

УДК 538.915+975;544.22.022.343;544.225.22+25

ЭЛАСТОПРОВОДИМОСТЬ ГЕРМАНЕНОВЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЛЕНТ С АКЦЕПТОРНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

© 2024 г. О. С. Лебедева^{1*}, Н. Г. Лебедев¹, А. С. Чибриков¹, Е. Н. Шамина²¹ Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия² Волгоградский государственный медицинский университет, Волгоград, Россия

*E-mail: lebedeva_os@volsu.ru

Поступила в редакцию 06.10.2023;

после доработки 29.11.2023;

принята в печать 20.12.2023

Работа посвящена теоретическому исследованию пьезорезистивности германеновых нанолент различной структурной модификации (кресельной и зигзагообразной) с акцепторными дефектами, в качестве которых выбраны атомы галлия. Предложено феноменологическое выражение для зонной структуры наноразмерных лент, деформированных растяжением и сжатием. Проанализированы зависимости продольной компоненты тензора эластопроводимости от относительной деформации растяжения и сжатия, концентрации примесей и ширины ленты.

Ключевые слова: зонная структура, напряженно-деформированное состояние, пьезорезистивный эффект, тензор эластопроводимости.

DOI: 10.31857/S0207401X24050122

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа продолжает цикл исследований, посвященных поиску нового перспективного наноразмерного материала семейства графена [1], уникальными электропроводящими и пьезорезистивными свойствами которого можно будет легко управлять с использованием действия внешних факторов (примесей, дефектов структуры, электрических и магнитных полей).

В 2004 г. проведена серия экспериментальных и теоретических исследований, связанных с синтезом и изучением свойств и структуры углеродных наноматериалов (графеновые наноразмерные ленты (далее — наноленты), графен), электропроводность которых открывала многообещающие перспективы их использования в наноэлектронных приборах [2–4].

Графен обладает экстремально высокой проводимостью вследствие практически полного отсутствия запрещенной зоны ($E_g < 0.05$ мэВ), что не дает возможности закрытия канала полевого транзистора, созданного на основе графена [5]. Это затрудняет его использование в качестве основы при разработке устройств преобразования электромеханической энергии, таких как транзисторы, резисторы, пьезорезистивные сенсоры,

датчики давления. Запрещенная зона позволяет сделать ток закрытого состояния полевого транзистора весьма малым, что необходимо при разработке больших логических схем. Поэтому усилия многих исследователей были направлены на открытие запрещенной зоны графена.

При решении этой задачи перед исследователями встал вопрос поиска нового наноматериала с аналогичными уникальными высокопроводящими свойствами, но при этом имеющими запрещенную щель в спектре. В результате компьютерного анализа в 2013 г. на эту роль было предложено более 90 кандидатов среди двумерных наноматериалов с похожей на графеновую структурой [6]. В свете этого перед постановкой задачи получения такого наноматериала необходимо теоретически предсказать не только его электропроводность, но и возможность ее изменения с помощью различных воздействий (деформаций, дефектов структуры).

В 2014 году на платиновой и золотой подложках синтезирован германен — один из материалов семейства графена [7–10]. Его электропроводность чувствительна к деформациям, а ширина запрещенной зоны ($E_g \approx 24$ мэВ) на несколько порядков превышает графеновую [11, 12]. Это

позволяет рассмотреть германен в качестве перспективного материала для использования в виде основы приборов, работа которых построена на полевых эффектах.

Варьирование ширины запрещенной зоны германена с помощью примесей различных концентраций и деформации структуры позволит управлять его электропроводностью, что расширит спектр использования материала в устройствах нанoeлектроники.

Необходимо отметить, что исследования физических свойств графена продолжают интенсивно [1]. На его основе получают различные многослойные, алмазоподобные, функционализированные и композиционные материалы [1, 4, 13, 14]. В недавней работе [15] проведено исследование влияния ферромагнитных и ферримагнитных подложек на электронные свойства и подрешеточный ферримагнетизм в графене. Авторами показано, что за счет спин-орбитального расщепления в графене вблизи уровня Ферми появляется устойчивая энергетическая щель. Это открывает перспективу применения графена для разработки элементной базы электроники на его основе.

В 1994 г. предсказан теоретически, а в 2010 г. впервые синтезирован на подложке родственный графену материал — силицен, представляющий собой двумерный слой из атомов кремния. Это еще один из так называемых дираковских материалов, интенсивно изучаемый вместе с графеном и германеном. Основным его недостатком является неустойчивость двумерной структуры и переход в объемную фазу. Тем не менее возможные практические применения его описаны в работе [16].

Настоящая работа продолжает цикл исследований [17, 18], посвященных изучению пьезорезистивных свойств примесных германеновых нанолент (nanoribbon (NR) — GeNRs), и возможности управлять ими, изменяя концентрацию и вид дефектов, а также величину деформаций.

2. МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ДЕФОРМИРОВАННЫХ ПРИМЕСНЫХ НАНОЛЕНТ

Геометрическая модель нанолент выбирается на основе двумерного гексагонального слоя с двумя атомами в элементарной ячейке (ЭЯ) и векторами основных трансляций $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$ и

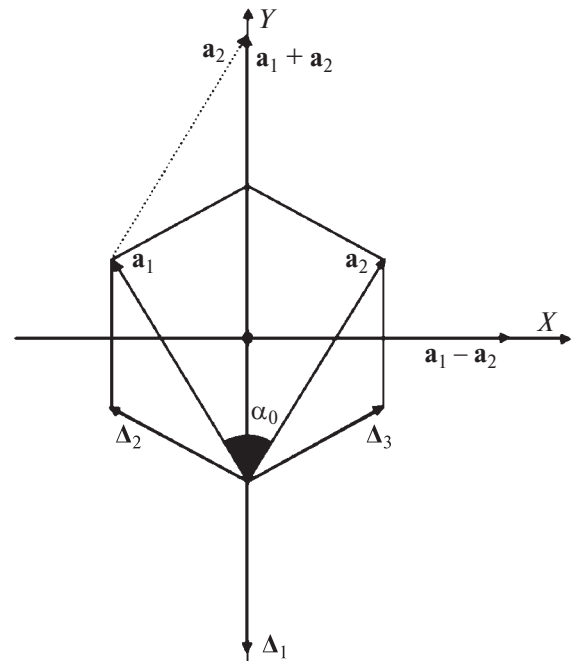


Рис. 1. Фрагмент структуры кресельной германеновой наноленты, деформированной продольным растяжением: Δ_i ($i = 1, 2, 3$) — векторы межатомных расстояний; $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ — векторы основных трансляций; α — угол между векторами $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$

$\mathbf{a}_2 = a(-1/2, \sqrt{3}/2)$, где $a_1 = a_2 = a$, $a = \sqrt{3} R_0$ — постоянная решетки, $R_0 = 2.44 \text{ \AA}$ — межатомное расстояние в германене (рис. 1).

Если сделать разрез плоскости вдоль кресельного или зигзагообразного направления, то получатся соответствующие германеновые наноленты. Классификация NRs осуществляется с помощью одного индекса N , где N равен числу атомов, укладываемых в поперечном разрезе зигзагообразной ленты, и числу димеров на срезе кресельных на NRs [4]. Ширина ленты также выражается через индекс N следующей формулой [4]:

$$H = \begin{cases} \left(\frac{3}{2}N - 1\right)R_0 \equiv H_z, \\ \frac{\sqrt{3}}{2}(N - 1)R_0 \equiv H_a, \end{cases} \quad (1)$$

где H_z — ширина зигзагообразной ленты, H_a — ширина кресельной ленты.

Основные особенности зонной структуры GeNRs описываются в рамках приближения сильной связи для π -электронной системы. В качестве отправной точки рассматривается электронный спектр гексагонального слоя с двумя атомами в ЭЯ [19]:

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \pm \gamma \left\{ 1 + 4 \cos\left(\frac{3k_x R_0}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y R_0}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y R_0}{2}\right) \right\}^{1/2}, \quad (2)$$

где $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ – волновой вектор, $\gamma = 1.47$ эВ – интеграл перескока (матричный элемент перехода) электрона с одного узла на соседний.

Электронный спектр нанолент определяется как линии пересечения двумерной энергетической поверхности (2) параллельными плоскостями разрешенных значений волнового вектора $q = 2\pi n/H$ ($n = 1, 2, \dots$), направленного поперек ленты. Тогда условие квантования волнового вектора $\mathbf{k}$ в направлении, поперечном длине NR, с учетом замыкания граничных атомов германия атомами водорода для нанолент определяется из условия равенства нулю волновой функции на границе ленты, а именно на нулевом и $(N + 1)$ атомных рядах [4].

В итоге электронный спектр GeNRs кресельного и зигзагообразного типов можно представить в виде:

$$\varepsilon_a(k, n) = \pm \gamma \left[1 + 4 \cos\left(\frac{ka_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi n}{N+1}\right) \right]^{1/2}, \quad (3)$$

$$-\pi < 3kR_0 \leq \pi, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

$$\varepsilon_z(k, n) = \pm \gamma \left[1 + 4 \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) \cos\left(\frac{ka_y}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ka_y}{2}\right) \right]^{1/2}, \quad (4)$$

$$-\pi < \sqrt{3}kR_0 \leq \pi, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

где k – продольная компонента волнового вектора в одномерной зоне Бриллюэна (ЗБ), $a_x = 3R_0$ – постоянная решетки кресельных лент, $a_y = \sqrt{3}R_0$ – постоянная решетки зигзагообразных лент.

В рамках рассмотренной модели электронного строения все зигзагообразные наноленты являются проводниками, а также кресельные наноленты с индексом $N = 3m - 1$, где m – целое число. Соответственно, кресельные наноленты с индек-

сами $N = 3m$ и $N = 3m + 1$ проявляют полупроводниковые свойства, т.е. имеют малую щель в спектре на уровне Ферми, которая убывает с ростом ширины ленты [4]:

$$E_g = \begin{cases} 0, & N = 3m - 1, \\ \frac{\pi R_0}{H_a + (\sqrt{3}/2)R_0}, & N = 3m, \\ \frac{\pi R_0}{H_a}, & N = 3m + 1. \end{cases} \quad (5)$$

Моделирование зонной структуры деформированных GeNRs осуществляется путем преобразования параметров элементарной ячейки и соответствующей ей зоны Бриллюэна [20]. При растяжении (сжатии) длина ЭЯ увеличивается (уменьшается), а длина ЗБ уменьшается (увеличивается) соответственно. Способы преобразования ЭЯ и ЗБ низкоразмерных структур, таких как углеродные нанотрубки и графеновые и германеновые наноленты, подробно излагались в работах [17, 18, 21–26]. Здесь приведем только краткое описание. Обозначим величину относительной деформации GeNR через $\delta = \Delta a/a_0$, где $\Delta a = a - a_0$ – изменение постоянной решетки 1D-кристаллита, a_0 – равновесная постоянная решетки GeNR. Тогда текущее значение деформированной постоянной решетки $a = a_0(1 + \delta)$.

Изменение ширины ленты в результате деформации растяжения (сжатия) можно учесть с помощью коэффициента Пуассона ν , принимающего значения 0.27 и 0.19 для GeNRs кресельного и зигзагообразного типов соответственно:

$$H = H_0(1 - \nu\delta), \quad (6)$$

где H_0 – ширина недеформированной GeNR.

Выражение для зонной структуры GeNRs, деформированных при растяжении (сжатии), в приближении изотропного межатомного перекрывания может быть записано в следующем виде:

$$\varepsilon_a(k, n) = \pm \gamma(\delta) \left\{ 1 + 4 \cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right) \times \cos\left[\frac{3}{2}kR_0(1 + \delta)\right] + 4 \cos^2\left(\frac{\pi n}{N+1}\right) \right\}^{1/2}, \quad (7)$$

$$-\pi < 3kR_0(1 + \delta) \leq \pi, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

$$\varepsilon_z(k, n) = \pm \gamma(\delta) \left\{ 1 + 4 \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) \times \right. \\ \left. \times \cos\left[\frac{\sqrt{3}}{2} k R_0 (1 + \delta)\right] + 4 \cos^2\left[\frac{\sqrt{3}}{2} k R_0 (1 + \delta)\right] \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (8) \\ -\pi < \sqrt{3} k R_0 (1 + \delta) \leq \pi, \quad n=1, 2, \dots, N.$$

Нарушение точечной симметрии GeNRs в результате деформации растяжения (сжатия) в этих выражениях задается увеличением (уменьшением) постоянной одномерной решетки и уменьшением (увеличением) поперечных размеров нанолент соответственно. Добавление примесей и других дефектов в кристаллическую структуру рассматриваемых GeNRs может способствовать изменению их пьезорезистивности, как показано на примере германеновых и графеновых нанолент в работах [18, 25, 27], что позволит целенаправленно влиять на их проводимость.

Расчет электронного спектра допированных GeNRs проводили в рамках периодической модели Андерсона [28]. Электронный спектр GeNR в рамках модели Андерсона имеет следующий вид [28, 29]:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon_l + \varepsilon(\mathbf{k}) \pm \right. \\ \left. \pm \left\{ [\varepsilon_l - \varepsilon(\mathbf{k})]^2 + 36 |V_D(\delta)|^2 x \right\}^{1/2} \right\}, \quad (9)$$

где $\varepsilon(\mathbf{k})$, эВ – зонная структура идеальной (беспримесной) наноленты, выражаемая формулами (7) и (8); ε_l , эВ – энергия электронов на дефекте; $x = N_d/N_{cel}$ – концентрация примесей (N_{cel} – число элементарных ячеек в кристалле, N_d – количество дефектов); $V_D(\delta)$, эВ – потенциал гибридизации, который представляет собой матричный элемент энергии взаимодействия между электронами кристалла и точечного дефекта и является функцией относительной деформации δ .

В качестве точечных дефектов в данной работе рассмотрены акцепторные примеси в виде атомов галлия. Энергию электрона на дефекте можно оценить как разность потенциалов ионизации атомов примеси и кристаллита:

$$\varepsilon_l = I_{Ge} - I_{Ga} = (7.88 - 6.00) \text{ эВ} = 1.88 \text{ эВ}.$$

Зависимости прыжкового интеграла $\gamma(\delta)$ и потенциала гибридизации $V_D(\delta)$ от относительной деформации вычислялись методом теории функционала плотности с использованием обменно-корреляционного потенциала B3LYP в базисе

атомных орбиталей STO-3G [30]. Для осуществления квантовохимических расчетов рассматривался фрагмент поверхности германена размером 6×6 элементарных ячеек. Граничные ненасыщенные связи замыкались одновалентными атомами водорода. Атом дефекта (Ga) помещался в центр построенного кластера, чтобы уменьшить влияние граничных атомов. Моделирование деформации структуры вдоль направления “кресло” и “зиг-заг” проводилось путем пошагового замораживания атомов германия на противоположных границах фрагмента. Полученные численные значения зависимостей $\gamma(\delta)$ и $V_D(\delta)$ интерполировались следующими аналитическими выражениями:

$$\gamma(\delta) = \gamma_0 \exp(-1.9523R), \\ V_D(\delta) = V_0 \exp(-1.8498R), \\ R = R_0 (1 + \delta), \quad \gamma_0 = 171.11 \text{ эВ}, \\ V_0 = 162.06 \text{ эВ}. \quad (10)$$

Равновесные длины межатомных связей в расчетах полагались равными $R_0 = 2.44 \text{ \AA}$. Это значение было получено в результате предварительной оптимизации геометрической структуры построенного фрагмента германена вышеописанным методом теории функционала плотности. Относительная деформации растяжения (сжатия), использованная в расчетах, выбиралась в следующих диапазонах: $\delta = \pm 0.1, \pm 0.06, \pm 0.04, \pm 0.02, \pm 0.01$.

Добавление акцепторных примесей различных концентраций в решётку недеформированных GeNRs приводит к изменению зонной структуры последних (рис. 2а, в). Энергетический спектр низкоразмерных структур с точечными дефектами в кристаллической решетке имеет те же особенности, что и спектр углеродных нанотрубок [21–26]. Зона примесных состояний локализована вблизи уровня энергии электрона на дефекте, ε_l , и содержит локальную энергетическую щель, которая не изменяет свойства кристаллита в целом. С увеличением концентрации примесей происходит все большее изменение зонной структуры углеродных нанотрубок, а именно увеличение локальной энергетической щели. Описанные особенности электронного спектра недеформированных углеродных нанотрубок с примесями подтверждаются общей теорией модели Андерсона [28].

Эффекты, возникающие в электронном спектре германеновых нанолент вследствие де-

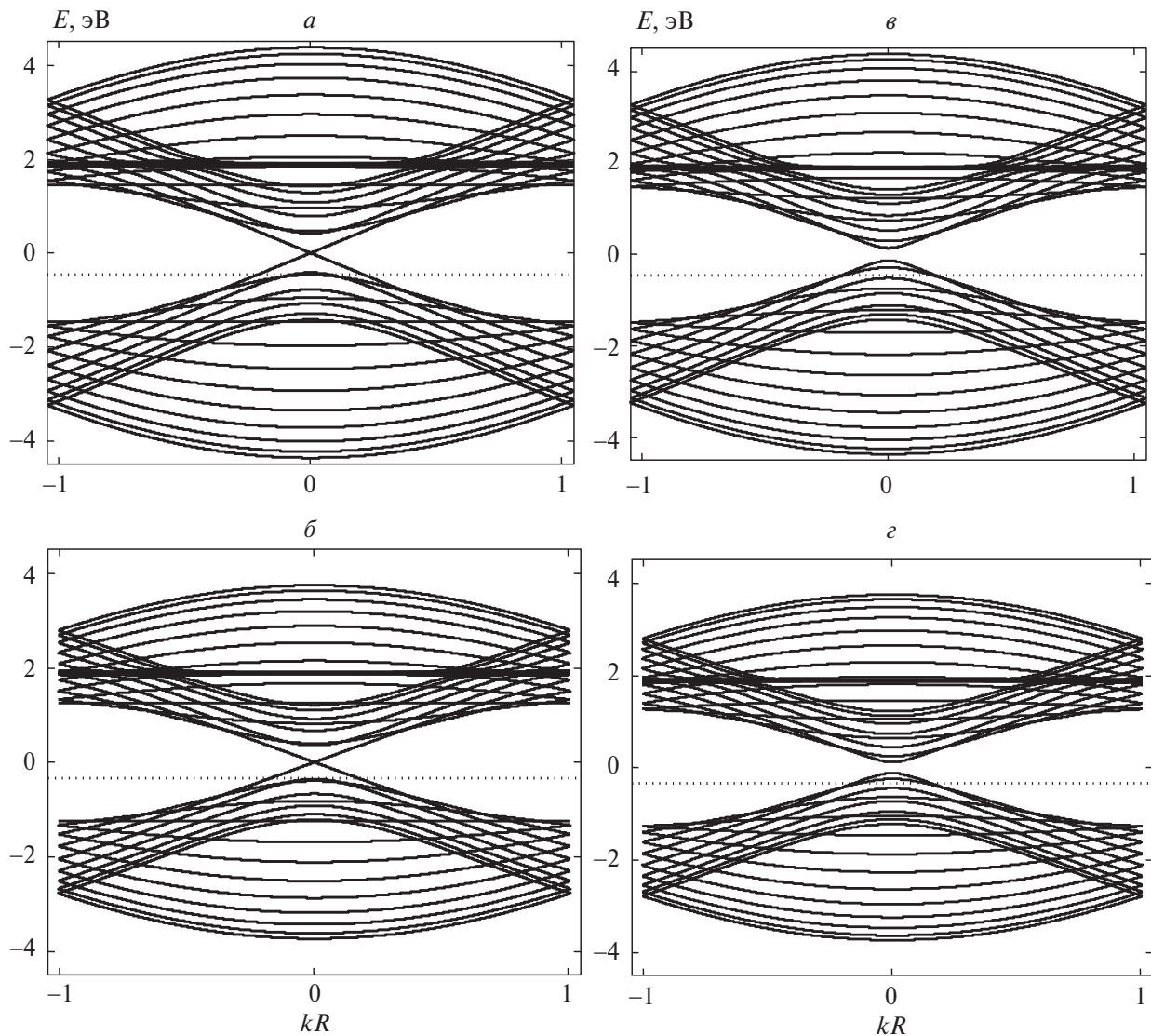


Рис. 2. Зонная структура p -проводящей 17-AGeNR ($a, б$) и p -полупроводниковой 18-AGeNR ($в, г$): $a, в - \delta = 0$, $N_d = 1000$; $б, г - \delta = 0.04$, $N_d = 1000$. Точечными линиями показан уровень Ферми.

формации продольного растяжения (сжатия), аналогичны поведению зонной структуры ахиральных (кресельных и зигзагообразных) и хиральных углеродных нанотрубок, а также графеновых нанолент и подробно проанализированы в работах [21–26]. Кратко опишем основные особенности спектра деформированных GeNRs.

Количественная оценка ширины энергетической щели, зоны проводимости и валентной зоны полупроводниковых GeNRs в случае деформации продольного растяжения/сжатия показала их уширение/сужение соответственно (рис. 2в, г). В результате деформации увеличивается (уменьшается) плотность электронных состояний в зоне проводимости и валентной зонах.

Бесщелевая зонная структура проводящих GeNRs в случае продольного растяжения (сжатия) также изменяется вышеописанным образом (рис. 2а, б). Исключением из аналогичного поведения является отсутствие запрещенных зон в спектрах таких лент при малых деформациях, они остаются проводящими. Продольное растяжение проводящих GeNRs также не оказывает принципиального влияния на качественное поведение их зонной структуры; запрещенная энергетическая зона при этом отсутствует при малых деформациях.

3. ЭЛАСТОПРОВОДИМОСТЬ НАНОЛЕНТ С АКЦЕПТОРНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Согласно теории, изложенной в работе [20], определение тензора эластопроводимости дву-

мерных кристаллических структур можно записать в виде

$$\frac{\Delta\sigma_{\alpha\beta}}{\langle\sigma\rangle} = M_{\alpha\beta\chi\eta}\delta_{\chi\eta},$$

$$\langle\sigma\rangle = \frac{1}{2}Sp[\hat{\sigma}] = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2}, \quad (11)$$

где $\sigma_{\alpha\beta}$ — тензор удельной проводимости; $\delta_{\chi\eta}$ — тензор деформаций; $\alpha, \beta, \chi, \eta = x, y$.

Для случая квазиодномерных структур (например, GeNR) продольная компонента $M = M_{xxxx}$ (для кресельных нанолент) или M_{yyyy} (для зигзагообразных нанолент) тензора эластопроводимости 4-го ранга может быть найдена с помощью следующего выражения:

$$M = \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} \frac{1}{\delta}, \quad (12)$$

где $\Delta\sigma$, См/м — изменение продольной компоненты тензора удельной проводимости, обусловленное деформацией; σ_0 , См/м — продольная компонента σ_{xx} (для кресельных нанолент) или σ_{yy} (для зигзагообразных нанолент) тензора 2-го ранга удельной проводимости недеформированных нанолент, $\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0$ (σ , См/м — та же компонента σ_{xx} или σ_{yy} деформированных нанолент).

Выражение для расчета продольной компоненты σ тензора удельной проводимости кресельных германеновых NRs, полученное в рамках теории Кубо—Гринвуда [31] с использованием метода функций Грина и модельного гамильтониана Хаббарда [28], приведено в работах [21, 22]:

$$\sigma = 2 \frac{i\pi e^2}{k_B T V} \sum_{\mathbf{k}, \beta} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \nu(\mathbf{k}) \nu(\mathbf{q}) \langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle \times$$

$$\times \left[\langle n_{\mathbf{q}\lambda} \rangle + \xi_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \xi_{\beta\lambda} (1 - \langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle) \right], \quad (13)$$

где V , м³ — объем наноленты; T , К — абсолютная температура; e , Кл — элементарный заряд; $\xi_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$, $\xi_{\beta\lambda}$ — символы Кронекера; $\mathbf{k}$, $\mathbf{q}$ — двухкомпонентные волновые векторы в пределах зоны Бриллюэна; β , λ — спиновые индексы; $\nu(\mathbf{k})$, м/с — продольная компонента вектора скорости электрона в зоне Бриллюэна; $\langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle$ — среднее число частиц в квантовом состоянии с волновым вектором $\mathbf{k}$ и спином β .

Среднее число частиц $\langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle$ выражается функцией распределения Ферми—Дирака:

$$\langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{k_B T}\right) \right]^{-1},$$

где k_B , Дж/К — постоянная Больцмана; μ , Дж/моль — химический потенциал, который находится с помощью процедуры самосогласования из условия нормировки функции распределения на полное число N_e электронов в системе; это число определяется соотношением

$$N_e = \sum_{\mathbf{k}, \beta} \langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \beta} \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{k_B T}\right) \right]^{-1}.$$

Вектор скорости определяется стандартным способом с помощью энергии электронов в зоне Бриллюэна (9):

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (14)$$

В данной работе представлены результаты изучения пьезорезистивных свойств кресельных и зигзагообразных GeNRs разной ширины и с разным типом проводимости — N -AGeNR и N -ZGeNR, где N задает число димеров на срезе кресельных нанолент, и число атомов, укладываемых в поперечном разрезе зигзагообразной ленты в соответствии с теорией, представленной в разд. 2. Теоретические расчеты проведены при абсолютной температуре $T = 300$ К.

На рис. 3–5 представлены зависимости продольной компоненты M тензора эластопроводимости от величины относительной деформации δ , вычисленные по формуле (12). Рассмотрен случай так называемого половинного заполнения зоны, т.е. от каждого атома германия в систему включался один электрон, от каждого примесного атома галлия — нуль электронов. Таким образом, полное число электронов вычислялось как $N_e = 2NL - N_d$, где $L = 100\,000$ — число ЭЯ вдоль длины ленты.

Как следует из рис. 3а, величина продольной компоненты M тензора эластопроводимости проводящей кресельной 17-AGeNR лежит в отрицательной области для всех концентраций акцепторных дефектов. Все кривые зависимости $M(\delta)$ для проводящей 17-AGeNR с разными концентрациями дефектов показывают немонотонное поведение с ростом деформации δ во всем диапазоне ее значений.

Поведение функции $M(\delta)$ полностью коррелирует с изменениями зонной структуры проводя-

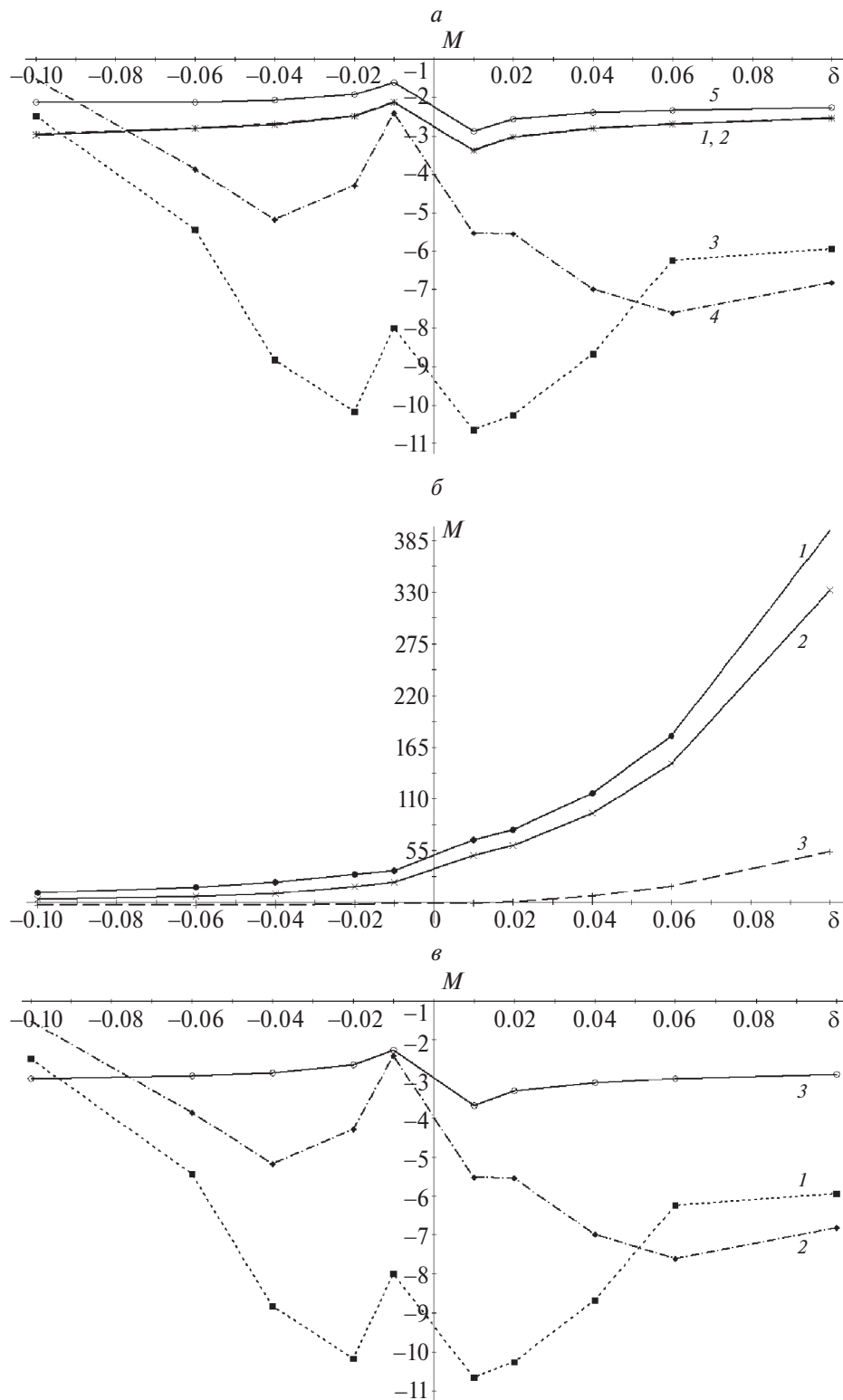


Рис. 3. Зависимости продольной компоненты M тензора эластопроводимости кресельных 17-AGeNR (*a*) и 18-AGeNR (*б*, *в*) от величины деформации δ при различной концентрации дефектов N_d : *a* – 1 (1), 10 (2), 100 (3), 1000 (4), 10000 (5); *б* – 0 (1), 1 (2), 10 (3); *в* – 100 (1), 1000 (2), 10000 (3).

щих примесных нанолент, описанными выше. Увеличение ширины зоны проводимости ведет к снижению плотности состояний на уровне Ферми

с ростом δ . Однако возникающая запрещенная энергетическая зона на уровне энергии электронов атомов примеси, расположенном выше

уровня Ферми, расширяется при возрастании величин N_d и δ . Поэтому в результате конкуренции этих двух эффектов удельная проводимость наноленты в целом убывает, что ведет к описанному выше поведению компоненты M .

Увеличение концентрации примесей ведет к интересному эффекту. В целом численное значение коэффициента M уменьшается с ростом концентрации практически для всех расчетных значений относительной деформации δ . Но при концентрации $N_d = 100$ зависимость $M(\delta)$ лежит выше, чем в случае $N_d = 1000$ для больших деформаций растяжения $\delta = 0.06$ и 0.1 . Такое поведение величины M связано с тем, что вследствие тепловых флуктуаций электроны заполняют зону проводимости NR, способствуя повышению удельной проводимости. Рост концентрации акцепторных примесей уменьшает число отрицательных носителей заряда в зоне проводимости. Все эти факторы изменяют удельную проводимость, вклад в которую вносят все заполненные электронные состояния в зоне проводимости.

Зависимость $M(\delta)$ для количества дефектов $N_d = 10000$ продолжает общую тенденцию поведения продольной компоненты 17-AGeNR. Конкуренция между двумя факторами, а именно — уширением запрещенной зоны вблизи примесного уровня за счет роста концентрации дефектов и относительной деформации и увеличением числа свободных носителей, приводит к убыванию $M(\delta)$ в области $\delta < 0$ (деформация сжатия) и ее возрастанию в области $\delta > 0$ (деформация растяжения). Кривая этой зависимости в случае малых концентраций акцепторных дефектов $N_d = 1, 10$ ведет себя подобным образом.

Анализируя вклады примесей и деформаций в поведение зависимостей $M(\delta)$ проводящей ленты, следует отметить, что при малых концентрациях акцепторных дефектов ($N_d = 1, 10$) диапазоны изменения продольной компоненты эластопроводимости примерно одинаковые: $\Delta M \approx 0.5$ – 1.0 . При увеличении концентрации ($N_d = 100, 1000$) интервал $\Delta M \approx 6.0$, а при деформации зависимость $M(\delta)$ изменяется на величину $\Delta M \approx 8.0$.

В случае полупроводниковых кресельных GeNRs (18-AGeNR, 100-AGeNR, 200-AGeNR) поведение продольной компоненты M тензора эластопроводимости зависит от ширины изучаемой наноленты.

Так, функция $M(\delta)$ для 18-AGeNR, можно сказать, монотонно возрастает с ростом относительной деформации во всем диапазоне величины δ (рис. 3б) для малых значений концентрации дефектов ($N_d = 0, 1, 10$). Увеличение концентрации примесей уменьшает значение константы M . Начиная со значения $\delta = -0.1$ величина M положительна для значений $N_d = 0, 1$. Для случая $N_d = 10$ кривая зависимости $M(\delta)$ переходит в положительную область при $\delta = 0.01$. Положительное значение пьезорезистивной константы M обусловлено увеличением удельной проводимости кристаллита с ростом деформации δ вследствие уширения запрещенной зоны. Уменьшение числа свободных носителей в зоне проводимости, обусловленное ростом концентрации дырок в зоне проводимости, уменьшает и величину M .

В случаях больших концентраций дефектов ($N_d = 100, 1000, 10000$) для 18-AGeNR кривые зависимости $M(\delta)$ переходят в область отрицательных значений (рис. 3в). Это обусловлено, как и в случае идеальных GeNRs [17], конкуренцией нескольких эффектов: уменьшением удельной проводимости с ростом деформации δ , обусловленным уширением энергетической щели E_g полупроводниковых NRs, что уменьшает число заполненных состояний в зоне проводимости, и ростом концентрации дырок в валентной зоне.

Для полупроводниковой ленты вклады примесей и деформаций в поведение зависимостей $M(\delta)$ существенно различаются при малых концентрациях дефектов ($N_d = 1, 10$). Деформационный вклад в диапазон изменения продольной компоненты эластопроводимости составляет $\Delta M \approx 400$. Примесный вклад в интервал составляет $\Delta M \approx 60$ при малых деформациях, а при больших ($\delta = 0.1$) — достигает значения $\Delta M \approx 350$. При больших концентрациях дефектов ($N_d = 100, 1000$) амплитуда изменения зависимости $M(\delta)$ такая же, как у проводящей 17-AGeNR, т.е. $\Delta M \approx 8.0$ (деформации) и $\Delta M \approx 6.0$ (примеси).

Характер функциональной зависимости $M(\delta)$ меняется для широких NRs 100-AGeNR и 200-AGeNR. Качественно поведение кривых для этих нанолент оказывается аналогичным, отличается только количественными значениями величины M , которая убывает с ростом ширины ленты. Кривые, соответствующие концентрациям $N_d = 1, 10, 100, 1000$, лежат в положительной области M . В области деформации сжатия ($\delta < 0$)

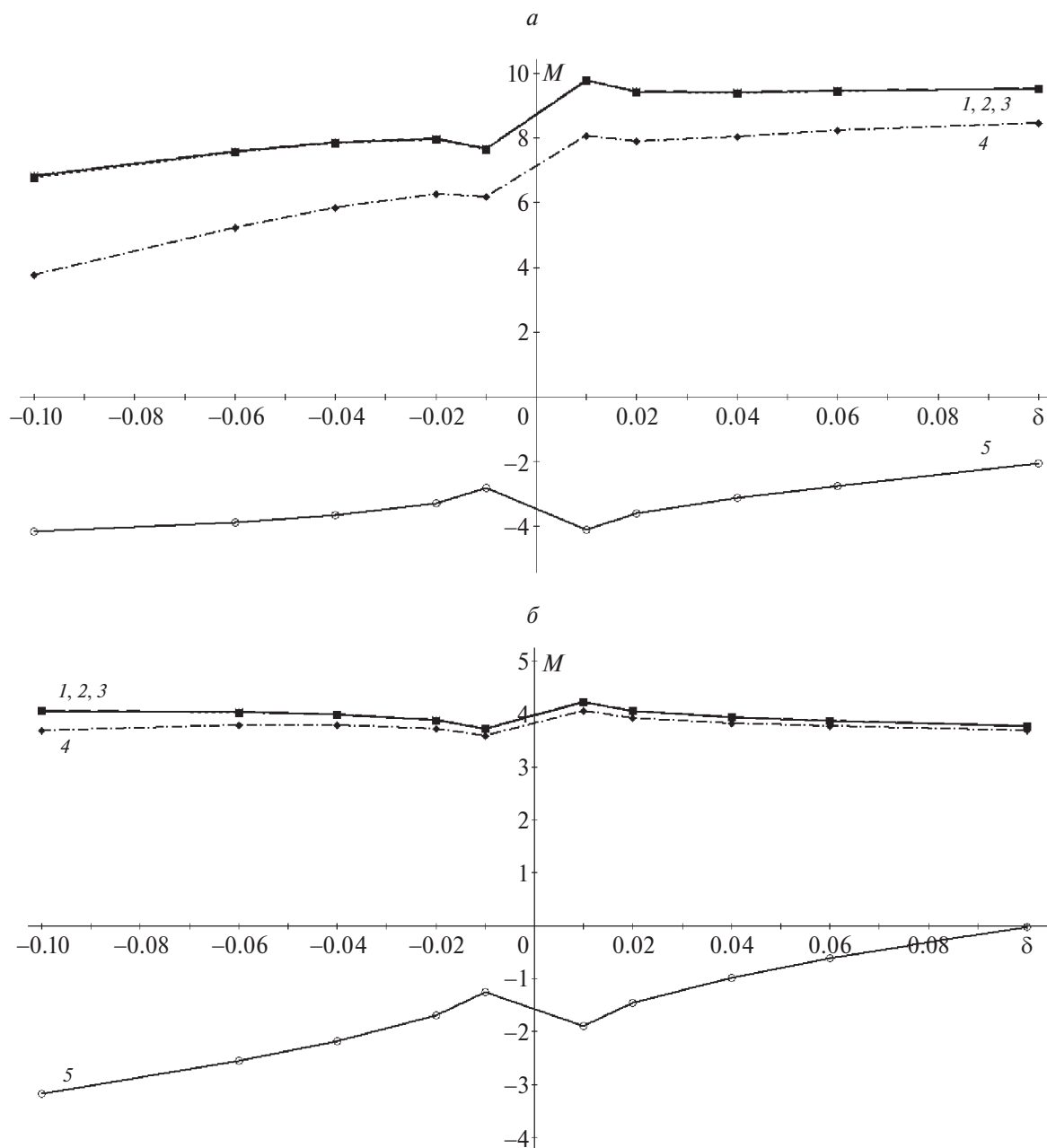


Рис. 4. Зависимости, аналогичные приведенным на рис. 2, но для 100-AGeNRs (а) и 200-AGeNRs (б) при различных концентрациях дефектов N_d : 1 (1), 10 (2), 100 (3), 1000 (4), 10000 (5).

наблюдается убывание величины M для 100-AGeNR для всех концентраций дефектов (рис. 4а). Компонента M для 200-AGeNR в этом случае монотонно выходит на насыщение – область “плато” (рис. 4б). При переходе в область положительных деформаций (растяжение) продольная компонента тензора эластропроводимости для обеих нанолент практически не изменяется вплоть до $\delta = 0.1$ (область “плато”). Случай большой концентрации дефектов ($N_d = 10000$) приводит к ярко выраженному росту (убыли) ве-

личины M для обеих нанолент в области деформации растяжения (сжатия). Такой эффект соответствует поведению зонной структуры деформированных узкозонных полупроводниковых NRs. Проявляется конкуренция между двумя факторами. Первый связан с убывлением проводимости NR за счет уменьшения числа свободных носителей в зоне проводимости, обусловленного акцепторными дефектами. Второй фактор – это блокировка проводимости ленты из-за увеличения E_g с ростом δ .

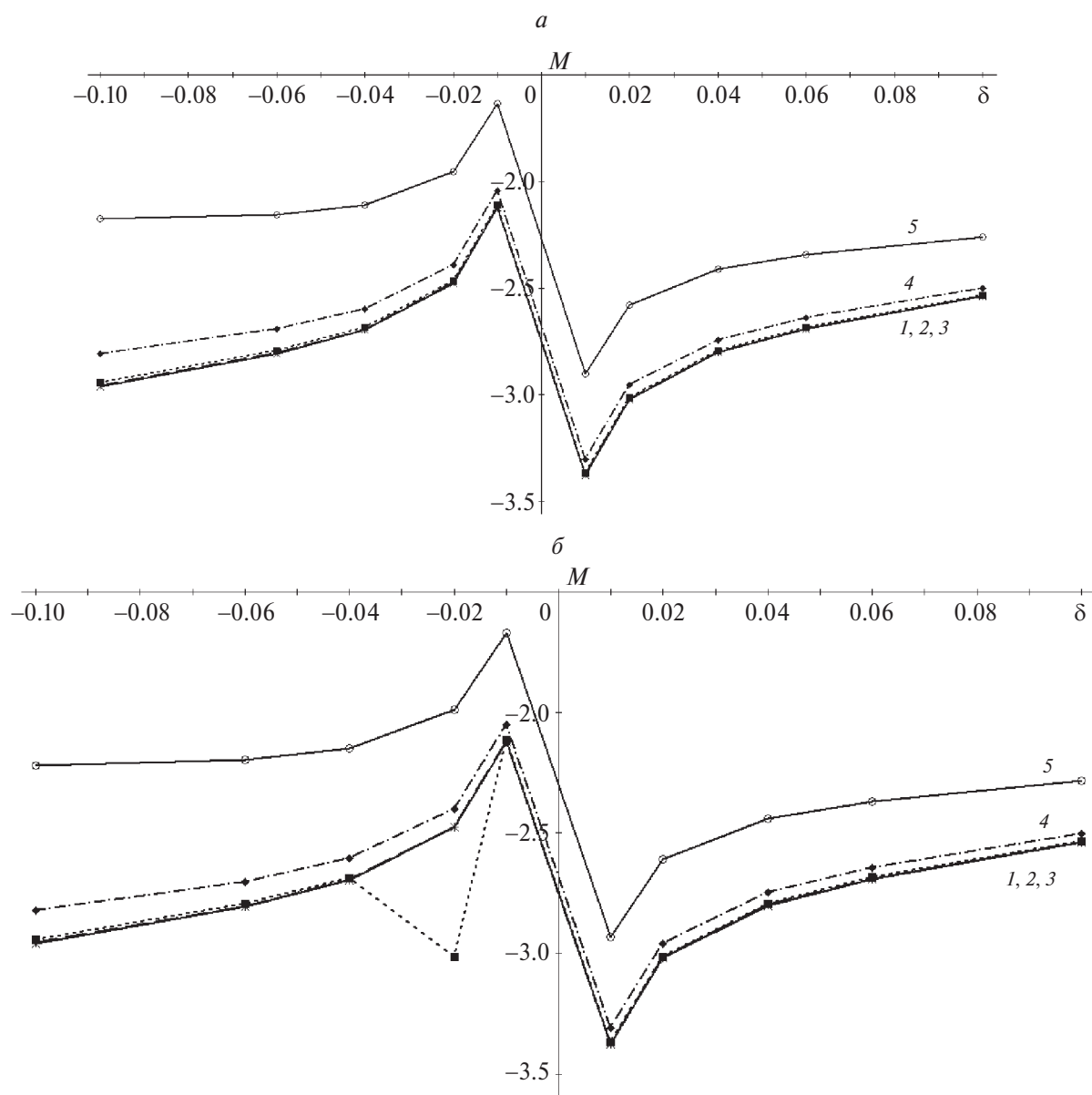


Рис. 5. Зависимости продольной компоненты M тензора эластопроедимости зигзагообразных 17-ZGeNRs (а) и 18-ZGeNRs (б) от величины относительной деформации δ при различной концентрации дефектов N_d : 1 (1), 10 (2), 100 (3), 1000 (4), 10000 (5).

В целом увеличение ширины GeNR приводит к уменьшению величины запрещенной зоны $E_g \sim 1/H$, где H — ширина ленты. Это, в свою очередь, увеличивает удельную проводимость кристаллита и, соответственно, численное значение коэффициента M (рис. 4). С ростом ширины ленты диапазоны изменения продольной компоненты эластопроедимости полупроводниковых нанолент становятся примерно одинаковыми: $\Delta M \approx 1.0\text{--}1.5$ для большинства концентраций примесей.

Величина продольной компоненты тензора эластопроедимости M проводящих зигзагообразных нанолент 17-ZGeNR и 18-ZGeNR лежит в от-

рицательной области для всех концентраций акцепторных дефектов (рис. 5). Все расчетные кривые для проводящих зигзагообразных нанолент с разными концентрациями дефектов показывают немонотонное увеличение M с ростом деформации δ как в области сжатия, так и в области растяжения. Поведение кривых зависимости $M(\delta)$ аналогично случаю проводящей кресельной наноленты 17-AGeNR для малых концентраций дефектов, описанному выше. Для проводящих зигзагообразных нанолент примесный вклад в ΔM составляет 0.5, а деформационный увеличивается до $\Delta M \approx 2.5$.

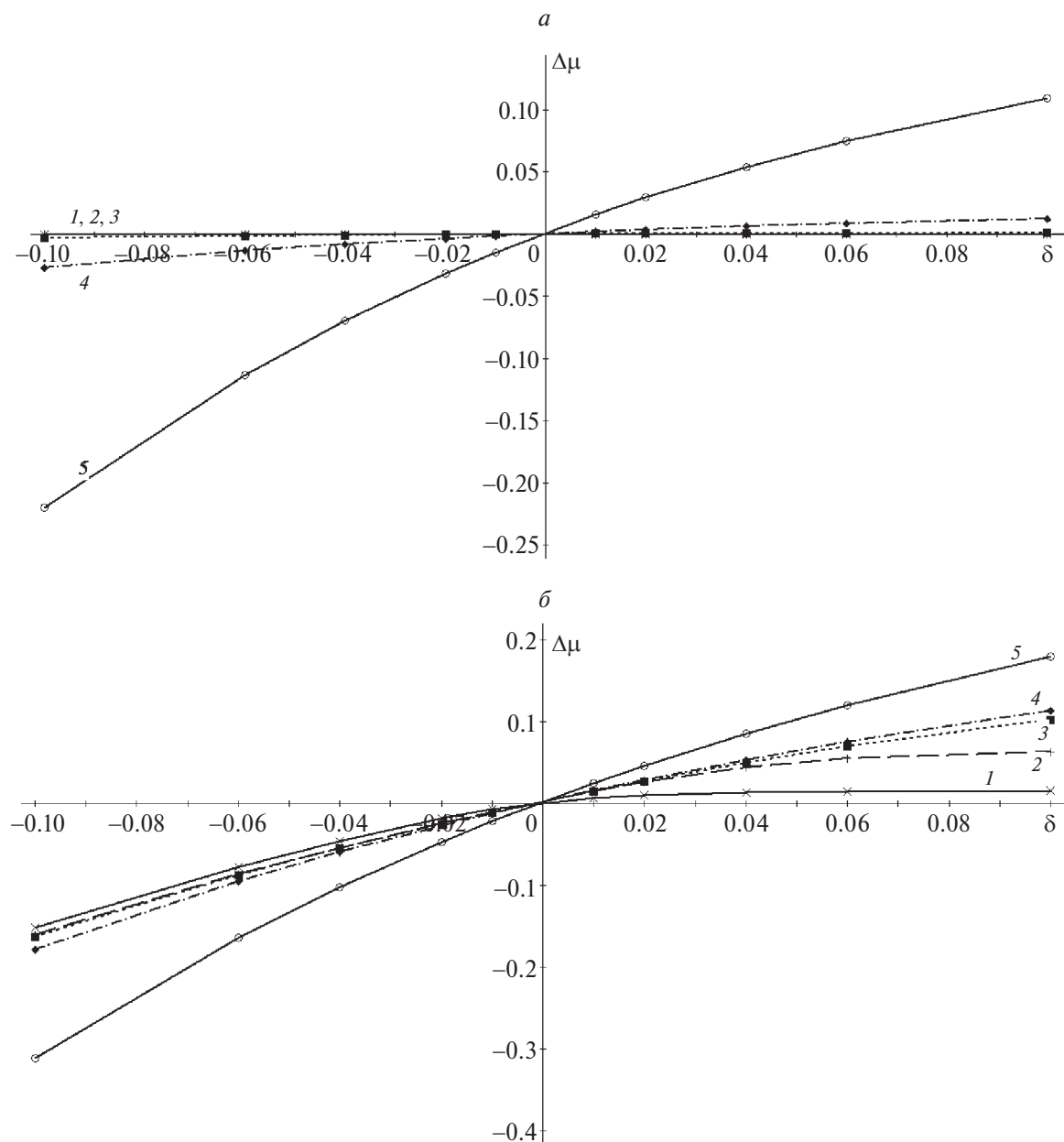


Рис. 6. Изменения химического потенциала $\Delta\mu$ проводящей 17-AGeNRs (a) и полупроводниковой 18-AGeNRs (б) от величины относительной деформации δ при различной концентрации дефектов N_d : 1 (1), 10 (2), 100 (3), 1000 (4), 10000 (5).

Деформация структуры GeNRs индуцирует так называемый пиннинг (pinning) химического потенциала кристаллита, который находится, как указывалось выше, из решения самосогласованной задачи нормировки функции распределения электронов на их полное число. Этот эффект отражает изменения в электронном спектре германиевых нанолент, обусловленные деформациями структуры и описанные выше.

На рис. 6 показаны зависимости изменения химического потенциала $\Delta\mu$ проводящей

17-AGeNR и полупроводниковой 18-AGeNR от величины относительной деформации δ для различных концентраций акцепторных дефектов. В целом поведение всех кривых качественно идентично. Величина $\Delta\mu$ монотонно возрастает с ростом δ на всем диапазоне ее изменения. В случае проводящей 17-AGeNR при малых концентрациях акцепторных примесей $N_d = 1, 10, 100$ кривые зависимости $\Delta\mu(\delta)$ слабо отличаются друг от друга и от нуля в выбранном масштабе рис. 6. Рост концентрации примесей приводит к росту

угла наклона кривых над осью δ . В случае полупроводниковой 18-AGeNR зависимость угла наклона кривых от концентрации акцепторных дефектов оказывается более выраженной, чем для проводящих нанолент.

Сравнение пьезорезистивных свойств p -проводящих GeNRs (рис. 3) со свойствами n -проводящих лент [18] показало их качественное и количественное отличие при малых концентрациях акцепторных и донорных примесей. Функции $M(\delta)$ у GeNRs n -типа для случая $N_d = 1$ и 10 попадают в область положительных значений. В то время как у GeNRs p -типа величины M имеют отрицательное значение во всем диапазоне концентрации примесей. При значениях $N_d > 10$ зависимости $M(\delta)$ качественно и количественно подобны.

В случае p -полупроводниковых GeNR продольная компонента M в основном положительна (рис. 4, 5). Характер ее монотонного роста с увеличением величины δ зависит от концентрации акцепторных дефектов. Функция $M(\delta)$ полупроводниковой GeNR n -типа показывает в целом уменьшение во всем диапазоне величины δ [18]. Увеличение концентрации носителей заряда, в свою очередь, ведет к росту величины M , поскольку возрастает удельная проводимость кристаллита.

Конечно, нельзя обойти стороной вопрос о сравнении пьезорезистивных свойств германеновых и графеновых нанолент в рамках одной теоретической модели. Поведение зависимости $M(\delta)$ для проводящих и полупроводниковых графеновых нанолент p -типа [25, 32] качественно совпадает с поведением $M(\delta)$ в случае германеновых лент. Отличие заключается в численных значениях продольной компоненты M . Для графеновых NRs при одних и тех же концентрациях акцепторных примесей и деформациях величина M оказывается больше, а диапазон ее изменения при варьировании δ — уже, чем у GeNRs. Это означает, что чувствительность удельной проводимости к деформациям структуры у графеновых нанолент выше, чем у германеновых. А относительное изменение проводимости более устойчиво к деформациям у графена.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках реализованного модельного подхода рассчитана основная пьезорезистивная характеристика германена — продольная компонента

тензора эластопроводимости M , а также исследована тенденция его изменения с ростом/уменьшением деформации и концентрации акцепторных и донорных дефектов.

Поведение M при вариации этих параметров оказалось качественно согласованным с пьезорезистивными свойствами наноматериалов семейства графена [24], количественные же особенности определили высокую чувствительность электропроводности германена к внешним нагрузкам и концентрации примесей. Такой сравнительный анализ позволит выбрать наноматериал с заданной пьезорезистивностью и возможностью управления ею, наиболее подходящий в качестве структурного элемента приборов, работа которых основана на преобразовании электромеханической энергии.

Изменение химического потенциала с помощью деформации растяжения (сжатия) и изменения концентрации примесей, рассчитанное в данной работе, в дальнейшем может способствовать практическому применению германена для создания градиентов концентрации основных носителей заряда, термопар, стрейн-транзисторов и других приборов на основе материала с переменным уровнем Ферми.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 22-22-20048 (<https://rscf.ru/project/22-22-20048/>) и за счет средств бюджета Волгоградской области.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Антонова И.В. // УФН. 2022. Т. 192. Вып. 6. С. 3. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2021.05.038984>
2. Морозов С.В., Новоселов К.С., Гейм А.К. // Там же. 2008. Т. 178. № 7. С. 776. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0178.200807i.0776>
3. Лозовик Ю.Е., Меркулова С.П., Соколик А.А. // УФН. 2008. Т. 178. № 7. С. 758. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0178.200807h.0757>
4. Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Артюх А.А. // Успехи химии. 2014. Т. 83. Вып. 3. С. 251. <https://doi.org/10.1070/RC2014v083n03ABEH004367>
5. Lemme M.C. // Solid State Phenomena. 2009. V. 156. P. 499. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.156-158.499>
6. Lebe'gue S., Bjoerkman T., Klintonberg M. et al. // Phys. Rev. X. 2013. V. 3. 031002. <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.3.031002>

7. *Acun A., Zhang L., Bampoulis P., et al.* // J. Phys.: Condensed Matter. 2015. V. 27. № 44. P. 443002. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/44/443002>
8. *Behzad S.* // J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 2018. V. 229. P. 13. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2018.09.003>
9. *Ould M.L., Hachimi A.G., Boujnah M., Benyoussef A., Kenz A.* // Optik. 2018. V. 158. P. 693. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.12.089>
10. *Kaloni T.P., Schwingenschlögl U.* // Chemical Physics Letters. 2013. V. 583. P. 137. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2013.08.001>
11. *Mortazavi B., Rahaman O., Makaremi M. et al.* // Physica E. 2017. V. 87. P. 228. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2016.10.047>
12. *Kazemlou V., Phirouznia A.* // Superlattices and Microstructures. 2019. V. 128. P. 23. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.01.003>
13. *Возняковский А.А., Возняковский А.П., Кидалов С.В., Заваринский В.И.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 6. С. 14. <https://doi.org/10.31857/S0207401X21060169>
14. *Нескоромная Е.А., Бабкин А.В., Захарченко Е.А. и др.* // Хим. физика. 2023. Т. 42. № 7. С. 41. <https://doi.org/10.31857/S0207401X23070130>
15. *Рыбкин А.Г., Тарасов А.В., Гогина А.А., Ерыженков А.В., Рыбкина А.А.* // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 117. Вып. 8. С. 626. <https://doi.org/10.31857/S1234567823080116>
16. *Галашев А.Е.* // Хим. физика. 2023. Т. 42. № 2. С. 143. <https://doi.org/10.31857/S0207401X2302005X>
17. *Лебедева О.С., Лебедев Н.Г., Ляпкосова И.А.* // Научно-технич. ведомости СПбГПУ. Физ.-мат. науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 38. <https://doi.org/10.18721/JPM.12404>
18. *Лебедева О.С., Лебедев Н.Г., Ляпкосова И.А.* // Научно-технич. ведомости СПбГПУ. Физ.-мат. науки. 2021. Т. 14. № 1. С. 8. <https://doi.org/10.18721/JPM.14101>
19. *Physics of graphene* / Eds. Aoki H., Dresselhaus M.S. Cham: Springer, 2014. (NanoScience and Technology). 2014.
20. *Бир Г.Л., Пикус Г.Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972.
21. *Лебедева О.С., Лебедев Н.Г.* // Научно-технич. ведомости СПбГПУ. Физ.-мат. науки. 2014. № 1. С. 26.
22. *Лебедева О.С., Лебедев Н.Г.* // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2014. № 2. С. 149.
23. *Лебедева О.С., Лебедев Н.Г.* // Хим. физика. 2014. Т. 33. № 10. С. 73. <https://doi.org/10.7868/S0207401X14100070>
24. *Лебедева О.С., Лебедев Н.Г., Ляпкосова И.А.* // Мат. физика и компьют. моделирование. 2018. Т. 21. № 1. С. 53.
25. *Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkoso I.A.* // J. of Phys: Condensed Matter. 2020. V. 32. №. 14. P. 145301. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab5f45>
26. *Лебедева О.С., Лебедев Н.Г., Ляпкосова И.А.* // ЖФХ. 2020. Т. 94. № 8. С. 1232. <https://doi.org/10.31857/S004445372008018X>
27. *Меринков В.Б., Домнин В.А.* // Хим. физика. 2023. Т. 42. № 2. С. 182. <https://doi.org/10.31857/S0207401X23020127>
28. *Изюмов Ю.А., Чащин Н.И., Алексеев Д.С.* Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала. М.: НИЦ РХД, 2006.
29. *Пак А.В., Лебедев Н.Г.* // ЖФХ. 2013. Т. 87. № 6. С. 994. <https://doi.org/10.1134/S0036024413060204>
30. *Степанов Н.Ф.* Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001.
31. *Квасников И.А.* Термодинамика и статистическая физика. В 4-х томах. Т. 4. Квантовая статистика. М.: Комкнига, 2005.
32. *Аланкина А.В., Лебедева О.С., Лебедев Н.Г.* // Материаловедение, формообразующие технологии и оборудование 2023 (ICMSSTE 2023). Матер. междунар. научно-практич. конф. Симферополь: Издат. дом КФУ, 2023. С. 209.

ELASTIC CONDUCTIVITY OF GERMANENE NANORIBBONS WITH ACCEPTOR DEFECTS

O. S. Lebedeva^{1*}, N. G. Lebedev¹, A. S. Chibrikov¹, E. N. Shamina²

¹ Volgograd State University, Volgograd, Russia

² Volgograd State Medical University, Volgograd, Russia

*E-mail: lebedeva_os@volsu.ru

This work is devoted to the theoretical researchers of the germanene nanoribbons piezoresistivity of various structural modifications (arm-chair and zig-zag) with the acceptor structural defects. Gallium atoms were chosen as impurities. A phenomenological expression for the band structure of nanoribbons deformed by tension and compression is proposed. The dependences of the longitudinal component of the elastic conductivity tensor on the relative deformation of tension and compression, the concentration of impurities and the width of the nanoribbon are analyzed.

Keywords: band structure, stress-strain state, piezoresistance effect, elastic conductivity tensor.

REFERENCES

1. Antonova I.V. // Phys. Usp. 2022. V. 192. № 6. P. 609. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2021.05.038984>
2. Morozov S.V., Novoselov K.S., Geim A.K. // Phys. Usp. 2008. V. 51. P. 744. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0178.200807i.0776>
3. Lozovik Yu.E., Merkulova S.P., Sokolik A.A. // Phys. Usp. V. 51. P. 727. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0178.200807h.0757>
4. Chernozatonskii L.A., Sorokin P.B., Artukh A.A. // Russ. Chem. Rev. 2014. V. 83. P. 251. <https://doi.org/10.1070/RC2014v083n03ABEH004367>
5. Lemme M.C. // Solid State Phenomena. 2009. V. 156. P. 499. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.156-158.499>
6. Lebe'gue S., Bjoerkman T., Klintonberg M. et al. // Phys. Rev. X. 2013. V. 3. 031002. <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.3.031002>
7. Acun A., Zhang L., Bampoulis P., et al. // J. Phys.: Condensed Matter. 2015. V. 27. № 443002. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/44/443002>
8. Behzad S. // J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2018. V. 229. P. 13. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2018.09.003>
9. Ould M.L., Hachimi A.G., Boujnah M., Benyoussef A., Kenz A. // Optik. 2018. V. 158. P. 693. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.12.089>
10. Kaloni T.P., Schwingenschlöggl U. // Chem. Phys. Lett. 2013. V. 583. P. 137. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2013.08.001>
11. Mortazavi B., Rahaman O., Makaremi M., et al. // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2017. V. 87. P. 228. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2016.10.047>
12. Kazemlou V., Phirouznia A. // Superlattices Microstruct. 2019. V. 128. P. 23. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.01.003>
13. Voznyakovsky A.A., Wozniakovsky A.P., Kidalov S.V., Zavarinsky V.I. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2021. V. 15. № 3. P. 377. <https://doi.org/10.31857/S0207401X21060169>
14. Neskoronnaya E.A., Babkin A.V., Zakharchenko E.A., Morozov Yu.G., Kabachkov E.N., Shulga Yu.M. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2023. V. 17. № 4. P. 818. <https://doi.org/10.31857/S0207401X23070130>
15. Rybkin A.G., Tarasov A.V., Gogina A.A., Eryzhenkov A.V., Rybkina A.A. // JETP Lett. 2023. V. 117. Is. 8. P. 626. <https://doi.org/10.31857/S1234567823080116>
16. Galashev A.E. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2023. V. 17. № 1. P. 113. <https://doi.org/10.31857/S0207401X2302005X>
17. Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A. // St. Petersburg State Polytechnical University J. Physics and Mathematics. 2019. V. 12. P. 38. <https://doi.org/10.18721/JPM.12404>
18. Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A. // Scientific and technical bulletin of SPbSPU. Physical and mathematical sciences. 2021. V. 14. P. 8. <https://doi.org/10.18721/JPM.14101>
19. Physics of graphene / Eds. Aoki H., Dresselhaus M.S. Cham: Springer, 2014. (NanoScience and Technology).
20. Bir G.L., Pikus G.E. Symmetry and strain-induced effects in semiconductors. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1974.
21. Lebedeva O.S., Lebedev N.G. // St. Petersburg State Polytechnical University J. Physics and Mathematics. 2014. V. 1. P. 26.
22. Lebedeva O.S., Lebedev N.G. // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. 2014. V. 2. P. 149.
23. Lebedeva O.S., Lebedev N.G. // Russian Journal of Physical Chemistry B: Focus on Physics. 2014. V. 8. № 5. P. 745. <https://doi.org/10.7868/S0207401X14100070>

24. *Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A.* // Mathematical Physics and Computer Simulation. 2018. V. 21. P. 53.
25. *Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A.* // J. Phys.: Condensed Matter. 2020. V. 32. 145301. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab5f45>
26. *Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A.* // Russ. J. Phys. Chem. A. 2020. V. 94. P. 1232. <https://doi.org/10.31857/S004445372008018X>
27. *Merinov V.B., Domnin V.A.* // Russ. J. Phys. Chem. B. 2023. V. 17. № 1. P. 215. <https://doi.org/10.31857/S0207401X23020127>
28. *Izyumov Ju.A., Chashhin N.I., Alekseev D.S.* Correlated Systems. Method of Generating Functional [in Russian]. Moscow: Regul'yarnaya i Khaoticheskaya Dinamika, 2006.
29. *Pak A.V., Lebedev N.G.* // Russ. J. Phys. Chem. A. 2013. V. 87. № 6. P. 979. <https://doi.org/10.1134/S0036024413060204>
30. *Stepanov N.F.* Quantum mechanics and quantum chemistry [in Russian]. Moscow: Mir, Moscow State University Publishing, 2001.
31. *Kvasnikov I.A.* Thermodynamics and statistical physics, in 4 vols., V. 4: Quantum Statistics [in Russian]. Moscow: KomKniga Publ., 2005.
32. *Alankina A.V., Lebedeva O.S., Lebedev N.G.* // Materials Science, Shaping Technologies and Equipment 2023 (ICMSSTE 2023). Materials of the international scientific and practical conference. Simferopol, 2023. P. 209.