

## ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КВАЗИДВУХМЕРНЫХ СТРУКТУР ХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ V ГРУППЫ

О.А. КОЗЛОВА

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
ул. П. Бровки, 6, г. Минск, 220013, Республика Беларусь  
olga.bsuir@gmail.com

Представлен анализ результатов теоретических и прикладных исследований по изучению электронных и магнитных свойств электронных свойств квазидвухмерных структур халькогенидов переходных металлов V группы ( $MeX_2$ , где Me - V, Nb, Ta, X - S, Se, Te), в том числе, полученных с использованием первопринципных методов моделирования.

*Ключевые слова:* квазидвухмерные структуры, халькогениды переходных металлов, электронные свойства, микроэлектронные устройства.

В многообразии новых материалов особое место занимают материалы, имеющие наномасштабную структуру. Исследования последних лет продемонстрировали важную роль наноструктур в различных областях науки и техники. Важное место в дальнейшем прогрессе понимания и объяснения физических явлений, происходящих в наноразмерных объектах, принадлежит использованию *ab initio*, первопринципных методов моделирования.

Ультратонкие двухмерные структуры слоистых дихалькогенидов переходных металлов (ХПМ) технологически просты в производстве и эффективны в использовании. В отличие от графена, их электрохимические свойства универсальны. Структуры, состоящие из одного или нескольких слоев ХПМ, полученные посредством отслаивания объемных материалов или CVD-методом, - являются прямозонными полупроводниками, значение запрещенной зоны и тип носителя заряда которых, колеблется в зависимости от кристаллографической конфигурации, химического состава и размерности соединений. Таким образом, возможность модификации электронной структуры ХПМ делает их привлекательными для различных приложений микро- и наноэлектроники.

В дополнение к составу и кристаллографической конфигурации атомов в соединениях ХПМ, размерность играет решающую роль в определении их основных электронных свойств. Наиболее ярким примером проявления аналогичного поведения является графен, уникальные свойства которого отсутствуют в объемном графите [1–3]. Быстрые темпы исследования электронных свойств графена и разработанных методологий подготовки и получения сверхтонких слоев привело к освоению других двухмерных материалов [4]. В частности, монослой ХПМ структур, подобные структуре графита, получили значительное внимание, так как некоторые из них являются полупроводниками с значительной шириной запрещенной зоны и широко распространены в природе.

В слоистых структурах ХПМ V группы, каждый слой имеет толщину 6 ~ 7 Å, который состоит из гексагонально упакованного слоя атомов металла между двумя слоями атомов халькогена. Связи М - X внутри слоя преимущественно ковалентные, слои соединены слабыми ван-дер-ваальсовыми силами, таким образом, возможно легко расщепить кристалл вдоль поверхности слоя. Соединения ХПМ V группы являются узкозонными полупроводниками или полуметаллами, характеризуются низким значением удельного электрического сопротивления ( $\sim 10 - 6 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ) и периодическим перераспределением в пространстве электронного, ионного и суммарного зарядов (волна зарядовой плотности) [5]. Длина связи М — М в структурах ХПМ V группы изменяется в диапазоне от 3,15 Å до

4,03 Å, в зависимости от размера ионов металла и халькогена. Эти величины на 15-25% больше, чем длины связей, в соединениях переходных металлов твердых веществ, что указывает на ограниченное энергетическое и пространственное перекрытие орбиталей в соединениях ХПМ. Кристаллографическая конфигурация металлов М в структуре ХПМ может быть как тригонально призматической, так и октаэдрической [6].

Разнообразный физико-химический состав квазидвухмерных структур на основе ХПМ предоставляет множество возможностей для использования электронных и магнитных свойств указанных соединений для широкого круга приложений микро- и наноэлектроники, в частности для устройств хранения энергии, каталитически активных элементов в оптоэлектронике, и в структурных компонентах микроэлектронных приборов. Однако остаются нерешенными ключевые проблемы, связанные с увеличением электрической проводимости и повышением стабильности квазидвухмерных структур, решение которых требует интеграции экспериментальных и теоретических исследований.

#### Список литературы

1. *Novoselov K. S. et al. // Science. 2011. Vol. 306. P. 666–669.*
2. *Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S., Geim A. K. // Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. P.109–162.*
3. *Geim A. K. // Science Vol. 2009. Vol. 324. P. 1530–1534.*
4. *Li H. et al. // Small. 2012. Vol. 8. P. 63–67.*
5. *Castro Neto A. H. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 86. P. 4382–4385.*
6. *Chhowalla M., Shin H.S., Eda G., Li L.-J., Loh K. P., Zhang H. // Nature chemistry. 2013. Vol. 5. P. 263–275.*

УДК 537.622.4

## ФЕРРОМАГНЕТИЗМ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО ОКСИДА ЦИНКА

М.С. ЗЕЛЕНИНА<sup>1</sup>, О.А. КОЗЛОВА<sup>1</sup>, В.Р. СТЕМПИЦКИЙ<sup>1</sup>, В.В. БАРКАЛИН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
ул. П. Бровки, 6, г. Минск, 220013, Республика Беларусь  
nil44@bsuir.by*

<sup>2</sup>*Белорусский национальный технический университет  
пр-т Независимости, 65, г. Минск, 220013, Республика Беларусь  
barkaline@yahoo.com*

Помимо интересных электрофизических и оптических свойств, оксид цинка является материалом, проявляющим высокотемпературный ферромагнетизм. Ранее удавалось получать соединения на основе оксида цинка с температурой Кюри выше комнатной. Однако, результаты, полученные исследователями, не сводятся к единому выводу, а именно, если одна группа коллективов экспериментаторов получила проявление ферромагнетизма, то другая группа не смогла выявить его.

*Ключевые слова:* граница зерна, оксид цинка, ферромагнетизм.

Высокотемпературный ферромагнетизм наблюдается у оксида цинка легированного переходными 3d элементами. Магнитные ионы примеси в узлах металлической подрешетки кристалла, вызывают проявление магнитных свойств. Следует заметить, что зависи-