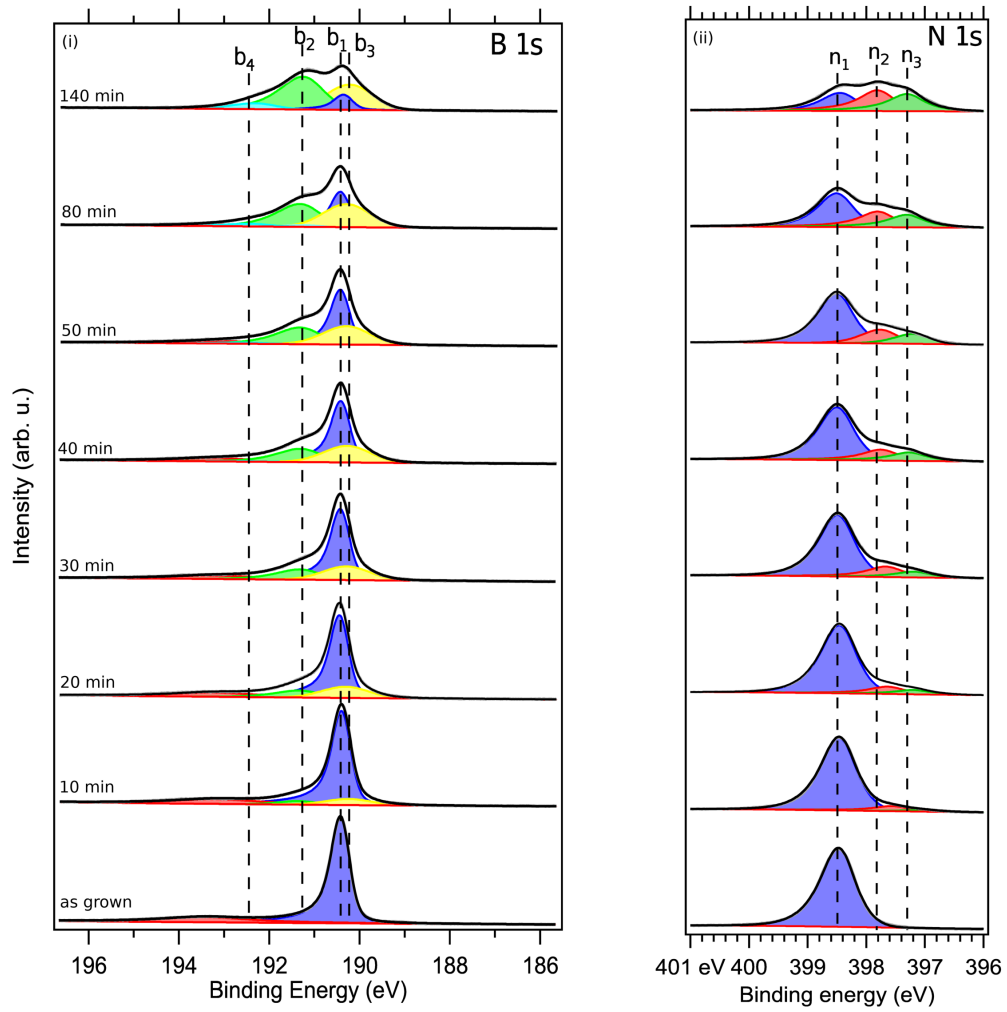


Рисунок 3.4 — XPS линии (i) B1s-, (ii) N1s-уровней от исходного h-BN (as grown) и на разных стадиях окисления.

при окислении преимущественно образуются оксидные группы  $\text{BN}_2\text{O}$ , а интеркаляция кислорода под монослой нитрида бора приводит к ослаблению связи между монослоем h-BN и подложкой Co(0001).

На рис. 3.5 представлен график зависимости концентраций всего бора B (a), бора связанного с Co(0001)  $\text{BN}_3$  (b), бора связанного с одним атомом кислорода  $\text{BN}_2\text{O}$  (c) и бора связанного с тремя атомами кислорода  $\text{BO}_3$  (d) от концентрации атомарного кислорода, встроенного в решетку гексагонального нитрида бора. Концентрация бора (d) на поверхности остается неизменной на протяжении всех этапов окисления. Концентрация бора сильно связанного с подложкой кобальта (b) характерно уменьшается и к седьмому этапу окисления с 50% убывает до 6.8%. Концентрация структуры  $\text{BN}_2\text{O}$ , появляющейся уже после первого этапа окисления, растет в течение всего эксперимента и к последнему этапу возрастает до 27.2%. Структура  $\text{BO}_3$  появляется только после 40 минут окисления, а ее концентрация на последнем этапе доходит до отметки



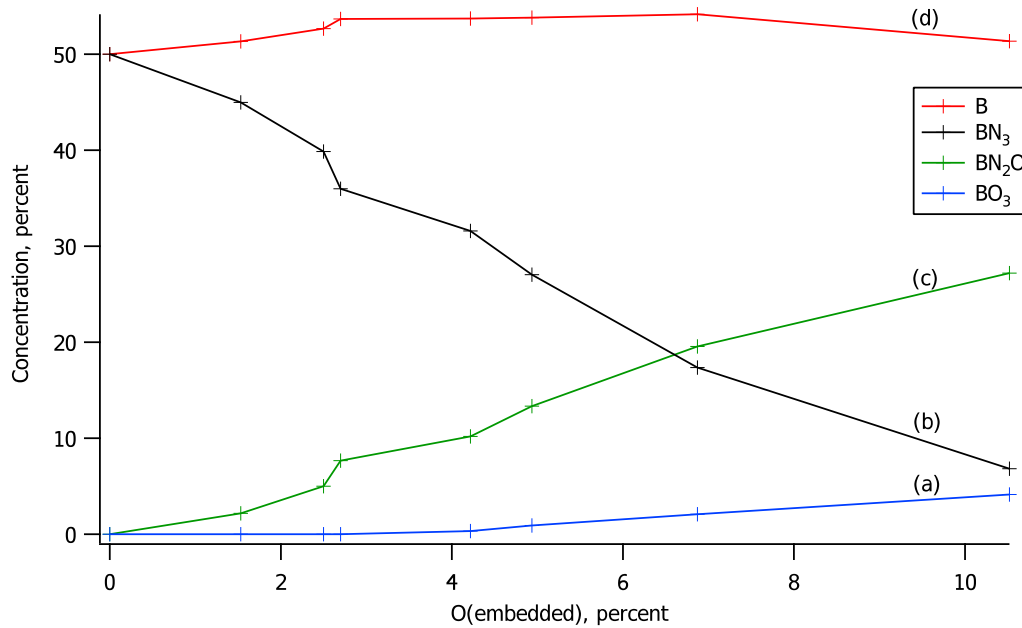


Рисунок 3.5 — График зависимости концентраций B (a), BN<sub>3</sub> (b), BN<sub>2</sub>O (c) и BO<sub>3</sub> (d) от концентрации кислорода, встроенного в решетку h-BN.

4.1%. Таким образом можно сделать вывод, что с увеличением концентрации атомарного кислорода в решетке h-BN, преимущественно образуются структуры вида BN<sub>2</sub>O, при этом атомы бора не покидают решетку нитрида бора.

На рис. 3.4(ii) представлена серия фотоэмиссионных спектров азота N1s в течение окисления поверхности. Пик  $p_1$  с энергией связи 398.5 соответствует основному пику чистого h-BN сильно связанного с Co(0001). После 10 минут окисления в пике азота появляются две новые компоненты  $p_2$  с энергией связи 397.7 eV и  $p_3$  с энергией связи 397.2 eV. Эти две компоненты связаны с интеркаляцией кислорода под монослой нитрида бора. Интенсивность пика  $p_1$  со временем окисления заметно падает, в то время как пики  $p_2$  и  $p_3$  растут, и после 140 минут экспозиции все три пика  $p_1$ ,  $p_2$  и  $p_3$  оказываются примерно с одинаковой интенсивностью. Это говорит о том, что интеркаляция кислорода под монослой гексагонального нитрида бора экранирует его от подложки кобальта. Общая интенсивность пика N1s в течение окисления уменьшается, что является следствием того, что количество азота в структуре h-BN/Co(0001) уменьшается, то есть замещенные кислородом атомы азота устраняются с поверхности.

Зависимость концентраций пиков азота от концентрации атомарного кислорода, встроенного в решетку гексагонального нитрида бора представлена на рис. 3.6. Кривая (c) соответствует концентрации атомарного азота на поверхности h-BN/Co(0001). Убывание этой кривой говорит о том, что количество

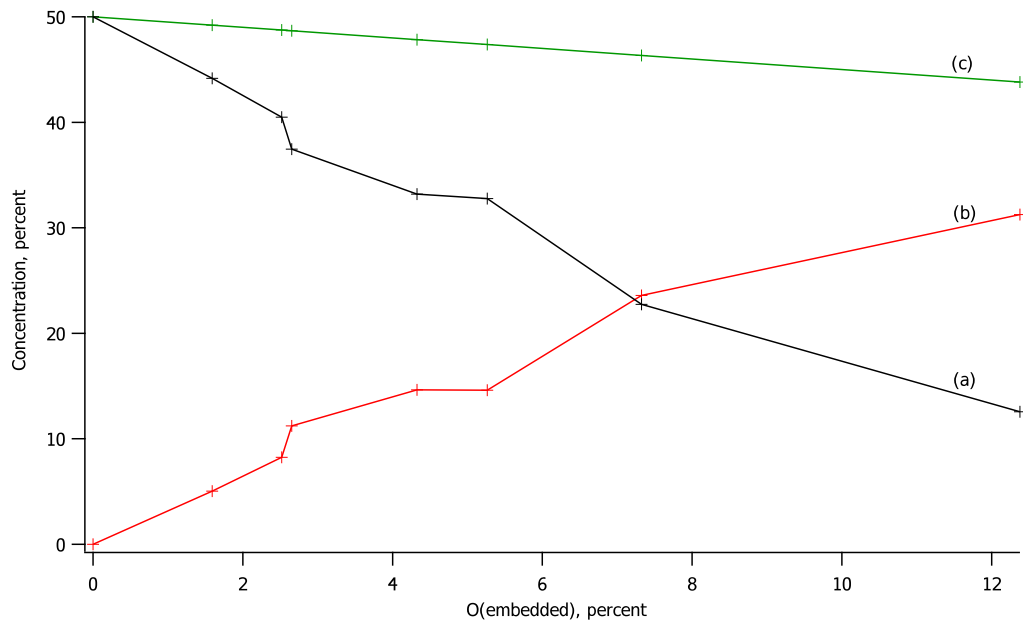


Рисунок 3.6 — График зависимости концентраций азота связанного с Co(0001) (a), азота несвязанного с подложкой (b) и всего азота от концентрации кислорода, встроенного в решетку h-BN.

атомарного азота в структуре h-BN/Co(0001) убывает в процессе окисления. Кривая (b) отвечает азоту несвязанному с подложкой кобальта. Это атомы азота, под которые интеркалировали атомы кислорода. Азоту сильно связанному с Co(0001) соответствует кривая (a), она характерно убывает с ростом концентрации кислорода, в то время как кривая (b) быстро растет. Это говорит о том, что вместе с процессом встраивания атомарного кислорода в решетку h-BN, так же происходит интеркаляция атомов кислорода под монослой гексагонального нитрида бора, и экранирование связи атомов азота и кобальта.

На рис. 3.7 представлена серия спектров фотоэмиссии кислорода O1s в течение окисления поверхности. Пик O1s содержит две компоненты: o с энергией связи 532.2 eV и o' с энергией связи 530.3 eV. Оба пика появляются после 10 минут окисления и растут в течение всех этапов экспозиции. Пик o' относится к атомам кислорода, которые интеркалировали под монослой нитрида бора. Пик o характеризует атомы кислорода, встроенные в решку h-BN в процессе окисления. Большая ширина этого пика является следствием суперпозиции двух пиков оксидов BN<sub>2</sub>O и BO<sub>3</sub> [26].

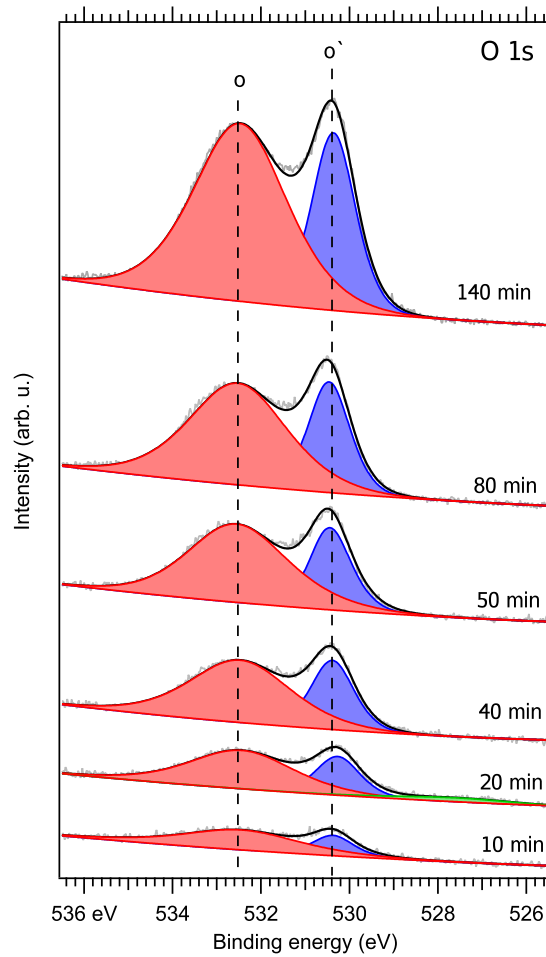


Рисунок 3.7 — XPS линии O1s-уровней на разных стадиях окисления.

### 3.2.2 Спектры поглощения NEXAFS

Теперь рассмотрим спектры поглощения. После каждого этапа окисления вместе с фотоэмиссионными спектрами, также снимались спектры поглощения NEXAFS. На рис. 3.8 представлены В К-спектры поглощения h-BN, соответствующие исходному h-BN/Co(0001) (a), через 10 минут после экспозиции с кислородом (b), 20 минут (c), 30 минут (d), 40 минут (e), 60 минут (d) и насыщенный кислородом h-BN/Co(0001), после 240 минут экспозиции (f). Пика А соответствует гибридным состояниям h-BN-Co. В процессе окисления интенсивность этого пика заметно понижается, и после 240 минут окисления пик А становится практически незаметным. Пик В отвечает за квазисвободный гексагональный нитрид бора. Этот пик становится более острым в процессе окисления, это следствие интеркаляции атомарного кислорода под монослой нитрида бора. Так же нельзя не обратить внимание на пики  $a_1$ ,  $a_2$  и  $a_3$  с энергиями связи 192.7 эВ, 193.3 эВ и 193.9 эВ соответственно. В работе [27] было

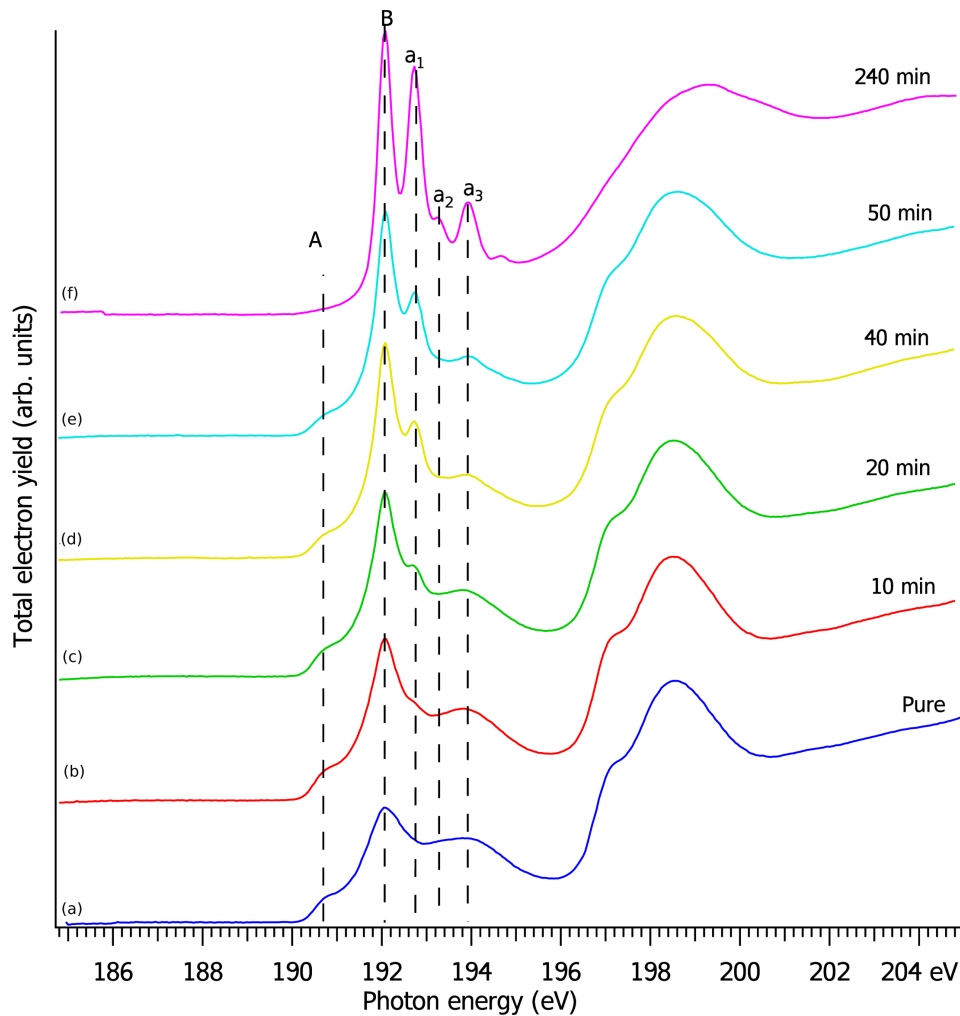


Рисунок 3.8 — Спектры поглощения В K-edge.

показано, что пик  $a_1$  соответствует  $\text{BN}_2\text{O}$ , пик  $a_2$  соответствует  $\text{BNO}_2$ , а пик  $a_3$  соответствует  $\text{BO}_3$ . Исходя из интенсивностей пиков  $a_1$ ,  $a_2$  и  $a_3$ , полученного спектра поглощения В K- уровня, можно заключить, что на поверхности гексагонального нитрида бора при окислении преобладает образование структуры  $\text{BN}_2\text{O}$ , пик  $a_1$  в течение всего процесса окисления. После 240 минут окисления так же становится явно выраженным пик  $a_3$ , что говорит о появлении структуры  $\text{BO}_3$  на поверхности h-BN/Co(0001). Пик  $a_2$  становится заметным только после 240 минут окисления. Интенсивность этого пика очень низкая, а значит структуры  $\text{BNO}_2$  практически не образуются на поверхности гексагонального нитрида бора при окислении в атомарном кислороде.

## Заключение

## Список литературы

- [1] P. R. Wallace, “The band theory of graphite,” *Phys. Rev.*, vol. 71, pp. 622–634, May 1947.
- [2] J. W. McClure, “Diamagnetism of graphite,” *Phys. Rev.*, vol. 104, pp. 666–671, Nov 1956.
- [3] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, “Band structure of graphite,” *Phys. Rev.*, vol. 109, pp. 272–279, Jan 1958.
- [4] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, “Electric field effect in atomically thin carbon films,” *Science*, vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, 2004.
- [5] R. Barends, J. Kelly, A. Megrant, A. Veitia, D. Sank, E. Jeffrey, T. C White, J. Mutus, A. Fowler, B. Campbell, Y. Chen, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, C. Neill, P. O’Malley, P. Roushan, A. Vainsencher, J. Wenner, and J. M Martinis, “Superconducting quantum circuits at the surface code threshold for fault tolerance,” *Nature*, vol. 508, pp. 500–3, 04 2014.
- [6] C. G. Joachim, J. Gimzewski, and a. A. Aviram, “Electronics using hybrid-molecular and mono-molecular devices,” *Nature*, vol. 408, pp. 541–8, 12 2000.
- [7] A. Nitzan and M. A. Ratner, “Electron transport in molecular wire junctions,” *Science*, vol. 300, no. 5624, pp. 1384–1389, 2003.
- [8] M. Zheng, Y. Liu, Y. Gu, and Z. Xu, “Synthesis and characterization of boron nitride sponges as a novel support for metal nanoparticles,” *Science in China Series B: Chemistry*, vol. 51, pp. 205–210, Mar 2008.
- [9] M. V. Kamalakar, A. Dankert, J. Bergsten, T. Ive, and S. Dash, “Enhanced tunnel spin injection into graphene using chemical vapor deposited hexagonal boron nitride,” *Scientific reports*, vol. 4, 06 2014.
- [10] M. V. Kamalakar, A. Dankert, P. J. Kelly, and S. Dash, “Inversion of spin signal and spin filtering in ferromagnet|hexagonal boron nitride-graphene van der waals heterostructures,” *Scientific Reports*, vol. 6, p. 21168, 02 2016.

- [11] Д.Ю.Усачев, *Синтез и управление электронной структурой систем на основе графена : дис. ... д-ра физ.-мат. наук : 01.04.07.* 2015.
- [12] P. Kidambi, R. Blume, J. Kling, J. Wagner, C. Baehtz, R. Weatherup, R. Schloegl, B. Bayer, and S. Hofmann, "In situ observations during chemical vapor deposition of hexagonal boron nitride on polycrystalline copper," *Chemistry of Materials*, vol. 26, no. 22, pp. 6380–6392, 2014.
- [13] M. T. Paffett, R. J. Simonson, P. Papin, and R. T. Paine, "Borazine adsorption and decomposition at Pt(111) and Ru(001) surfaces," *Surface Science*, vol. 232, pp. 286–296, June 1990.
- [14] A. Preobrajenski, S. Krasnikov, A. Vinogradov, M. Ng, T. Käämbre, A. Cafolla, and N. Mårtensson, "Adsorption-induced gap states of h-bn on metal surfaces," *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 77, no. 8, pp. 085421–1–085421–5, 2008.
- [15] T. Brugger, S. Guenther, B. Wang, H. Dil, M.-L. Bocquet, J. Osterwalder, J. Wintterlin, and T. Greber, "Comparison of electronic structure and template function of single-layer graphene and a hexagonal boron nitride nanomesh on ru(0001)," *Phys. Rev. B*, vol. 79, 01 2009.
- [16] A. Nagashima, N. Tejima, Y. Gamou, T. Kawai, and C. Oshima, "Electronic structure of monolayer hexagonal boron nitride physisorbed on metal surfaces," *Physical review letters*, vol. 75, pp. 3918–3921, 12 1995.
- [17] Q. Weng, X.-B. Wang, X. Wang, Y. Bando, and D. Golberg, "Functionalized hexagonal boron nitride nanomaterials: Emerging properties and applications," *Chemical Society reviews*, vol. 45, 05 2016.
- [18] C. Ataca and S. Ciraci, "Functionalization of bn honeycomb structure by adsorption and substitution of foreign atoms," *Phys. Rev. B*, vol. 82, p. 165402, Oct 2010.
- [19] Г.Г.Владимиров, *Физика поверхности твердых тел: Учебное пособие.* 2016.
- [20] M. P. Kittel C., McEuen P., "Introduction to solid state physics," *Wiley New York*, 1976.

- [21] К.А.Симонов, *Наноструктуры на основе графена и гексагонального нитрида бора: характеристика методами рентгеновской спектроскопии и сканирующей туннельной микроскопии : дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.07.* 2015.
- [22] S. Hufner, “Photoelectron spectroscopy : principles and applications / stefan hufner,” *SERBIULA (sistema Librum 2.0)*, 05 2019.
- [23] Y. G. Zhou, X. T. Zu, P. Yang, H. Y. Xiao, and F. Gao, “Oxygen-induced magnetic properties and metallic behavior of a BN sheet,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 22, p. 465303, nov 2010.
- [24] K. Simonov, N. Vinogradov, M. Ng, A. Vinogradov, N. Martensson, and A. Preobrajenski, “Controllable oxidation of h-bn monolayer on ir(111) studied by core-level spectroscopies,” *Surface Science Letters*, vol. 606, no. 3-4, pp. 564–570, 2012.
- [25] A. A. Makarova, L. Fernandez, D. Y. Usachov, A. Fedorov, K. A. Bokai, D. A. Smirnov, C. Laubschat, D. V. Vyalikh, F. Schiller, and J. E. Ortega, “Oxygen intercalation and oxidation of atomically thin h-bn grown on a curved ni crystal,” *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 123, no. 1, pp. 593–602, 2019.
- [26] V. O. Shevelev, K. A. Bokai, O. Y. Vilkov, A. A. Makarova, and D. Y. Usachov, “Oxidation of h-BN on strongly and weakly interacting metal surfaces,” *Nanotechnology*, vol. 30, p. 234004, mar 2019.
- [27] S. P. Huber, E. Gullikson, R. W. E. van de Kruijs, F. Bijkerk, and D. Prendergast, “Oxygen-stabilized triangular defects in hexagonal boron nitride,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, p. 245310, Dec 2015.