

# ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НАНОПОЛОС

Свечников А.Б.

НИЦ «Курчатовский институт», г.Москва

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

*В работе представлены результаты расчетов равновесной геометрии и зонной структуры нанополос карбида кремния. Показано, что выбор направления нанополос SiC определяет их электронные свойства. Одна часть нанополос относится к полупроводникам, другая к проводникам.*

В 2002 году впервые были представлены необычные свойства двухмерного материала, который в сотни раз быстрее кремния проводил тепло и заряд, графена - основы для создания сверхбыстрых транзисторов. Получение графена в промышленных масштабах заметно стимулировало продолжение исследовательских работ.

Гипотетическая возможность "разрезания" графеновых пластин на узкие полосы с шириной в несколько нанометров (нанополосы, НП), открывает новые перспективы для наноэлектроники. Дело в том, что как показали теоретические расчеты, электронные свойства нанополос зависят от ширины и кристаллографического направления, а также от насыщения водородом связей крайних атомов углерода. Есть вероятность, что наличие адсорбированных частиц и механические деформации также расширят диапазон уникальных свойств НП.

Экспериментальные методики получения НП пока не созданы. Основное внимание обращено к двум различным подходам: "сверху-вниз" и "снизу-вверх". Первый подход, литографический, сталкивается с проблемой массового образования структурных дефектов. Второй, получивший название самосборки (self-assembly method), предполагает контроль над молекулярными реакциями в адсорбционном слое на медной подложке и находится в начальной стадии реализации. Отметим также, что отсутствие экспериментальных данных лишь повышает ценность теоретических работ, в которых применяются высокоточные и проверенные временем вычислительные методы, а полученные результаты характеризуются высокой предсказательной силой.

В данной работе выполнены неэмпирические расчеты равновесной геометрии и электронных спектров нанополос карбида кремния. Рассмотрены две основные ориентации, получившие в литературе названия armchair (рис. 1а) и zigzag (рис. 1б). Свободные валентности атомов углерода на краях нанополос создают предпосылки для структурной реконструкции и, ввиду её нежелательности, были насыщены атомами водорода. Ширина варьировалась в диапазоне от 0,5 нм до 3,5 нм, что соответствует предельно узким НП.

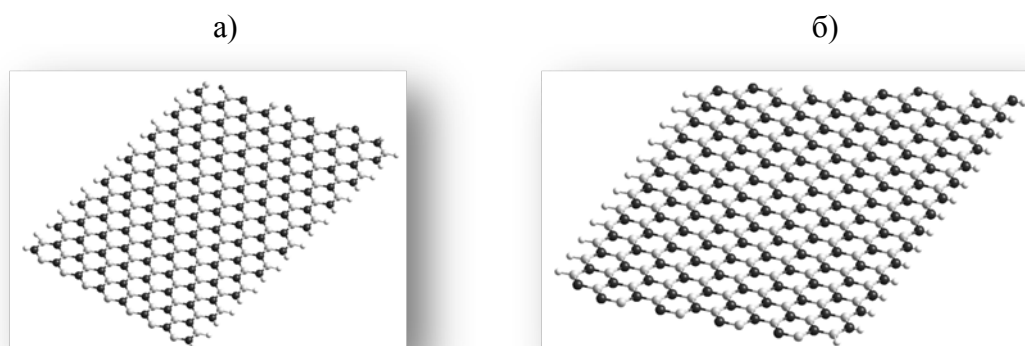


Рис. 1 Геометрическая структура нанополос карбида кремния, декорированных атомами водорода, а) armchair ( $N_a = 15$ ), б) zigzag ( $N_z = 10$ ).

Использование открытого кода ABINIT [1] позволило выполнить расчеты с минимальными вычислительными затратами в рамках теории функционала плотности (DFT), приближения локальной плотности (LDA) и в базисе PAW (projector augmented waves).

Из полученных результатов следует, что нанополосы armchair являются широкозонными полупроводниками. На рис.2 представлены электронная зонная структура (а) и плотность состояний (б) НП ( $N_a=11$ ) шириной 1,79 нм.

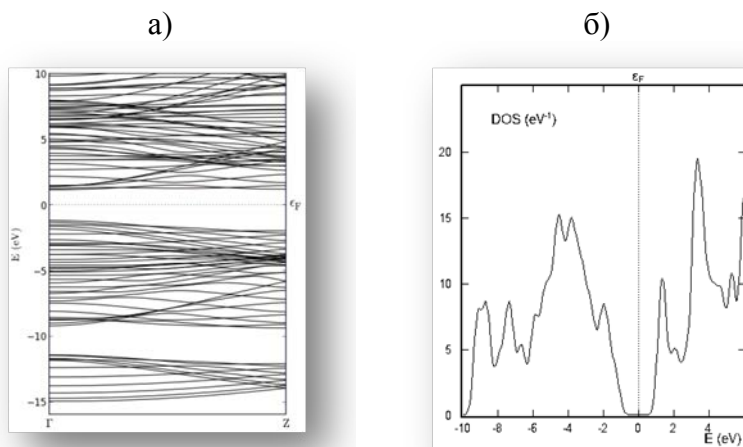


Рис.2 Зонная структура нанополосы SiC armchair с  $N_a = 11$  (а), плотность состояний (б).

Ширина запрещенной зоны  $E_g = 2,34$  эВ отвечает точке  $\Gamma(0, 0, 0)$ . Схожие результаты были получены в расчётах НП armchair различной ширины, а интервал значений  $E_g$  был от 2,2 эВ до 2,4 эВ. Для сравнения отметим, что ранее нами была исследована электронная структура графена SiC [2], где значение  $E_g = 2,81$  эВ, лежало в диапазоне 2,36 эВ (SiC 3C) ÷ 3,28 эВ (SiC 4H) соответствующих значений для объемных кристаллических структур карбида кремния.

Рассмотрим теперь электронные свойства НП SiC с zigzag геометрией. На рис.3 представлены результаты расчетов для НП  $N_z=24$  шириной 3,28 нм.

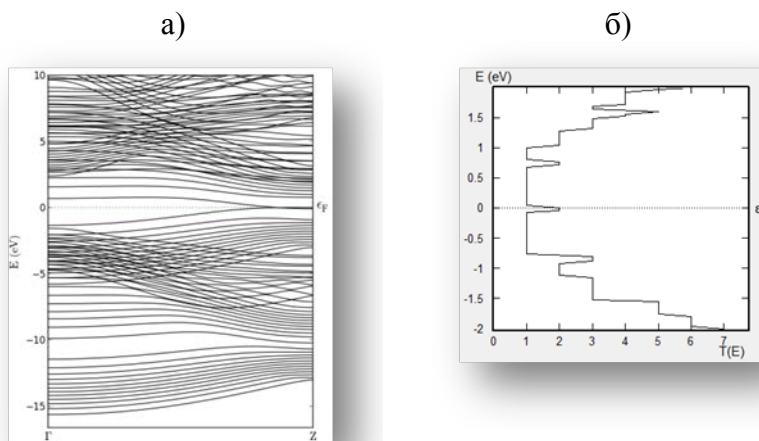


Рис.3 Зонная структура нанополосы SiC zigzag с  $N_z = 24$  (а), спектр пропускания (б)

Нанополосы SiC со структурой zigzag являются проводниками. В точке  $Z(\pi/a, 0)$  зоны соприкасаются, и как видно из спектра пропускания (transmission spectrum), рис.3 б, вблизи уровня Ферми находится локальный максимум. Как следует из дальнейшего анализа струк-

тур данного типа, каналы пропускания обеспечивают атомы кремния и углерода, расположенные на краях нанополосы. На рис.4 показаны плотности  $p$ - состояний таких атомов.

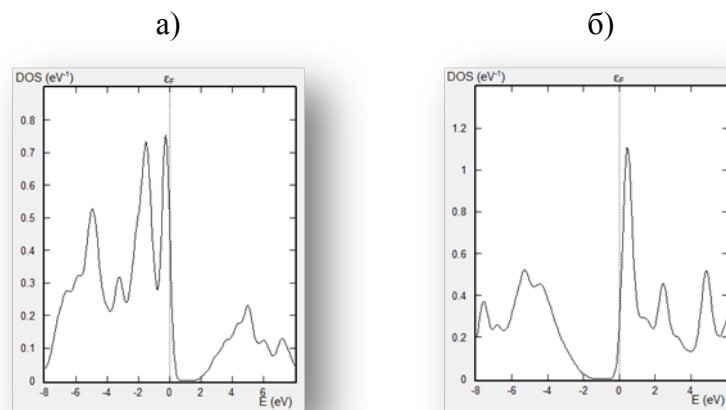


Рис.4 Плотность  $p$ -состояний нанополосы SiC zigzag с  $N_z = 24$  крайних атомов углерода (а), кремния (б).

Таким образом, релаксация связей Si-C на краях НП и наличие атомов водорода могут кардинально изменить электронные свойства материала. Нанополосы zigzag SiC - один из первых проводников среди модификаций карбида кремния, изученных в нашей лаборатории.

Наноструктуры с запрещенными зонами, например, armchair НП SiC, безусловно интереснее для практических приложений. Тем не менее, возможность во время "раскрытия" графена создать участки проводящих zigzag НП SiC может иметь особое значение.

### 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.
2. Свечников А.Б. Электронная структура графена SiC // Сборник трудов ИВТН-2013. ISSN 2220-7864, с. 16-17.