отношение алмазоподобной структуры, для которой характерна sp³- гибридизация и число фрагментов с графитоподобной структурой с sp²- 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

- Prasad B.L.V. et al. Heat-treatment effect on the nanosized grafphite pi-electron system during diamond to graphite conversion // Physical Rev. B – 2000 – V. 62, №16. P11209-11218.
- 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 МоS_{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 Ме – атом тугоплавкого металла, при этом плоскость из атомов металла расположена между двумя плоскостями из атомов халькогена. Связь между отдельными слоями Х-Ме-Х 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].

Одним из направлений исследования ДТМ является изучение их фононных свойств, которые определяют тепловые характеристики материалов, а также их взаимодействие с излучением. Инструментами для изучения фононных свойств являются ИК-спектроскопия, рамановская спектроскопия (спектроскопия комбинационного рассеяния), рассеяние нейтронов и первопринципное моделирование. Рамановские спектры твердых растворов могут иметь сложную структуру [5], теоретическое изучение которой для случая твердых растворов двумерных кристаллов $MoS_{2-x}Te_x$ является целью представленной работы.

В бинарных двумерных кристаллах ДТМ существует девять основных колебательных мод. Три из них наблюдаются в рамановских спектрах при геометрии обратного рассеяния [6]. В соответствии с неприводимыми представлениями их обозначают как A'_1 и две E' (продольная и поперечная). Мода A'_1 соответствует смещению двух плоскостей атомов халькогена в противоположные стороны, перпендикулярно плоскости слоя, в то время как атомы металла покоятся. Модам E' соответствует смещение атомов халькогена и атомов металла в противоположные стороны, параллельно плоскости слоя. Вследствие достаточно большой разницы в частотах однотипных мод MoS_2 и $MoTe_2$, в их твердых растворах ожидается двухмодовое поведение [4, 5]. Таким образом, в работе будут рассмотрены шесть рамановских мод твердых растворов $MoS_{2-x}Te_x$, обозначенные как $A'_1(S)$, E'(S), $A'_1(Te)$ и E'(Te). Пики первого порядка рамановских спектров дают частоты рамановских мод в Гточке [7], поэтому остальные точки первой зоны Бриллюэна в представленной работе не рассматриваются.

Для определения фононных свойств каждой исследуемой структуры рассчитывали матрицу силовых постоянных в рамках теории возмущений функционала плотности с использованием приближения локальной плотности (VASP код) [8]. С целью учета вкладов во взаимодействие достаточного количества атомов при их смещениях необходимо брать в расчет сверхъячейку, как минимум, трижды транслированную в двух направлениях, параллельных плоскости слоя (сверхъячейку 3×3×1) [9]. В направлении, перпендикулярном плоскости слоя, каждая рассчитанная сверхъячейка имеет слой вакуума толщиной около 20 Å, что необходимо для предотвращения влияния соседних слоев при изучении свойств двумерных кристаллов. Каждую исследуемую сверхъячейку предварительно релаксировали с максимальной точностью, при которой ячейка не разрушается вследствие оставшегося слабого взаимодействия между слоями. В работе не берется в расчет вызываемое макроскопическим электрическим полем LO-TO расщепление, оказывающее слабое влияние в бинарных ДТМ [10].

В результате замещения в сверхъячейках MoS_2 и $MoTe_2 2 \times 2 \times 1$, $3 \times 3 \times 1$ и $4 \times 4 \times 1$ двух рядом стоящих атомов халькогена на два атома халькогена другого типа были образованы сверхъячейки для твердых растворов $MoTe_{0,125}S_{1,875}$, $MoTe_{0,22}S_{1,78}$, $MoTe_{0,5}S_{1,5}$, $MoTe_{5}$, $MoTe_{1,5} S_{0,5}$, $MoTe_{1,78}S_{0,22}$ и $MoTe_{1,875}S_{0,125}$. Сверхъячейки размером $2 \times 2 \times 1$ в расчете были увеличены до $4 \times 4 \times 1$ по оговоренной выше необходимости использования сверхъячеек размером не меньше $3 \times 3 \times 1$.

В традиционном случае, при известных силовых постоянных, строится динамическая матрица, собственные значения которой будут равны квадратам частот мод, а собственные вектора – векторам смещений атомов из положения равновесия при соответствующей моде. Количество мод при этом равно числу степеней свободы системы 3N (где N – число атомов в транслируемой ячейке). В рассматриваемых сверхъячейках данный метод приводит к появлению 36, 81 и 144 мод. Вследствие нарушения симметрии, смещения атомов при этих модах сильно искажены, что не позволяет выделить из этого множества мод искомые рамановские.

Для анализа таких структур, путем записи уравнений движения атомов системы с нулевыми смещениями определенных атомов в определенных направлениях, были построены матрицы, в которых число степеней свободы уменьшено.

Ограничение движения атомов в направлении, перпендикулярном плоскости слоя, позволило получить частоты для мод $A'_1(S)$ и $A'_1(Te)$ всех исследуемых структур. В результате ограничения движения атомов во всех направлениях, параллельных плоскости слоя, удалось получить частоты мод E'(S), а в результате запрета движения всех атомов серы – E'(Te). Полученные зависимости частот от состава твердого раствора отображены на рисунке.



Рисунок – Зависимость частот рамановских мод твердых растворов MoS2-xTex от x

Частоты всех рамановских мод MoS_2 с увеличением концентрации теллура уменьшаются. При высоких концентрациях теллура их частоты немного увеличиваются, образуя минимум. Частоты рамановских мод структуры $MoTe_2$ слабее реагируют на изменение концентрации, однако, можно заметить увеличение частоты моды E'(Te) при высоких концентрациях серы по сравнению с $MoTe_2$. При равных концентрациях серы и теллура снимается вырождение парных мод E'(S) и E'(Te), что может быть связано со спецификой используемой сверхъячейки и также существовать в реальном кристалле. Изучение данных зависимостей с LO-TO расщеплением является предметом дальнейшего исследования.

Работа была выполнена в рамках программы «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии» (Подпрограмма «Материаловедение и технологии материалов») (ГБЦ 13-3064).

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Recent Advances in Two-Dimensional Materials beyond Graphene / G. R. Bhimanapati [et al.] // ASC Nano. 2015. Vol. 9, № 12. P. 11509–39.
- 2. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides / Q. H. Wang [et al.] // Nature nanotechnology. 2012. Vol. 7. P. 699–712.
- Controlled Scalable Synthesis of Uniform, High-Quality Monolayer and Few-layer MoS₂ Films / Y. Yu [et al.] // Scientific reports. – 2013. – Vol. 3, № 1866. – P. 1–6.

- 2-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides with Tunable Direct Band Gaps: MoS_{2(1-x)}Se_{2x} Monolayers / J. Mann [et al.] // Advanced Materials. – 2014. – Vol. 26, № 9. – P. 1399–1404.
- Springer Series in materials science : in 247 vol. / ed. : R. Hull [et al.]. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1986–2016. Vol. 42 : Raman scattering in materials science / ed. W. H. Weber, R. Merlin. 2010. 493 p.
- Phonon and Raman scattering of two-dimensional transition metal dichalcogenides from monolayer, multilayer to bulk material / Xin Zhang [et al.] // Chemical Society Reviews. – 2015. – Vol. 44, iss. 9. – P. 2757–2785.
- 7. Сущинский, М. М. Комбинационное рассеяние света и строение вещества / М. М. Сущинский. М. : Наука, 1987. 184 с.
- 8. Kresse, G. Efficient interactive schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 54, № 16. P. 11169–11186.
- Моделирование фононных спектров двумерных кристаллов дисульфида и дителлурида молибдена / А. Ю. Алексеев [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии – 2016. – № 6. – принято к печати.
- Molina-Sanchez, A. Phonons in single-layer and few-layer MoS₂ and WS₂ / A. Molina-Sanchez, L. Wirtz // Phis. Rew. B. - 2011. - Vol. 84, № 15. - P. 155413-8.

УВЕЛИЧЕНИЕ РАЗРЕШАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ЗАПИСИ ИЗОБРАЖЕНИЯ НА *n-p-i-m* НАНОСТРУКТУРАХ ЗА СЧЕТ ПАССИВАЦИИ ВОДОРОДОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ

В. Б. Британ¹, А. А. Вельченко², О. Р. Пелещак³, В. Д. Попович¹

¹Дрогобычский государственный педагогический университет имени Ивана Франко, г. Дрогобыч, Украина, vbrytan@yandex.ru

²Белорусский государственный аграрный технический университет, г. Минск, Беларусь, anna.velchenko@gmail.com ³Львовский колледж государственного университета телекоммуникаций г. Львов, Украина

Аннотация. В данной работе предложен способ увеличения разрешающей способности записи изображения на *n*-*p*-*i*-*m* наноструктурах и расширение спектрального диапазона записи изображения.

На сегодняшний день в качестве быстродействующих оптических регистрирующих сред предложены MIS структуры с тонким наноразмерным слоем диэлектрика таллия (Tl) толщиной 2 нм – 5 нм (M (Tl) S-наноструктуры) [1], где в качестве полупроводникового элемента берут высокоомный теллурид кадми (CdTe), $\rho = 10^7 \ Om \cdot cm - 10^8 \ Om \cdot cm$.

Одним из способов получения высокоомных монокристаллов есть выращивание или отжиг их в атмосфере водорода (CdTe:H). Это в свою очередь приводит к пассивации электрически-активных центров (вакансий, межузловых атомов), то есть к уменьшению их концентрации [2, 3]. Тогда при действии света на рабочий полупроводниковый элемент (CdTe:H) в нем увеличивается концентрация свободных носителей заряда, то есть на электродах увеличивается регистрирующий детекторный заряд Q_2 относительно заряда Q_1 , который возникает при действии света в непассивируемом полупроводниковом элементе CdTe.

Для создания оптически-регистрирующих сред на полупроводниковых наноструктурах для записи и обработки изображений с высокой разрешающей способно-