

9. Абрамов И.И. Влияние параметров конструкции и материалов на вольт-амперные характеристики двухостровковых одноэлектронных цепочек / И.И. Абрамов [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2002. – Т. 36, №10. – С. 1272–1277.
10. Абрамов И.И. Модель многоостровковых одноэлектронных цепочек на основе метода Монте-Карло. / И.И. Абрамов [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т.37, №5. – С. 583–587.
11. Абрамов, И.И. Система моделирования нанoeлектронных приборов – NANODEV / И.И. Абрамов [и др.] // Микроэлектроника. – 2003. – Т. 32, № 2. – С. 124–133.
12. Abramov, I. I. A nanoelectronic device simulation software system NANODEV: New opportunities / I.I. Abramov [et al.] // Proc. of SPIE. – 2010. – V. 7521. – P. 75211E-1–11.

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В НАНОТРУБКАХ СИЛИЦИДА МАГНИЯ

А. Ю. Алексеев, А. Г. Черных, А. Б. Филонов, Д. Б. Мигас

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6,
220013 Минск, Беларусь, e-mail: lucky.alexey94@gmail.com*

В зависимости от диаметра, нанотрубки, свёрнутые из двумерного Mg_2Si , имеют различную структуру: в нанотрубках с диаметром более 27 – 29 Å имеется искажение, аналогичное искажению динамически стабильной фазы Td двумерного Mg_2Si , тогда как нанотрубки с меньшим диаметром обладают более высокой симметрией и соответствуют нанотрубкам, свёрнутым из динамически нестабильной фазы T двумерного Mg_2Si . Зависимость энергии напряжения нанотрубок Mg_2Si от их диаметра содержит минимум, который приходится на нанотрубки (11,0) и (5,5) с диаметрами 15,7 и 12,5 Å, соответственно.

Ключевые слова: силицид; нанотрубка; наноструктура; отрицательная энергия напряжения; фазовый переход.

PHASE TRANSITION IN NANOTUBES OF MAGNESIUM SILICIDE

A. Yu. Alekseev, A. G. Chernykh, A. B. Filonov, D. B. Migas

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, P. Browki str. 6, 220013 Minsk, Belarus
Corresponding author: A. Yu. Alekseev (lucky.alexey94@gmail.com)*

The structure of nanotubes, rolled up from the two-dimensional Mg_2Si , depends on their diameter: nanotubes with diameters more than 27 – 29 Å have a distortion similarly to the distortion of the dynamically stable Td phase of the two-dimensional Mg_2Si , while nanotubes with smaller diameters have a higher symmetry and correspond to nanotubes rolled up from the dynamical unstable T phase of the two-dimensional Mg_2Si . There is a minimum of strain energy of Mg_2Si nanotubes with respect to their diameter which occurs for (11,0) and (5,5) nanotubes with diameters of 15,7 and 12,5 Å, respectively.

Key words: silicide; nanotube; nanostructure; negative strain energy; phase transition.

ВВЕДЕНИЕ

Углеродные и неорганические нанотрубки (НТ) демонстрируют широкий спектр физических свойств в зависимости от размера и хиральности, благодаря чему они имеют большой потенциал использования во многих сферах, от наноэлектроники до трибологии [1,2]. Существенным препятствием на пути использования наноструктур в электронике является сложность экономически эффективного внедрения в хорошо отработанную кремниевую технологию, а также трудности при формировании однородных по свойствам наноструктур в промышленных масштабах. Известно, что силицен – двумерный (2D) материал, состоящий из атомов кремния, структура которого отличается от графена в связи с sp^3 гибридизацией связей – удаётся синтезировать только на металлических подложках из-за наличия оборванных связей, делающих структуру нестабильной [3]. Недавно, нами было представлено теоретическое предсказание 2D силицидов, германидов и станнидов щёлочноземельных металлов посредством моделирования их фононных спектров из первых принципов [4–6]. В этих 2D структурах атомы кремния не формируют поверхностные слои и заключены в октаэдры или искажённые октаэдры из атомов щёлочноземельного металла, связанных с ними силами ионного типа, таким образом, что оборванные связи в структуре отсутствуют (так называемый эффект псевдопассивации) [4–6]. В данной работе представлено теоретическое исследование структуры НТ Mg_2Si , специфика которых обусловлена наличием искажения в динамически стабильной фазе 2D Mg_2Si .

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Полная оптимизация структур и расчёт полных энергий 2D Mg_2Si и НТ Mg_2Si проводились в рамках метода присоединенных волн с использованием проекционных функций (код VASP) [7] с учетом обобщённого градиентного приближения PBE [8]. В расчетах энергия отсечки принималась равной 360 эВ. Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось на упорядоченном наборе точек в обратном пространстве $13 \times 13 \times 1$ и $1 \times 1 \times 13$ для 2D структур и НТ, соответственно. Для предотвращения взаимодействия между соседними трансляциями 2D и НТ структур дополнительно вводился вакуум толщиной 10 Å.

2D Mg_2Si является динамически стабильным в фазе Td [5], которая представляет собой искажённую структуру фазы T. Обе 2D структуры изображены в верхней части рис. 1. В работе исследуются НТ, свёрнутые из обеих фаз 2D Mg_2Si . Для идентификации НТ используется хиральный вектор $n \cdot \vec{a}_1 + m \cdot \vec{a}_2$ или (n, m) , где $\vec{a}_1$ и $\vec{a}_2$ – вектора решётки 2D структуры (см. рис. 1). Внешний вид НТ (28,0) и (16,16), свёрнутых из 2D Mg_2Si в фазе T, а так же НТ (28,0) и (0,16), свёрнутых из 2D Mg_2Si в фазе Td, также представлены в нижней части рис. 1. $a_{||}$ представляет собой параметр решетки вдоль оси НТ.

Для исследования стабильности НТ Mg_2Si использовалась энергия напряжения, которая определяется как разность полной энергии НТ и полной энергии соответствующей 2D структуры, рассчитанные на одну структурную единицу.

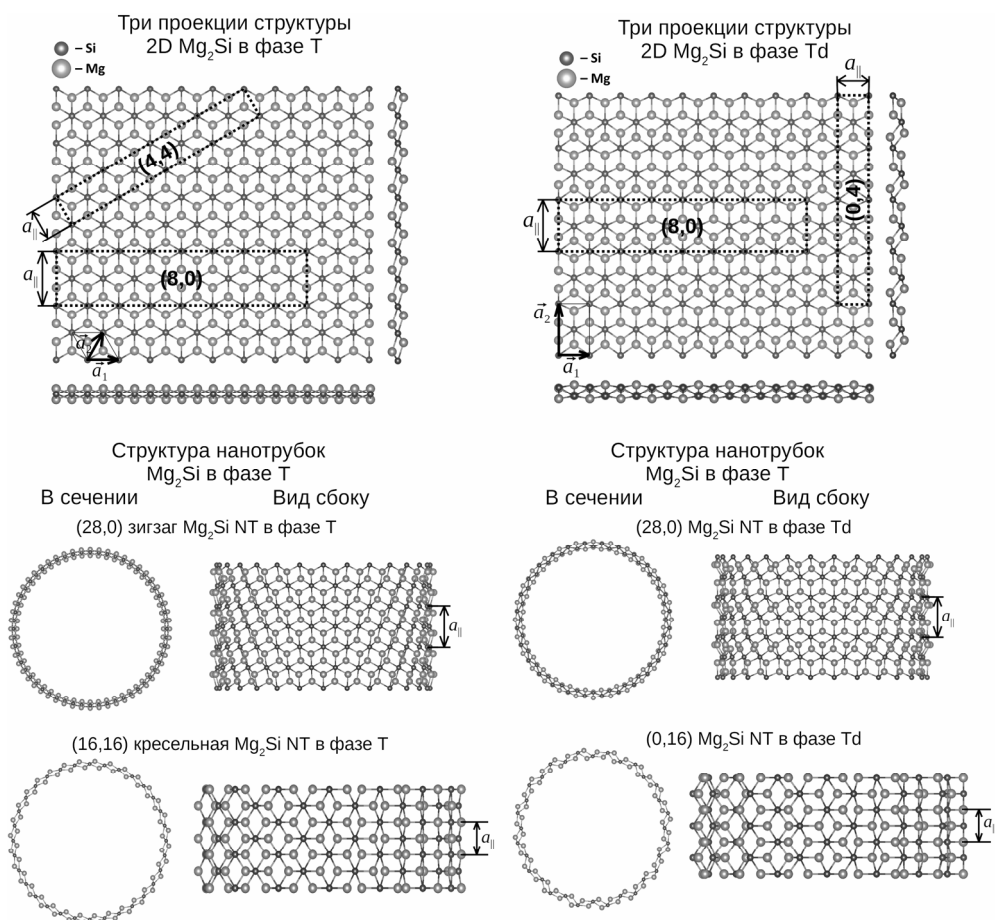


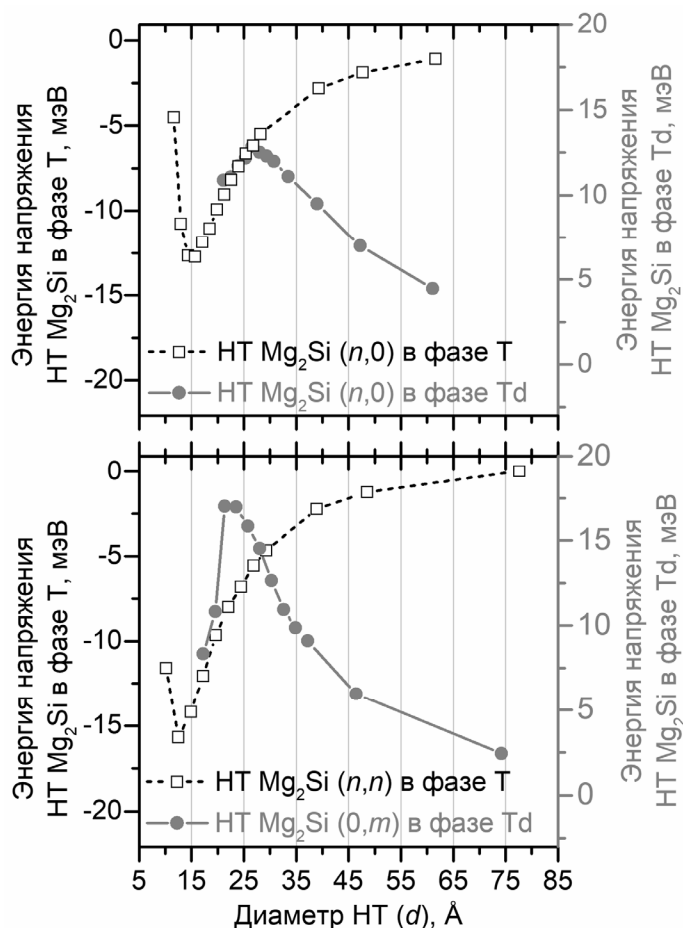
Рисунок 1. – Структуры 2D Mg_2Si в фазах Т и Тd и свёрнутых из них НТ Mg_2Si . Векторы решётки $\vec{a}_1$ и $\vec{a}_2$ 2D структур и параметр решётки НТ $a_{||}$ также представлены.

На 2D структурах пунктирной линией приведены примеры нанолент, необходимых для сворачивания НТ с указанными хиральными векторами

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 представлена зависимость энергий напряжения НТ Mg_2Si от их диаметра (d) (диаметр определяется, как средний диаметр трубки, образуемой атомами кремния). Поскольку в пределе бесконечного диаметра НТ физически эквивалентна 2D структуре, при увеличении диаметра энергия напряжения НТ стремится к нулю. При уменьшении диаметра энергия напряжения НТ Mg_2Si в фазе Тd увеличивается, как это имеет место для углеродных НТ [1] и НТ дихалькогенидов тугоплавких металлов [9] в связи с увеличением напряжения в химических связях, которое вызвано кривизной стенки НТ. Кроме того, обнаружено, что с уменьшением диаметра в НТ Mg_2Si в фазе Тd уменьшается искажение, отличающее их от соответствующих НТ в фазе Т. В связи с этим полная энергия НТ Mg_2Si в фазе Тd начинает стремиться к энергии НТ в фазе Т. Начиная с НТ (14,0) и (0,6) происходит фазовый переход из Тd

фазы в фазу Т. Этот фазовый переход обусловлен только силами, действующими на атомы, так как расчеты проводились при 0 К. Не исключено, что при увеличении температуры фазовый переход сдвинется в сторону больших диаметров.



**Рисунок 2. – Энергии напряжения НТ Mg_2Si в зависимости от их диаметра (d).
Представлены две шкалы энергии, которые сдвинуты друг относительно друга
на величину разности полных энергий 2D Mg_2Si в фазе Т и фазе Тd.
Линии, соединяющие точки, физического смысла не имеют**

С другой стороны, энергия напряжения НТ Mg_2Si в фазе Т, напротив, уменьшается при уменьшении диаметра, несмотря на вводимые кривизной стенки НТ напряжения в химических связях. Начиная с (19,0) и (12,12) НТ Mg_2Si в фазе Т ($d = 26.8$ и 29.3 Å, соответственно) обнаружено, что они имеют меньшую полную энергию, чем НТ в фазе Тd. С дальнейшим уменьшением диаметра на графике энергии напряжения наблюдается минимум, который приходится на НТ Mg_2Si в фазе Т (11,0) ($d = 15.7$ Å) и (5,5) ($d = 12.5$ Å). Расстояние двумя минимумами энергии напряжения для НТ различных хиральностей пренебрежимо мало (~ 3 мэВ). При сильном уменьшении радиуса НТ наблюдается резкий подъём энергии напряжения в связи с чрезмерным изменением угла между Mg-Si-Mg связями, вызванным кривизной стенки

НТ, или в связи с нежелательным взаимодействием между атомами, в результате уменьшения расстояний между ними.

Так как не проводился расчет фононного спектра НТ Mg_2Si с целью определения их динамической стабильности из-за необходимости слишком больших вычислительных и временных ресурсов, по поводу стабильности НТ Mg_2Si можно сказать следующее. Аналогично тому, как из двух близких 2D структур Mg_2Si (отличающихся друг от друга некоторым искажением) динамически стабильной оказывается только та, которая обладает меньшей полной энергией (нулевых колебаний атомов достаточно, чтобы исказить фазу Т в фазу Тd), можно предположить, что динамически стабильными являются только те НТ Mg_2Si , которые обладают меньшей полной энергией.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты теоретического исследования нанотрубок Mg_2Si показали, что 2D Mg_2Si в фазе Т может стабилизироваться не только посредством искажения структуры в фазу Тd, но посредством сворачивания двумерной структуры в НТ, благодаря увеличивающейся кривизне структуры. Было обнаружено, что НТ Mg_2Si с диаметром более 27 – 29 Å стабильны в фазе Тd, тогда как при уменьшении диаметра наблюдается фазовый переход в фазу Т.

На зависимости энергии напряжения НТ Mg_2Si от диаметра имеется минимум. Известно, что наличие такого минимума приводит к монодисперсности синтезированных на эксперименте НТ по отношению к их диаметру [10], что является очевидным преимуществом исследуемых НТ Mg_2Si . Результаты работы также предсказывают отсутствие монодисперсности синтезируемых НТ Mg_2Si по их хиральности.

Дальнейшее исследование физических свойств НТ Mg_2Si позволит оценить перспективы их использования в устройствах нанoeлектроники нового поколения.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Dresselhaus, G. Physical properties of carbon nanotubes / G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, R. Saito. – London : Imperial College Press, 1998. – 259 p.
2. Rao, C. N. R. Inorganic nanotubes / C. N. R. Rao, M. Nath // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 2004. – Vol. 362, № 1823. – P. 2099–2125.
3. Rise of silicene: A competitive 2D material / J. Zhao [et al.] // Prog. Mater. Sci. – 2016. – Vol. 83. – P. 24–151.
4. Quasi-2D silicon structures based on ultrathin Me_2Si (Me = Mg, Ca, Sr, Ba) films / D. B. Migas [et al.] // Surface Science. – 2018. – Vol. 670. – P. 51–57.
5. Stability of 2D Alkaline-Earth Metal Silicides, Germanides and Stannides / A. Yu. Alekseev [et al.] // International Journal of Nanoscience. 2019. – Vol. 18, № 03n04. – P. 1940013.
6. Structural stability and electronic properties of 2D alkaline-earth metal silicides, germanides, and stannides / A. Y. Alekseev [et al.] // Japanese Journal of Applied Physics. 2020. – Vol. 59. – P. SF0801.
7. Kresse, G. Efficiency of *ab-initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Computational Materials Science. – 1996. – Vol. 6, № 1. – P. 15–50.
8. Perdew, J. P. Generalized gradient approximation made simple / J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Physical review letters. – 1996. – Vol. 77, № 18. – P. 3865.
9. Seifert, G. Stability of metal chalcogenide nanotubes / G. Seifert, T. Köhler, R. Tenne // The Journal of Physical Chemistry B. – 2002. – Vol. 106, № 10. – P. 2497–2501.
10. Origin of the strain energy minimum in imogolite nanotubes / S. U. Lee [et al.] // The Journal of Physical Chemistry C. – 2011. – Vol. 115, № 13. – P. 5226–5231.