

ЭЛАСТОПРОВОДИМОСТЬ КРЕСЕЛЬНЫХ ГЕРМАНЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ С ДОНОРНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

О.С. Лебедева^{1,2}, Н.Г. Лебедев¹, И.А. Ляпкосова²

¹ Волгоградский государственный университет,
г. Волгоград, Российская Федерация;

² Волгоградский государственный аграрный университет,
г. Волгоград, Российская Федерация

В работе представлены и проанализированы результаты теоретических расчетов пьезорезистивных характеристик примесных германеновых нанолент кресельного типа (“arm-chair”) с донорными дефектами разной концентрации, однородно распределенными в кристаллической решетке наноматериала. В качестве донорных примесей использованы атомы мышьяка. Исследование зонной структуры нанолент проведено в рамках моделей Хаббарда и Андерсона. Вычисление основной характеристики пьезорезистивного эффекта – продольной компоненты тензора эластопроводимости выполнено в рамках тех же теоретических моделей с использованием метода функций Грина. Проанализированы зависимости указанной компоненты от относительной деформации растяжения и сжатия, концентрации примесей и ширины наноленты.

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

Ссылка при цитировании: Лебедева О.С., Лебедев Н.Г., Ляпкосова И.А. Эластопроводимость кресельных германеновых нанолент с донорными дефектами // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 1. С. 8–20. DOI: 10.18721/JPM.14101

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

ELASTIC CONDUCTIVITY OF GERMANENE “ARM-CHAIR” NANORIBBONS WITH DONOR IMPURITIES

O.S. Lebedeva^{1,2}, N.G. Lebedev¹, I.A. Lyapkoso²

¹ Volgograd State University,
Volgograd, Russian Federation;

² Volgograd State Agricultural University,
Volgograd, Russian Federation

In the article, results of theoretical calculations of the piezoresistance characteristics of impurity germanene nanoribbons (NR) of the “arm-chair” type with donor defects with various concentrations uniformly distributed in the crystal lattice of the nanomaterial have been presented and analyzed. Arsenic atoms were used as donor impurities. Investigations of the NR’s band structure were carried out in the frameworks of the Hubbard’s and Anderson’s models. The computation of the main characteristic of the piezoresistance effect, i.e., the longitudinal component of the elastic conductivity tensor was carried out using the Green’s function method within the framework of the same theoretical models. An analysis of the dependence of this characteristic on the tensile and compressive strains, the concentration of impurities and the nanoribbon width were carried out.

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



Citation: Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A. Elastic conductivity of germanene “arm-chair” nanoribbons with donor impurities, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (1) (2021) 8–20. DOI: 10.18721/JPM.14101

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

Введение

Одной из приоритетных проблем физики конденсированного состояния является получение материалов с заданными свойствами и возможностью управлять ими. С 2004 года проводится активный синтез и исследования наноматериалов на основе углерода (графен, графеновые наноленты), обладающих практически важными электронными, проводящими, оптическими, механическими свойствами, что может расширить спектр их использования [1 – 3].

Электронные характеристики графеновых нанолент довольно разнообразны и зависят от природы и концентрации примесей, приложенных внешних полей, механических деформаций и т. п. С 2004 года, когда был синтезирован графен, он стал объектом самых многообещающих технологий наномеханических систем для разработки наномеханических приборов. Его можно использовать вместо кремния в качестве основы для транзисторов, кантилевера для атомно-силового микроскопа, химических сенсоров и др.

Несмотря на совокупность уникальных свойств, графен в свете практического применения не лишен ряда недостатков, например, у него практически полностью отсутствует запрещенная зона энергий, что не дает возможности закрытия канала полевого транзистора на его основе [4]. Одним из приоритетных решений этой проблемы является поиск новых неуглеродных перспективных 2D-материалов, имеющих структуру, аналогичную графену, но при этом обладающих запрещенной зоной, достаточно удобной по величине.

В 2013 году путем компьютерного выбора среди материалов, которые бы обладали свойствами, подобными графену, и структурой, аналогичной двумерной, было выявлено

92 перспективных аналога [5]. Сорок из них ранее никогда не предлагались в качестве веществ, подобных графену, и их свойства, в том числе и проводящие, остаются малоизученными. Несмотря на такое обилие выбранных аналогов, перспективных для создания основы наномеханических устройств, их использование сильно ограничивается проблемами синтеза и взаимодействия с подложкой. Поэтому актуальной задачей первого этапа работы должен быть отбор аналогов среди реально синтезированных наноматериалов «семейства графена» и изучение их пьезорезистивных свойств.

Предсказанный в 2009 году и успешно синтезированный в 2014, германен следует считать одним из самых перспективных наноматериалов «постграфеновой эры» [6 – 9].

Запрещенная энергетическая щель германена и его электронные свойства чувствительны к внешним полям, механическим деформациям и химической адсорбции [10, 11]. В соответствии с теоретическими исследованиями, ширина запрещенной зоны германена равна примерно 24 мэВ ($E_g \approx 24$ мэВ), что на несколько порядков превышает известную для графена ($E_g < 0,05$ мэВ). Увеличение ширины запрещенной зоны открывает возможности использования германена в устройствах, работа которых основана на полевых эффектах, таких как транзисторы. Этого можно добиться как приложением внешних воздействий [12], так и целенаправленным допированием наноматериала акцепторными и донорными примесями различных концентраций. Через объединение деформационного механического воздействия и варьирование количества дефектов, можно создать эффективный механизм управления запрещенной зоной германена.

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию (а следовательно, пред-

сказанию) пьезорезистивных свойств примесных германеновых нанолент (nanoribbon (NR)) – GeNRs.

Модель электронного строения деформированных примесных германеновых нанолент

Геометрическая модель германеновых нанолент (GeNRs) выбирается на основе вида двумерного гексагонального слоя. На рис. 1 показана деформированная элементарная ячейка кристаллической решетки германена, где через α обозначен угол между векторами основных трансляций \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 , через Δ_i – вектор межатомных расстояний, через a – постоянная решетки деформированной GeNR ($a_1 = a_2 = a$). Длина и ширина наноленты отмерены вдоль осей Ox и Oy соответственно.

Электронный спектр недеформированных GeNRs в рамках метода сильной связи и в приближении ближайших соседей можно представить в следующем виде [13]:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = \pm t_0 \left\{ 1 + 4 \cos\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2}\right) \times \right. \\ \times \cos\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) + \\ \left. + 4 \cos^2\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) \right\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где t_0 , эВ, – резонансный, или прыжковый интеграл ($t_0 = 1,47$ эВ [6]); \mathbf{k} , см⁻¹, – волновой вектор; \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , нм, – векторы основных трансляций.

Уровень Ферми в формуле (1) традиционно принимается за 0 эВ.

Направление вектора $(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ называется кресельным, или “arm-chair”, а вектора $(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)$ – зигзагообразным, или “zig-zag”.

Условие квантования волнового вектора \mathbf{k} в направлении, поперечном длине NR, можно записать следующим образом [13]:

$$3k_x R_0 = \frac{2\pi q}{N_x}, \quad q = 1, 2, \dots, N_x \quad (2)$$

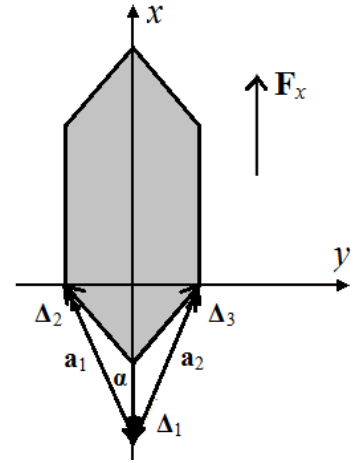


Рис. 1. Фрагмент структуры кресельной германеновой наноленты, деформированной продольным растяжением силой F_x : Δ_i ($i = 1, 2, 3$) – векторы межатомных расстояний; $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ – векторы основных трансляций; α – угол между векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2

для германеновых нанолент кресельного типа и

$$\sqrt{3}k_y R_0 = \frac{2\pi q}{N_y}, \quad q = 1, 2, \dots, N_y \quad (3)$$

для нанолент зигзагообразного типа.

Здесь R_0 , нм, – равновесное межатомное расстояние в недеформированной GeNR; k_x, k_y , см⁻¹, – волновые числа в зоне Бриллюэна.

На рис. 1 показана геометрическая модификация германенового гексагона кристаллической решетки GeNR кресельного типа, деформированной продольным растяжением силой F_x .

Моделирование зонной структуры деформированных GeNRs осуществляется преобразованием параметров элементарной ячейки и зоны Бриллюэна. Эта процедура подробно описана в работе [15].

Если ввести величину относительной деформации длины межатомной связи R как $\delta = \Delta R/R_0$, где ΔR – изменение равновесной длины (Ge-Ge)-связи R_0 ($\Delta R = R - R_0$), то можно получить следующие выражения для компонент волнового вектора [15]:



$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{k}_x(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2} &= \\ &= k_x R_0 (1 + \delta)(1 + \cos \alpha), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{k}_y(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2} &= \\ &= k_y R_0 (1 + \delta) \sin \alpha = \frac{\pi q}{n}, \\ q &= 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (4)$$

для GeNR кресельного типа ($k_x \in$ зоне Бриллюэна);

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{k}_x(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2} &= \\ &= k_x R_0 [(1 + \delta) \cos \alpha + 1 - \delta] = \frac{\pi q}{n}, \\ q &= 1, 2, \dots, n, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{\mathbf{k}_y(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2} = k_y R_0 (1 + \delta) \sin \alpha$$

для GeNR зигзагообразного типа ($k_y \in$ зоне Бриллюэна).

В результате деформации растяжения (сжатия) изменяются и поперечные размеры GeNR, а, следовательно, и модуль хирального вектора [13] модифицируется следующим образом:

$$\begin{aligned} C_h &= C_{h0} (1 - v\delta), \\ C_{h0} &= a_0 \sqrt{N_x^2 + N_y^2 + N_x N_y}, \end{aligned} \quad (6)$$

где a_0 , нм, – постоянная решетки недеформированной GeNR, $a_0 = R_0$; N_x, N_y – целые числа, определяющие размер и тип наноленты ($N_y = 0$ для кресельного типа и $N_y = N_x$ для зигзагообразного); v – коэффициент Пуассона, принимающий значения 0,27 и 0,19 для GeNRs кресельного и зигзагообразного типов, соответственно.

Угол α можно оценить из соотношения (6) [15]:

$$\sin \alpha = \left(\frac{1 - v\delta}{1 + \delta} \right) \sin \alpha_0,$$

$$\cos \alpha = \sqrt{1 - \sin^2 \alpha}$$

для GeNR кресельного типа;

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= \frac{1}{(1 + \delta)} \times \\ &\times [(1 - v\delta)(1 + \cos \alpha_0) - 1 + \delta], \end{aligned}$$

$$\sin \alpha = \sqrt{1 - \cos^2 \alpha}$$

для GeNR зигзагообразного типа.

В конечном итоге электронный спектр деформированных германеновых NRs принимает вид [15]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_a(\mathbf{k}) &= \pm \gamma(\delta) \left\{ 1 \pm 4 \cos \left(\frac{\pi q}{n} \right) \times \right. \\ &\times \cos [k_x R_0 (1 + \delta)(1 + \cos \alpha)] + \\ &\left. + 4 \cos^2 \left(\frac{\pi q}{n} \right) \right\}^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_z(\mathbf{k}) &= \\ &= \pm \gamma(\delta) \left\{ 1 \pm 4 \cos [k_y R_0 (1 + \delta) \sin \alpha] \times \right. \\ &\left. \times \cos \left(\frac{\pi q}{n} \right) + 4 \cos^2 [k_y R_0 (1 + \delta) \sin \alpha] \right\}^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\gamma(\delta)$ – резонансный интеграл деформированных GeNRs как функция относительной деформации δ ; нижние индексы a и z обозначают спектры кресельных и зигзагообразных нанолент; знаки плюс-минус следуют из того, что в элементарной ячейке наноленты содержится четыре атома германия.

Электронный спектр деформированных GeNRs в отсутствие примесей, с учетом кулоновского отталкивания на одном узле, рассчитывался в рамках модели Хаббарда [16], что подробно описано в работе [17]:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[\varepsilon(\mathbf{k}) + U \pm \sqrt{\varepsilon(\mathbf{k})^2 - 2\varepsilon(\mathbf{k})U(1 - 2n_{-\beta}) + U^2} \right], \quad (9)$$

где $\varepsilon(\mathbf{k})$ – зонная структура идеальных NR; U , Дж, – энергия кулоновского взаимодействия на одном узле, которая является параметром полуэмпирического метода квантовой химии MNDO [18]; $n_{-\beta}$ – число электронов с противоположным спином в зоне.

Сравнительный анализ изображения зонных структур $E(\mathbf{k})$ выражения (9) и $\varepsilon(\mathbf{k})$ формулы (7) для GeNR кресельного типа не выявил существенных качественных различий.

Количественная оценка ширины энергетической щели полупроводниковой GeNR в случае деформации продольного растяжения (сжатия) показал ее уширение (сужение). Так же ведут себя и зона проводимости, и валентная зона. В результате увеличивается (уменьшается) плотность электронных состояний в этих зонах. Подобное поведение дисперсионных кривых наблюдалось при исследовании деформационных эффектов в ахиральных (кресельных и зигзагообразных) углеродных нанотрубках [15, 17].

Бесщелевая зонная структура проводящих кресельных GeNRs в случае продольного растяжения (сжатия) также изменяется вышеописанным образом. Исключением из аналогичного поведения является непоявление запрещенных зон в спектрах таких лент, 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.

Добавление примесей в кристаллическую структуру рассматриваемых GeNRs может способствовать изменению их пьезорезистивности, как показано на примере графеновых нанолент в работе [19], что позволит целенаправленно влиять на их проводимость.

Расчет электронного спектра допированных GeNRs проводился с использованием

периодической модели Андерсона [16]. Эта модель заключается в отдельном рассмотрении коллективизированных π -электронов и локализованных электронов, взаимодействие между которыми учитывается путем введения потенциала гибридизации. Модель успешно адаптирована к изучению влияния точечных дефектов (донорных и акцепторных) на зонную структуру графеновых нанолент [19].

Электронный спектр GeNR в рамках модели Андерсона имеет следующий вид [16]:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[\varepsilon_l + \varepsilon(\mathbf{k}) \pm \sqrt{(\varepsilon_l - \varepsilon(\mathbf{k}))^2 + 36|V_{\text{GeD}}(\delta)|^2 \cdot x} \right], \quad (10)$$

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

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

$$\begin{aligned} \varepsilon_l &= I_{\text{Ge}} - I_{\text{As}} = \\ &= (7,88 - 9,81) \text{ эВ} = -1,93 \text{ эВ}. \end{aligned}$$

Зависимости прыжкового интеграла $\gamma(\delta)$ и потенциала гибридизации $V_{\text{GeD}}(\delta)$ от относительной деформации вычислялись методом теории функционала плотности с использованием обменно-корреляционного потенциала B3LYP в базе атомных орбиталей STO-3G [18]. Для осуществления квантовохимических расчетов рассматривался фрагмент поверхности германена размером

6×6 элементарных ячеек (UC). Граничные ненасыщенные связи замыкались одновалентными атомами водорода. Атом дефекта (As) помещался в центр построенного кластера, чтобы уменьшить влияние граничных атомов. Моделирование деформации структуры вдоль направления “arm-chair” проводилось путем пошагового замораживания атомов германия на противоположных границах фрагмента. Полученные численные значения зависимостей $\gamma(\delta)$ и $V_{\text{GeD}}(\delta)$ интерполировались следующими аналитическими выражениями:

$$\begin{aligned}
 \gamma &= \gamma_0 \exp(-1,9523R), \\
 V_{\text{GeD}} &= V_0 \exp(-1,9523R), \\
 R &= R_0(1 + \delta); \\
 \gamma_0 &= 171,11 \text{ эВ}, \\
 V_0 &= 152,37 \text{ эВ}.
 \end{aligned} \tag{11}$$

Равновесные длины межатомных связей в дальнейших 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.

Добавление донорных примесей различных концентраций в систему недеформированных GeNRs приводит к изменению зонной структуры последних. Особенности энергетического спектра низкоразмерных структур с донорным атомом азота в кристаллической решетке проанализированы на примере углеродных нанотрубок в работе [17]. Зона примесных состояний в этом случае локализована вблизи уровня энергии электрона на дефекте ϵ_i 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 [16].

Эластопроводимость германеновых нанолент с акцепторными дефектами

Согласно рекомендациям монографии [20], определение тензора эластопроводимости двумерных кристаллических структур можно записать в виде

$$\begin{aligned}
 \frac{\Delta\sigma_{\xi\rho}}{\langle\sigma\rangle} &= M_{\xi\rho\chi\eta} \cdot \delta_{\chi\eta}, \\
 \langle\sigma\rangle &= \frac{1}{2} \text{Sp}[\sigma] = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2}, \\
 M_{\xi\rho\chi\eta} &= M_{\rho\xi\chi\eta} = M_{\rho\xi\eta\chi} = M_{\xi\rho\eta\chi},
 \end{aligned} \tag{12}$$

где $\sigma_{\xi\rho}$ – тензор удельной проводимости; $\delta_{\chi\eta}$ – тензор деформаций; $\xi, \rho, \chi, \eta = x, y$.

Для случая квазиодномерных структур (например, кресельной GeNR) продольная компонента $M = M_{xxxx}$ тензора эластопроводимости 4-го ранга может быть выражена следующей формулой:

$$M = \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} \frac{1}{\delta}, \tag{13}$$

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

Выражение для расчета продольной компоненты σ тензора удельной проводимости кресельных германеновых NRs, полученное в рамках теории Кубо – Гринвуда [21] с использованием метода функций Грина и модельного гамильтониана Хаббарда [18], представлено в работах [17, 19]:

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

$$\times \left[\langle n_{q\lambda} \rangle + \delta_{kq} \delta_{\beta\lambda} (1 - \langle n_{k\beta} \rangle) \right], \quad (14)$$

где V , m^3 , – объем наноленты; T , K , – абсолютная температура; e , Кл, – элементарный заряд; \mathbf{k} , \mathbf{q} – двухкомпонентные волновые векторы в пределах зоны Бриллюэна (ЗБ); β , λ – спиновые индексы; $v(\mathbf{k})$, m/s , – продольная компонента вектора скорости электрона в зоне Бриллюэна; $\langle n_{k\beta} \rangle$ – среднее число частиц в квантовом состоянии с волновым вектором \mathbf{k} и спином β .

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

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

где k_B , Дж/К, – постоянная Больцмана; μ , Дж/моль, – химический потенциал, который находится из условия нормировки функции распределения на полное число N_e электронов в системе; это число выражается как

$$N_e = \sum_{\mathbf{k}, \beta} \langle n_{k\beta} \rangle =$$

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

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

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{h} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (15)$$

В данной работе представлены результаты изучения пьезорезистивных свойств кресельных GeNRs разной ширины и с разным типом проводимости – n Arm, где n задает число элементарных ячеек (УС) вдоль ширины ленты. Значения параметров, использованных в расчетах, сведены в таблицу.

Зависимости продольной компоненты M тензора эластопроводимости от величины относительной деформации δ , рассчитанные по формуле (13), представлены на рис. 2. Расчетные точки на рисунках отмечены символами и соединены линиями.

Рассмотрен случай так называемого половинного заполнения зоны, т. е. от каждого атома германия в систему включался один

Таблица

Значения параметров модели, использованные в расчетах

| Параметр | Обозначение | Значения |
|--|-------------|--|
| Число УС по NR вдоль длины вдоль ширины | N | 10 000 |
| | n | 9, 10, 50, 100 |
| Число дефектов в NR | N_d | 1, 10, 100, 1000 |
| Относительная деформация сжатия (растяжения) | δ | -0,10; -0,06; -0,04; -0,02; -0,01; 0,01; 0,02; 0,04; 0,06; 0,10 |
| Равновесная длина межатомных связей (Ge-Ge), Å | R_0 | 2,44 |
| Температура деформации, К | T | 300 |

Примечание: УС – элементарная ячейка, NR – нанолента.

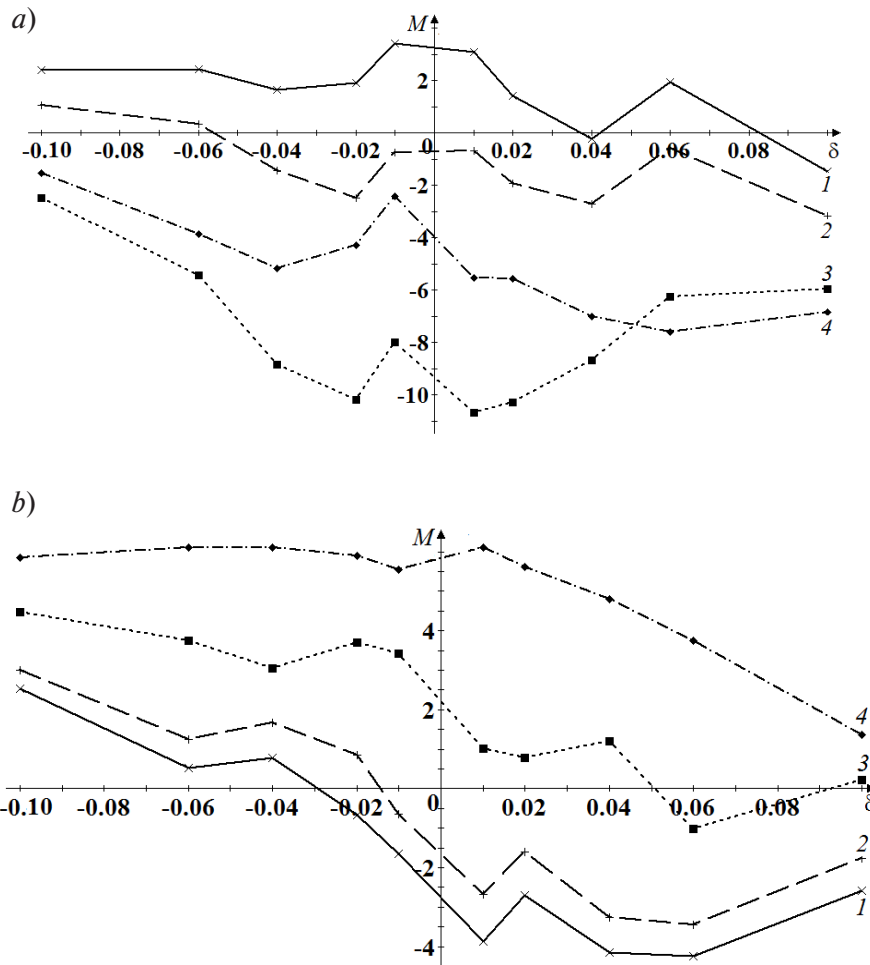


Рис. 2. Зависимости продольной компоненты M тензора эластопроводимости кресельных 9Arm GeNRs (a) и 10Arm GeNRs (b) (9 и 10 – числа УС вдоль ширины) от величины относительной деформации δ для различной концентрации донорных дефектов N_d : 1(1), 10 (2), 100 (3), 1000 (4); Расчетные точки на рисунках отмечены символами и соединены линиями

электрон, от каждого примесного атома мышьяка – два. Таким образом, полное число электронов вычислялось как $N_e = N \cdot n + N_d$.

Как следует из рис. 2, a, величина M для проводящей кресельной 9Arm NR положительна при малой концентрации дефектов ($N_d = 1$) и отрицательна при всех остальных значениях концентрации. Все кривые $M(\delta)$ для проводящей 9Arm NR с разными концентрациями дефектов показывают немономонное снижение с ростом деформации δ по всему диапазону ее значений. Исключение составляет случай $N_d = 100$, где коэффици-

ент M проявляет монотонный рост в области $\delta > 0$ (деформация растяжения).

Поведение функции $M(\delta)$ полностью коррелирует с изменениями зонной структуры проводящих 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 примеси 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 компо-

ненты M для случаев малой концентрации донорных примесей ($N_d = 1, 10$).

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 для случая $N_d = 100$. Такое поведение величины M связано с тем, что вследствие тепловых флуктуаций электроны заполняют зону проводимости NR, способствуя повышению удельной проводимости. Рост концентрации донорных примесей увеличивает число 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 $N_d = 1000$ продолжает общую тенденцию поведения продольной компоненты NR 9Arm. 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).

В случае полупроводниковых кресельных GeNRs (10Arm, 50Arm, 100Arm) поведение продольной компоненты тензора эластопроводимости M зависит от ширины изучаемой наноленты. Так, функция $M(\delta)$ GeNR 10Arm немонотонно убывает с ростом относительной деформации во всем диапазоне величины δ (рис. 2, *b*) для различных значений концентрации дефектов ($N_d = 1, 10, 100, 1000$). Начиная с $\delta = -0,1$ величина M положительна для всех значений N_d . Положительное значение обусловлено увеличением удельной проводимости кристаллита с ростом деформации сжатия ($\delta < 0$) вследствие сужения запрещенной зоны и увеличения числа свободных носителей в зоне проводимости.

Затем для случаев малых концентраций дефектов ($N_d = 1, 10$) кривые переходят в об-

ласть отрицательных значений. Это обусловлено, как и в случае идеальных GeNRs [12], уменьшением удельной проводимости с ростом деформации δ . Объяснить этот эффект можно уширением энергетической щели E_g полупроводниковых NRs, что уменьшает число заполненных состояний в зоне проводимости.

Рост концентрации донорных дефектов ($N_d = 1, 10, 100, 1000$) в целом не изменяет тенденцию поведения величины M , только увеличивает ее численное значение.

Характер функциональной зависимости $M(\delta)$ меняется для широких NRs 50Arm и 100Arm. В отрицательной области величины δ (сжатие) наблюдается убывание величины M GeNR 50Arm для всех концентраций дефектов (рис. 3, *a*). При переходе в область положительных деформаций (растяжение) для случая $N_d = 1$ продольная компонента тензора эластопроводимости практически не изменяется вплоть до $\delta = 0,1$ (область «плато»), в последнем случае видно ее возрастание. Дальнейший рост концентрации дефектов ($N_d = 10, 100, 1000$) приводит к ярко выраженному росту величины M в области деформации растяжения. Увеличение ширины ленты (100Arm) приводит к образованию «плато» и для случая $N_d = 10$ (рис. 3, *b*). Такой эффект соответствует поведению зонной структуры деформированных полупроводниковых NRs. Проявляется конкуренция между двумя факторами. Первый связан с ростом проводимости NR за счет увеличения числа свободных носителей в зоне проводимости, обусловленного донорными дефектами. Второй фактор – это блокировка проводимости ленты из-за увеличения E_g с ростом δ .

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. 3, *b*).

Описанный выше подход и аналитический алгоритм применялся к изучению пьезорезистивных свойств графеновых нанолент с до-

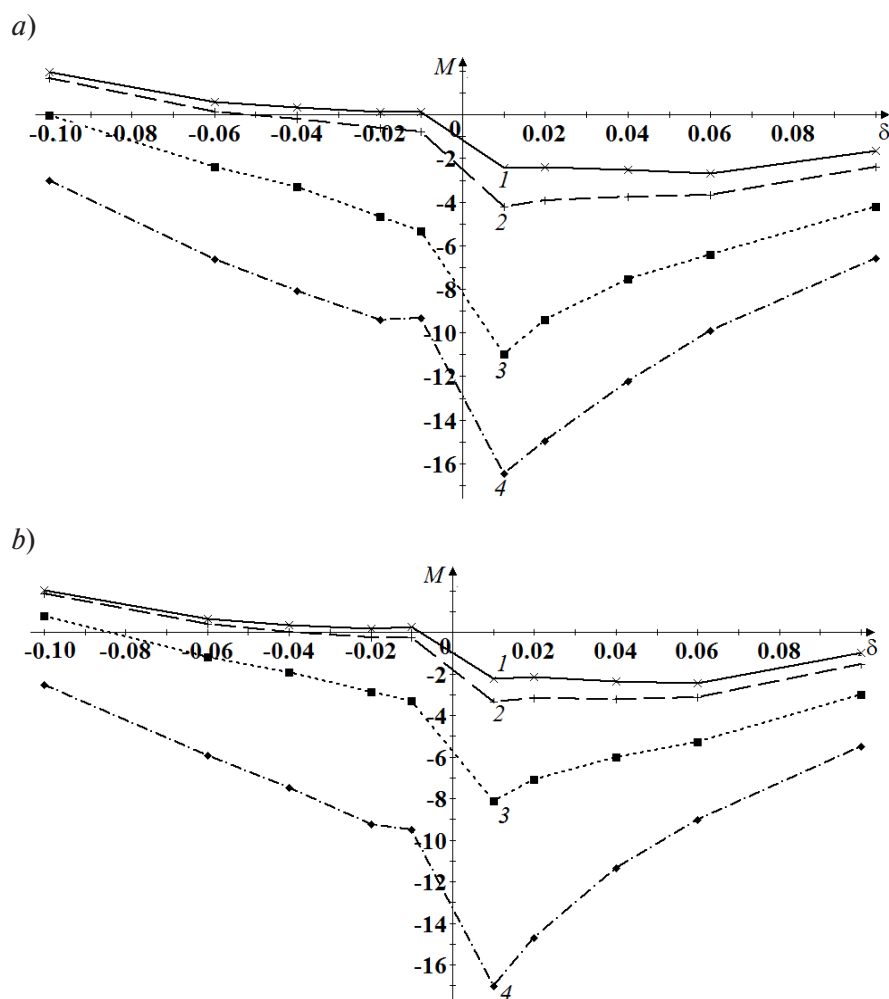


Рис. 3. Зависимости, аналогичные приведенным на рис. 2, но для 50Arm GeNRs (a) и 100Arm GeNRs (b) для тех же концентраций донорных дефектов N_d

норными и акцепторными примесями [19]. Сравнение тенденций поведения зависимостей $M(\delta)$, представленных в данной работе, с литературными данными по пьезорезистивным свойствам графеновых нанолент показало качественное согласие полученных результатов. Следует ожидать, что описанные свойства характерны и для других структур семейства графена.

Заключение

Теоретическое исследование пьезорезистивности германеновых нанолент кресельного типа (“arm-chair”) с разным типом проводимости, допированных точечными дефектами замещения, показало ряд особенностей качественного и количественного

изменения продольной компоненты тензора эластопроводимости M .

Изучение поведения константы M и ее величины в зависимости от концентрации донорных примесей, геометрических параметров наноленты (в частности, ее ширины), величины деформации демонстрирует полную картину изменения продольной проводимости нанолент, обусловленного механическим сжатием и растяжением. Чувствительность тензора эластопроводимости к перечисленным факторам подтверждает возможность эффективного управления проводимостью германена.

Полученные теоретические данные можно предложить для количественной калибровки наноэлектромеханических приборов

и устройств, в принципе функционирования которых лежит эффект пьезосопротивления, а базовым структурным материалом выступают германеновые наноленты.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Волгоградской области в рамках научного проекта № 19-42-343001_р_мол_а.

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. Lemme M.C. Current status of graphene transistors // Solid State Phenomena. 2009. Vol. 156. October. Pp. 499–509.
5. Lebègue S., Bjoerkman T., Klintonberg M., Nieminen R.M., Eriksson O. Two-dimensional materials from data filtering and *ab initio* calculations // Physical Review X. 2013. Vol. 3. No. 3. P. 031002.
6. Acun A., Zhang L., Vampoulis P., Farmanbar M., van Houselt A., Rudenko A.N., Lingenfelder M., Brocks G., Poelsema B., Katsnelson M.I., Zandvliet H.J.W. 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 NE 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. Лебедева О.С., Лебедев Н.Г., Ляпкосова И.А. Эластопроводимость силициновых и германеновых нанолент // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 38–49.
13. Physics of graphene. Edited by Aoki H., Dresselhaus M.S. (Nanoscience and Technology). Switzerland: Springer International Publishing, 2014. 345 p.
14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики в 10 тт. Т. VII. Теория упругости. М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит.-ры, 2003. 264 с.
15. Лебедева О.С., Лебедев Н.Г. Влияние растяжения и сжатия на пьезорезистивность углеродных нанотрубок и графеновых нанолент // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. № 1 (189) С. 26–34.
16. Изюмов Ю.А., Чашин Н.И., Алексеев Д.С. Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала. М.: Регулярная и хаотическая динамика, 2006. 384 с.
17. Лебедева О.С., Лебедев Н.Г. Пьезорезистивный эффект в примесных однослойных углеродных нанотрубках в приближении «Хаббард-1» // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2014. № 2 (195). С. 149–161.
18. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и



квантовая химия. М.: Мир, 2001. 519 с.

19. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkoso-va I.A.** The effect of isomorphic impurities on the elastic conductivity of Dirac structures // Journal of Physics: Condensed Matter. 2020. Vol. 32. No. 14. P. 145301.

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

21. **Квасников И.А.** Термодинамика и статистическая физика. В 4 тт. Т. 4. Квантовая статистика. М.: Комкнига, 2005. 352 с.

Статья поступила в редакцию 17.04.2020, принята к публикации 05.11.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

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

400062, Российская Федерация, г. Волгоград, Университетский пр., 100
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
lyapkosova_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 (in Russian).

4. **Lemme M.C.**, Current status of graphene transistors, Solid State Phenomena. 156 (October) (2009) 499–509.

5. **Lebègue S., Bjoerkman T., Klintonberg M., et al.**, Two-dimensional materials from data filtering and *ab initio* calculations, Physical Review X. 3 (3) (2013) 031002.

6. **Acun A., Zhang L., Vampoulis 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., Schwingenschlögl 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 stanine, *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. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkoso-va I.A.**, Elastic conductivity of silicene and germanene nanoribbons, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 12 (4) (2019) 38–49.

13. *Physics of graphene*, Edited by Aoki H., Dresselhaus M.S. (Nanoscience and Technology), Springer International Publishing, 2014.

14. **Landau L.D., Lifshitz E.M.**, *Theory of elasticity*, 2nd ed., *Course of theoretical physics*, Vol. 7, Pergamon Press, Oxford, 1981.

15. **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 (in Russian).

16. **Izyumov Ju.A., Chashhin 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 (in Russian).

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 (in Russian).

18. **Stepanov N.F.**, *Kvantovaya mekhanika i kvantovaya khimiya* [Quantum mechanics and quantum chemistry], Mir and Moscow State University Publishing, Moscow, 2001 (in Russian).

19. **Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkoso-va I.A.**, The effect of isomorphic impurities on the elastic conductivity of Dirac structures, *Journal of Physics: Condensed Matter*. 32 (14) (2020) 145301.

20. **Bir G.L., Pikus G.E.**, *Symmetry and strain-induced effects in semiconductors*, John Wiley & Sons, Inc., New-York, 1974.

21. **Kvasnikov I.A.**, *Termodinamika i statisticheskaja fizika. T. 4: Kvantovaja statistika* [Thermodynamics and statistical physics, in 4 Vols., Vol. 4: Quantum Statistics], KomKniga Publ., Moscow, 2005.

Received 17.04.2020, accepted 05.11.2020.

THE AUTHORS

LEBEDEVA Olga S.

Volgograd State University

100, University Ave., Volgograd, 400062, 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., 400002 Volgograd, Russian Federation

lyapkosovao_irina@mail.ru