

# ВЛИЯНИЕ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ НАНОПРОВОДОВ SiC

Свечников А.Б.

НИЦ «Курчатовский институт», г.Москва

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

*В данной работе выполнены неэмпирические расчеты равновесной геометрии и электронных спектров нанопроводов карбида кремния с ориентацией продольной оси (100). Были рассмотрены чистые и декорированные атомами водорода нанопровода SiC различных диаметров. Проанализирован случай, когда функционализация наноструктуры превращает проводник в непрямозонный полупроводник. Сделан вывод о важности функционализации для формирования нанопроводов с заданными свойствами.*

Наноструктуры обладают оригинальными физико-химическими свойствами по сравнению с исходными материалами в виде объемных кристаллических структур. Благодаря высоким отношениям числа атомов на поверхности к числу атомов в объеме, квантовым размерным эффектам и другим особенностям, наноматериалы находят уникальное применение в наноразмерных устройствах, сенсорах, элементах сканеров.

Кристаллический карбид кремния является широкозонным полупроводниковым материалом. Отличают его также высокая механическая прочность, химическая и биологическая стойкость. Можно предположить, что наноструктуры карбида кремния, получив хотя бы часть этого наследства, вместе с успешными работами по их синтезу, найдут широкое применение в производстве наноустройств.

Нанопровода принято считать одномерными структурами, поскольку размер диаметра поперечного сечения (несколько десятков- сотен ангстрем) намного меньше их длин (миллиметры). Наличие кристаллической структуры определяет анизотропию их физических свойств и ориентацию. Благодаря относительно большой площади поверхности, в нанопроводах, и это отличает их от нанотрубок, всегда имеется большое количество активных центров (ненасыщенных валентностей или радикалов).

Под функционализацией понимают результат обработки внешней поверхности нанопровода, обычно атомами водорода, в результате которой повышается ее химическая инертность. Однако наличие адсорбента часто влияет и на электронные свойства материала - подложки. Тем более что в случае нанопроводов отношение числа атомов адсорбента к числу родных атомов может превышать величину 0,01.

В данной работе выполнены неэмпирические расчеты равновесной геометрии и электронных спектров нанопроводов карбида кремния с ориентацией продольной оси (100). Последовательно рассматривались чистые и декорированные атомами водорода нанопровода SiC с поперечными диаметрами от 1 нм до 3,8 нм. На рис. 1 показан внешний вид фрагмента нанопровода SiC, где атомы водорода (показаны зеленым цветом) занимают все активные места на боковой поверхности.

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).

Влияние функционализации на электронную структуру проиллюстрируем на примере самого тонкого нанопровода SiC с поперечным диаметром 1 нм. Зонные структуры чистого и декорированного нанопроводов приведены на рис.2.

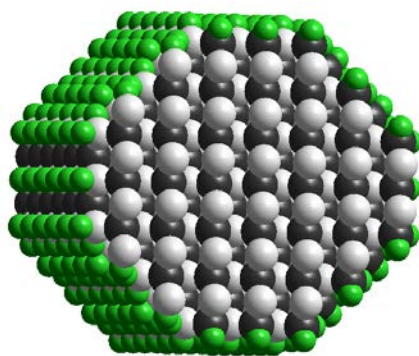


Рис.1 Геометрическая структура нанопровода карбида кремния, декорированного атомами водорода.

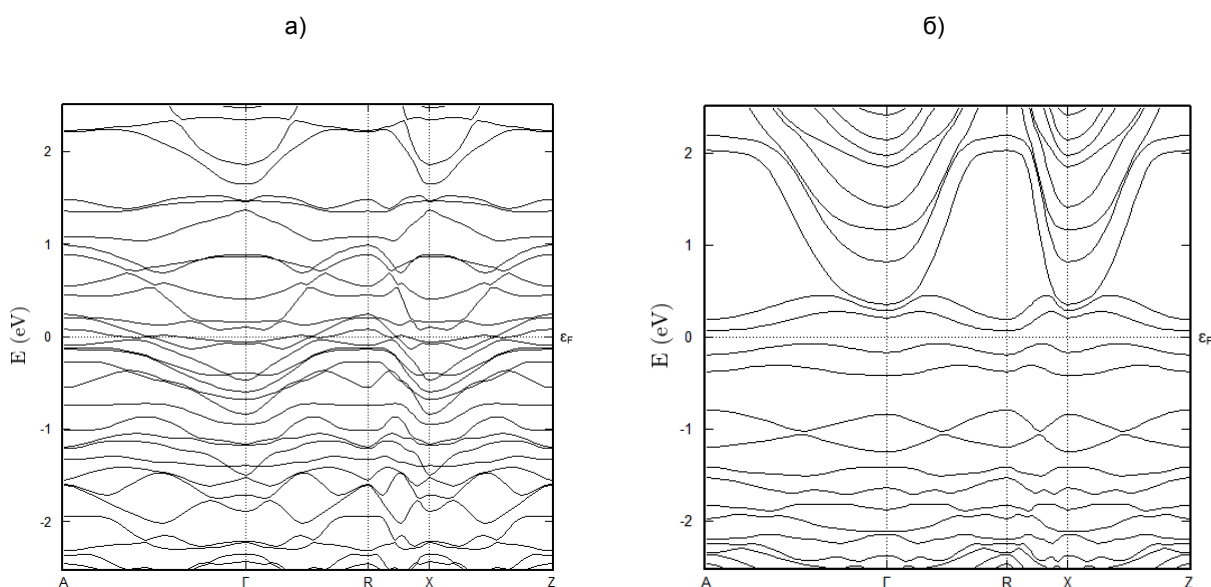


Рис.2 Зонная структура нанопровода SiC,  $\varnothing = 1$  нм а) чистый, б) после функционализации.

Чистый нанопровод, рис.2а, является проводником, и это вполне ожидаемый результат. Как следует из дальнейшего анализа структур данного типа, каналы пропускания обеспечивают атомы кремния и углерода, расположенные на боковой поверхности нанопровода. Декорирование атомами водорода, рис.2б, заметно изменяет зонную структуру нанопровода. Можно наблюдать появление узкой запрещенной зоны. Таким образом, функционализация превращает проводник в непрямозонный полупроводник.

В заключении можно сделать вывод о значении функционализации для формирования нанопроводов с заданными свойствами. Здесь имеется большой выбор элементов декора, например, атомы галогенов. Плотность адатомов (степень покрытия) и предварительная подготовка поверхности нанопровода могут оказаться существенными. По аналогии с литографией, неоднородная функционализация, когда степень покрытия отличается в различных частях нанопровода, может привести к созданию нанoeлектронных приборов. И наконец, функционализация мобильными частицами, способными диффундировать вдоль нанопровода, позволит динамически изменять параметры наноприборов.

### 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.