

Моделирование спектра фононов в трехкомпонентных двумерных кристаллах дихалькогенидов тугоплавких металлов

А. Ю. Алексеев ¹

А. В. Кривошеева ²

В. Л. Шапошников ³

В. Е. Борисенко ⁴

2017 г.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

Ключевые слова: дихалькогенид молибдена, двумерный кристалл, твердый раствор, тройное соединение, фонон

Аннотация: Разработана модель для расчета *ab initio* фононных свойств трехкомпонентных твердых растворов дихалькогенидов тугоплавких металлов, основанная на допущении об одинаковом смещении однотипных атомов халькогена и несвязанных смещениях атомов металла. Результаты расчета частот фононов в точке Γ для мономолекулярных слоев $\text{MoS}_2\text{-xSex}$ и $\text{MoS}_2\text{-xTex}$ показали их соответствие с имеющимися экспериментальными данными спектроскопии комбинационного рассеяния.

Источник публикации: А. Ю. Алексеев, А. В. Кривошеева, В. Л. Шапошников, В. Е. Борисенко, Моделирование спектра фононов в трехкомпонентных двумерных кристаллах дихалькогенидов

тугоплавких металлов, Журнал прикладной спектроскопии 84(4), 554-560 (2017).

Full text/Полный текст:

<http://imaph.bas-net.by/JAS/rus/index.html>

<https://elibrary.ru/item.asp?id=29738328>