

На рисунке 2а представлены схемы координационных сфер без учета их размера. В пределах 25-й координационной сферы число атомов равно 766. Исследования показали, что поверхностные полигоны с «некристаллографическими» числами углов образуются на координационных сферах с достаточно большими номерами (рисунок 2б).

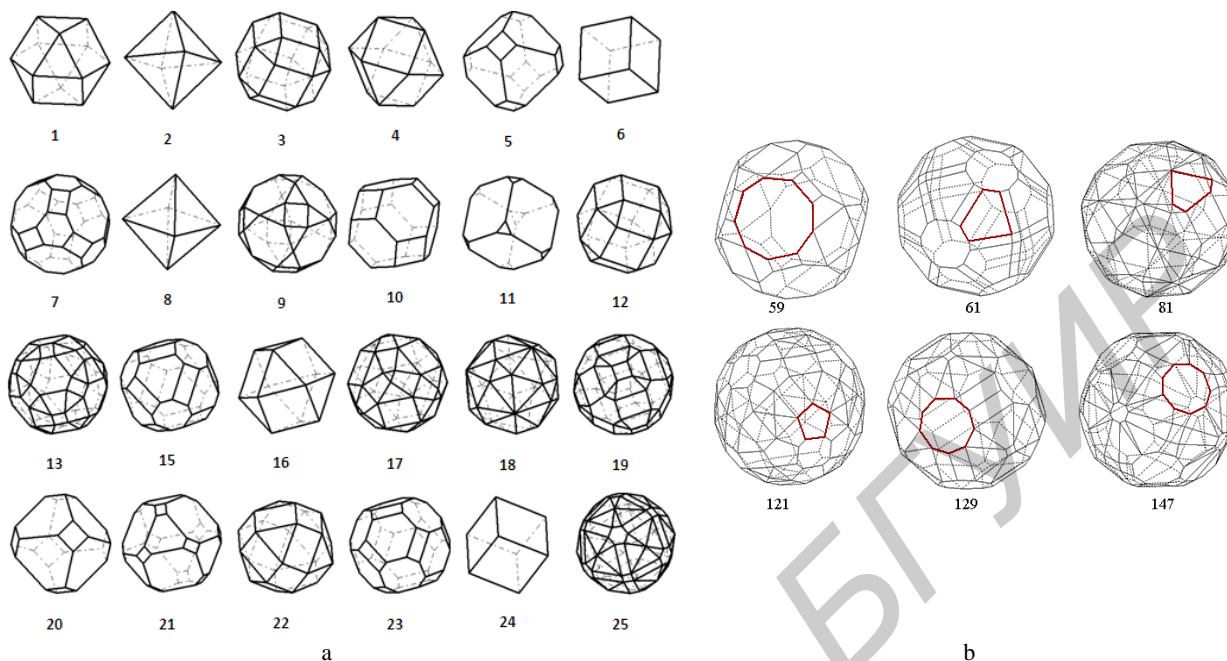


Рисунок 2 – а) схемы координационных сфер ГЦК систем с указанием их номеров, б) примеры координационных сфер с ретикулярными псевдопента-, псевдогексагональными конфигурациями

Приведенные изображения общих и частных правильных форм соответствуют совокупностям, когда грани формы имеют кристаллографические индексы  $(hkl)$ , связанные точечной симметрией макроскопического аналога. В реальных кристаллах в габитусе частиц могут существовать грани с различными  $(hkl)$ . Возможно и сочетание различных форм. В наночастицах возможны ситуации, когда внешние координационные сферы остаются незаполненными. В этом случае на поверхность нанокристалла выходят атомы координационных сфер с меньшими номерами [2]. Возникающие поверхностные дефекты способствуют образованию активных поверхностных центров. При этом увеличивается модифицирующая активность наночастицы, например, при создании полимерных композитов с металлическими наполнителями.

#### Список литературы

1. Вайнштейн, В. Б. Современная кристаллография / В. Б. Вайнштейн, Л. М. Инденбом, В. М. Фридкин. – М. : Наука, 1979. – 360 с.
2. Guozhong Cao. Nanostructures & Nanomaterials / Cao Guozhong. – London : Imperial College Press, 2004. – 433 p.

The aim of the study was to develop a method for calculating the crystallographic orbits for single-element spherical nanocrystalline particles with different sizes. Are given the coordinates of the initial points, coordination numbers and the number of atoms in the particle, 30 Restricted second coordination sphere. The basic principles discussed techniques are applicable not only to single-element, but also to more complex single crystals.

Ситкевич Анастасия Леонидовна, аспирант физико-технического факультета ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь, rotkevich\_al@grsu.by.

Научный руководитель – Лиоро Валерий Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры теоретической физики и теплотехники ГрГУ им. Я. Купалы, Гродно Беларусь, lioro@grsu.by.

УДК 538.95, 537.9

В. А. СКАЧКОВА, М. С. ЗЕЛЕНИНА

### ЧЁРНЫЙ ФОСФОР. СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ

Проведен обзор степени изученности свойств объемного и однослойного черного фосфора и перспективных направлений его применения в электронике и оптоэлектронике.

В последнее время большое внимание уделяется изучению двумерных материалов, таких как графен, дихалькогениды переходных металлов, силицен и германен. Такое внимание они привлекают благодаря их уникальным свойствам, которые делают двумерные материалы перспективными для использования в качестве элементов электронных приборов. Фосфорен, представляющий собой монослой черного фосфора, активно изучается как перспективный 2D-материал. На рисунке 1 видно, что он занимает свою нишу относительно ширины запрещенной зоны среди двумерных материалов между графеном и дихалькогенидами переходных металлов [1], причем запрещенная зона соответствует спектру поглощения в области между видимым и инфракрасным светом. Это открывает черному фосфору перспективы применения в оптоэлектронике. Кроме того, фосфорен можно легко получить с использованием классического механического отшелушивания.

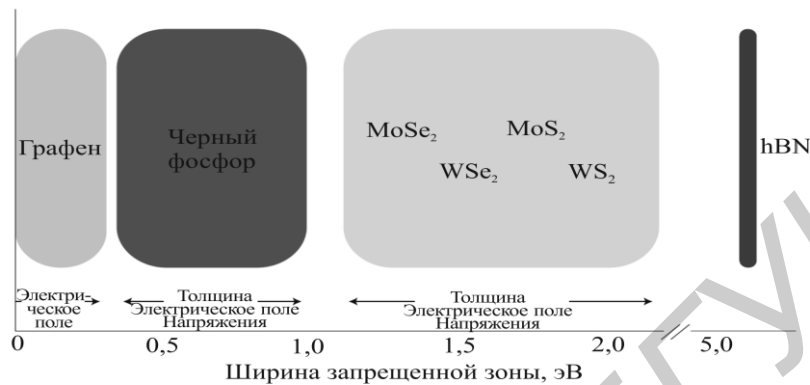


Рисунок 1 – Ширина запрещенных зон некоторых слоистых материалов, используемых в нанoeлектронике; hBN – гексагональный нитрид бора [1]

В отличие от других аллотропов фосфора, черный фосфор является химически стабильным, он не загорается при взаимодействии с воздухом и может выдерживать свыше 400 °С в воздушной среде не воспламеняясь. Черный фосфор, как объемный кристалл, по своей структуре похож на графит: слои черного фосфора связаны между собой связями Ван дер Ваальса с расстоянием  $d$  между слоями (рисунок 2, слева). При атмосферном давлении черный фосфор имеет орторомбическую структуру (Срс<sub>8</sub>, 64) и является узкозонным полупроводником с прямой запрещенной зоной в точке Z, равной ~0,3 эВ. Элементарная ячейка состоит из 8 атомов (рисунок 2, справа). Каждый атом связан с тремя соседними атомами с длиной связи 2,18 Å [2].

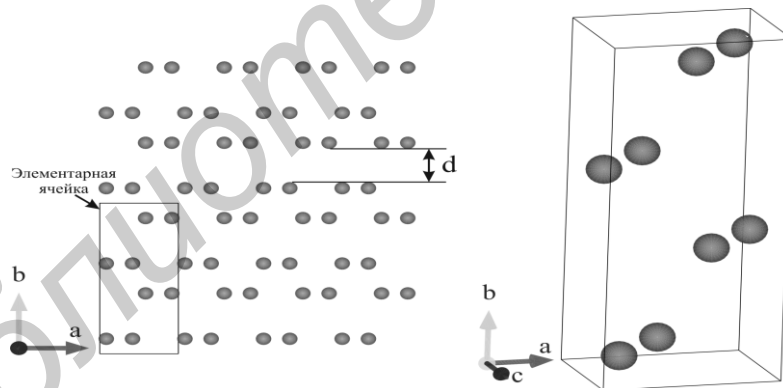


Рисунок 2 – Структура черного фосфора, вид сбоку (слева) и элементарная ячейка черного фосфора (справа)

Электронная структура черного фосфора определялась различными подходами, такими как метод самосогласованного псевдопотенциала и метод локальных орбиталей. Расчеты с использованием зонных структур показали анизотропию эффективных масс дырок и электронов.

Анизотропией обладает также и проводимость носителей заряда в черном фосфоре. Анизотропия подвижности связывается с тем, что перенос заряда внутри слоя отличается по механизму от переноса носителей заряда между слоями.

При определении точной ширины запрещенной зоны у монослоя фосфорена, исследователи столкнулись с проблемой, которая заключается в поверхностном окислении образца. Несмотря на эти трудности, численные методы помогли предсказать уникальные свойства монослоя черного фосфора. С использованием различных численных методов были получены разные значения ширины запрещенной зоны для отдельного слоя фосфорена: от 0,75 до 2 эВ [3]. Изучение пленок черного фосфора показало сильную зависимость ширины запрещенной зоны, подвижности носителей от числа слоев, из которых состоит пленка [3].

Таким образом, важной задачей является детальное исследование электрофизических свойств слоистого черного фосфора, природы связей между слоями материала, а также свойств квазидвумерного моноатомного слоя черного фосфора (фосфорена) и зависимости свойств материала от числа слоев с использованием теории функционала электронной плотности.

#### Список литературы

1. Churchill, H. O. H. Phosphorus joins the family / H. O. H. Churchill, P. Jarillo-Herrero // Nature Nanotechnology. – 2014. – Vol. 9. – P. 330–331.
2. Hultgren, R. The Atomic Distribution in Red and Black P and the Crystal Structure of Black P / R. Hultgren, N. S. Gingrich, B. E. Warren // J. Chem. Phys. – 1935. – Vol. 3. – P. 351–355.
3. Qiao, J. High-mobility transport anisotropy and linear dichroism in few-layer black phosphorus / J. Qiao, X. Kong, Z.-X. Hu [et al.] // Nature Communications. – 2014. – Vol. 5. – 4475.

Работа проводилась в рамках молодежного гранта БРФФИ на тему «Исследование в первопринципном подходе электронных свойств двумерных наноструктур кремния и германия и гетероструктур на их основе».

A review of the investigation degree of the properties of bulk and single-layer black phosphorus and promising areas of application in electronics and optoelectronics has been performed.

Скачкова Вероника Андреевна, аспирант БГУИР, Минск, Беларусь veranika.burko@gmail.com.

Зеленина Мария Сергеевна, магистрант БГУИР, Минск, Беларусь pooliateen@mail.ru.

Научный руководитель – *Степицкий Виктор Романович*, кандидат технических наук, доцент, факультет радиотехники и электроники БГУИР, Минск, Беларусь, vstem@bsuir.by.

УДК 537.311.322

К. А. СОЛЯНИКОВА

### ВЛИЯНИЕ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В ТВЁРДОМ РАСТВОРЕ $\text{SiGe}$ НА ЭНЕРГИЮ ИОНИЗАЦИИ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ

Методом спектроскопии комбинационного рассеяния света исследовалась зависимость параметра решетки твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  ( $x = 0 - 0,123$ ) от их состава. Показано, что релаксация упругих напряжений в растворе, обусловленная заменой атомов кремния атомами германия, происходит путем изменения длин связей и угла между ними. Установлено, что внутренние напряжения в решетке приводят к увеличению энергии ионизации радиационных дефектов.

Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) является экспрессной, информативной и неразрушающей методикой для определения оптических свойств и анализа состава твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ . Однако на положение пиков КРС существенное влияние оказывают механические напряжения, связанные с несоответствием ковалентных радиусов атомов германия и кремния. В настоящей работе исследуется механизм релаксации напряжений.

Исследования проводились на объемных монокристаллических образцах твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  ( $x = 0 - 0,123$ ), выращенных методом электронно-лучевой плавки. Спектры КРС записывались при комнатной температуре с помощью спектрометра Nanofinder High End (Lotis ТП).

На рисунке 1 представлен спектры КРС для  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  в области однофононной линии ( $520 \text{ см}^{-1}$ ), обусловленной колебанием связи  $\text{Si-Si}$  по мере увеличения доли германия  $X$ . Видно, что частота пика уменьшается от  $519,64 \text{ см}^{-1}$  до  $512,36 \text{ см}^{-1}$  в диапазоне изменения  $X = (0,0058-0,123)$ .

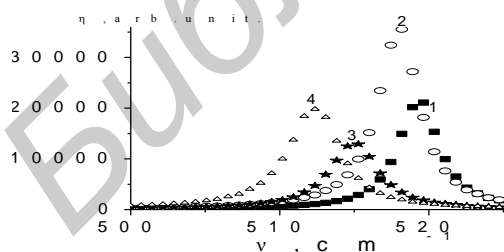


Рисунок 1 - Смещение пика  $\text{Si-Si}$  в зависимости от содержания германия  $X$  в твердом растворе  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$   
X: 1 – 0,0058; 2 – 0,029; 3 – 0,076; 4 – 0,123

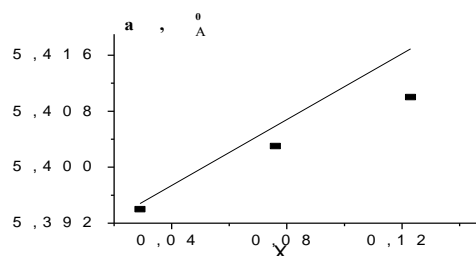


Рисунок 2 – Зависимость постоянной решетки твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  от  $X$

Зависимость частоты пика от  $X$  может быть объяснена в модели ангармонического кристалла за счет изменения длины связи между атомами при релаксации решетки в процессе образования твердого раствора. Действительно, в ангармоническом приближении следует учитывать, что возвращающая сила не подчиняется