

УДК 538.91

АТОМАРНАЯ СТРУКТУРА, ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ, ОПТИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР ИЗ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В.Е. БОРИСЕНКО, А.В. КРИВОШЕЕВА, Д.Б. МИГАС,
В.А. ПУШКАРЧУК, А.Б. ФИЛОНОВ, В.Л. ШАПОШНИКОВ

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Республика Беларусь

Поступила в редакцию 11 февраля 2019

Аннотация. Обобщены результаты теоретического моделирования из первых принципов атомарной структуры и свойств перспективных низкоразмерных структур из полупроводников, выполненного в Центре наноэлектроники и новых материалов Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники за последние пять лет. Приведены основные обнаруженные новые свойства двумерных структур из дихалькогенидов тугоплавких металлов и полупроводниковых силицидов, одномерных структур из кремния, полупроводников A^3B^5 и полупроводниковых оксидов металлов, нульмерных структур из углерода – наноалмазов.

Ключевые слова: низкоразмерная структура, двумерный кристалл, квантовая пленка, квантовый шнур, дихалькогенид, силицид, оксид, A^3B^5 , кремний, наноалмаз.

Abstract. The results of theoretical modeling from the first principles of atomic structure and properties of promising low-dimensional structures from semiconductors, performed for the past five years at the Center of Nanoelectronics and Novel Materials of Belarusian state university of informatics and radioelectronics, are summarized. The discovered principal new properties of two-dimensional structures from dichalcogenides of refractory metals and semiconductor silicides, one-dimensional structures of silicon, A^3B^5 semiconductors and semiconductor metal oxides, and zero-dimensional structures of carbon – nanodiamonds – are presented.

Keywords: low-dimensional structure, two-dimensional crystal, quantum film, quantum wire, dichalcogenide, silicide, oxide, A_3B_5 , silicon, nanodiamond.

Doklady BGUIR. 2019, Vol. 120, No. 2, pp. 73-84

**Atomic structure, fundamental electronic, optical
and magnetic properties of low-dimensional structures of semiconductors**

V.E. Borisenko, A.V. Krivosheeva, D.B. Migas,

V.A. Pushkarchuk, A.B. Filonov, V.L. Shaposhnikov

Введение

В современном мире идет стремительное развитие и совершенствование электронных устройств, размеры которых должны постоянно уменьшаться, а производительность повышаться. Наноэлектроника [1] и спинтроника [2] сегодня вышли на передовые рубежи развития и практического освоения в техническом обеспечении информационных технологий. Основной прогресс в них достигается использованием нанотехнологий и формируемых с их помощью низкоразмерных структур [3], свойства которых определяются поверхностью и влиянием квантовых эффектов, что выгодно отличает их от свойств объемных материалов. Эффекты, связанные с низкой размерностью, проявляются при геометрических размерах структурных элементов в нанометровом диапазоне, типично от 1 до 100 нм.

Наряду с уменьшением размеров структурных элементов электронных и оптических информационных систем значительные перспективы представляет и поиск новых

полупроводниковых материалов, низкоразмерные структуры из которых по своим свойствам превосходили бы аналоги из традиционно используемых кремния и полупроводниковых соединений A^3B^5 . Решению этой комплексной задачи и посвящены теоретические исследования, выполняемые в Центре наноэлектроники и новых материалов Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники. Их основные результаты обобщены в данном обзоре.

Методика теоретического исследования низкоразмерных структур из полупроводников

Для получения новых сведений об основном состоянии и свойствах материалов и низкоразмерных структур из них, не прибегая к дорогостоящим и трудоемким экспериментальным исследованиям, авторами было проведено их моделирование первопринципными методами, в основе которых лежит теория функционала электронной плотности. Их достоинством является использование в качестве первичной информации данных только о предполагаемой кристаллической структуре и типах атомов в исследуемом твердом теле и отсутствие каких-либо подгоночных параметров.

Используемая авторами схема расчетов включает следующие основные этапы [4]: 1) выбор типа кристаллической решетки, характерной для идеальной объемной структуры исследуемого материала, и задание первичных координат атомов в ней; 2) оптимизация расположения атомов в идеальной кристаллической решетке минимизацией сил, действующих на каждый атом; 3) выделение из объемного материала исследуемой низкоразмерной структуры, введение в ее объем и на поверхность примесных атомов и/или вакансий и определение новых координат атомов с учетом присутствия этих точечных дефектов; 4) расчет фундаментальных электронных свойств (энергетические электронные зоны, плотность электронных состояний) в исследуемой структуре; 5) расчет оптических, магнитных и транспортных свойств из полученных фундаментальных электронных свойств.

Численные расчеты для двумерных и одномерных структур проводятся с использованием пакета VASP (Vienna *ab initio* simulation package), реализующего метод псевдопотенциала и пакета WIEN2K, реализующего метод линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) с полным потенциалом. Для моделирования нульмерных структур используются специальные кластерные пакеты GAMESS и ORCA. Они, как показало сравнение результатов расчета с имеющимися экспериментальными данными, обеспечивают наилучшее сочетание точности расчетов и временных затрат на их проведение.

Двумерные структуры – квантовые пленки и слои, двумерные кристаллы

Двумерными, с точки зрения фундаментальных электронных свойств, называют структуры, в которых квантовое ограничение носителей заряда действует только в одном направлении, а именно по толщине пленки, слоя, кристалла [1]. Такого рода структуры были исследованы авторами на примере таких перспективных полупроводников, как дихалькогениды тугоплавких металлов и силициды.

Дихалькогениды тугоплавких металлов. Дихалькогениды тугоплавких металлов представляют собой неорганические соединения со слоистой гексагональной кристаллической структурой, каждый слой в которой состоит из чередующихся плоскостей: атом халькогена – атом металла – атом халькогена (S(Se)–Mo(W)–S(Se)). В решетке таких соединений существуют два различных типа связи: ковалентная межатомная связь и ван-дер-ваальсовы связи между слоями. Авторами были исследованы объемные MoS_2 , $MoSe_2$, WS_2 и WSe_2 , отдельные нанометровые слои из них и гетероструктуры на их основе при наличии в них вакансий и примесей [5–18].

Установлено, что в объемном состоянии все указанные материалы являются непрямозонными полупроводниками. Уменьшение их толщины до одного мономолекулярного слоя (монослоя), что соответствует их двумерному состоянию, приводит к тому, что сульфиды становятся прямозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны $E_g = 1,84$ эВ (MoS_2) и $E_g = 1,97$ эВ (WS_2), при этом прямой переход расположен в точке К гексагональной

зоны Бриллюэна. Селениды MoSe_2 и WSe_2 остаются непрямозонными полупроводниками с $E_g = 1,60$ эВ и $E_g = 1,66$ эВ соответственно.

Расчет диэлектрической функции для объемных и однослойных халькогенидов показал сильную анизотропию оптических спектров вдоль двух рассмотренных направлений поляризации света. В рассмотренных объемных соединениях первый прямой переход имеет низкую силу осцилляторов, и его вероятность невысока. В случае монослоев дисульфидов молибдена и вольфрама, обладающих первым прямым переходом в точке К, этот переход имеет значительную силу осцилляторов. Таким образом, можно заключить, что монослои из MoS_2 и WS_2 можно использовать в светоизлучающих приборах, работающих в красной области видимого спектра. Для непрямозонных однослойных диселенидов перспективы создания светоизлучающих диодов на их основе менее вероятны [5, 10].

Исследовано влияние примеси кислорода и наличия вакансий по атому халькогена на электронную структуру названных выше дихалькогенидов [7, 8, 16]. Зависимости изменения ширины запрещенной зоны в 2D-дихалькогенидах при наличии в их структуре вакансий и атомов кислорода представлены на рис. 1.

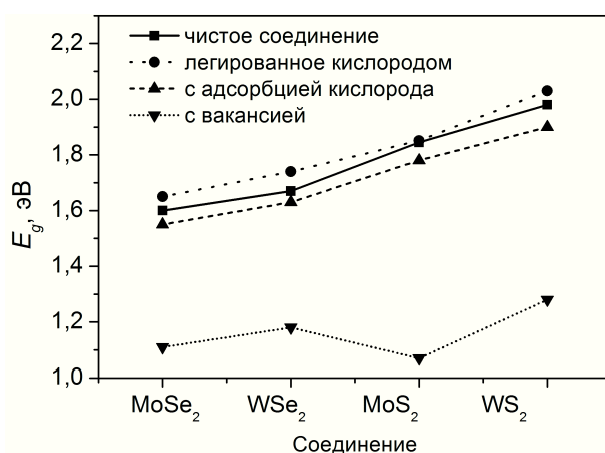


Рис. 1. Ширина запрещенной зоны (E_g) исследованных дихалькогенидов при наличии в материале вакансий и атомов кислорода [16]

Проведенные расчеты электронных зонных структур MoS_2 при замещении атомов серы атомами теллура вплоть до образования MoTe_2 показали, что полупроводниковый характер соединений не изменяется [9, 11, 15, 18].

Представленная на рис. 2 закономерность изменения E_g в соединениях $\text{MoS}_{2-x}\text{Te}_x$ демонстрирует, что при $x = 0-1$ ширина запрещенной зоны линейно зависит от концентрации атомов Te. При преобладании концентрации атомов теллура над концентрацией атомов серы зависимость имеет нелинейный характер вследствие различного расположения экстремумов энергетических зон.

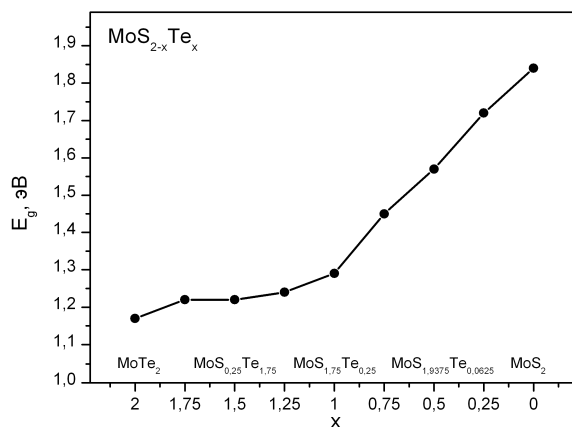


Рис. 2. Зависимость ширины запрещенной зоны (E_g) от концентрации атомов теллура (x) в соединении $\text{MoS}_{2-x}\text{Te}_x$ [9]

Влияние дефектов на свойства гетероструктур исследовалось на примере различного сочетания слоев двумерных кристаллов MoS_2 , WS_2 , WSe_2 и MoSe_2 , при этом атомы слоев располагались либо с соблюдением зеркальной симметрии относительно плоскости слоев, либо со смещением друг относительно друга по аналогии с объемным материалом [16]. Было установлено, что расстояния между атомами металла и халькогена существенно увеличиваются в слоях, содержащих атомы селена, по сравнению со слоями, содержащими атомы серы, в то время как варьирование атомов металла практически не изменяет межатомные расстояния. Замещение атома халькогена атомом теллура увеличивает расстояние до атомов металла и до атомов халькогена [15, 18].

Анализ различий в электронных зонных структурах в зависимости от места расположения в них примеси и вакансий показал, что в случае замещения атомов халькогена атомами теллура все структуры становятся непрямозонными полупроводниками. Присутствие примеси приводит к снятию вырождения и расщеплению энергетических уровней в зоне проводимости, а также к сдвигу экстремумов зон и уменьшению ширины запрещенной зоны.

В случае присутствия в структуре одновременно атома примеси и вакансии ряд структур становится прямозонными полупроводниками, при этом ширина запрещенной зоны уменьшается по сравнению с бездефектной структурой [15, 18].

Еще один вариант модификации свойств предполагает внедрение магнитных примесей в немагнитные полупроводники. Авторами рассмотрена возможность возникновения магнитного упорядочения в гетероструктурах из монослоев дихалькогенидов молибдена и вольфрама, легированных атомами марганца, при этом проанализированы локальные и полные магнитные моменты при расположении двух атомов примеси в нижнем слое, верхнем слое; либо когда один из атомов примеси находится в нижнем, а второй – в верхнем слоях гетероструктуры [17]. Выявлено, что магнитный момент на атоме марганца максимален, когда примесь находится в двух различных слоях, в то время как взаимное расположение слоев относительно друг друга оказывает существенное влияние на величину магнитного момента преимущественно при положении атомов примеси либо в верхнем, либо в нижнем слое гетероструктуры. Так, когда атомы примеси находятся в верхнем слое, магнитный момент при зеркальном расположении слоев имеет большее значение в антиферромагнитной конфигурации, тогда как при смещенном расположении слоев магнитный момент существенно выше у системы в ферромагнитном состоянии. Нахождение атомов примеси в нижнем слое приводит к изменению величины его магнитного момента в зависимости от взаимного расположения слоев, однако в целом тенденция изменения значения магнитного момента при разном взаимном расположении слоев сохраняется.

Расчет спин-зависимых электронных зонных спектров двумерных гетероструктур $\text{MoS}_2/\text{MoSe}_2$, MoS_2/WS_2 , WS_2/WSe_2 , $\text{MoSe}_2/\text{WSe}_2$ с атомами марганца в позициях атомов молибдена и вольфрама, когда атомы Mn расположены в нижнем и в верхнем слоях, показал, что в случае зеркального расположения слоев структура WS_2/WSe_2 проявляет металлические свойства, тогда как остальные три варианта – $\text{MoS}_2/\text{MoSe}_2$, MoS_2/S_2 и $\text{MoSe}_2/\text{Se}_2$ – проявляют полуметаллический характер. В случае расположения слоев со смещением все рассмотренные гетероструктуры являются полуметаллами [17]. Когда в качестве замещающей примеси были взяты атомы марганца на месте атомов молибдена и вольфрама в гетероструктурах $\text{MoS}_2/\text{MoSe}_2$, MoS_2/WS_2 , WS_2/WSe_2 , $\text{MoSe}_2/\text{WSe}_2$, при этом один атом примеси находился в верхнем, а другой – в нижнем слое, практически во всех случаях, за исключением зеркального расположения слоев WS_2/WSe_2 , имеет место стопроцентная спиновая поляризация, то есть преимущественное большинство рассмотренных комбинаций являются полуметаллами в ферромагнитном состоянии, которое, из анализа полной энергии систем, является для них энергетически выгодным.

Установленные электронные, оптические и магнитные свойства исследованных двумерных дихалькогенидов тугоплавких металлов позволили выработать рекомендации по их практическому использованию в новых элементах обработки информации [19].

Полупроводниковые силициды. Среди соединений, образуемых металлами и кремнием, называемых силицидами, лишь немногим более десятка обладают полупроводниковыми свойствами в объемном состоянии [20]. Авторами впервые проведен теоретический анализ

двумерных слоев из Mg_2Si , Ca_2Si , Sr_2Si , Ba_2Si , $BaSi_2$, $CaSi_2$, которые перспективны для оптоэлектронных и термоэлектрических применений.

Установлено, что объемные полупроводниковые Ca_2Si , Sr_2Si и Ba_2Si с орторомбической структурой в случае пленочных систем, содержащих несколько атомарных монослоев, меняют свою структуру на гексагональную, которая характерна для двумерных халькогенидов переходных металлов. Объемный полупроводниковый Mg_2Si с кубической структурой в направлении $\langle 111 \rangle$ также формирует слоистую структуру, как и у халькогенидов переходных металлов. Такое изменение структуры оказалось энергетически выгодным из-за влияния эффекта псевдопассивации: атомы металла образуют поверхностные слои, расположенные параллельно друг другу, между которыми располагаются атомы Si, а значительное перераспределение заряда между атомами «виртуально» приводит к исчезновению оборванных связей у атомов металла на поверхности и не требует проведения дополнительной пассивации [21].

Проведенные расчеты энергетических электронных зон в объемных и двумерных Mg_2Si , Ca_2Si , Sr_2Si и Ba_2Si [21], результаты которых представлены на рис. 3, показали, что понижение размерности структур из этих материалов до двумерного состояния приводит к тому, что Mg_2Si становится прямым полупроводником с шириной запрещенной зоны 1,14 эВ, а Ca_2Si , Sr_2Si и Ba_2Si – квазипрямыми с шириной запрещенной зоны 0,69 эВ, 0,33 эВ и 0,19 эВ соответственно. Анализ перераспределения заряда между атомами показывает, что атомы металла отдают около $1,49e^-$, $1,39e^-$, $1,27e^-$ и $1,12e^-$, а атомы кремния принимают около $2,98e^-$, $2,78e^-$, $2,54e^-$, $2,24e^-$ соответственно для Mg_2Si , Ca_2Si , Sr_2Si и Ba_2Si , что указывает на значительную ионную составляющую химической связи. Существенной разницы в перераспределении зарядов между названными объемными материалами и двумерными структурами из них не обнаружено.

Исследованы свойства тонких пленок полупроводникового $BaSi_2$ [22] с различной ориентацией. Установлено, что наименьшим значением поверхностной энергии, вследствие эффекта псевдопассивации, обладают пленки $BaSi_2$ с атомами бария на поверхности. Также выявлены энергетические положения поверхностных состояний в районе запрещенной зоны. Оценены значения подвижностей носителей заряда в пленках $BaSi_2$, которые при комнатной температуре оказались равными $\sim 800 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ для электронов и $\sim 200 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ для дырок [23], что является наивысшими показателями для данного класса материалов. В случае тонких пленок $CaSi_2$ анализ энергетического спектра и зависимостей коэффициента оптического поглощения от энергии фотонов показал, что данный материал является прозрачным в инфракрасном диапазоне проводником [24].

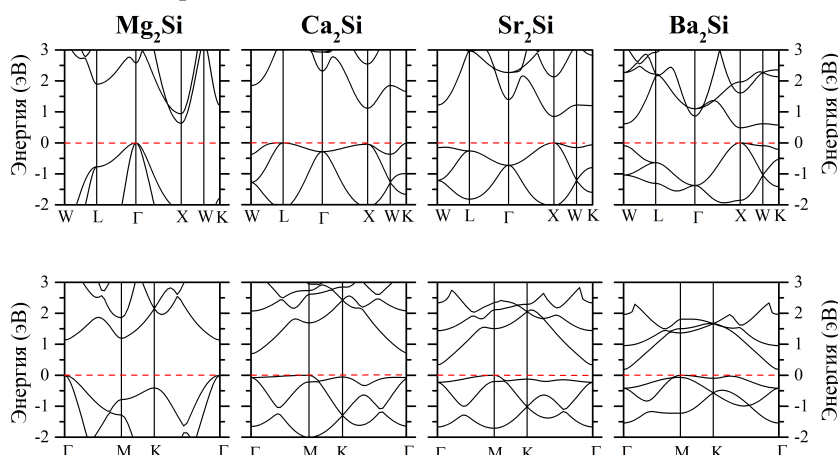


Рис. 3. Энергетические спектры объемных (верхняя панель) и 2D-структур (нижняя панель) Mg_2Si , Ca_2Si , Sr_2Si и Ba_2Si . Ноль на шкале энергий соответствует потолку валентной зоны [21]

Одномерные структуры – квантовые шнуры

В одномерных структурах квантовое ограничение действует в двух взаимно перпендикулярных направлениях, что, наряду с малыми (нанометровыми) размерами поперечного

сечения шнуров, делает актуальным анализ влияния структурных перестроек и атомарных конфигураций на боковых гранях на их свойства. Это влияние было исследовано для шнуров из полупроводниковых соединений A^3B^5 , кремния, германия, полупроводникового диоксида титана TiO_2 и силицида кальция Ca_2Si . Экспериментально наблюдаемое поперечное сечение $\langle 111 \rangle$ -ориентированных A^3B^5 (GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs и InSb) нанощнуров имеет форму шестигранника с $\{011\}$ гранями на поверхности (рис. 4, *a*). A^3B^5 нанощнуры имеют структуру цинковой обманки. Предложено и проведенными расчетами обосновано [25] ее изменение, предполагающее образование небольших по размеру реконструированных $\{112\}$ граней между соседними $\{011\}$ гранями (рис. 4, *б*), определяющими поверхность этих наноструктур. Установлено, что предложенная морфология является более стабильной по полной энергии.

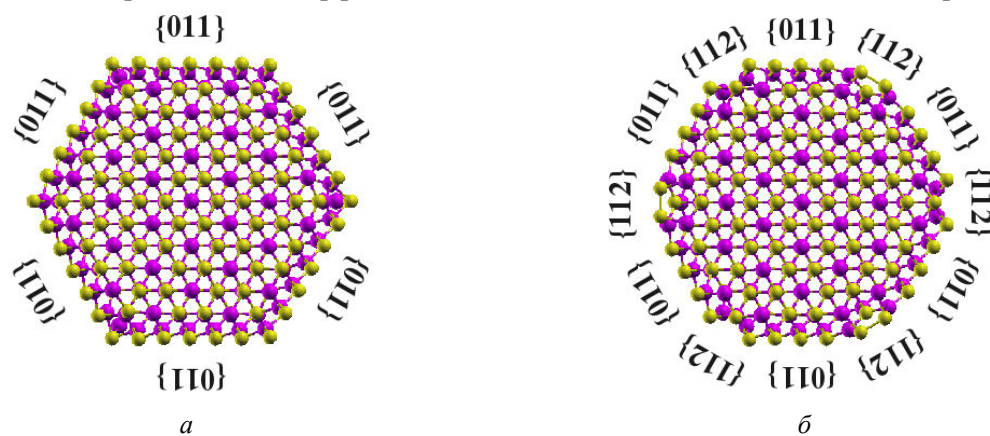


Рис. 4. Сечения A^3B^5 нанощнуров с диаметром около 2,6 нм с $\{011\}$ гранями (*a*) и с $\{011\}$ и $\{112\}$ гранями (*б*). Атомы третьей группы – темные, а атомы пятой группы – светлые [25]

Для A^3B^5 нанощнуров без $\{112\}$ граней на поверхности соответствующие зонные диаграммы имеют энергетическую щель (рис. 5 – верхняя панель), в которой находятся полузаполненные локализованные состояния в районе уровня Ферми. Эти состояния обусловлены p -электронами атомов, находящимися на краях между соседними $\{011\}$ гранями и обладающими двумя или тремя оборванными связями. Появление небольших $\{112\}$ граней на поверхности, выступающих в роли кромок, приводит к исчезновению локализованных состояний (уровень Ферми находится в запрещенной зоне и не пересекает энергетические зоны), как видно на рис. 5 – нижняя панель.

Установлено [25], что для GaP и GaAs нанощнуров характерно наличие двух сравнимых по энергии минимумов зоны проводимости в Γ и Z точках, в то время как максимум валентной зоны находится в Γ точке, что позволяет утверждать о квазипрямозонном характере запрещенной зоны. GaSb нанощнуры являются непрямозонными полупроводниками, так как минимум зоны проводимости находится в точке Z , а максимум валентной зоны в Γ точке. При увеличении диаметра этих нанощнуров происходит уменьшение ширины запрещенной зоны и появление прямозонного характера запрещенной зоны. При диаметрах ~ 4 нм прямой переход наблюдается в точке Γ из-за смещения вверх по энергии минимума зоны проводимости в точке Z . InP, InAs и InSb нанощнуры являются прямозонными полупроводниками, если значения их диаметров находится в диапазоне 2–4 нм.

Аналогично изучено влияние морфологии нанощнуров Si и Ge на их стабильность и предсказаны особенности реконструкции граней и кромок между гранями, которые обладают поверхностными атомами только с одной оборванной связью [26]. В случае нанощнуров и нанотрубок TiO_2 установлено влияние морфологии на их стабильность и выявлена роль поверхностных состояний, которые определяют экстремумы электронных энергетических зон и нивелируют влияние квантово-размерных эффектов [27, 28]. В случае нанощнуров Ca_2Si показано, что появление определенных граней на поверхности может приводить к изменению полупроводниковых свойств на металлические [29].

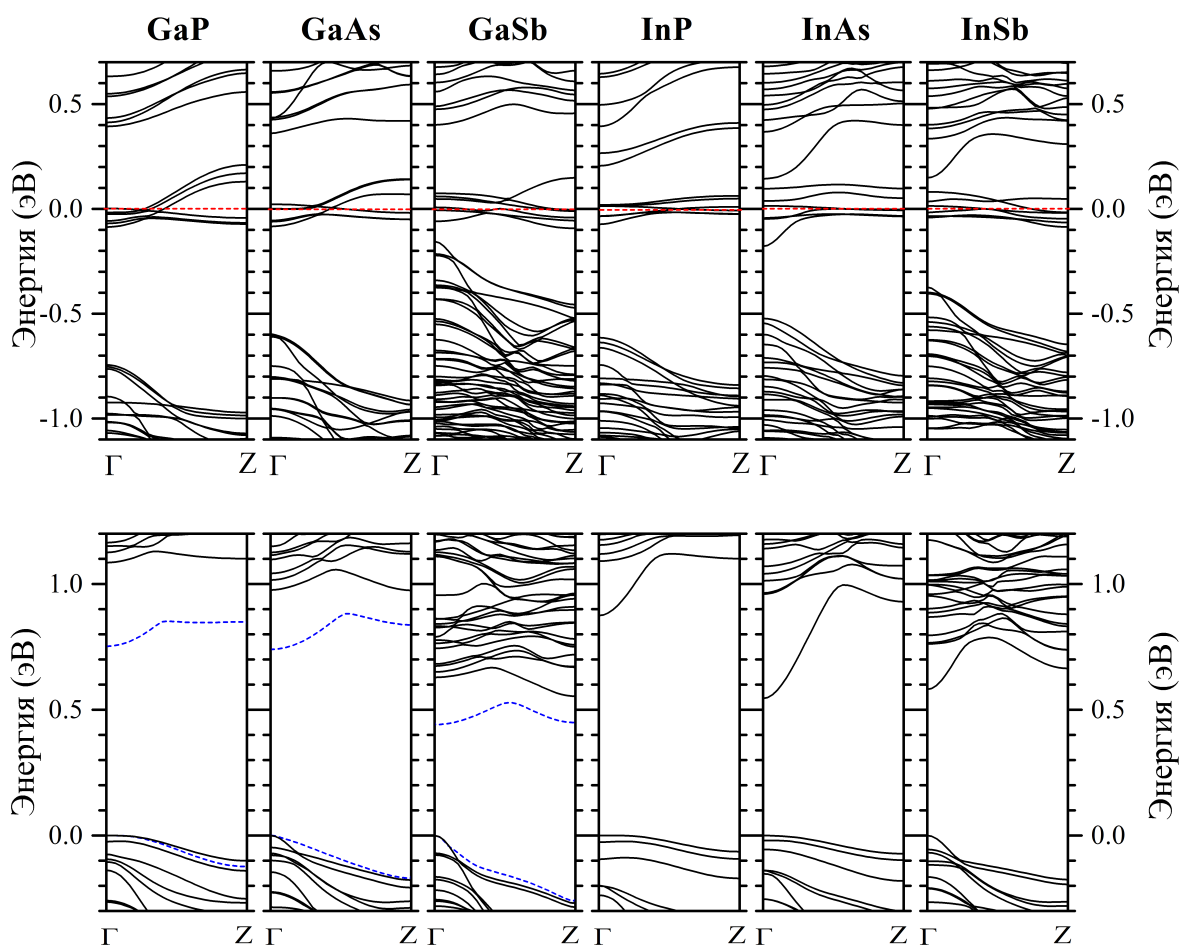


Рис. 5. Зонные структуры A^3B^5 нанопроволок с диаметрами $\sim 2,6$ нм без $\{112\}$ граней (верхняя панель) и с $\{112\}$ гранями (нижняя панель). Для GaP, GaAs и GaSb нанопроволок с $\{112\}$ гранями и диаметром ~ 4 нм верхняя по энергии валентная зона и нижняя по энергии зона проводимости представлены пунктирными линиями [25]

Нульмерные структуры – наноалмазы

Из всего многообразия нульмерных структур для теоретического анализа авторами были выбраны наноалмазы с точечными дефектами в кристаллической решетке. Это перспективные твердотельные структуры для квантовой обработки информации. С этой точки зрения наиболее привлекательным является дефектный центр «азот-вакансия» (NV-центр), который состоит из замещающего атома азота (N) и вакансии (V) в соседних узлах кубической решетки алмаза.

Для практической реализации разрабатываемых квантовых технологий используются системы с изотопом углерода ^{13}C , обозначаемые $^{13}\text{C}[\text{NV}]^-$. Для таких структур авторами рассчитаны важные для практического использования элементы матриц сверхтонкого взаимодействия (СТВ) с учетом ядерных спинов, экспериментальное определение которых затруднено.

Проведенный анализ характеристик СТВ в нанокластере алмаза $\text{C}_{291}\text{H}_{172}[\text{NV}]^-$, содержащем NV-центр [30, 31], показал, что он содержит «семейства» атомов ^{13}C с эквивалентными положениями, ядерный спин ^{13}C в которых не испытывает стохастических переворотов, индуцируемых его СТВ с электронным спином NV-центра. Это позволило количественно описать имеющиеся экспериментальные данные.

Аналогичным образом расчеты для нанокластера большего размера – $\text{C}_{510}\text{H}_{252}[\text{NV}]^-$, NV-центр в котором находился в различных позициях [32–41], позволили впервые получить характеристики СТВ для восьми спиновых систем NV-«осевой ^{13}C », где ядерный спин располагался на гораздо большем расстоянии от NV-центра как до вакансии, так и до атома азота. Полученные характеристики стабильности систем $^{13}\text{C}[\text{NV}]^-$ показали хорошее

количественное соответствие с экспериментальными данными, что дает возможность применять используемые методы компьютерного моделирования для прогнозирования новых экспериментов на системах типа $^{13}\text{C}[\text{NV}]^-$ [32–41].

В дополнение к ожидаемым положениям атома $^{13}\text{C}^-$ на оси NV-центра для кластера $\text{C}_{510}\text{H}_{252}[\text{NV}]$ предсказано существование нового класса таких стационарных систем $\text{NV}-^{13}\text{C}$, в которых ядерный спин ^{13}C расположен в плоскости, перпендикулярной оси NV-центра. На основе рассчитанных спиновых параметров и построенного спин-гамильтониана были рассчитаны времена жизни для всех возможных положений ядерного спина ^{13}C в кластере.

Сделанные предсказания экспериментально подтверждены специально поставленным экспериментом, выполненным специалистами Института квантовой оптики университета г. Ульм, Германия. Результаты совместно опубликованы в работе [32] и вошли в Топ-10 результатов деятельности ученых Академии наук за 2018 год в области фундаментальных и прикладных исследований.

Развитие работ по NV-центрам в наноалмазах получило продолжение в недавних исследованиях для таких центров, как «кремний-вакансия» (SiV), «германий-вакансия» (GeV) и «олово-вакансия» (SnV) [42]. Эти центры также рассматриваются в качестве перспективных, но пока недостаточно исследованных носителей квантовой информации. Авторами оптимизирована атомарная структура нанокластеров $\text{C}_{128}\text{H}_{98}[\text{SiV}]$, $\text{C}_{128}\text{H}_{98}[\text{GeV}]$ и $\text{C}_{128}\text{H}_{98}[\text{SnV}]$, в которых дефектные центры расположены в центральной части кластера, рассчитана структура электронных энергетических зон и распределение спиновой плотности по кластеру.

Заключение

Выполненный поиск и теоретическое обоснование устойчивых атомарных конфигураций, а также предсказанные электронные, оптические и магнитные свойства двумерных кристаллов из дихалькогенидов тугоплавких металлов, двумерных слоев из полупроводниковых силицидов, квантовых шнуров из полупроводниковых соединений A^3B^5 , кремния, германия, диоксида титана, силицида кальция и дефектных центров в наноалмазах показали их перспективность для нано- и оптоэлектроники, спинтроники, солнечной и термоэлектрической энергетики, квантовой обработки информации. Продвижение этих результатов к практической реализации ведется в кооперации с отечественными и зарубежными учеными-экспериментаторами и разработчиками элементной базы информационных систем нового поколения.

Список литературы

1. Нанoeлектроника: Теория и практика / В.Е. Борисенко [и др.]. М.: Бинoм, 2013. 366 с.
2. Борисенко В.Е., Данилюк А.Л., Мигас Д.Б. Спинтроника. М.: Лаборатория знаний, 2017. 229 с.
3. Borisenko V.E., Ossicini S. What is What in the Nanoworld. Third, Revised and Enlarged Edition. Weinheim: Wiley-VCH, 2012. 601 p.
4. Кривошеева А.В., Шапошников В.Л., Борисенко В.Е. Методика моделирования электронных свойств объемных полупроводниковых соединений // Докл. БГУИР. 2017. № 4 (106). С. 70–76.
5. Electronic and optical properties of two-dimensional MoS_2 , WS_2 , and $\text{Mo}_{0.5}\text{W}_{0.5}\text{S}_2$ from first-principles. In: Physics, Chemistry and Application of Nanostructures / A.V. Krivosheeva [et al.]. Singapore: World Scientific, 2013. P. 32–35.
6. Electronic and dynamical properties of bulk and layered MoS_2 / A.V. Krivosheeva [et al.] // Докл. БГУИР. 2014. № 5 (83). С.34–37.
7. Band gap modifications of two-dimensional defected MoS_2 / A.V. Krivosheeva [et al.] // Int. J. Nanotechnol. 2015. Vol. 12(8/9). P. 654–662.
8. Theoretical study of defect impact on two-dimensional MoS_2 / A.V. Krivosheeva [et al.] // J. of Semiconductors. 2015. Vol. 36 (12). P. 122002.
9. Кривошеева А.В., Шапошников В.Л., Борисенко В.Е. Модификация ширины запрещенной зоны MoS_2 при замещении атомов серы атомами теллура // Докл. БГУИР. 2016. № 4 (98). С. 98–101.
10. Кривошеева А.В., Шапошников В.Л., Борисенко В.Е. Зонная структура и оптические свойства дихалькогенидов молибдена и вольфрама // Вестн. Фонда фундаментальных исследований. 2016. Т. 3. С. 41–48.

11. Расчет фононных спектров двумерных кристаллов дисульфида и дителлурида молибдена / А.Ю. Алексеев [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. 2016. Т. 83 (6). С. 989–992.
12. Моделирование спектра фононов в трехкомпонентных двумерных кристаллах дихалькогенидов тугоплавких металлов / А.Ю. Алексеев [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. 2017. Т. 84 (4). С. 554–560.
13. Electronic properties of bulk and monolayer TMDs: theoretical study within DFT framework GJVJ-2e method / J. Gusakova [et al.] // Phys. Status Solidi A. 2017. Vol. 214 (12). P. 1700218 (1–7).
14. Lattice thermal conductivity of transition metal dichalcogenides / A. Alexeev [et al.] // Materials Physics and Mechanics. 2018. Vol. 39 (1). P. 1–7.
15. Shaposhnikov V.L., Krivosheeva A.V., Borisenko V.E. Impact of Defects on Electronic Properties of Heterostructures Constructed From Monolayers of Transition Metal Dichalcogenides // Phys. Stat. Sol. B. 2019. DOI: 10.1002/pssb.201800355.
16. Кривошеева А.В., Шапошников В.Л., Борисенко В.Е. Влияние вакансионных дефектов и примесей на электронную структуру двумерных кристаллов MoS_2 , MoSe_2 , WS_2 и WSe_2 // Докл. НАН Беларуси. 2016. Т. 60, № 6. С. 48–53.
17. Кривошеева А.В., Шапошников В.Л. Магнитное упорядочение в гетероструктурах на основе двумерных кристаллов дихалькогенидов тугоплавких металлов, легированных марганцем // Вестн. фонда фундаментальных исследований. 2017. Т. 80, № 2 (17). С. 106–112.
18. Кривошеева А.В., Шапошников В.Л., Алексеев А.Ю. Влияние дефектов на электронные свойства структур из слоистых дихалькогенидов тугоплавких металлов // Докл. БГУИР. 2016. № 8 (102). С. 76–81.
19. Кривошеева А.В. Перспективные полупроводниковые соединения и наноструктуры для оптоэлектроники, фотовольтаики и спинтроники // Докл. БГУИР. 2016. № 3 (97). С. 12–17.
20. Semiconducting Silicides / Ed. by V.E. Borisenko. Berlin: Springer, 2000. 348 p.
21. Quasi-2D silicon structures based on ultrathin Me_2Si ($\text{Me} = \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) films / D.B. Migas [et al.] // Surface Science. 2018. Vol. 670, № 1. P. 51–57.
22. Electronic properties of thin BaSi_2 films with different orientations / D.B. Migas [et al.] // Jpn. J. Appl. Phys. 2017. Vol. 56, № 3. P. 05DA03.
23. Transport properties of n- and p-type polycrystalline BaSi_2 / V.E. Borisenko [et al.] // Thin Solid Films. 2018. Vol. 661, № 4. P. 7–15.
24. Conductive CaSi_2 transparent in the near infra-red range / V.E. Borisenko [et al.] // J. of Alloys and Compounds. 2019. Vol. 770, № 2. P. 710–720.
25. Role of edge facets on stability and electronic properties of III–V nanowires // D.B. Migas [et al.] // Nano Convergence. 2015. Vol. 2. P. 14.
26. Revising morphology of $\langle 111 \rangle$ -oriented silicon and germanium nanowires / D.B. Migas [et al.] // Nano Convergence. 2015. Vol. 2. P. 16.
27. Orientation effects in morphology and electronic properties of anatase TiO_2 one-dimensional nanostructures. I. Nanowires / D.B. Migas [et al.] // Phys. Chem. Chem. Phys. 2014. Vol. 16, № 3. P. 9479–9489.
28. Orientation effects in morphology and electronic properties of anatase TiO_2 one-dimensional nanostructures. II. Nanotubes / D.B. Migas [et al.] // Phys. Chem. Chem. Phys. 2014. Vol. 16, № 3. P. 9490–9498.
29. Electronic properties of semiconducting Ca_2Si silicide: From bulk to nanostructures by means of first principles calculations / D.B. Migas [et al.] // Jpn. J. Appl. Phys. 2015. Vol. 54, № 2. P. 07JA03.
30. Theoretical study of hyperfine interactions and optically detected magnetic resonance spectra by simulation of the $\text{C}_{291}[\text{NV}]\text{H}_{172}$ diamond cluster hosting nitrogen-vacancy center / A.P. Nizovtsev [et al.] // New Journal of Physics. 2014. Vol. 16. P. 083014(1–21).
31. Сверхтонкое взаимодействие NV центра в алмазе с атомом ^{13}C , расположенным на оси центра: моделирование методом DFT / А.Л. Пушкарчук [и др.] // Сб. науч. ст. VIII Междунар. конф. «Фуллерены и наноструктуры в конденсированных средах». Минск, 2014. С. 164–169.
32. Non-flipping ^{13}C spins near an NV center in diamond: Hyperfine and Spatial Characteristics by DFT Simulation of the $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$ Cluster / A.P. Nizovtsev [et al.] // New Journal of Physics. 2018. Vol. 20. P. 023022 (1–15).
33. DFT simulation of hyperfine interactions in the NV hosting carbon cluster $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$: predictions for the «on-NV-axis» ^{13}C sites / A.P. Nizovtsev [et al.] // Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Singapore: World Scientific, 2015. P. 24–27.
34. Non-flipping ^{13}C nuclear spins in NV diamond: Hyperfine and spatial characteristics from DFT simulation of the NV hosting H-terminated cluster $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$ / A.P. Nizovtsev [et al.] // Book of Abstracts of XIV International Conference on Quantum Optics and Quantum Information, Minsk, Belarus. 2015. P. 47.
35. A semiempirical description of functionalized nanodiamonds with NV color centers / A.V. Luzanov [et al.] // Funct. Mater. 2016. Vol. 23 (2). P. 268–273.

36. Стабильные ядерные спины ^{13}C в комплексах «NV-аксиальный ^{13}C » в алмазе: Предсказание характеристик сверхтонкого взаимодействия моделированием кластера $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$. / А.П. Низовцев [и др.] // Материалы V Междунар. конф. «Наноструктурные материалы-2016: Беларусь-Россия-Украина». Минск, 2016. С. 175–178.
37. Квантово-химическое моделирование электронных свойств функционализированных наноалмазов с центром окраски типа NV- / А.В. Лузанов [и др.] // Материалы V Междунар. конф. «Наноструктурные материалы-2016: Беларусь-Россия-Украина». Минск, 2016. С. 517–520.
38. Стабильные электронно-ядерные спиновые системы NV- ^{13}C в алмазе для квантовых технологий / А.П. Низовцев [и др.] // Изв. НАН Беларуси. 2017. № 1. С. 98–110.
39. Stable Electron-Nuclear Spin Systems NV- ^{13}C in Diamond for Quantum Technologies / A.L. Pushkarchuk [et al.] // Nonlinear Dynamics and Application: Proceeding of the 23 Annual Seminar NPC'S'2017. 2017. Vol. 23. P. 150–158.
40. Robust electron-nuclear spin systems NV- ^{13}C in diamond for quantum technologies / A.P. Nizovtsev [et al.] // Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. Singapore: World Scientific, 2017. P. 69–73.
41. Non-flipping ^{13}C spins in NV diamond: Hyperfine and Spatial Characteristics by DFT Simulation of the $\text{C}_{510}[\text{NV}]\text{H}_{252}$ Cluster A.P. Nizovtsev [et al.] // Book of Abstracts and Program of XV International Conference on Quantum Optics and Quantum Information, Minsk, Belarus. 2017. P. 43.
42. Новые парамагнитные центры окраски SiV, GeV и SnV в алмазе для квантовых технологий: характеристика методами квантовой химии / А.П. Низовцев [и др.] // Сб. науч. ст. X Междунар. конф. «Фуллерены и наноструктуры в конденсированных средах». Минск, 2018. С. 11–14.

References

1. Nanoelektronika: Teorija i praktika / V.E. Borisenko [i dr.]. M.: Binom, 2013. 366 s. (in Russ.)
2. Borisenko V.E., Daniljuk A.L., Migas D.B. Spintronika. M.: Laboratorija znanij, 2017. 229 s. (in Russ.)
3. Borisenko V.E., Ossicini S. What is What in the Nanoworld. Third, Revised and Enlarged Edition. Weinheim: Wiley-VCH, 2012. 601 p.
4. Krivosheeva A.V., Shaposhnikov V.L., Borisenko V.E. Metodika modelirovanija jelektronnyh svojstv ob'emnyh poluprovodnikovyh soedinenij // Dokl. BGUIR. 2017. № 4 (106). S. 70–76. (in Russ.)
5. Electronic and optical properties of two-dimensional MoS_2 , WS_2 , and $\text{Mo}_{0.5}\text{W}_{0.5}\text{S}_2$ from first-principles. In: Physics, Chemistry and Application of Nanostructures / A.V. Krivosheeva [et al.]. Singapore: World Scientific, 2013. P. 32–35.
6. Electronic and dynamical properties of bulk and layered MoS_2 / A.V. Krivosheeva [et al.] // Dokl. BGUIR. 2014. № 5 (83). S. 34–37. (in Russ.)
7. Band gap modifications of two-dimensional defected MoS_2 / A.V. Krivosheeva [et al.] // Int. J. Nanotechnol. 2015. Vol. 12 (8/9). P. 654–662.
8. Theoretical study of defect impact on two-dimensional MoS_2 / A.V. Krivosheeva [et al.] // J. of Semiconductors. 2015. Vol. 36 (12). P. 122002.
9. Krivosheeva A.V., Shaposhnikov V.L., Borisenko V.E. Modifikacija shiriny zapreshhennoj zony MoS_2 pri zameshhenii atomov sery atomami tellura // Dokl. BGUIR. 2016. № 4 (98). S. 98–101. (in Russ.)
10. Krivosheeva A.V., Shaposhnikov V.L., Borisenko V.E. Zonnaja struktura i opticheskie svojstva dihal'kogenidov molibdena i vol'frama // Vestnik Fonda fundamental'nyh issledovanij. 2016. T. 3. S. 41–48. (in Russ.)
11. Raschet fononnyh spektrov dvumernyh kristallov disulfida i ditellurida molibdena / A.Ju. Alekseev [i dr.] // Zhurnal prikladnoj spektroskopii. 2016. T. 83 (6). S. 989–992. (in Russ.)
12. Modelirovanie spektra fononov v trehkomponentnyh dvumernyh kristallah dihal'kogenidov tugoplavkih metallov / A.Ju. Alekseev [i dr.] // Zhurnal prikladnoj spektroskopii. 2017. T. 84 (4). S. 554–560. (in Russ.)
13. Electronic properties of bulk and monolayer TMDs: theoretical study within DFT framework GVVJ-2e method / J. Gusakova [et al.] // Phys. Status Solidi A. 2017. Vol. 214 (12). P. 1700218 (1–7).
14. Lattice thermal conductivity of transition metal dichalcogenides / A. Alexeev [et al.] // Materials Physics and Mechanics. 2018. Vol. 39 (1). P. 1–7.
15. Shaposhnikov V.L., Krivosheeva A.V., Borisenko V.E. Impact of Defects on Electronic Properties of Heterostructures Constructed From Monolayers of Transition Metal Dichalcogenides // Phys. Stat. Sol. B. 2019. DOI: 10.1002/pssb.201800355.
16. Krivosheeva A.V., Shaposhnikov V.L., Borisenko V.E. Vlijanie vakansionnyh defektov i primesej na jelektronnuju strukturu dvumernyh kristallov MoS_2 , MoSe_2 , WS_2 i WSe_2 // Dokl. NAN Belarusi. 2016. T. 60, № 6. S. 48–53. (in Russ.)
17. Krivosheeva A.V., Shaposhnikov V.L. Magnitnoe uporjadochenie v geterostrukturah na osnove dvumernyh kristallov dihal'kogenidov tugoplavkih metallov, legirovannyh margancem // Vestn. fonda fundamental'nyh issledovanij. 2017. T. 80, № 2 (17). S. 106–112. (in Russ.)

18. Krivosheeva A.V., Shaposhnikov V.L., Alekseev A.Ju. Vliyanie defektov na jelektronnye svoystva struktur iz sloistyh dihal'kogenidov tugoplavkih metallov // Dokl. BGUIR. 2016. № 8 (102). S. 76–81. (in Russ.)
19. Krivosheeva A.V. Perspektivnye poluprovodnikovye soedinenija i nanostrukturny dlja optoelektroniki, fotovol'taiki i spintroniki // Dokl. BGUIR. 2016. № 3 (97). S. 12–17. (in Russ.)
20. *Semiconducting Silicides* / Ed. by V.E. Borisenko. Berlin: Springer, 2000. 348 p.
21. Quasi-2D silicon structures based on ultrathin Me₂Si (Me = Mg, Ca, Sr, Ba) films / D.B. Migas [et al.] // *Surface Science*. 2018. Vol. 670, № 1. P. 51–57.
22. Electronic properties of thin BaSi₂ films with different orientations / D.B. Migas [et al.] // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2017. Vol. 56, № 3. P. 05DA03.
23. Transport properties of n- and p-type polycrystalline BaSi₂ / V.E. Borisenko [et al.] // *Thin Solid Films*. 2018. Vol. 661, № 4. P. 7–15.
24. Conductive CaSi₂ transparent in the near infra-red range / V.E. Borisenko [et al.] // *J. of Alloys and Compounds*. 2019. Vol. 770, № 2. P. 710–720.
25. Role of edge facets on stability and electronic properties of III–V nanowires // D.B. Migas [et al.] // *Nano Convergence*. 2015. Vol. 2. P. 14.
26. Revising morphology of <111>-oriented silicon and germanium nanowires / D.B. Migas [et al.] // *Nano Convergence*. 2015. Vol. 2. P. 16.
27. Orientation effects in morphology and electronic properties of anatase TiO₂ one-dimensional nanostructures. I. Nanowires / D.B. Migas [et al.] // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014. Vol. 16, № 3. P. 9479–9489.
28. Orientation effects in morphology and electronic properties of anatase TiO₂ one-dimensional nanostructures. II. Nanotubes / D.B. Migas [et al.] // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014. Vol. 16, № 3. P. 9490–9498.
29. Electronic properties of semiconducting Ca₂Si silicide: From bulk to nanostructures by means of first principles calculations / D.B. Migas [et al.] // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2015. Vol. 54, № 2. P. 07JA03.
30. Theoretical study of hyperfine interactions and optically detected magnetic resonance spectra by simulation of the C₂₉₁[NV]-H₁₇₂ diamond cluster hosting nitrogen-vacancy center / A.P. Nizovtsev [et al.] // *New Journal of Physics*. 2014. Vol. 16. P. 083014(1–21).
31. Sverhtonkoe vzaimodejstvie NV centra v almaze s atomom ¹³S, raspolozhennym na osi centra: modelirovanie metodom DFT / A.L. Pushkarchuk [i dr.] // *Sb. nauch. st. VIII Mezhdunar. konf. «Fullereny i nanostrukturny v kondensirovannyh sredah»*. Minsk, 2014. S. 164–169. (in Russ.)
32. Non-flipping ¹³C spins near an NV center in diamond: Hyperfine and Spatial Characteristics by DFT Simulation of the C₅₁₀[NV]H₂₅₂ Cluster / A.P. Nizovtsev [et al.] // *New Journal of Physics*. 2018. Vol. 20. P. 023022 (1–15).
33. DFT simulation of hyperfine interactions in the NV hosting carbon cluster C₅₁₀[NV] H₂₅₂: predictions for the «on-NV-axis» ¹³C sites / A.P. Nizovtsev [et al.] // *Physics, Chemistry and Application of Nanostructures*. Singapore: World Scientific, 2015. P. 24–27.
34. Non-flipping ¹³C nuclear spins in NV diamond: Hyperfine and spatial characteristics from DFT simulation of the NV hosting H-terminated cluster C₅₁₀[NV]H₂₅₂ / A.P. Nizovtsev [et al.] // *Book of Abstracts of XIV International Conference on Quantum Optics and Quantum Information*, Minsk, Belarus. 2015. P. 47.
35. A semiempirical description of functionalized nanodiamonds with NV color centers / A.V. Luzanov [et al.] // *Funct. Mater.* 2016. Vol. 23 (2). P. 268–273.
36. Stabil'nye jadernye spiny ¹³C v kompleksah «NV-aksial'nyj ¹³C» v almaze: Predskazanie harakteristik sverhtonkogo vzaimodejstvija modelirovaniem klastera C₅₁₀[NV]H₂₅₂ / A.P. Nizovtsev [i dr.] // *Materialy V Mezhdunar. konf. «Nanostrukturnye materialy-2016: Belarus'-Rossija-Ukraina»*. Minsk, 2016. S. 175–178. (in Russ.)
37. Kvantovo-himicheskoe modelirovanie jelektronnyh svoystv funkcionalizirovannyh nanoalmazov s centrom okraski tipa NV- / A.V. Luzanov [i dr.] // *Materialy V Mezhdunar. konf. «Nanostrukturnye materialy-2016: Belarus'-Rossija-Ukraina»*. Minsk, 2016. S. 517–520. (in Russ.)
38. Stabil'nye jelektronno-jadernye spinovye sistemy NV-¹³C v almaze dlja kvantovyh tehnologij / A.P. Nizovtsev [i dr.] // *Izv. NAN Belarusi*. 2017. № 1. S. 98–110. (in Russ.)
39. Stable Electron-Nuclear Spin Systems NV-¹³C in Diamond for Quantum Technologies / A.L. Pushkarchuk [et al.] // *Nonlinear Dynamics and Application: Proceeding of the 23 Annual Seminar NPCS'2017*. 2017. Vol. 23. P. 150–158.
40. Robust electron-nuclear spin systems NV-¹³C in diamond for quantum technologies / A.P. Nizovtsev [et al.] // *Physics, Chemistry and Application of Nanostructures*. Singapore: World Scientific, 2017. P. 69–73.
41. Non-flipping ¹³C spins in NV diamond: Hyperfine and Spatial Characteristics by DFT Simulation of the C₅₁₀[NV]H₂₅₂ Cluster A.P. Nizovtsev [et al.] // *Book of Abstracts and Program of XV International Conference on Quantum Optics and Quantum Information*, Minsk, Belarus. 2017. P. 43.
42. Novye paramagnitnye centry okraski SiV, GeV i SnV v almaze dlja kvantovyh tehnologij: harakterizacija metodami kvantovoj himii / A.P. Nizovtsev [i dr.] // *Sb. nauch. st. X Mezhdunar. konf. «Fullereny i nanostrukturny v kondensirovannyh sredah»*. Minsk, 2018. S. 11–14.

Сведения об авторах

Борисенко В.Е., д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой микро- и нанoeлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Кривошеева А.В., д.ф.-м.н., с.н.с. Центра 4.11 НИЧ Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Мигас Д. Б., д.ф.-м.н., доцент, профессор кафедры микро- и нанoeлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Пушкарчук В.А., к.ф.-м.н., с.н.с. Центра 4.11 НИЧ Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Филонов А.Б., к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник Центра 4.11 НИЧ Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Шапошников В.Л., к.ф.-м.н., с.н.с. Центра 4.11 НИЧ Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь,
г. Минск, П. Бровка, 6
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники
Тел. +375-17-293-88-69; +375-29-778-59-64
e-mail: krivosheeva@bsuir.by
Кривошеева Анна Владимировна

Information about the authors

Borisenko V.E., D.Sci, professor, head of the department of micro- and nanoelectronics of Belarusian state university of informatics and radioelectronics.

Krivosheeva A.V., D.Sci, senior researcher of Center 4.11 of R&D department of Belarusian state university of informatics and radioelectronics.

Migas D.B., D.Sci, associate professor, professor of the department of micro- and nanoelectronics of Belarusian state university of informatics and radioelectronics.

Pushkarchuk V.A., PhD, senior researcher of Center 4.11 of R&D department of Belarusian state university of informatics and radioelectronics.

Filonov A.B., PhD, leading researcher of Center 4.11 of R&D department of Belarusian state university of informatics and radioelectronics.

Shaposhnikov V.L., PhD, senior researcher of Center 4.11 of R&D department of Belarusian state university of informatics and radioelectronics.

Address for correspondence

220013 Belarus,
Minsk, P. Brovka st., 6
Belarusian state university
of informatics and radioelectronics
тел. +375-17-293-88-69;
e-mail: krivosheeva@bsuir.by
Krivosheeva Anna Vladimirovna