

УДК 621.382

## ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КРЕМНИЕВЫХ НАНОШНУРОВ

Ю.В. ГУСАКОВА, Д.Б. МИГАС

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
П. Бровка, 6, Минск, 220013, Беларусь

Поступила в редакцию 8 июня 2010

Проведено моделирование стабильности кремниевых шнуров с ориентацией  $\langle 001 \rangle$  диаметром 0,82–1,818 нм. Установлено, что с увеличением диаметра шнура в этих пределах ширина запрещенной зоны уменьшается с 3,42 эВ до 2,27 эВ. Реконструкция поверхности нанOSHнура (формирование димеров на поверхности) влияет на его электронные свойства – приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны.

*Ключевые слова:* кремниевые нанOSHнуры, ширина запрещенной зоны, полуэмпирический метод Хартри-Фока.

### Введение

За последние десятилетия сильно возрос интерес к наноструктурам из кремния, особенно к нанOSHнурам, поскольку технологически они хорошо совместимы с существующей кремниевой технологией. Они перспективны для дальнейшей миниатюризации элементов интегральных микросхем. Экспериментально уже получены нанOSHнуры из кремния с пассивированной водородом поверхностью [1, 2]. Однако их электронные свойства остаются малоизученными, что определяет актуальность их теоретического моделирования.

Теоретическое изучение структуры и электронных свойств кремниевых нанOSHнуров проводилось ранее с использованием трудоемких *ab-initio* методов [3, 4]. Цель данного исследования – расчет и анализ фундаментальных электронных свойств кремниевых нанOSHнуров с использованием полуэмпирического метода Хартри-Фока, использование которого отличается меньшими затратами при приемлемой точности и объективности результатов расчетов. Рассматриваются кремниевые нанOSHнуры с ориентацией  $\langle 001 \rangle$ , поверхность которых пассивирована водородом.

### Методика расчета

В проведенных расчетах фундаментальных электронных свойств кремниевых  $\langle 001 \rangle$  нанOSHнуров использовали полуэмпирический метод Хартри-Фока в приближении NDDO с параметризацией PM5. Первоначально из объемного монокристаллического кремния «вырезали» шнуры с ориентацией  $\langle 001 \rangle$ , в поперечном сечении которых было 21, 45 и 77 атомов кремния. Атомы кремния формируют направленные ковалентные связи в соответствии с  $sp^3$ -гибридизацией и на поверхности нанOSHнура неизменно образуют оборванные связи, делающие поверхностные атомы химически реактивными. Суть пассивации поверхности состоит в пассивации оборванных связей поверхностных атомов, что приводит к химической стабильности структуры. Все оборванные связи атомов кремния насыщали водородом. Сечение рассматриваемых нанOSHнуров представляет собой ромб с  $\{011\}$  гранями, в то время как  $\{001\}$  грани выполняют роль кромок [4].

Другим важным фактором, влияющим на структурные свойства нанощнуров, является реконструкция  $\{001\}$  кромок, на которых атомы кремния имеют две оборванные связи. Соседние атомы поверхности сближались и образовывали ковалентную связь между собой, таким образом формируя димер. Изучали два вида структур: первые – без димеров и имеющие атомы кремния с двумя оборванными связями; второй тип – с димерами. На  $\{011\}$  гранях все поверхностные атомы кремния имеют только одну оборванную связь. Рассматривали нанощнуры различного диаметра, но с одинаковой формой поперечного сечения. Проводили полную релаксацию атомной структуры нанощнуров.

### Результаты и их обсуждение

Структуры рассматриваемых нанощнуров представлены на рис. 1.

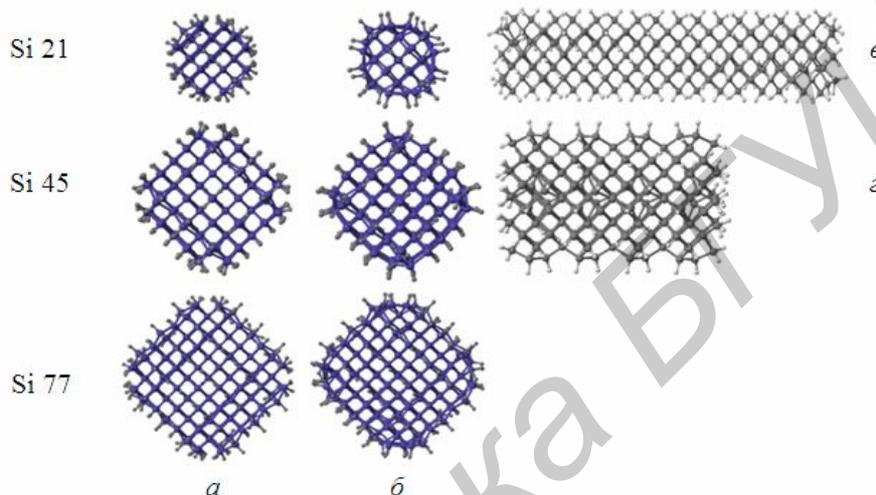


Рис. 1. Кремниевые нанощнуры  $\langle 001 \rangle$ , содержащие в сечении 21, 45 и 77 атомов кремния: *a* – вид поперечного сечения нанощнуров без димеров на поверхности; *b* – вид поперечного сечения нанощнуров с димерами на поверхности; *c* – вид сбоку на нанощнур, содержащий 21 атом кремния в поперечном сечении, без димеров на поверхности,  $\text{Si}_{173}\text{H}_{180}$ ; *c* – вид сбоку на нанощнур, содержащий 45 атомов кремния в поперечном сечении, с димерами на поверхности,  $\text{Si}_{189}\text{H}_{116}$

Известно, что используемый для расчетов полуэмпирический метод дает заниженное значение межатомного расстояния и соответственно постоянной решетки для объемного кремния. Сравнение приведено в табл. 1.

Таблица 1. Значения постоянной решетки и межатомного расстояния для объемного кремния, полученные экспериментально и при расчетах методом PM5

Характеристика	Эксперимент	PM5
Постоянная решетки ( <i>a</i> ), нм	0,5431	0,5028
Межатомное расстояние ( <i>b</i> ), нм	0,23516	0,21773

Результаты контрольных расчетов постоянной решетки для объемного кремния дали значения меньше экспериментальных данных на 7,4%, что характерно для использованного метода и не влияет на качественную оценку обнаруживаемых закономерностей. Таким образом, нами проведено сравнение результатов расчетов для нанощнуров со значением межатомного расстояния, получаемого для объемного кремния при расчетах тем же методом. Межатомное расстояние для атомов кремния, находящихся не на поверхности нанощнура, близко к межатомному расстоянию в объемном кремнии. Межатомное расстояние увеличивается для атомов кремния, образующих поверхность нанощнура, и составляет порядка 2,184 Å. Для нанощнуров, имеющих димеры на своей поверхности, наблюдается изменение формы сечения – округление.

Результаты расчетов показали, что нанощнуры с димерами на  $\{001\}$  кромках будут иметь меньший диаметр (на 3–10%), чем нанощнуры без димеров. Это объясняется тем, что формирование димеров приводит к уменьшению межатомного расстояния для атомов, образующих димер, по сравнению с атомами в объеме. Также наблюдается уменьшение длины на-

ношнур с формированием димеров. Значения рассчитанной постоянной решетки вдоль наношнура приведены в табл. 2.

Таблица 2. Диаметр, длина, постоянная решетки для фрагментов наношнуров с димерами и без димеров на поверхности.

Число атомов кремния в поперечном сечении	Стехиометрия	Диаметр, нм	Длина, нм	Постоянная решетки, нм
Без димеров на поверхности				
Si 21	Si <sub>131</sub> H <sub>140</sub>	0,820	3,087	0,5145
Si 45	Si <sub>144</sub> H <sub>120</sub>	1,292	1,522	0,5073
Si 77	Si <sub>252</sub> H <sub>192</sub>	1,818	1,516	0,5053
С димерами на поверхности				
Si 21	Si <sub>131</sub> H <sub>92</sub>	0,739	2,994	0,499
Si 45	Si <sub>144</sub> H <sub>96</sub>	1,256	1,509	0,503
Si 77	Si <sub>252</sub> H <sub>168</sub>	1,74	1,512	0,504

Для исследуемых структур рассчитана теплота их образования в зависимости от количества атомов кремния – рис. 2.

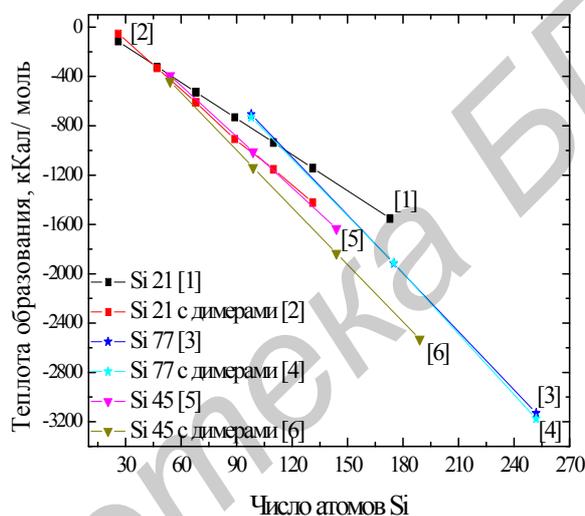


Рис. 2. Зависимость теплоты образования кремниевых наношнуров от количества составляющих их атомов

Все рассматриваемые кремниевые наношнуры являются устойчивыми. Об этом свидетельствует монотонное убывание теплоты образования с увеличением количества составляющих их атомов кремния. При одинаковом диаметре более энергетически выгодным является формирование наношнуров, имеющих димеры на поверхности. А с увеличением количества атомов будет более вероятным формирование структур с большими диаметрами, так как увеличивается отношение объема к поверхности шнура.

Для рассматриваемых наношнуров рассчитаны значения ширины запрещенной зоны, которые представлены на рис. 3. С увеличением диаметра кремниевого наношнура величина ширины запрещенной зоны уменьшается. Для наношнуров с диаметрами 0,82–1,818 нм, ширина запрещенной зоны лежит в диапазоне 3,42–2,27 эВ. Также для наношнуров с одинаковым количеством атомов в поперечном сечении шнуры, имеющие димеры на своей поверхности, имеют меньшую ширину запрещенной зоны. Однако с увеличением количества атомов, образующих структуру, данное различие по величине становится незначительным. Полученные значения для ширины запрещенной зоны достаточно хорошо согласуются с результатами расчета методом GW и LDA [5].

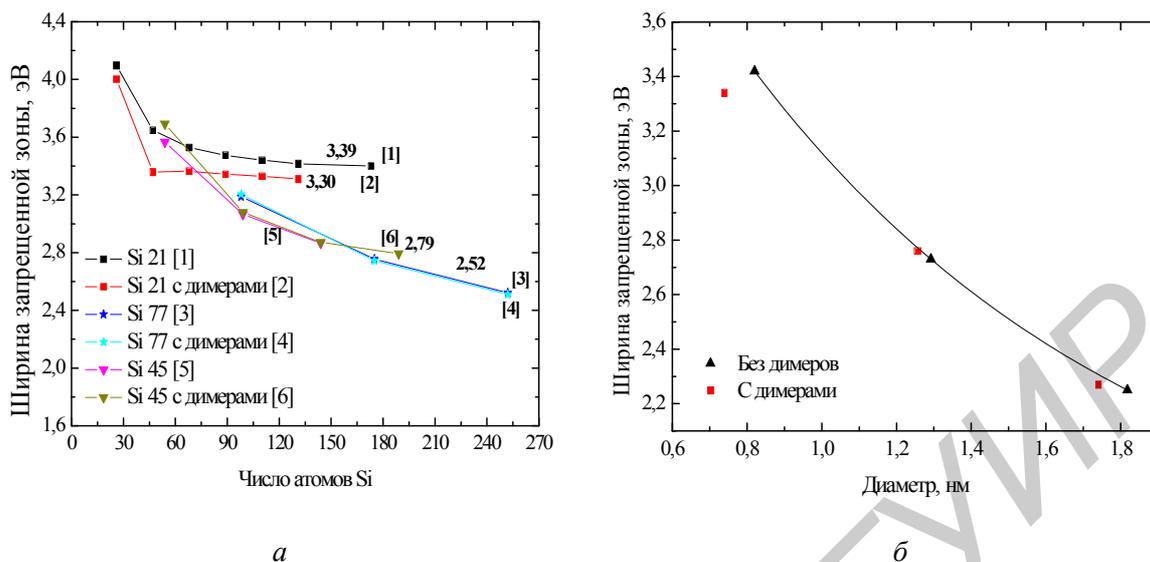


Рис. 3. Зависимость ширины запрещенной зоны кремниевых нанопроволок от количества атомов в нем (а); зависимость ширины запрещенной зоны от диаметра и реконструкции поверхности нанопроволок (б)

Полученная в результате расчетов (PM5) зависимость свидетельствует о том, что, контролируя диаметр и отсутствие/наличие димеров на поверхности кремниевых нанопроволок, можно варьировать ширину запрещенной зоны в них.

Авторы выражают благодарность профессору В.Е. Борисенко за полезное обсуждение результатов работы.

## FUNDAMENTAL ELECTRONIC PROPERTIES OF SILICON NANOWIRES

J.V. GUSAKOVA, D.B. MIGAS

### Abstract

Modeling of structural stability of silicon nanowires with the orientation  $\langle 001 \rangle$  and diameter 0,82–1,818 nm has been carried out. It was obtained, that with increase of diameter of nanowire in the specified range, band gap decreases from 3,42 eV to 2,27 eV. Surface reconstruction of nanowire (dimers on the surface) influence on its electronic properties – it leads to the decrease of band gap width.

### Литература

1. Wei Lu, Charles M. Lieber // J. Phys. D: Appl. Phys. 2006 Vol. 39. R 387
2. Thelander C., Agarwal P., Brongersma S. et al. // Mat. Today. 2006. Vol. 9, №10.
3. Lee B., Rudd R.E. // Phys. Rev. 2007. Vol. 75, 195328.
4. Migas D.B. // Journal of Applied Physics. 2005. Vol. 98, 054310.
5. Bruno M., Palumbo M., Marini A. et al. // Physical Review Letters 2007. Vol. 98, 036807.