

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА СИЛИЦЕНА, ЛЕГИРОВАННОГО ФОСФОРОМ

Воробьёв А.С.⁽¹⁾, Галашев А.Е.^(1,2)

⁽¹⁾ Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН
620137, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

⁽²⁾ Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Цель настоящей работы – методом теории функционала плотности исследовать электронные свойства силицена на углеродной подложке после нейтронного легирования, приводящего к превращению от 6.25 до 25 % атомов кремния в атомы фосфора. Расчеты выполнены в программном пакете Siesta.

Объектами исследования были одно- и двухслойный силицен. Однослойный силицен был представлен сверхячейкой 2×2 (восемью атомами кремния, находящимися в двух xy плоскостях), а двухслойный – двумя такими сверхячейками, размещенными одна над другой. Расчёты выполнялись как для свободностоящего силицена, так и для силицена на углеродной подложке. Толщина углеродной подложки подбиралась с помощью проведения дополнительного компьютерного моделирования, в котором исследовались подложки, имеющие от одного до четырёх графитовых слоёв.

Системы были подвергнуты геометрической оптимизации с использованием обобщённого градиентного приближения в форме PBE. Динамическую релаксацию атомов проводили до тех пор, пока изменение полной энергии системы не становилось меньше 0.001 эВ. Энергию обрезания базиса плоских волн принимали равной 200 Ry. Зона Бриллюэна задавалась методом Монхорста-Пака с использованием $10 \times 10 \times 1$ k-точек.

Полученные результаты показывают, что при содержании ~6 % фосфора в свободностоящем модифицированном листе силицена происходит металлизация системы вследствие взаимодействия 3p электронов кремния с 3p электронами фосфора. Последовательное повышение содержания фосфора в силицене вызывает постепенное увеличение расстояния между подрешетками силицена. В листах двухслойного силицена длина связи Si-Si на 3 % больше, чем соответствующая характеристика однослойного силицена. Удлинение связи коррелирует с увеличением расстояния между подрешетками силицена. Связи Si-P имели длину на 1-2 % меньшую, чем Si-Si связи. Это не приводило к существенной перестройке кристаллической структуры силицена.

В результате р-р гибридизации система «силицен-углеродная подложка» в большинстве случаев приобретала проводниковые свойства. Однако, когда в двухслойном силицене происходило замещение двух определенным образом расположенных атомов Si на атомы P, можно было наблюдать переход проводник-полупроводник.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № П16-13-00061).