

УДК 538.915

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРАФЕНОВЫХ СТРУКТУР ПРИ АЗОТНОМ ДОПИРОВАНИИ

Камара Д., Маркидонов А.В.

Камара Джимбрил, аспирант, cadj87269@gmail.com, Россия, Новокузнецк, ФГБОУ ВО «Сибирский государственный индустриальный университет»

Маркидонов Артем Владимирович, д.ф.-м.н., доц., markidonov_artem@mail.ru, Россия, Новокузнецк, Кузбасский гуманитарно-педагогический институт ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет»,

Аннотация: известно, что несмотря на значительный потенциал применения графена в нанoeлектронике, его использование ограничено отсутствием запрещённой зоны в энергетической структуре. Результаты исследования, базирующиеся на первопринципных расчётах в рамках теории функционала плотности, демонстрируют формирование запрещённой зоны и смещение уровня Ферми выше точки Дирака при азотном допировании, что трансформирует графен в полупроводник *n*-типа.

Ключевые слова: графен, азот, допант, моделирование.

Графен представляет собой двумерную аллотропную модификацию углерода, обладающую выдающимися физико-механическими характеристиками [1-3]. Теоретическая подвижность носителей заряда в графеновых структурах достигает значений порядка $1.5 \cdot 10^6 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$. Модуль Юнга графена составляет приблизительно 1 ТПа, что определяет его как один из наиболее прочных материалов. Теплопроводность графена достигает $5000 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$, что является рекордным показателем среди известных материалов.

Несмотря на перспективность графена как материала для нанoeлектроники, его практическое применение ограничено отсутствием запрещённой зоны в энергетической структуре. Одним из эффективных методов модификации электронных свойств графена является внедрение гетероатомных примесей, в частности, атомов азота.

Цель работы заключается в исследовании модификации электронных свойств графеновых структур посредством внедрения атомов азота с применением методов компьютерного моделирования.

Исследование проводилось с применением метода функционала плотности (DFT) в рамках программного комплекса VASP. Электрон-ионное взаимодействие описывалось посредством PAW-псевдопотенциалов [4]. Обменно-корреляционные эффекты учитывались в рамках обобщённого градиентного приближения (GGA) с параметризацией Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [5].

Моделирование осуществлялось для гексагональной суперячейки размером 4×4 , содержащей 32 атома. Концентрация азотных примесей варьировалась в диапазоне от 3,125% до 18,750%. Параметры моделирования были оптимизированы до достижения сходимости полной энергии при энергии обрезания = 500 эВ и сетке k -точек $3 \times 3 \times 3$ (см. рис. 1).

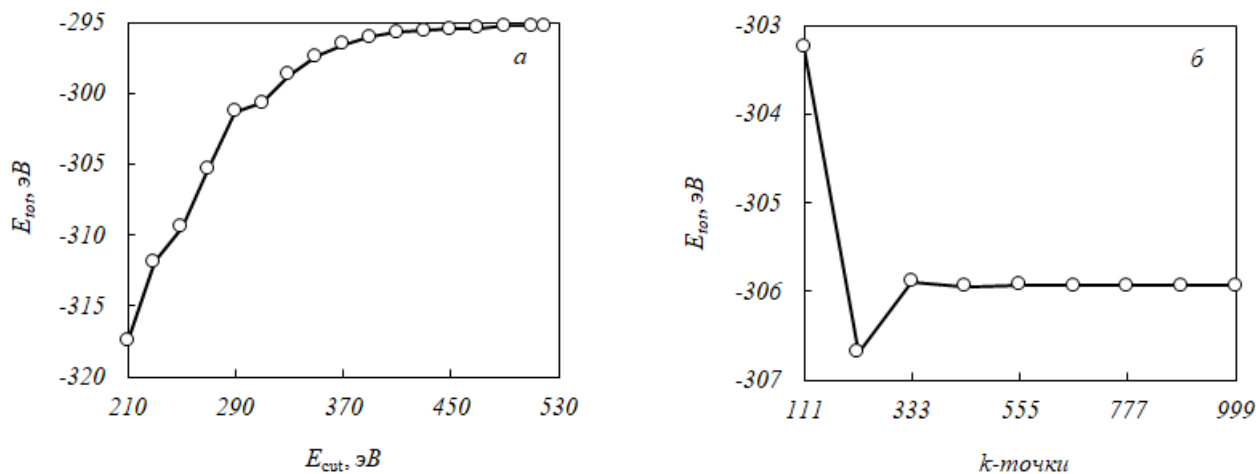


Рис.1. Сходимость полной энергии (E_{tot}) в зависимости от энергии обрезания (E_{cut}) (а) и количества k -точек (б)

Анализ структурных характеристик показал сохранение стабильности кристаллической решётки при внедрении атомов азота. Наблюдается незначительное сокращение межатомных расстояний при сохранении гексагональной симметрии структуры (см. табл. 1).

Таблица 1
Значения длин (Å) межатомных связей в графене, при различной концентрации (n , %) атомов азота

n	0	3.125	6.25	9.37	12.5	15.62	18.75
C-C (L)	1.424	1.421	1.422	1.42	1.425	1.417	1.418
C-C (P)	1.424	1.411	1.392	1.396	1.388	1.381	1.374
C-N	-	1.422	1.414	1.405	1.394	1.384	1.381

Исследование электронных свойств выявило формирование запрещённой зоны и смещение уровня Ферми выше точки Дирака (см. рис. 2). Установлено, что графен трансформируется в полупроводник n -типа с возможностью регулирования ширины запрещённой зоны посредством изменения концентрации и пространственного распределения азотных примесей.

Таким образом, проведённое исследование демонстрирует возможность целенаправленной модификации электронных свойств графена посредством контролируемого азотного допирования. Полученные результаты открывают перспективы для создания новых поколений электронных устройств на основе

модифицированного графена. Методология исследования подтвердила свою эффективность в изучении структурных и электронных характеристик графеновых систем.

При норме допинга 6,25% мы получили наивысший разрыв около 0,250 эВ. Наблюдая PDOS, мы видим изменение электронной плотности частиц вокруг уровня Ферми в основном из-за p-орбиталей атомов азота.

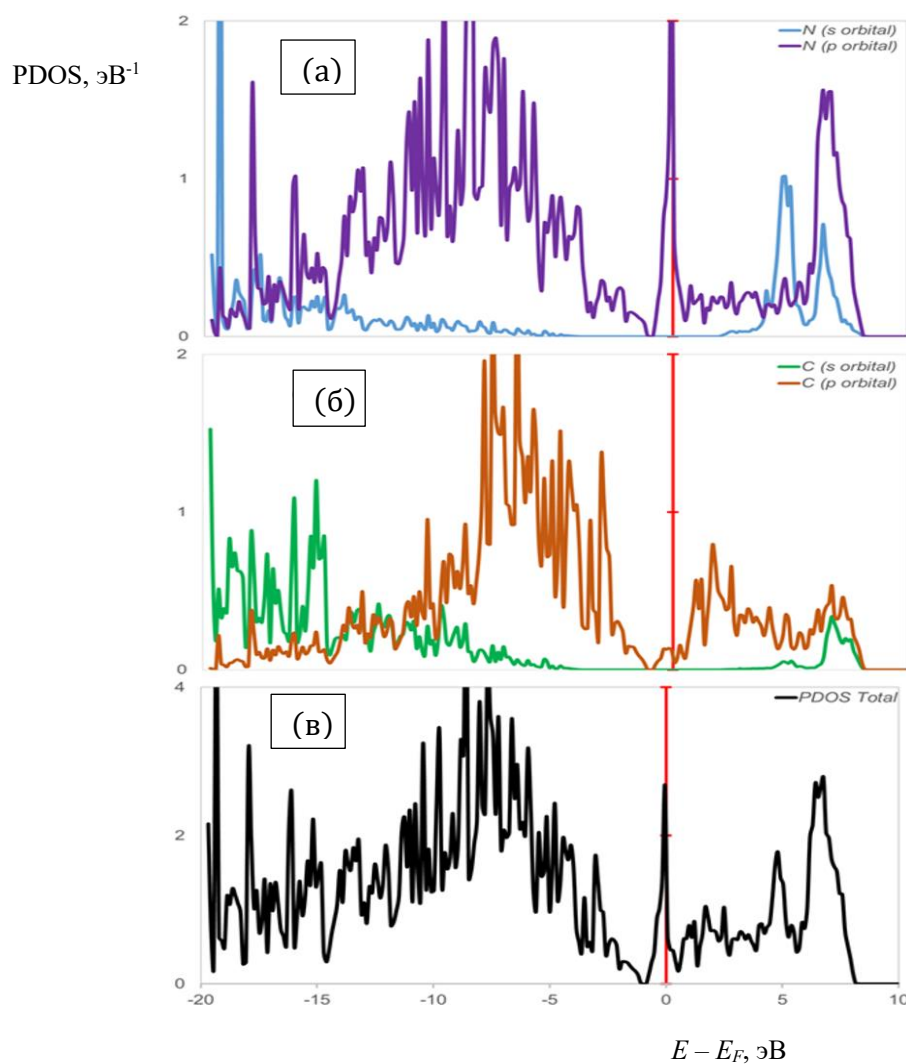


Рис.2. PDOS для атомов азота (а), углерода (б) и полный PDOS (в) для графена, допированного азотом (концентрация 6.25%)

Список литературы

1. Bolotin K.I., Sikes K.J., Jiang Z., Klima M., Fudenberg G., Hone J., Kim P., Stormer H.L. Ultrahigh electron mobility in suspended graphene // Solid State Communications. 2008. V.46. Pp.351-355.
2. Lee C., Wei X., Kysar J.W., Hone J. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // Science. 2008. V.321. Pp.385-388.
3. Balandin A.A., Ghosh S., Bao W., Calizo I., Teweldebrhan D., Miao F., Lau C.N. Superior thermal conductivity of single-layer graphene // Nano Letters. 2008. V.8. №3 Pp.902-907.
4. Jolleta F., Torrenta M., Holzwarth N. Generation of Projector Augmented-Wave atomic data: A 71 element validated table in the XML format // Computer Physics Communications. 2014. V.85. Pp.1246-1254.
5. Henderson T.M., Janesko B.G., Scuseria G.E. Generalized gradient approximation model exchange holes for range-separated hybrids // The Journal of Chemical Physics. 2008. V.128. №19. 194105.

MODIFICATION OF THE ELECTRONIC CHARACTERISTICS OF GRAPHENE STRUCTURES BY NITROGEN DOPING

Camara D., Markidonov A.V.

Annotation: It is known that despite the significant potential of graphene application in nanoelectronics, its use is limited by the absence of a band gap in the energy structure. The results of the study, based on basic calculations within the framework of density functional theory, demonstrate the formation of a band gap and a shift of the Fermi level above the Dirac point during nitrogen doping, which transforms graphene into an n-type semiconductor.

Key words: graphene, nitrogen, dopant, modeling.