

DOI: 10.18721/JPM.12404

УДК 538.915+975; 544.22.022.343; 544.225.22+25

## **ЭЛАСТОПРОВОДИМОСТЬ СИЛИЦЕНОВЫХ И ГЕРМАНЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ**

**О.С. Лебедева<sup>1,2</sup>, Н.Г. Лебедев<sup>1</sup>, И.А. Ляпкосова<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Волгоградский государственный университет, г. Волгоград, Российская Федерация;

<sup>2</sup> Волгоградский государственный аграрный университет,  
г. Волгоград, Российская Федерация

Представлены результаты теоретического исследования пьезорезистивных свойств идеальных силиценовых и германеновых нанолент с разным типом проводимости. В рамках модели Хаббарда проведено моделирование зонной структуры исследуемых наночастиц и аналитический расчет продольной компоненты тензора эластопроводимости, а также исследованы его зависимости от величины относительной деформации продольного сжатия (растяжения) и ширины наноленты.

**Ключевые слова:** двумерная структура, силицен, германен, напряженно-деформированное состояние, пьезорезистивный эффект

**Ссылка при цитировании:** Лебедева О.С., Лебедев Н.Г., Ляпкосова И.А. Эластопроводимость силиценовых и германеновых нанолент // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 38–49. DOI: 10.18721/JPM.12404

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## **ELASTIC CONDUCTIVITY OF SILICENE AND GERMANENE NANORIBBONS**

**O.S. Lebedeva<sup>1,2</sup>, N.G. Lebedev<sup>1</sup>, I.A. Lyapkosova<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Volgograd State University, Volgograd, Russian Federation;

<sup>2</sup> Volgograd State Agricultural University, Volgograd, Russian Federation

The theoretical research results for piezoresistive properties of ideal silicene and germanene nanoribbons with different conductivity types have been presented. Within the framework of the Hubbard model, the band structure of the nanoparticles under investigation was simulated and a longitudinal component of their elastoconductivity tensor was analytically calculated. For this tensor, the dependences on the relative strain of longitudinal compression/tension as well on the nanoribbon width were studied.

**Keywords:** 2D structure, silicene, germanene, stress-strain state, piezoresistive effect, elastoconductivity tensor

**Citation:** Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A., Elastic conductivity of silicene and germanene nanoribbons, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (4) (2019) 38–49. DOI: 10.18721/JPM.12404

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Синтезированные в 2004 году новые наноструктуры на основе углерода, такие как графен и графеновые наноленты, зарекомендовали себя как материалы, обладающие уникальным набором физико-химических свойств, которые можно использовать в широком круге прикладных задач [1 – 4]. Электронные характеристики графена различаются и зависят от природы и концентрации дефектов структуры, атомов и атомных групп, адсорбированных на его поверхность. В настоящее время графен является одним из основных кандидатов на элементы наноэлектроники будущего, взамен кремния. Основное препятствие для широкого использования графена в электронике связано с его зонной структурой – для него характерна малая запрещенная зона; на ее расширение направлены главные усилия исследователей.

В 1994 году предсказан теоретически, а в 2010 году впервые синтезирован родственный графену материал – силицен, представляющий собой двумерный слой из атомов кремния, составляющих две подрешетки, которые смещены относительно друг друга [5]. Шириной запрещенной зоны можно управлять с помощью электрического поля, что открывает возможность создания эффективного спинового поляризатора на его основе. Этот материал привлекает большое внимание в связи с перспективами практического применения в кремниевой электронике и спинтронике.

В 2014 году синтезирован еще один материал, родственный графену, – германен, который, подобно силицену, имеет две атомные подрешетки, смещенные относительно друг друга. Малая запрещенная щель германена поддается управлению электрическим полем, адсорбцией различных атомов, деформацией и взаимодействием с подложкой [6, 7]. Германен обладает большими потенциальными возможностями применения в солнечных элементах [8]. Рассчитанный параметр Грюнайзена нового материала показывает зависимость от деформации, аналогичную таковой для силицена [9].

В работе [10] методом теории функционала плотности проведено сравнительное исследование механических свойств однослойных силицена, германена и стана. Показано, что применение одноосной нагрузки на каждый материал может

изменить электронную природу изогнутой структуры полупроводника на металлический характер.

В статье [11] исследованы оптические свойства силицена и германена при одноосной деформации сжатия в рамках теории функционала плотности. Результаты показывают, что отклик оптического поля сильно зависит от величины приложенной нагрузки. При деформации сжатия в силицене и германене ширина энергетической щели в точках Дирака снижается и в конечном итоге достигает нуля. В обеих структурах поглощение света вдоль зигзагообразного направления больше, чем в направлении кресла.

В последние десятилетия сформировалось новое научное направление физики конденсированного состояния – стрейнтроника. Она использует физические явления в веществе, обусловленные деформациями, возникающими в микро-, нано- и гетероструктурах под действием внешних управляющих полей, приводящих к изменению электронного строения этого вещества, и, как следствие, к модификации его электрических, магнитных, оптических и других свойств [12]. Подобные эффекты позволяют реализовать новое поколение устройств информационных и сенсорных технологий. Например, в работе [13] анонсирована разработка транзистора на базе графена, который претерпевает деформационное изменение баллистической проводимости (эффект пьезопроводимости). Подобные транзисторы могут быть разработаны также на базе германена и силицена, деформационные эффекты в которых находятся на стадии изучения.

В данной работе представлены результаты теоретического исследования пьезорезистивных свойств идеальных силиценовых (Si) и германеновых (Ge) нанолент (NR) – SiNR и GeNR.

### Модель электронного строения деформированных графеновых нанолент

В качестве геометрической модели наноленты выбирался двумерный гексагональный графеновый слой. Фрагмент такой кристаллической структуры изображен на рис. 1, на котором обозначены хиральный вектор

$$C_h = na_1 + ma_2,$$

угол  $\alpha$  между векторами основных трансляций  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$ , а также векторы межатомных расстояний  $\Delta_i$ .

Система координат выбрана таким образом, что вдоль оси  $OX$  с помощью хирального вектора  $\mathbf{C}_h$  отмеряется ширина ленты, а ось  $OY$  направлена вдоль длины ленты. Угол  $\theta$  между векторами  $\mathbf{C}_h$  и  $\mathbf{a}_1$  отсчитывается от вектора трансляции  $\mathbf{a}_1$ , лежит в диапазоне от 0 до  $30^\circ$  и называется хиральным углом [4].

Математическая модель электронного строения недеформированных нанолент строится на основе их геометрического строения и зонной структуры гексагонального слоя. Общий вид зонной структуры нанолент в рамках метода сильной связи в приближениях Хюккеля и ближайших соседей можно представить в следующем виде [4]:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & \pm\gamma_0 \left\{ 3 + 2\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + \right. \\ & \left. + 2\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2) + 2\cos(\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)) \right\}^{1/2} = \\ = & \pm\gamma_0 \left\{ 1 + 4\cos\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2}\right) \times \right. \\ & \times \cos\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) + \\ & \left. + 4\cos^2\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) \right\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\gamma_0$  – прыжковый интеграл, матричный элемент перехода электрона между соседними атомами;  $\mathbf{k}$  – волновой вектор, одна из компонент которого квантуется вдоль ширины ленты.

Уровень Ферми в законе дисперсии (1) принят за 0 эВ.

Условие квантования волнового вектора  $\mathbf{k}$  вдоль направления хирального вектора  $\mathbf{C}_h$  можно записать следующим образом [4]:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{C}_h = 2\pi q, \quad q = 1, 2, \dots \quad (2)$$

Компоненты волнового вектора  $k_x$  и  $k_y$  целесообразно выбрать так, чтобы они были сонаправлены с хиральным вектором  $\mathbf{C}_h$  и длиной наноленты соответственно, т. е.

$$\mathbf{k}_x \uparrow \uparrow \mathbf{C}_h, \quad \mathbf{k}_y \perp \mathbf{C}_h.$$

Модуль хирального вектора недеформированных нанолент можно представить, в соответствии с его определением, в следующем известном виде [1]:

$$\begin{aligned} |\mathbf{C}_{h0}| = & \sqrt{n \cdot \mathbf{a}_1^2 + m \cdot \mathbf{a}_2^2 + 2nm\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2} = \\ = & a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}. \end{aligned} \quad (3)$$

С помощью представления (3) и условий (2) можно получить явное выражение для квантования поперечной компоненты волнового вектора:

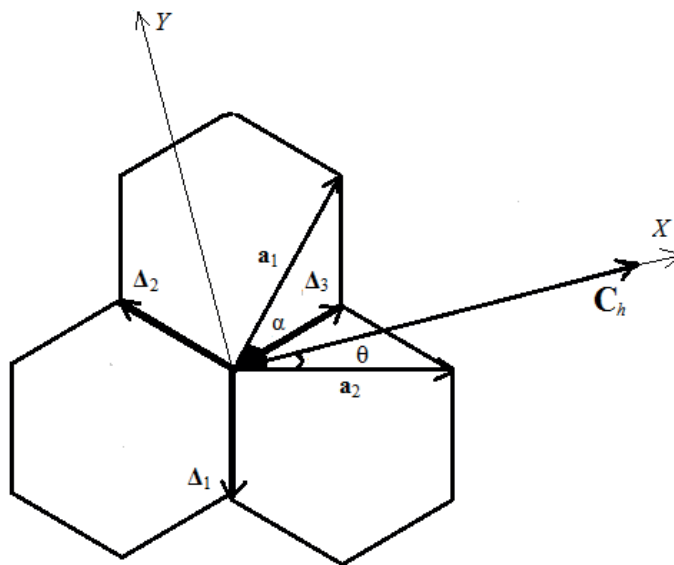


Рис. 1. Фрагмент структуры наноленты с выбранной системой координат:  $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$  – векторы расстояний между ближайшими соседями;  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  – векторы трансляций;  $\alpha$  – угол между векторами трансляций;  $\theta$  – хиральный угол;  $\mathbf{C}_h$  – хиральный вектор

$$k_x a = \frac{2\pi q}{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}, \quad (4)$$

$$q = 1, 2, \dots, \left[ \sqrt{n^2 + m^2 + nm} \right].$$

Аргументы тригонометрических функций в выражении для зонной структуры (1), исходя из геометрических преобразований, соответствующих рис. 1, можно записать в следующем виде:

$$\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2} = \left( \frac{1}{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \times \right. \\ \left. \times \left( \frac{3\pi q(n+m)}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} + \frac{\sqrt{3}k_y a(n-m)}{4} \right) \right), \quad (5)$$

$$\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2} = \left( \frac{1}{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \times \right. \\ \left. \times \left( \frac{\pi q(n-m)}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} - \frac{\sqrt{3}k_y a(n+m)}{4} \right) \right).$$

В результате выражение (1) и соотношения (5) полностью определяют энергетический спектр электронов недеформированных нанолент. Согласно теории электронного строения графеновых нанолент [4], набор дисперсионных кривых электронного спектра, нумеруемых целым числом  $q$ ,

образуется путем пересечения двумерной энергетической поверхности графена параллельными плоскостями, соответствующими непрерывной компоненте волнового вектора. Положение указанных плоскостей относительно зоны Бриллюэна задается значением дискретной  $k_x$ -компоненты волнового вектора (согласно условию квантования (2)).

Деформированное состояние кристаллита в общем случае характеризуется тензором дисторсии

$$u_{\mu\eta} = \partial_\eta (\mathbf{r}' - \mathbf{r})_\mu, \quad (\mu, \eta = x, y, z),$$

где  $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$  – радиус-векторы начального и конечного положения некоторой точки кристаллита [14].

Диагональные элементы тензора характеризуют относительное удлинение образца вдоль соответствующего направления, недиагональные элементы задают угол поворота линейного элемента при деформации.

В соответствии с определением тензора дисторсии, вывод энергетического спектра деформированных нанолент основывается на модификации скалярных произведений, стоящих в аргументах тригонометрических функций в выражении (1) для электронного спектра. Изменение элементарной ячейки наноленты под действием нагрузки растяжения показано на рис. 2. Здесь демонстрируются модельные представления о том, что

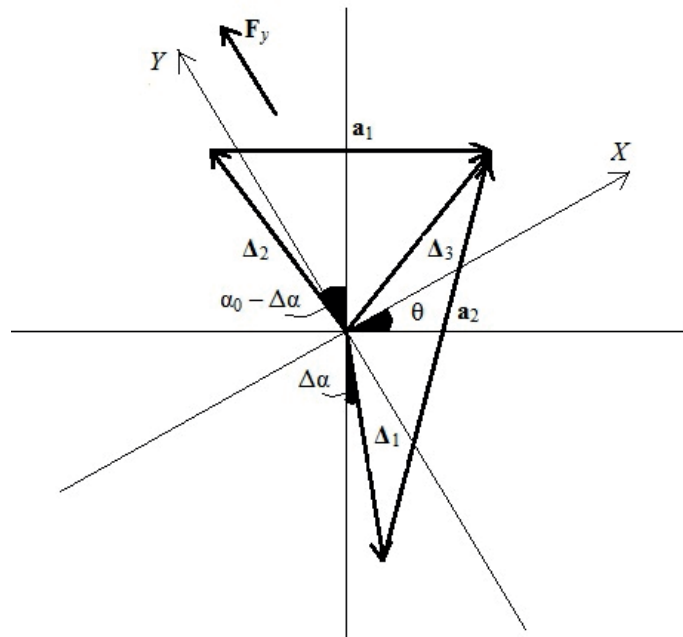


Рис. 2. Положения межатомных векторов  $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$  после деформации растяжения (сжатия) с учетом их поворота на угол  $\Delta\alpha$ ;  $F_y$  – растягивающая (сжимающая) сила. Остальные обозначения указаны в подписи к рис. 1

вследствие деформации происходит изменение не только длин межатомных связей  $\Delta_i$  ( $\Delta_i = R_0(1 + \delta)$ ) на величину их относительного удлинения  $\delta$  ( $\delta = \Delta R/R_0$ ), но и угла  $\alpha$  между векторами трансляций ( $\alpha = \alpha_0 + \Delta\alpha$ , где  $\alpha_0 = \pi/3$  – угол между векторами трансляций в недеформированной решетке,  $\Delta\alpha$  – величина изменения угла вследствие деформации), а следовательно, проекций векторов трансляций  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$  на оси  $OX$  и  $OY$  выбранной системы координат.

Выражение для зонной структуры деформированных нанолент можно получить, исходя из геометрических преобразований (см. рис. 2). В результате электронный спектр таких нанолент в рамках метода сильной связи примет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & \pm \gamma (1 + 4 \cos[\pi n A_1 + B_1]) \times \\ & \times \cos[\pi n A_2 - B_2] + \\ & + 4 \cos^2[\pi n A_2 - B_2]^{1/2}, \end{aligned} \quad (6)$$

где введены следующие обозначения для общего случая:

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{F \cos \alpha + G \sin \alpha}{A \cos \alpha + B \sin \alpha}, \\ B_1 &= k_y R_0 (1 + \delta) (-G \cos \alpha + F \sin \alpha), \\ A_2 &= \frac{-E \cos \alpha}{A \cos \alpha + B \sin \alpha}, \\ B_2 &= k_y R_0 (1 + \delta) E \sin \alpha, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} A &= n \sin \theta \cos(2\alpha_0) + m \cos \theta \cos(\alpha_0/2), \\ B &= \sin \theta [n \sin(2\alpha_0) + m \cos(\alpha_0/2)], \\ E &= \sin \theta \sin(\alpha_0/2) + \cos \theta \cos(\alpha_0/2), \\ F &= \sin \theta \cos(2\alpha_0) + \cos \theta \cos(\alpha_0/2), \\ G &= \sin \theta [\sin(2\alpha_0) + \cos(\alpha_0/2)]. \end{aligned}$$

Изменение поперечных размеров (ширины) наноленты в результате деформации учитывается путем модификации модуля хирального вектора  $C_h$ , который, в соответствии с определением коэффициента Пуассона и прямой пропорциональности основных геометрических размеров нанотрубок параметрам решетки, можно считать по следующей формуле:

$$C_h = (1 - \nu \cdot \delta) C_{h0}, \quad (8)$$

где  $\nu$  – коэффициент Пуассона, значение которого варьируется в пределах  $\nu = 0,19 - 0,27$ .

Соотношение (8) и выбранная геометрическая модель деформированных нанолент позволяют определить угол  $\alpha$  между векторами трансляций в деформированной гексагональной решетке, входящий в выражения для коэффициентов (7) спектра нанолент (6):

$$\sin \alpha = \frac{BC + A\sqrt{B^2 - C^2 + A^2}}{A^2 + B^2}, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} C = \frac{1 - \nu \delta}{1 + \delta} \left[ \sin \theta (n \cos \alpha_0 + m \cos^2(\alpha_0/2)) + \right. \\ \left. + \frac{m}{2} \cos \theta \sin \alpha_0 \right], \end{aligned}$$

а коэффициенты  $A$  и  $B$  выражаются формулой (8).

Методика вычисления зависимости прыжкового интеграла  $\gamma$  от относительной деформации  $\delta$  на примере углеродных нанотрубок подробно описана в работах [15 – 18].

Для теоретических расчетов в настоящей работе использованы следующие значения относительной деформации растяжения (сжатия):

$$\delta = \pm 0,035; \pm 0,069; \pm 0,104; +0,250.$$

Нахождение зонной структуры идеальных наночастиц с учетом эффектов рассеяния, например кулоновского взаимодействия электронов на одном узле, сводится к нахождению полюсов функций Грина [19] в рамках модели Хаббарда [20], что описано в работе [17] для случая ахиральных углеродных нанотрубок.

Тогда электронный спектр деформированной наноленты можно представить в виде

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\varepsilon(\mathbf{k}) + U \pm \\ \pm (\varepsilon(\mathbf{k})^2 - 2\varepsilon(\mathbf{k})U(1 - 2n_{-B}) + U^2)^{1/2}], \end{aligned} \quad (10)$$

где  $\varepsilon(\mathbf{k})$  – зонная структура деформированных идеальных нанолент, выраженная формулой (6);  $U$  – энергия кулоновского взаимодействия электронов на одном узле, которую можно оценить, например, с

помощью квантово-химического полуэмпирического метода MNDO [21];  $n_{-\beta}$  – число уже имеющихся в зоне электронов с противоположным спином.

Принципиальных качественных различий полученных зонных структур полупроводниковых нанолент SiNR и GeNR кресельного типа, по сравнению с энергетическим спектром недеформированных нанолент, не наблюдается. Количественный анализ показывает сужение зоны проводимости, валентной и запрещенной зон, приводящее к увеличению плотности электронных состояний в случае сжатия и, наоборот, уширение указанных зон (уменьшение плотности состояний) при деформации растяжения. Подобный результат наблюдался и в случае деформации ахиральных (кресельных и зигзагообразных), а также ахиральных углеродных нанотрубок, изученных в работах [15 – 18].

В случае проводящих кресельных и зигзагообразных нанолент SiNR и GeNR продольное растяжение (сжатие) также изменяет их зонную структуру вышеописанным способом и принципиально не отличается от кресельных нанолент. Но следует отметить одно исключение: энергетическая щель в таких нанолентах отсутствует и при малых деформациях не открывается. Открытие щели путем деформации структуры наблюдается в смешанных нанолентах, так же как в случае хиральных углеродных нанотрубок [23], в которых становятся возможными переходы моттовского типа проводник  $\rightarrow$  полупроводник и полупроводник  $\rightarrow$  проводник, обусловленные осевыми деформациями растяжения (сжатия).

#### Эластопроводимость нанолент

Расчет пьезорезистивных констант, в частности продольной компоненты тензора эластопроводимости нанолент, осуществлялся по методике, подробно описанной в работах [15 – 17]. В соответствии с определением тензора эластопроводимости [22], его продольную компоненту для квазиодномерных структур можно выразить следующей формулой:

$$M = \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} \frac{1}{\delta}, \quad (11)$$

где  $M$  – продольная компонента тензора эластопроводимости 4-го ранга ( $M = m_{zzzz}$ );  $\sigma_0$  – продольная компонента тензора 2-го

ранга удельной проводимости  $\sigma_{zz}$  недеформированного кристалла;  $\Delta\sigma$  – изменение продольной компоненты тензора удельной проводимости вследствие деформации кристаллита ( $\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0$ ,  $\sigma$  – продольная компонента тензора 2-го ранга удельной проводимости  $\sigma_{zz}$  деформированного кристалла).

Продольная компонента тензора удельной бесфононной проводимости нанолент вычислялась в рамках теории Кубо – Гринвуда [19] с помощью метода функций Грина, с использованием модельного гамильтониана Хаббарда [20]. Окончательное выражение для продольной удельной проводимости нанолент, использованное в расчетах константы  $M$ , имеет следующий вид [17]:

$$\sigma = 2 \frac{i\pi e^2}{k_B T V} \sum_{\mathbf{k}, \beta} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} v(\mathbf{k}) v(\mathbf{q}) \times \langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle \left[ \langle n_{\mathbf{q}\lambda} \rangle + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\beta\lambda} (1 - \langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle) \right], \quad (12)$$

где  $V$  – объем кристаллита;  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $T$  – абсолютная температура;  $e$  – элементарный заряд;  $\mathbf{k}, \mathbf{q}$  – двухкомпонентные волновые векторы в пределах зоны Бриллюэна;  $\beta, \lambda$  – спиновые индексы;  $\langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle$  – среднее число частиц в квантовом состоянии с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и спином  $\beta$ , выражаемое функцией распределения Ферми – Дирака;  $v$  – продольная компонента вектора скорости электрона в зоне Бриллюэна.

Вектор скорости определяется стандартным способом с помощью электронного спектра (10):

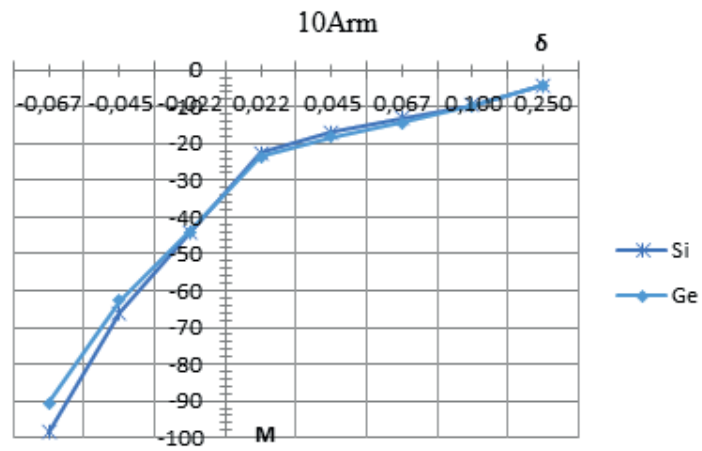
$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (13)$$

Поскольку многочисленные исследования транспортных свойств дираковских материалов, например графеновых нанолент, свидетельствуют о баллистическом (бесфононном) характере электронной проводимости [4], использование модели Хаббарда, не учитывающей электрон-фононное взаимодействие, является оправданным и целесообразным.

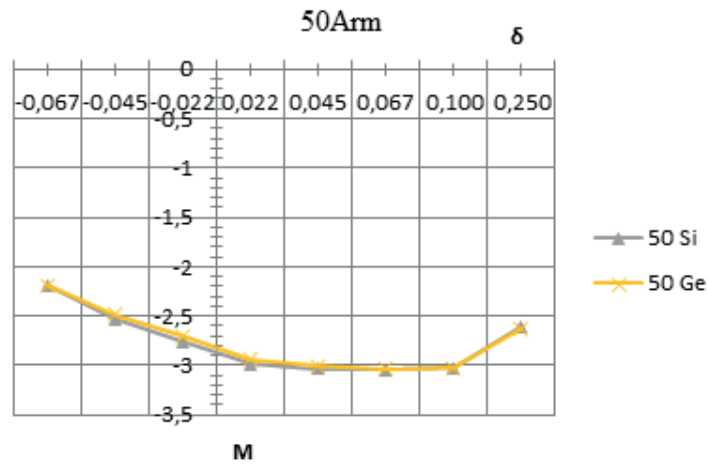
На рис. 3 и 4 представлены зависимости компоненты  $M$  тензора эластопроводимости от относительной деформации  $\delta$ , равной

$$\begin{aligned} & -0,067, -0,045, -0,022, \\ & +0,022, +0,045, +0,067, +0,250 \end{aligned}$$

a)



b)



c)

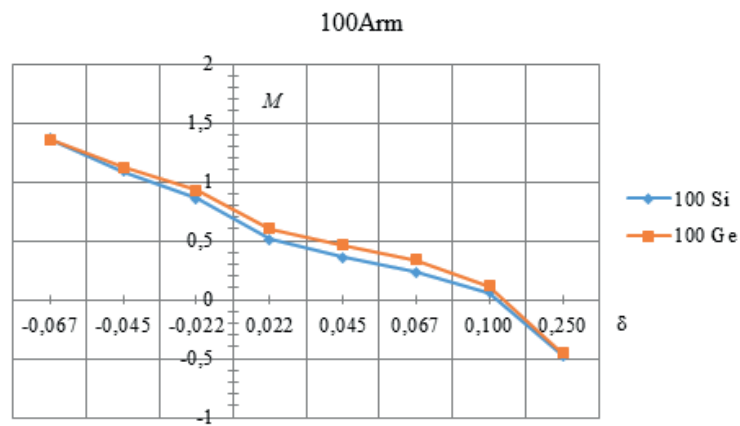


Рис. 3. Продольная компонента  $M$  тензора эластопроводимости кресельных (Arm) нанолент SiNR и GeNR шириной 10 (a), 50 (b) и 100 (c) элементарных ячеек как функция величины относительной деформации  $\delta$ .

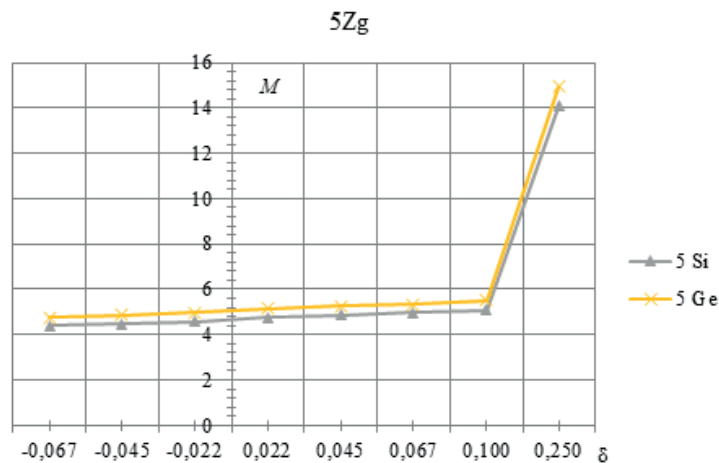
На всех кривых точка  $\delta = 0$  не определена

для кресельных (Arm) и зигзагообразных (Zg) нанолент SiNR и GeNR разной ширины:  $n\text{Arm}$  ( $n = 9, 10, 50$  и  $100$ ) и  $m\text{Zg}$  ( $m = 5$  и  $10$ ) (значения даны в количествах элементарных ячеек). Численные результаты получены при температуре  $T = 300$  К. Расчетные точки соединены сплошными линиями, чтобы наглядно показать тенденции изменения константы  $M$ . При этом необходимо отметить, что точка  $\delta = 0$  не определена.

Как следует из рис. 3 и 4, продольная компонента  $M$  проводящих кресельных (9Arm) и зигзагообразных (5Zg, 10Zg) нанолент положительна и поведение данной компоненты полностью коррелирует с из-

менениями их зонной структуры, описанными выше. Общей закономерностью для рассмотренных проводящих нанолент является монотонный рост (снижение) величины  $M$  с увеличением относительной деформации растяжения (сжатия)  $\delta$ . Подобное поведение наблюдается и у проводящих ахиральных углеродных нанотрубок [16, 17]. Несмотря на увеличение ширины зоны проводимости и уменьшение плотности состояний на уровне Ферми с увеличением  $\delta$ , удельная проводимость объектов возрастает, что ведет к монотонному росту компоненты  $M$ . Этот эффект связан с тем, что все большее число носителей заряда со все большими энергиями дает вклад в удельную

a)



b)

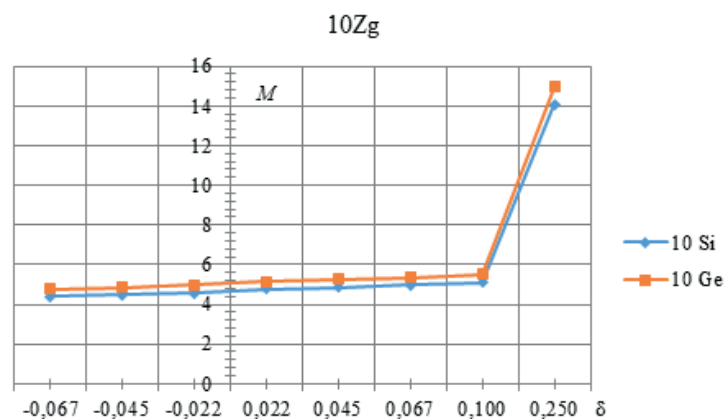


Рис. 4. Продольная компонента  $M$  тензора эластопроводимости зигзагообразных (Zg) нанолент SiNR и GeNR шириной 5 (a) и 10 (b) элементарных ячеек как функция величины относительной деформации  $\delta$ .

На всех кривых точка  $\delta = 0$  не определена



проводимость кристаллита. Тепловые флуктуации приводят к заполнению электронами зоны проводимости наноленты согласно функции распределения Ферми – Дирака. Модификация электронного спектра ведет к изменению удельной проводимости, учитывающей все возможные заполненные электронные состояния, а, следовательно, к росту компоненты  $M$  с увеличением величины  $\delta$ .

В случае полупроводниковых кресельных (10Arm, 50Arm, 100Arm) нанолент SiNR и GeNR продольная компонента  $M$  отрицательна, но, как и в случае проводящих нанолент, монотонно растет с увеличением величины  $\delta$ . Отрицательное значение обусловлено снижением удельной проводимости с увеличением деформации. Этот эффект также является следствием поведения зонной структуры деформированных полупроводниковых нанолент, у которых уширяется энергетическая щель, и поэтому уменьшается число заполненных состояний в зоне проводимости. Подобное поведение константы  $M$  наблюдается и у полупроводниковых ахиральных углеродных нанотрубок [16, 17].

Описанная выше методика расчета продольной компоненты тензора эластопроводимости, примененная к изучению пьезорезистивных свойств углеродных нанотрубок [16, 17], показала результаты, которые находятся в хорошем согласии с литературными данными по пьезорезистивным свойствам углеродных структур [24, 25]. Поэтому следует ожидать, что вследствие подобных подходов к описанию зонной структуры, наноленты семейства графена (дираковские

структуры) обладают качественно одинаковыми пьезорезистивными свойствами. Подобные литературные данные, относящиеся к нанолентам семейства графена, в том числе силициновым и германеновым, на данный момент отсутствуют.

### Заключение

Проведенное теоретическое исследование пьезорезистивных свойств идеальных силициновых и германеновых нанолент с разным типом проводимости в рамках модели Хаббарда выявило ряд особенностей поведения продольной компоненты тензора эластопроводимости, описанных выше. Количественное исследование зависимостей константы  $M$  от величины деформации и ширины наноленты позволяет получить более полное представление об изменении удельной проводимости нанолент, обусловленном деформацией растяжения (сжатия). Кроме того, продольная компонента тензора эластопроводимости германеновых нанолент незначительно превышает компоненту силициновых нанолент.

Полученные результаты также можно учесть и использовать для электромеханических наносенсорных разработок, в основе работы которых лежит эффект пьезосопротивления, а основным структурным элементом выступают силициновые и германеновые наноленты.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Волгоградской области в рамках научного проекта № 18-42-343004.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Морозов С.В., Новоселов К.С., Гейм А.К. Электронный транспорт в графене // Успехи физических наук. 2008. Т. 178. № 7. С. 776–780.
2. Лозовик Ю.Е., Меркулова С.П., Соколик А.А. Коллективные электронные явления в графене // Успехи физических наук. 2008. Т. 178. № 7. С. 758–776.
3. Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Артюх А.А. Новые наноструктуры на основе графена: физико-химические свойства и приложения // Успехи химии. 2014. Т. 83. Вып. 3. С. 251–279.
4. Physics of graphene. Edited by Aoki H., Dresselhaus M.S. (Nanoscience and Technology). Switzerland: Springer International Publishing, 2014. 345 p.
5. Герт А.В., Нестоклон М.О., Ясиевич И.Н. Зонная структура силицена в приближении сильной связи // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 148. № 1. С. 133–139.
6. Acun A., Zhang L., Vampoulis P., et al., Germanene: the germanium analogue of graphene // Journal of Physics: Condensed Matter. 2015. Vol. 27. No. 44. P. 443002.
7. Behzad S. Effect of uni-axial and bi-axial strains and vertical electric field on free standing buckled germanene // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2018.



Vol. 229. December. Pp. 13–19.

8. Ould N.E. M.L., El Hachimi A.G., Boujnah M., Benyoussef A., El Kenz A. Comparative study of electronic and optical properties of graphene and germanene: DFT study // *Optik*. 2018. Vol. 158. April. Pp. 693–698.

9. Kaloni T.P., Schwingenschlögl U. Stability of germanene under tensile strain // *Chemical Physics Letters*. 2013. Vol. 583. 17 September. Pp. 137–140.

10. Mortazavi B., Rahaman O., Makaremi M., Dianat A., Cunibert G., Rabczuk T. First-principles investigation of mechanical properties of silicene, germanene and stanene // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2017. Vol. 87. March. Pp. 228–232.

11. Kazemlou V., Phirouznia A. Influence of compression strains on photon absorption of silicene and germanene // *Superlattices and Microstructures*. 2019. Vol. 128. April. Pp. 23–29.

12. Бухараев А.А., Звездин А.К., Пяток А.П., Фетисов Ю.К. Стрейнтроника – новое направление микро- и нанoeлектроники и науки о материалах // *Успехи физических наук*. 2018. Т. 188. № 12. С. 1288–1330.

13. McRae A.C., Wei G., Champagne A.R. Graphene quantum strain transistors // *Physical Review Applied*. 2019. Vol. 11. No. 5. P. 054019.

14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. М.: Физматлит, 2003. 264 с.

15. Ляпкосова О.С., Лебедев Н.Г. Пьезорезистивный эффект в однослойных углеродных нанотрубках // *Физика твердого тела*. 2012. Т. 54. № 7. С. 1412–1416.

16. Лебедева О.С., Лебедев Н.Г. Влияние растяжения и сжатия на пьезорезистивность углеродных нанотрубок и графеновых на-

нолент // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2014. № 1 (189) С. 26–34.

17. Лебедева О.С., Лебедев Н.Г. Пьезорезистивный эффект в примесных однослойных углеродных нанотрубках в приближении «Хаббард-I» // *Научно-технические ведомости СПбГПУ*. 2014. № 2 (195). С. 149–161.

18. Лебедева О.С., Лебедев Н.Г. Деформационное изменение запрещенной щели примесных углеродных нанотрубок // *Химическая физика*. 2014. Т. 33. № 10. С. 73–80.

19. Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика. Т. 4. Квантовая статистика. М.: Комкнига, 2005. 352 с.

20. Изюмов Ю.А., Чашин Н.И., Алексеев Д.С. Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала. М.: Регулярная и хаотическая динамика, 2006. 384 с.

21. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир. Изд. Московского ун-та, 2001. 519 с.

22. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.

23. Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A. Piezoconductivity of chiral carbon nanotubes in the framework of the tight-binding method // *Математическая физика и компьютерное моделирование*. 2018. Т. 21. № 1. С. 53–63.

24. Li Y., Wang W., Liano K., Hu Ch., et. al. Piezoresistive effect in carbon nanotube films // *Chinese Science Bulletin*. 2003. Vol. 48. No. 2. Pp. 125–127.

25. Obitayo W., Liu T. A review: carbon nanotube-based piezoresistive strain sensors // *Journal of Sensors*. 2012. Vol. 2012. P. ID 652438, 15 p. DOI 10.1155/2012/652438.

*Статья поступила в редакцию 01.10.2019, принята к публикации 09.12.2019.*

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ЛЕБЕДЕВА Ольга Сергеевна** – кандидат физико-математических наук, ассистент Волгоградского государственного университета, доцент Волгоградского государственного аграрного университета, г. Волгоград, Российская Федерация.

400062, Российская Федерация, г. Волгоград, Университетский пр., 100.

400002, Российская Федерация, г. Волгоград, Университетский пр., 26.

lebedeva\_os@volsu.ru

**ЛЕБЕДЕВ Николай Геннадьевич** – доктор физико-математических наук, профессор Волгоградского государственного университета, г. Волгоград, Российская Федерация.

400062, Российская Федерация, г. Волгоград, Университетский пр., 100.

nikolay.lebedev@volsu.ru

**ЛЯПКОСОВА Ирина Александровна** – кандидат сельскохозяйственных наук, доцент Волгоградского государственного аграрного университета, г. Волгоград, Российская Федерация. 400002, г. Волгоград, Университетский пр., 26. lyarkosova\_irina@mail.ru

## REFERENCES

1. **Morozov S.V., Novoselov K.S., Geim A.K.**, Electronic transport in graphene, *Phys. Usp.* 51 (7) (2008) 744–748.
2. **Lozovik Yu.E., Merkulova S.P., Sokolik A.A.**, Collective electron phenomena in graphene, *Phys. Usp.* 51 (7) (2008) 727–744.
3. **Chernozatonskii L.A., Sorokin P.B., Artukh A.A.**, New nanostructures based on graphene: physical and chemical properties and applications, *Russ. Chem. Rev.* 83 (2014) 251–279.
4. *Physics of graphene*, Edited by Aoki H., Dresselhaus M.S. (Nanoscience and Technology), Springer International Publishing, 2014.
5. **Gert A.V., Nestoklon M.O., Yassievich I.N.**, Band structure of silicene in the tight binding approximation, *JETP.* 121 (1) (2015) 115–121.
6. **Acun A., Zhang L., Bampoulis P., et al.**, Germanene: the germanium analogue of graphene, *Journal of Physics: Condensed Matter.* 27 (44) (2015) 443002.
7. **Behzad S.**, Effect of uni-axial and bi-axial strains and vertical electric field on free standing buckled germanene, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena.* 229 (December) (2018) 13–19.
8. **Ould NE M.L., El Hachimi A.G., Boujnah M., et al.**, Comparative study of electronic and optical properties of graphene and germanene: DFT study, *Optik.* 158 (April) (2018) 693–698.
9. **Kaloni T.P., Schwingenschlugl U.**, Stability of germanene under tensile strain, *Chemical Physics Letters.* 583 (17 September) (2013) 137–140.
10. **Mortazavi B., Rahaman O., Makaremi M., et al.**, First-principles investigation of mechanical properties of silicene, germanene and stanene, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* 87 (March) (2017) 228–232.
11. **Kazemlou V., Phirouznia A.**, Influence of compression strains on photon absorption of silicene and germanene, *Superlattices and Microstructures.* 128 (April) (2019) 23–29.
12. **Bukharaev A.A., Zvezdin A.K., Pyatakov A.P., Fetisov Yu.K.**, Straintronics: a new trend in micro- and nanoelectronics and material science, *Phys. Usp.* 61 (12) (2018) 1175–1212.
13. **McRae A.C., Wei G., Champagne A.R.**, Graphene quantum strain transistors, *Physical Review Applied.* 11 (5) (2019) 054019.
14. **Landau L.D., Lifshitz E.M.**, *Theory of elasticity*, 2nd ed., Course of theoretical physics, Vol. 7, Pergamon Press, Oxford, 1981.
15. **Lyapkosova O.S., Lebedev N.G.**, Piezoresistive effect in single-walled carbon nanotubes, *Physics of the Solid State.* 54 (7) (2012) 1501–1506.
16. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G.**, The influence of the stretching and compression deformations on the piezoresistance of the carbon nanotubes and graphene nanoribbons, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* (1(189)) (2014) 26–34.
17. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G.**, The piezoresistive effect in doped single-walled carbon nanotubes in the “Hubbard-I” approach, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal.* (2(195)) (2014) 149–161.
18. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G.**, Deformation change of the band gap of impurity carbon nanotubes, *Russian Journal of Physical Chemistry B: Focus on Physics.* 8 (5) (2014) 745–751.
19. **Kvasnikov I.A.**, *Termodinamika i statisticheskaja fizika. T. 4: Kvantovaja statistika [Thermodynamics and statistical physics, Vol. 4: Quantum Statistics]*, KomKniga Publ., Moscow, 2005.
20. **Izyumov Ju.A., Chashchin N.I., Alekseev D.S.**, *Teoriya sil'no korrelirovannyh sistem. Metod proizvodjashhego funkcionala [The theory of strongly correlated systems. Method of generating functional]*, Reguljarnaja i Haoticheskaja Dinamika Publ., Moscow, 2006.
21. **Stepanov N.F.**, *Kvantovaya mehanika i kvantovaya himiya [Quantum Mechanics and Quantum Chemistry]*. Mir, Moscow, 2001.
22. **Bir G.L., Pikus G.E.**, *Symmetry and strain-induced effects in semiconductors*, John Wiley & Sons, Inc., New-York, 1974.
23. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A.**, Piezoconductivity of chiral carbon nanotubes in the framework of the tight-binding method, *Mathematical Physics and Computer*



Simulation. 21 (1) (2018) 53–63.

24. **Li Y., Wang W., Liano K., et. al.**, Piezoresistive effect in carbon nanotube films, Chinese Science Bulletin. 48(2) (2003) 125–127.

25. **Obitayo W., Liu T.**, A review: carbon nanotube-based piezoresistive strain sensors, Journal of Sensors. 2012 (2012), ID 652438, DOI 10.1155/2012/652438.

*Received 01.10.2019, accepted 09.12.2019.*

### THE AUTHORS

**LEBEDEVA Olga S.**

*Volgograd State University*

*Volgograd State Agricultural University*

100, University Ave., Volgograd, 400062, Russian Federation

26, University Ave., Volgograd, 400002, Russian Federation

lebedeva\_os@volsu.ru

**LEBEDEV Nikolay G.**

*Volgograd State University*

100, University Ave., Volgograd, 400062, Russian Federation

nikolay.lebedev@volsu.ru

**LYAPKOSOVA Irina A**

*Volgograd State Agricultural University*

26, University Ave., Volgograd, 400002, Russian Federation

lyapkosova\_irina@mail.ru