

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НАНОЛЕНТ C<sub>3</sub>N И C<sub>5</sub>N

Николаева К.М.

научный руководитель канд. физ.-мат. наук Кузубов А.А.

*Сибирский федеральный университет*

Все цифровые устройства в процессе своего развития имеют тенденцию к миниатюризации, соответственно, ученым приходится искать новые компактные материалы нанoeлектроники. Графеновые наноленты представляют собой вполне подходящий материал для изготовления полевых транзисторов, являющихся стандартными узлами всех микросхем. При этом транзисторы на их основе могут с успехом работать даже при комнатной температуре, в то время как предшествующие разработки функционировали только при низких температурах в силу своей большей толщины. Поскольку свойства графеновых нанолент сильно зависят от их геометрических параметров (толщина, ширина, типа краев zigzag или armchair), химические и структурные модификации нанолент могут резко изменить их производительность. Одним из наиболее распространенных способов изменения электронных и химических свойств нанолент является допирование такими атомами, как бор и азот в связи с образованием более прочной ковалентной связи, по сравнению со связью C-C. К тому же допирование азотом может значительно увеличить проводимость графеновых нанолент, изменить ширину запрещенной зоны. Следовательно, допирование азотом представляется интересным и перспективным с точки зрения управления электронными свойствами материала.

Целью данной работы являлось квантово-химическое исследование энергетической стабильности и электронных свойств нанолент C<sub>3</sub>N и C<sub>5</sub>N.

В настоящей работе исследования осуществлялись с помощью квантово-химического моделирования в программном пакете VASP в рамках метода функционала плотности (DFT) с использованием базиса плоских волн и PAW формализма. Вычисления проводились с применением обобщенного градиентного приближения (GGA) – обменно-корреляционного функционала PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) с коррекцией Grimme, учитывающей ван-дер-ваальсово взаимодействие.

На начальном этапе были оптимизированы гексагональные элементарные ячейки монослоев C<sub>3</sub>N и C<sub>5</sub>N (рисунок 1 а), б)). Для отделения образов плоскостей, находящихся в соседних ячейках, в условиях расчетов с периодическими условиями, задавался вакуумный промежуток 10 Å, вдоль нормали к плоскости. Обратное пространство в первой зоне Брюллюэна автоматически разбивалось на сетку по схеме Монхорста-Пака, количество k-точек вдоль каждого из направлений составляло 12x12x1. Энергия обрезания плоских волн в расчетах была равна 400 эВ.

Далее с помощью элементарных гексагональных ячеек C<sub>3</sub>N и C<sub>5</sub>N были смоделированы наноленты различной толщины двух типов armchair (таблица 1, 2, рисунок 2а), б) и zigzag. При этом были рассмотрены два случая пассивации краев нанолент. В первом случае края были пассивированы полностью (H<sub>CN</sub>), во втором с водородом был связан только углерод (H<sub>C</sub>). При нахождении оптимальной геометрии нанолент, ввиду одномерности структуры, количество k-точек вдоль каждого из направлений составляло 12 × 1 × 1.

Для сравнения энергетической стабильности расчет энергии образования наноленты проводился по формуле:

$$E = E_{nanoribbon} - n_1 \cdot E_{unitcell} - m \cdot E_{H_2} - k \cdot E_{graphene}, \quad (1)$$

где  $E_{nanoribbon}$  – полная энергия наноленты,  $E_{unitcell}$  – энергия элементарной гексагональной ячейки монослоя  $C_3N$  ( $C_5N$ ),  $E_{graphene}$  – энергия элементарной ячейки графена,  $E_{H_2}$  – энергия молекулы водорода,  $n_1$  – количество атомов азота в структуре,  $m$  – количество атомов водорода,  $k$  – количество избыточных атомов углерода.

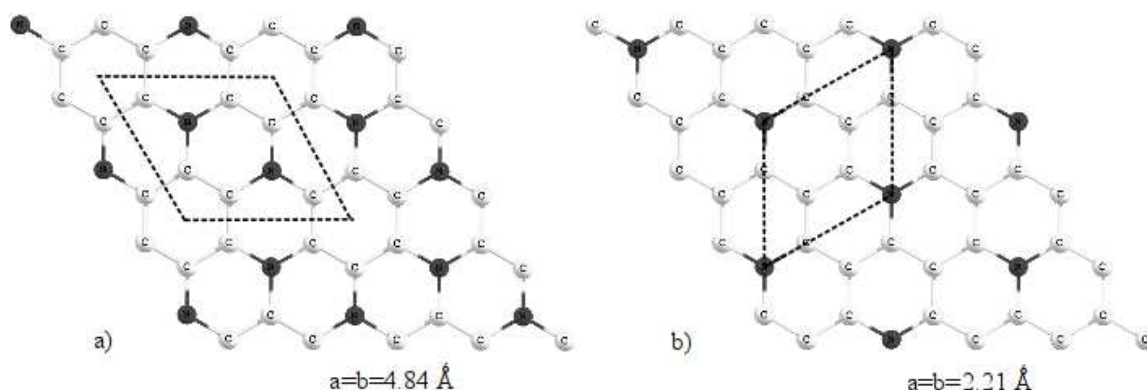


Рисунок 1 Элементарные гексагональные ячейки а) –  $C_3N$ , б) –  $C_5N$   $a=b=2.21\text{Å}$

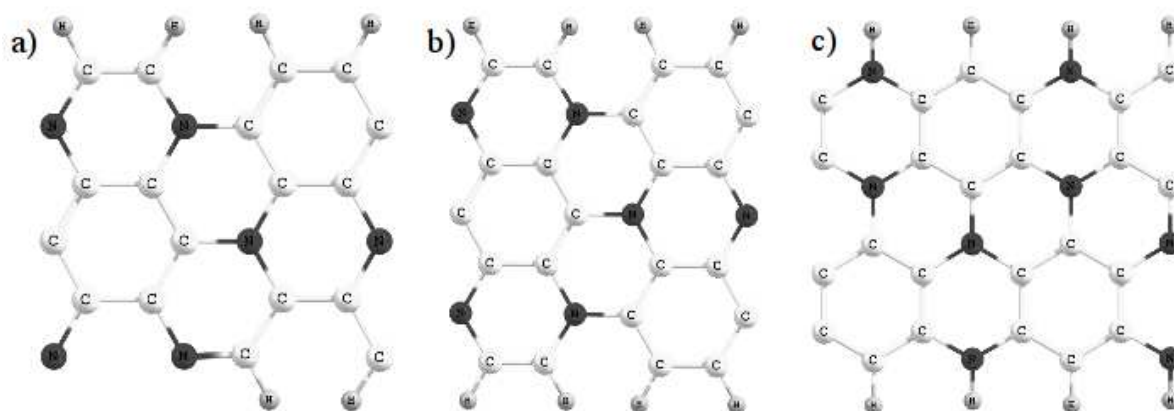


Рисунок 2 Наноленты  $C_3N$  а) – нанолента типа armchair 3-C-C с типом пассивации  $H_C$ , б) – нанолента типа armchair 3-C-CN с типом пассивации  $H_C$ , в) – нанолента типа zigzag 3-CN-CN с типом пассивации  $H_{CN}$

Согласно полученным результатам (таблица 1,2), все ленты  $C_5N$  являются стабильными в отличие от  $C_3N$ . Среди нанолент типа zigzag наиболее выгодными являются 3-CN-CN  $C_3N$  и 5-C-CN  $C_5N$ . При этом стоит отметить, что пассивация типа  $H_{CN}$  стабилизирует структуру. Что касается нанолент типа armchair, как для  $C_3N$ , так и для  $C_5N$  самой стабильной является краевая конфигурация C-C. В отличие от нанолент  $C_5N$  типа zigzag, пассивация  $H_{CN}$  наоборот дестабилизирует структуру. В связи с этим, можно предположить, что на стабильность структур влияют не только тип наноленты, пассивации и краевой конфигурации, но и соотношение C:N.

Далее в работе были изучены электронные свойства нанолент. С этой целью был проведен расчет зонной структуры. Число промежуточных точек вдоль исследуемого направления  $G-X$  в первой зоне Бриллюэна равнялось 20. Согласно полученным результатам все наноленты  $C_5N$  являются проводниками. В случае  $C_3N$  наноленты типа zigzag также обладают проводниковыми свойствами, за исключением структуры с краевой конфигурацией CN-CN и пассивацией типа  $H_{CN}$ . В свою очередь большинство нанолент типа armchair являются полупроводниками (таблица 2).

Таблица 1 Величины энергии образования и ширины запрещенной зоны в зависимости от типа нанолент  $C_3N$

Тип наноленты	Тип пассивации	Толщина и тип краевой конфигурации	Соотношение C:N	Энергия образования наноленты, эВ	Ширина щели, эВ
zigzag	$H_C$	2-C-CN	3:1	0.124	0.00
		3-C-C	3:1	0.602	0.00
		3-CN-CN	3:1	-0.382	0.00
		4-C-CN	3:1	0.230	0.00
	$H_{CN}$	2-C-CN	3:1	-0.400	0.00
		3-CN-CN	3:1	-1.478	1.04
4-C-CN		3:1	-0.459	0.04	
Armchair	$H_C$	2-CN-CN	7:3	-0.462	0.00
		2-C-C	4:1	-3.968	0.98
		2-C-CN	3:1	0.663	0.07
		3-CN-CN	5:2	-0.221	0.00
		3-C-C	11:3	-3.989	0.69
		3-C-CN	3:1	-0.334	0.37
	$H_{CN}$	2-CN-CN	7:3	-0.529	0.09
		2-C-CN	3:1	-0.851	1.20
		3-CN-CN	5:2	-0.744	0.28
		3-C-CN	3:1	-0.765	0.73

Таблица 2 Величины энергии образования и ширины запрещенной зоны в зависимости от типа нанолент  $C_5N$

Тип наноленты	Тип пассивации	Толщина и тип краевой конфигурации	Соотношение C:N	Энергия образования наноленты, эВ
zigzag	$H_C$	4-C-CN	5:1	-0.794
		5-C-CN	5:1	-0.813
	$H_{CN}$	4-C-CN	5:1	-0.869
		5-C-CN	5:1	-0.920
Armchair	$H_C$	3-CN-CN	11:3	-1.087
		3-C-CN	13:3	-0.533
		4-C-CN	5:1	-0.466
		4-CN-CN	4:1	-1.064
		3-C-C	6:1	-1.299
		4-C-C	5:1	0.006
		5-C-C	19:3	-2.370
		$H_{CN}$	3-CN-CN	11:3
	3-C-CN		13:3	-0.346
	4-C-CN		5:1	-0.274
	4-CN-CN		4:1	-0.697

В заключение из проделанной работы можно сделать вывод о зависимости ширины запрещенной зоны от типа нанолент, пассивации, краевой конфигурации и соотношения C:N. Следовательно, наноленты на основе  $C_3N$  и  $C_5N$  могут использоваться для управления электронными свойствами материала.