

## РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН НАНОТРУБОК ZIGZAG SiC

Свечников А.Б.

НИЦ «Курчатовский институт», г.Москва

Свечников А.Б.  
НИЦ «Курчатовский  
институт»

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. 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.

Расчет электронной структуры zigzag нанотрубок (n, 0) SiC проводился методом теории функционала плотности (DFT) в приближении локальной плотности (LDA) с помощью открытого кода ABINIT [1]. 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.1(а,б) 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.

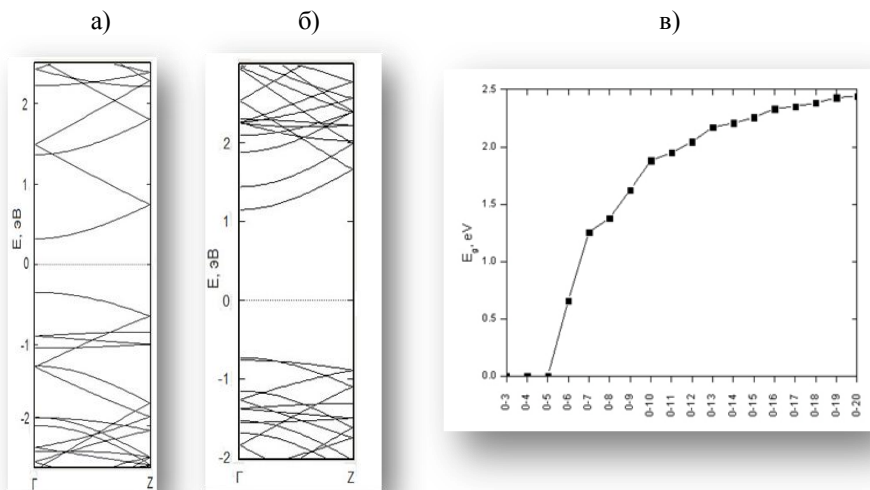


Рис.1 Зонная структура нанотрубок SiC, а) (6, 0), б) (10,0), в) зависимость ширины запрещенной зоны от поперечного размера нанотрубок zigzag.

Зависимость ширины запрещенной зоны от размера нанотрубок SiC показана на рис.1 (в). 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).

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.2(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.2(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 моноатомных 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.

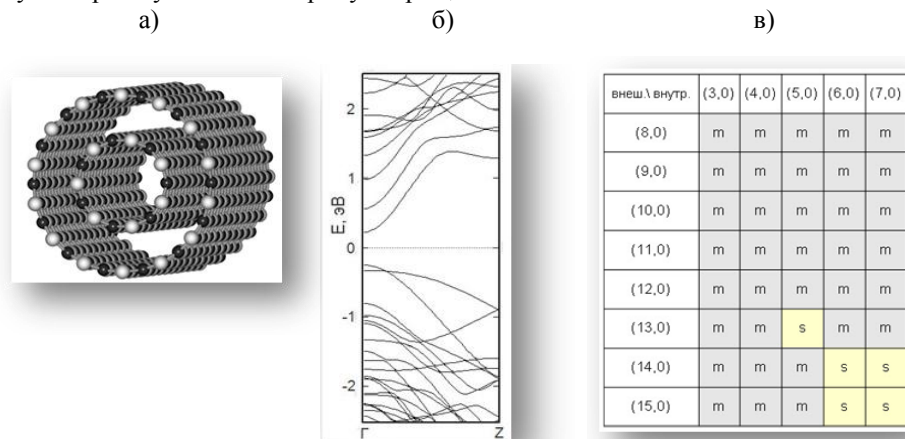


Рис.2 а) строение двухслойной (7,0)@(14,0) zigzag нанотрубки SiC, б) зонная структура (7,0)@(14,0), в) электронные свойства двухслойных zigzag нанотрубок SiC (m - проводник, s - полупроводник).

Дальнейшие исследования показали, что граница раздела между двухслойными нанотрубками SiC проводниками (m) и полупроводниками (s) расположена, как показано на рис. 2(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. 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.