



# VII Українська наукова конференція з фізики напівпровідників

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Дніпро, Україна  
26-30 вересня 2016 р.

**Національна академія наук України  
Міністерство освіти та науки України  
Наукова рада з проблеми «Фізика напівпровідників  
та напівпровідникові пристрої» при Відділенні фізики і астрономії  
Національної академії наук України  
Українське фізичне товариство  
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України  
Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара  
Інститут оптоелектроніки**

**VII УКРАЇНСЬКА НАУКОВА  
КОНФЕРЕНЦІЯ З ФІЗИКИ  
НАПІВПРОВІДНИКІВ**

**УНКФН–7**

**ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ**

**Дніпро, Україна  
26 - 30 вересня 2016**

**УДК 537.311.322(063)**

**ББК 22.379я431**

**П 26**

**7-ма Українська наукова конференція з фізики напівпровідників. Матеріали конференції. – Кременчук: Видавець ПП Щербатих О. В., 2016. – 556 с.**

Дана збірка містить тези доповідей 7-ї Української наукової конференції з фізики напівпровідників (УНКФН-6) за участі зарубіжних науковців. Матеріали відображають зміст доповідей конференції, у яких викладені нові результати, стан і перспективи досліджень в області фізики напівпровідників за основними напрямками: нові фізичні явища в об'ємі та на поверхні напівпровідників, фізичні явища у низькорозмірних структурах, фізика напівпровідникових приладів, проблемні питання мікро- та наноелектроніки, сучасні фізико-технічні аспекти напівпровідникової сенсорики та оптоелектроніки, надвисокочастотна та терагерцова електроніка, матеріалознавство, технології та діагностика напівпровідникових матеріалів.

У збірці надруковані тези пленарних, запрошених, усних та стендових секційних доповідей. Більша частина відповідних повних доповідей за рекомендацією програмного комітету і редакційної колегії конференції буде опублікована в тематичних випусках наукових журналів: "Український фізичний журнал", "Журнал фізичних досліджень", "Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics", "Функціональні матеріали", "Технология и конструирование в электронной аппаратуре", "Фотоелектроніка", "Сенсорна електроніка і мікросистемні технології".

Видання тез доповідей здійснено з авторських оригіналів, підготовлених до друку Програмним комітетом і редакційною колегією конференції.

Рекомендовано до друку Вченою радою Інституту фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України (протокол № 7 від 8 червня 2016 р.).

**ББК 22.379я431**

**УДК 537.311.322(063)**

Редакційна колегія:

Головний редактор О.Є. Беляєв

Члени редколегії:

В.О. Кочелап

В.Г. Литовченко

О.В. Стронський

М.В. Поляков

О.В. Коваленко

**ISBN 978-617-639-108-1**

© Видавництво ПП Щербатих О.В.

© Дніпропетровський національний університет  
імені Олеся Гончара, 2016

# Hysteresis of low temperature thermal conductivity, boson peak in glassy $\text{As}_2\text{S}_3$ and low frequency $\text{As}_n\text{S}_m$ nanocluster vibrations

V. Mitsa<sup>1</sup>, A. Feher<sup>2</sup>, S. Petretskij<sup>1</sup>, R. Holomb<sup>1</sup>, V. Tkach<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Uzhgorod National University, Voloshin Str.54, 88000, Uzhgorod, Ukraine, e-mail: v.mitsa@gmail.com*

<sup>2</sup> *P. J. Šafárik University in Košice, Angelinum 9, 040 01 Košice, Slovakia*

The origins of low temperature thermo conductivity and Boson peak are still remain open to question and are matter of debate [1-8]. We have studied thermal conductivity in  $g\text{-As}_2\text{S}_3$  between 2 and 100 K (Fig. 1). Thermal conductivity is weakly temperature  $k(T)$  dependent from 2 to 10 K showing a plateau region during both cooling and heating (Fig. 1). The jump of value in  $k(T)$  dependence between cooling and heating cycles of  $g\text{-As}_2\text{S}_3$  were discovered (see Fig. 1). The values show that the jump of  $k(T)$  is greater than the accuracy of the measurement producing an appreciable deviation from  $k$  values taken during cooling. The appearance of hysteresis in  $k(T)$  during heating was found in range of temperature from 11 to 60 K. The difference curve of  $k(T)$  (heating minus cooling) is complex asymmetric peak in energy range from 1 to 10 meV (not shown) and reproduces the experimental low-temperature Boson peak (excess of the density of states over the Debye prediction). The Boson peak is presented in scale  $g(\omega)/\omega^2$  (curve 4,  $T=10$  K [2], curve 5,  $T=293$  K) is shown in Fig. 1. For comparison the position of  $g(\omega)/\omega^2$  maximum at 2.65 eV in experimental neutron scattering measurements of  $g\text{-As}_2\text{S}_3$  the density of state  $g(\omega)$  is indicated in Fig.1 by arrow. In elastic X-ray scattering the low-energy excitation was observed around 3 meV [5] (arrow in Fig. 1).

It is known that the BP in the low frequency Raman spectra of glasses has also been related to the existence of intermediate range ordering (clusters) [6,7]. The low-lying vibrational of the rigid layer modes in counterpart crystalline  $\text{As}_2\text{S}_3$  where found at 25 and 36  $\text{cm}^{-1}$  [6]. In order to understand how these low frequency-modes depends on system the several As-S clusters (namely branchy-, ring-, and cage-like) were used to calculate the LF Raman active modes. It was found that only the glass-network forming branchy- and ring-like clusters have LF vibrational modes. The increasing of length of these clusters (*i.e.* by increasing the cluster size) lead to red shift of the lowest frequency modes. For example, the lowest in frequency vibrational mode at 31  $\text{cm}^{-1}$ , calculated for  $\text{As}_2\text{S}_{1+4/2}$  cluster, is shifted to 13  $\text{cm}^{-1}$  for  $\text{As}_{2+4/3}\text{S}_5$ . Calculated LF Raman of  $i$ -member rings exhibit a trend similar to those observed for branchy structures: the frequency position of the LF modes decreases with increasing cluster sizes. The lowest frequency modes were calculated at 33, 18, 11, and 9  $\text{cm}^{-1}$  for 6-, 8-, 10-, and 12-membered rings, respectively. The analysis of normal coordinates of these low frequency vibrations indicate that they are torsional and out of plane bending vibrations

involving group of atoms and extended even to 3-5 bonds. The atomic motions for some of these vibrations have a “wavelike” character. The larger  $i$ -member rings and branchy clusters may reproduce the medium range order in the glass and the localized collective LF vibrations (Fig. 2) and can be responsible for the low temperature anomalies and BP of  $g$ -As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>.

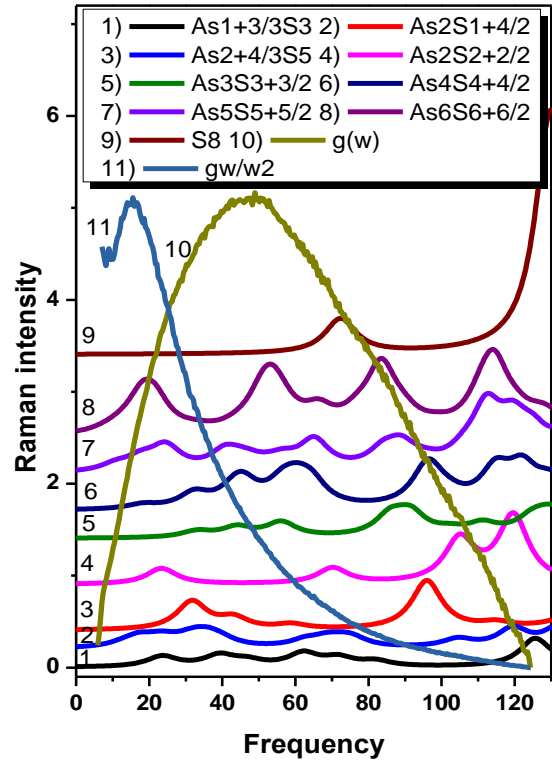
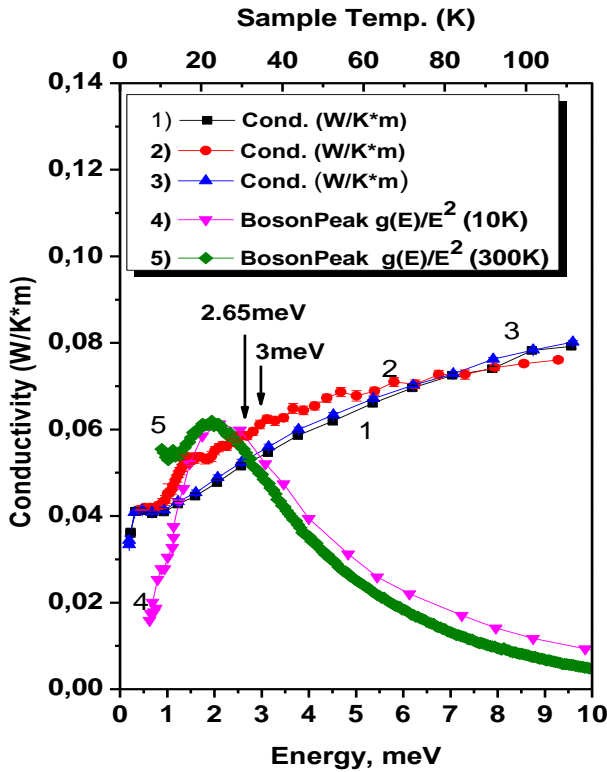


Fig. 1. Thermal conductivity during cooling (curve 1,3) and heating (curve 2) and LF Boson peak in scale  $g(\omega)/\omega^2$  of  $g$ -As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>.

Fig. 2. Simulated LF vibration of As<sub>n</sub>S<sub>m</sub> clusters (see insert ) density of state  $g(\omega)$  and  $g(\omega)/\omega^2$  of  $g$ -As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>.

1. Zeller R. C., Pohl R. Phys. Rev. B **4**, 2029 (1971).
2. Sokolov A.P, Kisliuk A., Quitmann D., Duval E. Phis.Rev.**48**, 7692(1993).
3. Feher A., Yurkin I.M., Deich L.I., Orendac M., Turyanitsa I.D. Physica B. **194-196**, 395(1994).
4. Malinovsky V.K., Novikov V.N., Parshin P.P., Sokolov A.P., Zemlyanov M.G. Europhysics Letters. **11**,43(1990).
5. Matsuishi K., Hosokawa S., Tsutsui S., Baron A. Q. Journal of Non-Crystalline Solids . **354**, 2669 (2008).
6. Zallen R., Slade M. L. Phys. Rev. B, **9**, 1627 (1974).
7. Holomb R., Mitsa V., Solid State Commun. **129**, 655(2004).
8. Holomb R., Mitsa V., Johansson P., Veres M. Phys. Status Sol. C. **7**, 885 (2010).

## The influence of X-Ray irradiation on crystal structure