

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-15-0693****2D materiály iné ako grafén: monovrstvy, heteroštruktúry a hybridné vrstvy**Zodpovedný riešiteľ **Dr. Martin Hulman**Príjemca **Elektrotechnický ústav SAV**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Elektrotechnický ústav SAV, Bratislava

Fyzikálny ústav SAV, Bratislava

Danubia NanoTech, s.r.o., Bratislava

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

žiadne

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

žiadne

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. Hulman, M., Sojková, M., Végso, K., Mrkývková, N., Hagara, J., Hutár, P., Kotrusz, P., Hudec, J., Tokar, K., Majková, E., and Šiffalovič, P.: Polarized Raman reveals alignment of few-layer MoS₂ films, J. Phys. Chem. C 123 (2019) 29468-29475.
2. Sojková, M., Végso, K., Mrkývková, N., Hagara, J., Hutár, P., Rosová, A., Čaplovičová, M., Ludacka, U., Skákalová, V., Majková, E., Šiffalovič, P., and Hulman, M.: Tuning the orientation of few-layer MoS₂ films using one-zone sulfurization, RSC Adv. 9 (2019) 29645-29651.
3. Hagara, J., Mrkyvkova, N., Nádaždy, P., Hodas, M., Bodík, M., Jergel, M., Majková, E., Tokár, K., Hutár, P., Sojková, M., Chumakov, A., Konovalov, O., Pandit, P., Roth, S., Hinderhofer, A., Hulman, M., Siffalovic P. and Frank Schreiber: Reorientation of pi-conjugated molecules on few-layer MoS₂ films, in Physical Chemistry Chemical Physics, v tlači
4. Sojková, Michaela – Šiffalovič, Peter – Babchenko, Oleg – Vanko, Gabriel – Dobročka, Edmund – Hagara, Jakub – Mrkývková, Naďa, Tesárová – Majková, Eva – Ižák, T. – Kromka, A. – Hulman, Martin. Carbide-free one-zone sulfurization method grows thin MoS₂ layers on polycrystalline CVD diamond. In Scientific Reports, 2019, vol. 9, no. 2001.

Uplatnenie výsledkov projektu

Je to projekt základného výskumu, takže z krátkodobého hľadiska nemajú jeho výsledky žiadne priame uplatnenie.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Projekt bol zameraný na výskum 2D materiálov zo skupiny dichalkogenidov prechodových kovov. Hlavným zámerom projektu bolo získať základné poznatky o možnosti rasti veľmi tenkých vrstiev niektorých materiálov z tejto skupiny, pričom cieľom bolo dosiahnuť hrúbku vrstiev pod 10 nm a prípadne pripraviť vrstvy s hrúbkou jednej atómovej vrstvy. Ideou projektu bol skúmať tie vlastnosti týchto materiálov, ktoré s hrúbkou súvisia, ako napr. šírka zakázaného pásu, alebo skutočnosť, že zakázaný pás sa mení z nepriameho na priamy, ako je to v MoS₂. Tento materiál sme si zvolili ako najvhodnejší pre naše experimenty, keďže v čase začiatku projektu bolo v literatúre o tenkých vrstvách MoS₂ najviac informácií. Kľúčovou záležitosťou pre úspech projektu bol aj výber vhodnej metódy rasti tenkých vrstiev. Testovali sme dve, a to rast pomocou pulznej laserovej depozície a pomocou sulfurizácie tenkých prekurzorových filmov molybdénu. Druhá metóda sa ukázala pre nás ako vhodnejšia a technologicky jednoduchšia. Podarilo sa nám deponovať vrstvy MoS₂ s hrúbkou pod 4 nm, avšak ukázalo sa, že metóda nie je vhodná pre rast monoatomárnych vrstiev. Na druhej strane umožňovala prípravu tenkých vrstiev na veľkej ploche rádovo cm², čo nám dovoľovalo urobiť experimenty, ktoré sa na menšej ploche nedajú uskutočniť. Tenké vrstvy sme charakterizovali viacerými experimentálnymi technikami, z ktorých najdôležitejšími sa ukázali Ramanova spektroskopia a röntgenová difrakcia pod malým uhlom. Pomocou týchto techník sa nám podarilo identifikovať dve možné orientácie vrstiev MoS₂ a nájsť také parametre syntézy vrstiev, ktoré túto orientáciu ovplyvňujú a určujú. Podarilo sa nám vypracovať aj metódu založenú na polarizačných ramanovských meraniach, ktorá dokáže spoľahlivo a rýchlo túto orientáciu zistiť. Okrem MoS₂ sa nám podarilo pripraviť vrstvy aj iných materiálov z tejto skupiny, ako napr. WS₂, MoSe₂ a najmä PtSe₂, ktorému sme sa venovali v poslednom roku riešenia projektu. Taktiež sme pripravili štruktúry tvorené na sebe deponovanými vrstvami MoS₂ a grafénu, na ktorých sa nám podarilo zistiť, že tieto dva materiály sú navzájom kompatibilné. To znamená, že multivrstvy týchto materiálov sa dajú pripraviť bez toho, aby samotný rast negatívne vplýval na kvalitu jednotlivých zložiek. Ako zaujímavá heteroštruktúra sa ukázala kombinácia MoS₂ a organickej molekuly DIP. Dve možné orientácie vrstvy MoS₂ ovplyvňujú aj orientácie molekúl DIPu, ktoré sú na vrstve deponované. Tento fakt môže byť zaujímavý pre elektroniku na báze organických molekúl, pre ktorú je molekula DIP jeden z najväznejších kandidátov.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

The project was focused on the research of 2D materials from the group of transition metal dichalcogenides. The main aim of the project was to acquire basic knowledge of the possibility of very thin layers of some materials from this group to grow, intending to achieve a layer thickness below 10 nm and to prepare layers with single atomic layer thickness. The idea of the project was to investigate those thickness-related properties of these materials, such as e.g. the width of the electronic gap, or the fact that the electronic gap changes from indirect to direct, as in MoS₂. We chose this material as the most appropriate for our experiments, as at the time of the project start, there was the most information in the MoS₂ thin-film literature. A key issue for the success of the project was also the selection of a suitable thin film growth method. We tested two, using pulsed laser deposition and sulfurization of thin molybdenum precursor films. The second method has proved to be more suitable and technologically simpler for us. We managed to deposit MoS₂ layers with the thickness below 4 nm, but the method proved to be unsuitable for the growth of monoatomic layers. On the other hand, it allowed the preparation of thin layers on a large area of the order of cm², which allowed us to do experiments that could not be performed on a smaller area. Thin films were characterized by several experimental techniques, the most important of which were Raman spectroscopy and low-angle X-ray diffraction. Using these techniques, we have been able to identify two possible alignments of the MoS₂ layers and find such layer synthesis parameters that influence and determine this alignment. We have also developed a method based on polarized Raman measurements that can reliably and quickly detect this orientation. In addition to MoS₂, we were able to prepare layers of other materials from this group, such as WS₂, MoSe₂ and especially PtSe₂, which we have been dealing with in the last year of the project. We also prepared structures consisting of

superimposed layers of MoS₂ and graphene on which we were able to find that these two materials are compatible with each other. This means that multilayers of these materials can be prepared without the growth itself adversely affecting the quality of the individual components. The combination of MoS₂ and the organic DIP molecule has also proven to be an interesting heterostructure. The two possible alignments of the MoS₂ layer also affect the orientations of the DIP molecules deposited on the layer. This may be of interest to organic molecule electronics, for which the DIP molecule is one of the most serious candidates.