

# РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН НАНОТРУБОК ZIGZAG SiC

Свечников А.Б.

НИЦ «Курчатовский институт», г.Москва

[asvech@mail.ru](mailto:asvech@mail.ru)

*Представлены результаты неэмпирических расчетов энергетических зон однослойных и двухслойных нанотрубок zigzag SiC. Построена зависимость ширины запрещенной зоны от размера нанотрубок. Проведен анализ влияния состава двухслойных нанотрубок SiC на их энергетические характеристики.*

За время, прошедшее от первых публикаций, посвященных исследованиям углеродных нанотрубок (УНТ) [1], до создания первого компьютера на нанотрубках [2], был выполнен большой объем экспериментов и расчетов. Возникли оригинальные методики получения УНТ, расширился элементный состав нанотрубок: Si, BN, WS<sub>2</sub> и др., получивших название "неорганические нанотрубки". К перспективным можно отнести работы по получению и изучению неорганических нанотрубок SiC, впервые выращенные авторами [3].

В данной работе исследованы зависимости электронных спектров однослойных и двухслойных нанотрубок SiC от их поперечных размеров. Была выбрана структура zigzag (n, 0), характерной особенностью которой является наличие связей Si-C, направленных параллельно оси нанотрубки (рис.1). Атомы кремния и углерода чередуются, занимая вершины шестиугольников. В пределе больших значений параметра хиральности n, а соответственно и радиуса, локальная геометрия нанотрубки повторяет решетку графена SiC.

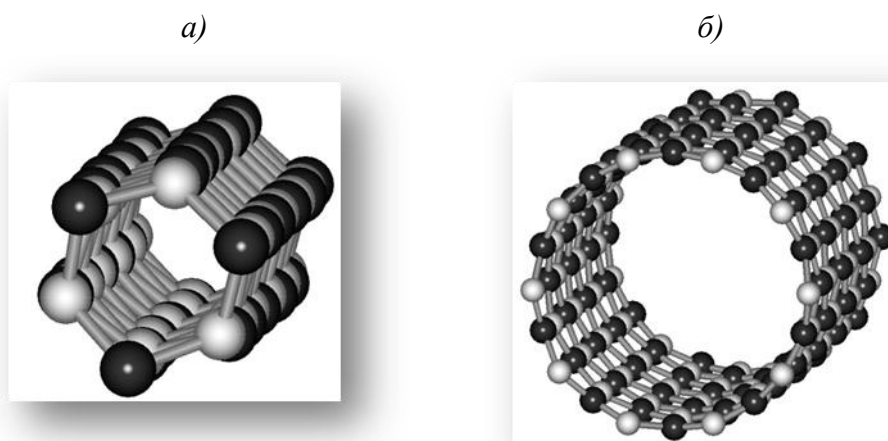


Рис.1 Геометрическая структура zigzag нанотрубок SiC, а) (3, 0), б) (10, 0).

Расчет электронной структуры zigzag нанотрубок (n, 0) SiC проводился методом теории функционала плотности (DFT) в приближении локальной плотности (LDA) с помощью открытого кода ABINIT [4]. Параметр хиральности n изменялся от 3 до 20, а радиус нанотрубок от 0,1507 нм до 0,94 нм соответственно. Равновесные геометрические параметры определялись путем минимизации полной энергии, в качестве базиса использовались PAW (projector augmented waves).

На рис.2 показаны энергетические зоны нанотрубок SiC (6, 0) и (10, 0) в окрестности уровня Ферми. Точки симметрии  $\Gamma(0, 0)$  и  $Z(\pi/a, 0)$ , где a - постоянная "решетки", представляют одномерную зону Бриллюэна. Обе нанотрубки являются прямозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны ( $E_g$ ) 0,661 эВ и 1,881 эВ соответственно.

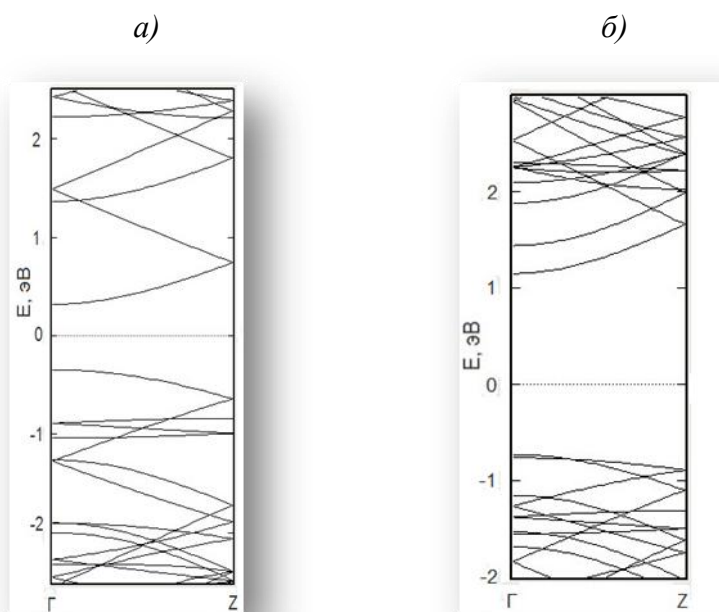


Рис.2 Зонная структура нанотрубок SiC, а) (6, 0), б) (10,0).

Зависимость ширины запрещенной зоны от размера нанотрубок SiC показана на рис.3 а). Нанотрубки с наименьшими радиусами ( $n < 5$ ) являются проводниками. Промежуточное положение занимает структура (5, 0) с нулевой  $E_g$ , как у графена углерода. Дальнейшее увеличение поперечного сечения нанотрубок ( $n > 5$ ) ведет к монотонному, логарифмическому росту  $E_g$ . Горизонтальной асимптотой графика функции  $E_g(n)$  является прямая  $E = E_g^*$ , где  $E_g^*$  - ширина запрещенной зоны графена SiC, равная 2,812 эВ (расчет выполнен нами, тем же методом).

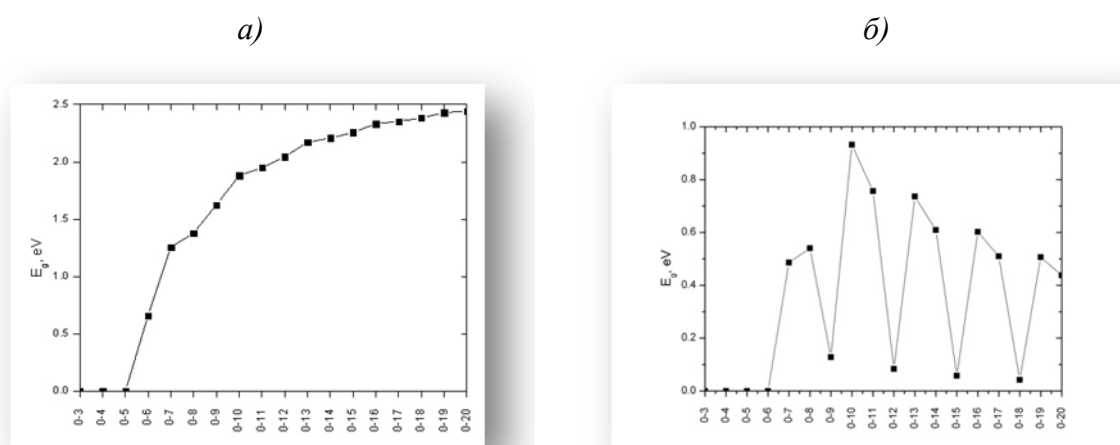


Рис.3 Зависимости ширины запрещенной зоны от поперечного размера нанотрубок zigzag, а) SiC, б) УНТ.

Интересно провести сравнение с аналогичной зависимостью, полученной нами по той же методике, для углеродных zigzag нанотрубок (УНТ) (рис.3 б). Узкие ( $n < 7$ ) УНТ также являются проводниками. Величина  $E_g$  понижается с ростом  $n$  и асимптотически стремится к 0 эВ, ширине запрещенной зоны углеродного графена. Однако на этом сходство представленных зависимостей  $E_g(n)$  заканчивается. Главным отличием является немонотонный характер функции  $E_g(n)$  для УНТ. Описанный в литературе "эффект  $n$  кратного 3", на наш взгляд обусловлен свойствами симметрии УНТ. Подтверждением может служить анализ каналов в

трансмиссионных спектрах, выполненных нами методом DFT, но этот вопрос выходит за рамки данной работы.

Двухслойные нанотрубки SiC крайне слабо изучены. В данной работе мы попытались ответить на вопрос, как комбинация параметров хиральности  $n_1$  и  $n_2$ , внутренней  $(n_1,0)$  и внешней  $(n_2,0)$  монослойных нанотрубок SiC, влияет на электронные свойства многослойных  $(n_1,0)@(n_2,0)$  нанотрубок. На рис.4 а) изображен фрагмент двухслойной  $(7,0)@(14,0)$  zigzag нанотрубки SiC. Поскольку межатомные расстояния Si-C во внутренней и внешних нанотрубках практически совпадают, элементарные ячейки двухслойных нанотрубок не слишком велики, тем самым облегчая расчеты. Анализ зонной структуры, представленный на рис.4 б), показывает, что нанотрубка  $(7,0)@(14,0)$  SiC является прямозонным полупроводником, где  $E_g = 0,469$  эВ. Для сравнения приведем величины  $E_g$  для составляющих монослойных нанотрубок,  $E_g[(7,0)] = 1,258$  эВ и  $E_g[(14,0)] = 2,207$  эВ. Несмотря на большое расстояние между нанотрубками (0,346 нм), наблюдается их связывание (в англ. источниках coupling), которое, как и в случае графита, существенно изменяет электронные свойства многослойной структуры. В данном случае в разы уменьшая ширину запрещенной зоны.

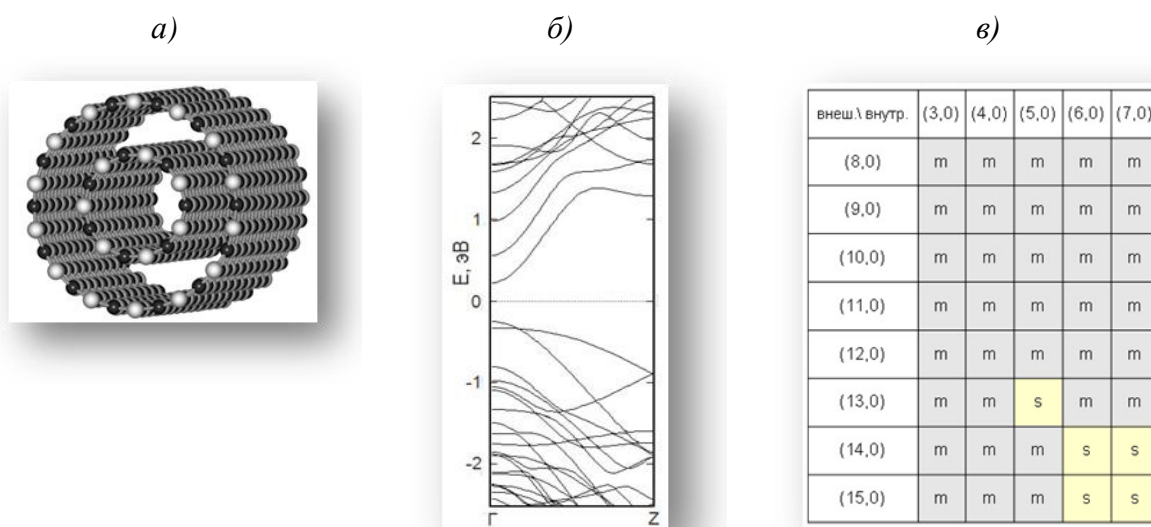


Рис.4 а) строение двухслойной  $(7,0)@(14,0)$  zigzag нанотрубки SiC, б) зонная структура  $(7,0)@(14,0)$ , в) электронные свойства двухслойных zigzag нанотрубок SiC (m - проводник, s - полупроводник).

Дальнейшие исследования показали, что граница раздела между двухслойными нанотрубками SiC проводниками (m) и полупроводниками (s) расположена, как показано на рис. 4 в). Пары однослойных нанотрубок с малым поперечным размером образуют двухслойные с металлическим типом проводимости. Крайнее положение занимают полупроводниковые нанотрубки  $(5,0)@(13,0)$  и  $(6,0)@(14,0)$ , для которых  $E_g$  равны 0,369 эВ и 0,486 эВ соответственно.

### Литература

1. Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // Nature., 1991. V.354. P.56-58.
2. Shulaker M., Hills G., Patil N. etc. Carbon nanotube computer // Nature., 2013. V.501. P.526-530.
3. Sun X., Li C., Wong W. etc. Formation of silicon carbide nanotubes and nanowires via reaction of silicon (from disproportionation of silicon monoxide) with carbon nanotubes // J. Am. Chem Soc., 2002. V.124. P.14464-14471.
4. Gonze X., Amadon B., Anglade P.-M. etc. ABINIT : First-principles approach of materials and nanosystem properties // Computer Phys. Commun., 2009. V.180. P.2582-2615.