

**ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ
УСТОЙЧИВОСТИ МНОГОСЛОЙНЫХ КРЕМНИЕВЫХ НАНОТРУБ
РАЗЛИЧНОГО РАЗМЕРА И ХИРАЛЬНОСТИ С ПОМОЩЬЮ
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ**

Кузик В.Р.

**Научный руководитель — доцент Кузубов А. А.
Сибирский федеральный университет**

Формирование нанонитей, нанокластеров и нанотруб для кремния весьма благоприятно из-за существующей sp^3 -гибридизации. Он играет большую роль как фундаментальный компонент в интегральных микросхемах и, следовательно, в микроэлектронных разработках.

Основной метод получения многослойных кремниевых нанотруб из монооксида кремния – гидротермальный. Однако в данном случае практически невозможно точно определить, какие именно по хиральности получаются нанотрубки. Поэтому, целью данной работы является исследование возможности формирования кремниевых нанотруб и их энергетической стабильности.

В работе рассматривались однослойные и многослойные кремниевые нанотрубки (SiNTs) различной структуры. Первый тип структуры – h-SiNTs подобны углеродным нанотрубкам. Второй тип структуры – g-SiNTs, это так называемые «gearlike» структуры. Помимо этого, рассматривались двухслойные h-структуры с дополнительными атомами кремния в промежуточном слое.

Проводился квантово-химический расчет энергий данных систем в рамках формализма функционала локальной плотности (DFT) с использованием пакета VASP (Vienna Ab-Simulation Package). Первоначально проводился расчет оптимального вектора трансляции вдоль оси трубы. Исследуемые структуры периодичны вдоль данного вектора трансляции, следовательно, энергия данных систем будет зависеть от его правильного выбора. Полученный оптимальный вектор, используется для окончательной оптимизации структуры и определения ее энергии.

В качестве примера на рисунке 1 представлены однослойные кремниевые трубки с различной структурой.

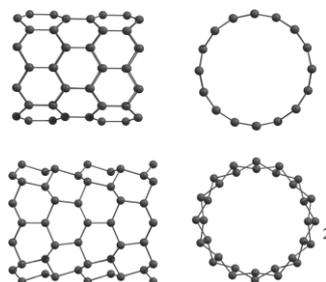


Рис. 1. Структуры однослойных кремниевых нанотрубок:

1 – h-структура с хиральностью $(n,0)$; 2 – g-структура с хиральностью $(n,0)$

Особенность рассматриваемых структур состоит в том, что подобно другим элементам четвертой группы, кремний легко образует четыре ковалентных сигма связи в тетрагональной координации (sp^3 -гибридизация) и обычно кристаллизуется в алмазоподобную структуру. В результате выяснилось, что наиболее энергетически выгодными являются двухслойные структуры, состоящие из g-трубок, так как в данном случае атомы кремния находятся в более выгодной гибридизации. Таким образом, определена

энергия систем, приходящаяся на атом, и энергия связи Si-Si между внешней и внутренней трубками. Последняя вычислялась по формуле:

$$E_{Si-Si} = (E_{полн.} - E_{внеш.} - E_{внутр.}) / N_{Si}, \quad (2)$$

где $E_{внеш.}$ – полная энергия внешней трубки, $E_{внутр.}$ – полная энергия внутренней трубки. В качестве примера в таблице 2 представлены значения энергии для наиболее стабильных трубок.

Табл. 2. Энергии двухслойных систем g-типа.

Структуры	Энергия системы, eV/atom	E_{Si-Si} (между трубками)
(10,0) – (15,0)	-4,821	-0,187
(8,0) – (12,0)	-4,806	-0,185

Наиболее вероятно формирование структур с небольшим по толщине промежуточным слоем между внешней и внутренней трубками (~0,24 нм). Данные двухслойные g-системы характеризуются более низкими энергиями, приходящимися на атом. Это объясняется тем, что происходит перекрывание некомпенсированных p-облаков атомов внешней и внутренней трубок. Причем как показано на рисунке 3, в зависимости от числа совпадающих шестиугольных ячеек происходит определенное искажение структуры, что способствует увеличению ее термодинамической устойчивости.

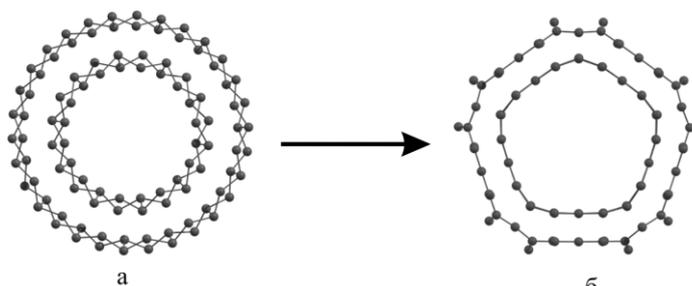


Рис. 3. Структура двухслойной кремниевой нанотрубки (10,0) – (15,0) с пятью совпадающими шестиугольными ячейками:
а – первоначальный вид; б – после оптимизации

Для многослойных (количество слоев превышает два) g – структур при расстоянии между внешней и внутренней трубками ~0,31 нм наблюдается наибольшая энергетическая стабильность по сравнению с двухслойными структурами. В данном случае также наблюдается искажение структуры после оптимизации ее геометрии. Также можно сказать, что при увеличении количества слоев система стремится к так называемому пределу, становится похожей по структуре на кремниевую пластинку, так как sp^2 -гибридизация полностью вырождается и наблюдается исключительно sp^3 -гибридизация.