

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С применением предложенных моделей проведено моделирование и исследование двух наиболее перспективных приборных структур нанoeлектроники, в частности ПГТ и РТД на основе графена, в зависимости от различных факторов.

Предложенные модели включены в систему моделирования нанoeлектронных приборных структур и устройств NANODEV [8, 9], разрабатываемую в БГУИР с 1995 года.

Работы проведены в рамках проектов Государственных программ научных исследований Республики Беларусь «Конвергенция» и «Нанотех».

## ЛИТЕРАТУРА

1. Novoselov K.S., Fal'ko V.I., Colombo, L., Gellert P.R., Schwab M.G., Kim K.S. A roadmap for graphene // Nature. – 2012. – Vol. 490. – P. 192–200.
2. Ferrari A.C., Bonaccorso F., Fal'ko V., Novoselov K.S. et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems // Nanoscale. – 2015. – Vol. 7. – P. 4598–4810.
3. Абрамов, И.И. Основы моделирования элементов микро- и нанoeлектроники / И.И. Абрамов. – Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2016. – 444 с.
4. Абрамов, И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем / И.И. Абрамов. – М. –Ижевск: НИЦ РХД, 2005. – 152 с.
5. Абрамов, И.И. Лекции по моделированию элементов интегральных схем микроэлектроники / И.И. Абрамов. – Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012. – 116 с.
6. Абрамов И.И., Коломейцева Н.В., Лабунев В.А., Романова И.А. Моделирование резонансно-туннельных диодов на основе графена на подложках различного типа // Нано- и микросистемная техника. – 2015. – № 11. – С. 3–10.
7. Wang H., Hsu A., Antoniadis D.A., Palacios T. Compact virtual-source current-voltage model for top- and back-gated graphene field-effect transistors // IEEE Trans. Electron. Dev. – 2011. – Vol. 58, No. 5. – P. 1523–1533.
8. Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Игнатенко С.А., Королев А.В., Новик Е.Г., Рогачев А.И. Система моделирования нанoeлектронных приборов – NANODEV // Микроэлектроника. – 2003. – Т. 32, № 2. – С. 124–133.
9. Abramov I.I., Baranoff A.L., Goncharenko I.A., Kolomejtseva N.V., Bely Y.L., Shcherbakova I.Y. A nanoelectronic device simulation software system NANODEV: New opportunities // Proc. of SPIE. – 2010. – Vol. 7521. – P. 75211E-1–11.

## СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УДА ДО И ПОСЛЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

И. И. Азарко<sup>1</sup>, Г. А. Гусаков<sup>2</sup>, В. Б. Оджаев<sup>1</sup>, О. Н. Янковский<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет

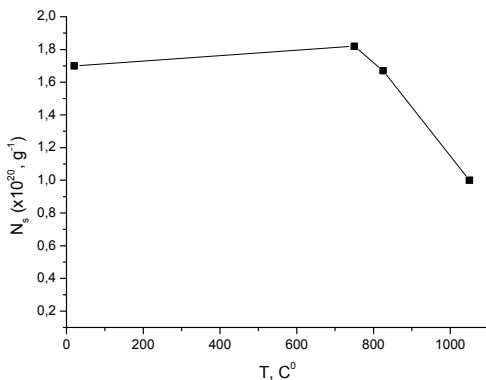
<sup>2</sup>Научно-исследовательское учреждение "Институт прикладных физических проблем им. А.Н.Севченко" Белорусского государственного университета

## ВВЕДЕНИЕ

Ультрадисперсные алмазы (УДА) детонационного синтеза относятся к классу наноматериалов с развитой поверхностью. Поэтому относительно легко с помощью химической или барометрической обработки им можно придать различные элек-

тронные свойства [1]. В связи с этим внимание исследователей сосредоточено на детальном изучении характеристик и свойств ультрадисперсных алмазов и на поиске новых областей их применения для различных отраслей промышленности, в том числе для наполнения и упрочнения композитных материалов с целью создания стабильной структуры [2].

Методом электронного парамагнитного резонанса было исследовано изменение параметров спектров ультрадисперсных алмазов после отжига на воздухе. Парамагнитные центры (ПЦ) регистрировались на ЭПР-спектрометре «Varian E-112» при комнатной и температуре жидкого азота. При комнатной температуре измерения регистрируется одиночный сигнал с  $g = 2,0019$  с формой линии хорошо аппроксимируемой уравнением Лоренца и шириной линии до 7,6 Гс. Концентрация ПЦ, соответственно изменяется от  $2 \cdot 10^{17}$  до  $6 \cdot 10^{17}$  спин/г. Сигнал ЭПР не насыщается при повышении мощности СВЧ излучения вплоть до 150 мВт. При снижении температуры измерения до 77 К интенсивность сигнала увеличивается примерно на порядок. Форма линии сигнала остается лоренцевой. На рисунке представлена зависимость концентрации парамагнитных центров образцов УДА от температуры отжига.



**Рисунок – Зависимость концентрации парамагнитных центров образцов УДА от температуры отжига**

Как видно из рисунка, наблюдается падение концентрации парамагнитных центров при приближении к температурам  $T \geq 1000 \text{ C}^\circ$ , которое связано со спеканием кристаллов друг с другом и уменьшением количества оборванных связей. Ширина линии сигнала при этом практически не меняется и только при повышении температуры отжига до  $1000 \text{ C}^\circ$  происходит ее увеличение до 10 Гс, что может свидетельствовать об усиленном образовании дефектов при спекании частиц. Фазовый переход из графита в алмаз происходит под действием высокого давления в ударной волне. Структура частицы УДА состоит из упорядоченного кристаллоподобного ядра и не плотной оболочки. За основные свойства, близкие к характеристикам объемных кристаллов алмаза, отвечает именно центральная область частицы, периферийная же область определяет в первую очередь знак и величину поверхностного заряда, химический состав. Последний, в основном, определяется, как и для ядра, преобладанием атомов углерода. Вследствие активного взаимодействия разрыхленной оболочки с внешней средой, периферия частицы УДА обогащена кислород- и азотсодержащими дефектами. При увеличении температуры отжига может изменяться процентное со-

отношение алмазоподобной структуры, для которой характерна  $sp^3$ -гибридизация и число фрагментов с графитоподобной структурой с  $sp^2$ -гибридизацией. Вследствие чего может увеличиваться область перехода от центрального ядра с алмазной кристаллической решеткой к аморфной периферии. Различные дефекты на поверхности и внутри частиц УДА, в том числе искажения структуры алмазного ядра определяют парамагнитные свойства образцов. Несмотря на высокую концентрацию азота в УДА триплетный сигнал Р1 центров не наблюдается, т.к. из-за высокой скорости образования кристалла входящие в ароматический цикл компоненты встраиваются в углеродную матрицу скорее не как одиночные атомы, а в виде азот-углеродной пары [2].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Prasad B.L.V. et al. Heat-treatment effect on the nanosized graphite pi-electron system during diamond to graphite conversion // Physical Rev. B – 2000 – V. 62, №16. P11209-11218.
2. Долматов В.Ю. Ультрадисперсные алмазы детонационного синтеза: свойства и применение // Успехи химии. 2001, том. 70, Вып. 7.–с. 687-708.

### ФОНОННЫЕ СВОЙСТВА МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СЛОЕВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $MoS_{2-x}Te_x$

**А. Ю. Алексеев, А. В. Кривошеева, В. Л. Шапошников, В. Е. Борисенко**

---

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
lucky.alexey94@gmail.com*

Моделирование из первых принципов фононных свойств двумерных кристаллов твердых растворов  $MoS_{2-x}Te_x$  показало, что с увеличением концентрации теллура рамановские частоты мод, типичные для  $MoS_2$ , уменьшаются, а на частоты мод, типичные для  $MoTe_2$ , состав твердого раствора оказывает слабое влияние.

Обнаружение необычных электронных свойств графена явилось стимулом к изучению свойств различных двумерных кристаллов. Среди них наибольший научный и практический интерес представляют двумерные кристаллы дихалькогенидов тугоплавких металлов (ДТМ) [1], структура которых схожа со структурой графита, в котором отдельные слои графена связаны друг с другом слабо, а связь между атомами одного слоя сильна. ДТМ образуют слоистые структуры вида  $X-Me-X$ , где  $X$  – атом халькогена, а  $Me$  – атом тугоплавкого металла, при этом плоскость из атомов металла расположена между двумя плоскостями из атомов халькогена. Связь между отдельными слоями  $X-Me-X$  осуществляется за счет слабых сил Ван-дер-Ваальса. Для некоторых ДТМ, в частности дихалькогенидов молибдена и вольфрама, являющихся непрямозонными полупроводниками в объемном состоянии, характерно превращение в прямозонные полупроводники с шириной запрещенной зоны 1–2 эВ при понижении размерности до одного мономолекулярного слоя [1], что открывает широкие возможности их применения в электронике и оптоэлектронике [2]. Разработаны технологические основы получения качественных однородных мономолекулярных слоев ДТМ на промышленно используемых подложках [3]. Также была продемонстрирована возможность синтеза одного или нескольких мономолекулярных слоев твердых растворов ДТМ с целью создания структур с настраиваемыми электронными и оптическими свойствами [4].