

УДК 541.16

**О ВОЗМОЖНОСТЯХ МЕТОДА РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ
В ОПРЕДЕЛЕНИИ ПОЛИТИПОВ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ
СЛОИСТЫХ ДИСУЛЬФИДАХ МЕТАЛЛОВ****А.Н. Еняшин, А.Л. Ивановский***Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург**E-mail: Enyashin@ihim.uran.ru**Статья поступила 11 марта 2012 г.**С доработки — 20 июня 2012 г.*

На примере многослойных нанотрубок MoS_2 обсуждены возможности метода рентгеновской дифракции в определении возможных политипных форм слоистых дихалькогенидов металлов, которые могут возникать при наноструктурировании данных соединений. Сделан вывод о малой информативности метода рентгеновской дифракции, поэтому экспериментальный анализ политипного состава наноструктур дихалькогенидов металлов требует привлечения методов электронной микроскопии и электронной томографии.

Ключевые слова: слоистый дисульфид молибдена, наноструктуры, политипизм, рентгеновская дифракция, моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Дихалькогениды переходных металлов MX_2 ($\text{X} = \text{S}, \text{Se}$ или Te) привлекают внимание как материалы, обладающие уникальным набором трибологических, фотоэлектрических, оптических и каталитических свойств [1–4]. Эти свойства во многом определяются слоистой структурой MX_2 , образованной относительной укладкой молекулярных слоев $\{\text{X—M—X}\}$. Внутри монослоев существует система сильных направленных ковалентно-ионных связей M—X , тогда как соседние слои $\{\text{X—M—X}\}/\{\text{X—M—X}\}$ взаимодействуют за счет слабых связей Ван-дер-Ваальса. Каждый слой $\{\text{X—M—X}\}$ состоит из гексагональной сетки атомов M , заключенной между плоскими сетками атомов халькогена. В свою очередь, слой $\{\text{X—M—X}\}$ можно представить как составленный из координационных полиэдров MX_6 , где каждый атом M имеет шестикратное окружение в виде октаэдра или тригональной призмы $[\text{X}_6]$, что обуславливает существование MX_2 как минимум в двух полиморфных модификациях. Кроме того, слабые межслоевые взаимодействия определяют возможность различной ориентации слоев относительно друг друга, т.е. возникновения (для каждого полиморфа) значительного набора политипных форм.

Типичными представителями семейства слоистых дихалькогенидов являются дисульфиды молибдена MoS_2 и вольфрама WS_2 , для которых наиболее стабильными являются полиморфы с тригонально-призматической координацией. Менее устойчивы полиморфы с октаэдрической координацией атомов металла, но их стабилизация может быть достигнута при электронном инжентировании, например, за счет интеркаляции щелочных металлов [5] или при допировании рением [6]. Что касается политипизма, то, например, минерал молибденит (MoS_2) включает два устойчивых политипа на основе гексагональных слоев с призматической координацией атомов Mo — гексагональный 2H-MoS_2 и ромбоэдрический 3R-MoS_2 . Их элементарные ячейки содержат два (2H) и три (3R) монослоя, а слои ориентированы антипараллельно и параллельно