

2. М.А. Михеев, И.М. Михеева / Основы теплопередачи. Учебное пособие для вузов 3-е изд., репринтное. – М.: ООО «ИД БАСТЕТ», 2010 г. – 344 с.

3. С.К. Лазарук, В.В. Дудич, Д.Н. Завальный и др. / Исследование джоулева разогрева оксида алюминия в процессе электрохимического анодирования // Доклады БГУИР. – 2016. – Т. 100. – С. 5–10.

4. S. Chu, K. Wada, S. Inoue, et al. / Fabrication of ideally ordered nanoporous alumina films and integrated alumina nanotubule arrays by high-field anodization // Adv. Mater. – Vol. 17. – 2005. – p. 2115.

**В. А. Скачкова** (УО «БГУИР», Минск)

Науч. рук. **В. Р. Стемпицкий**, канд. техн. наук, доцент

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВАКАНСИИ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ФОСФОРЕНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ**

В области изучения материалов большое внимание уделяется двумерным (2D) материалам, таким как графен, дихалькогениды переходных металлов, силицен и германен, благодаря их уникальным свойствам. Однако, такие приборы микро- и наноэлектроники, как МОП-транзисторы, требуют наличие запрещенной зоны, шириной которой можно управлять. В последнее время наблюдается рост интереса к фосфорену – 2D-материалу, который представляет собой монослой черного фосфора, наиболее устойчивого аллотропа фосфора, обладающего высокой подвижностью носителей заряда и наличием конечной ширины запрещенной зоны.

В отличие от графена, фосфорен обладает прямой запрещенной зоной, величина которой 1-2 эВ, в зависимости от количества слоев [1]. Кроме того, он обладает высоким значением полевой подвижности носителей заряда (экспериментальное значение –  $10^3$  см<sup>2</sup>/В·с [2], предсказанное значение подвижности дырок –  $10^5$  см<sup>2</sup>/В·с [3]). Таким образом, важно исследовать влияние точечных дефектов на механизмы захвата носителей заряда, что приводит к ограничению их полевой подвижности.

Представлены результаты изучения влияния единичной вакансии на электронные свойства фосфорена. Теоретические исследования проводились в рамках теории функционала электронной плотности, реализованной в программе VASP [4]. Взаимодействие между атомными остовами и валентными электронами описывалось методом

присоединенных плоских волн (PAW). Структурная оптимизация достигалась при разнице полной энергии между двумя последними шагами менее  $1 \cdot 10^{-6}$  эВ. Энергией обрезания составила 400 эВ. Интегрирование в импульсном пространстве проводилось по сетке  $k$ -точек  $6 \times 6 \times 1$ , сгенерированной по Гамма-схеме. Зонная структура рассчитывалась по контуру  $\Gamma$ - $X$ - $\Gamma$  первой зоны Бриллюэна. Исследование вакансии проводилось с использованием суперячейки, состоящей из  $4 \times 4 \times 1$  элементарных ячеек (рисунок 1), для минимизации влияния вакансий друг на друга. Вакуумный слой между слоями фосфора равен  $17 \text{ \AA}$ .

Удаление атома из структуры однослойного фосфора ведет к образованию трех разорванных связей. Поскольку фосфорен обладает механической гибкостью, релаксация структуры приведет к перестроению вакансии. Ниже представлена идеальная структура фосфорена с вакансией (без реконструкции) (рисунок 2, а), и реконструированная структура фосфорена с нейтральной вакансией (рисунок 2, б).

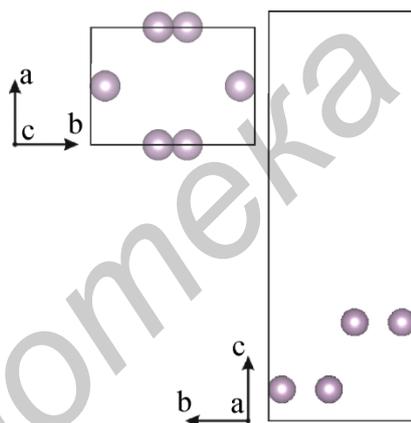


Рисунок 1 – Элементарная ячейка фосфорена

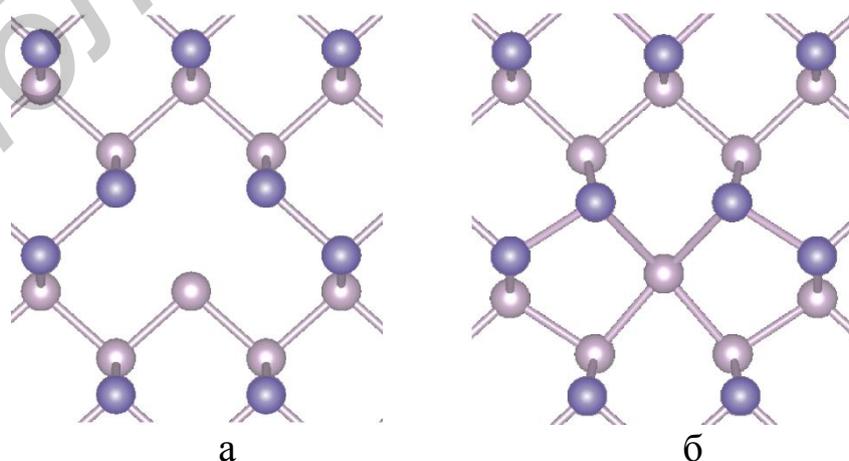


Рисунок 2 – Идеальная (а) и реконструированная (б) структура фосфорена с единичной нейтральной вакансией

Значение энергии образования вакансии  $E_v$  может быть получено из выражения

$$E_v = E_t - \frac{N-1}{N} E_b,$$

где  $E_t$  – полная энергия ячейки, содержащей вакансию;  $N$  – число атомов в идеальной суперячейке;  $E_b$  – полная энергия идеальной суперячейки. Энергия образования вакансии такого типа равна 1,95 эВ, что соответствует значениям в 2 и 1,96 эВ, полученным в работах [5] и [6].

Исследование влияния данной вакансии на зонную структуру показало, что наличие вакансии ведет к тому, что фосфорен становится непрямозонным полупроводником (рисунок 3). Кроме того, одна из валентных зон пересекает уровень Ферми, который смещен в ноль, что говорит о появлении в запрещенной зоне разрешенных состояний, ~0,1 эВ выше валентной зоны.

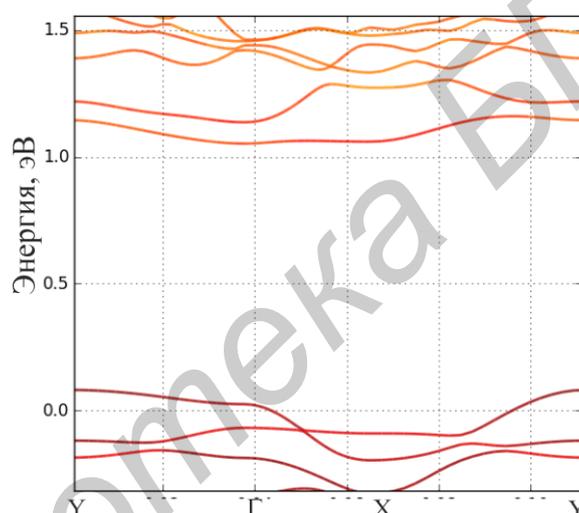


Рисунок 3 – Зонная структура фосфорена с реконструкцией нейтральной вакансии

Проведенные исследования показывают, что наличие дефекта в структуре фосфорена приводит к значительному изменению его электронных свойств и появлению разрешенных состояний в запрещенной зоне, что влечет уменьшение подвижности носителей заряда.

### Литература

1. Du, Y. Ab Initio Studies on atomic and electronic Structures of Black Phosphorus // Y. Du, C. Ouyang, S. Shi, M. Lei // J. Appl. Phys. – 2010. – №107. – 093718-4.
2. Li, L. Black Phosphorus field-effect transistors / L. Li, Y. Yu, G. J. Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X. H. Chen, Y. Zhang // Nat. Nanotechnol. – 2014. – № 9. – P. 372–377.

3. Rodin, A. S. Strain-Induced Gap Modification in Black Phosphorus / A. S. Rodin, A. Carvalho, A. H. Castro Neto // Phys. Rev. Lett. – 2014. – №112. – 176801-5.

4. Kresse, G. VASP the guide: tutorial / G. Kresse, M. Marsman, J. Furthmüller – Vienna: University of Vienna, 2014 – 209 p.

5. Li, X.-B. Structures, stabilities, and electronic properties of defects in monolayer black phosphorus / X.-B. Li, P. Guo, T.-F. Cao, H. Liu, W.-M. Lau, L.-M. Liu // Scientific Reports. – 2015. – №5. – 10848-11.

6. Guo, Y. Vacancy and Doping States in Monolayer and bulk Black Phosphorus / Y. Guo, J. Robertson // Scientific Reports. – 2015. – № 5. – 14165-10.

**А.И. Толкачёв** (УО «ГГУ имени Ф. Скорины», Гомель)  
Науч. рук. **В.Н. Капшай**, канд. физ.-мат. наук, доцент

## ЗАДАЧИ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

1. Как известно, многие задачи акустики, электродинамики и квантовой механики для звуковых, электромагнитных и других полей сводятся к решению уравнения Гельмгольца в ограниченных областях:

$$\Delta + k^2 \Psi(\vec{x}) = 0; \quad \vec{x} \in G. \quad (1)$$

При этом на поверхности  $\Sigma$ , ограничивающей область  $G$ , должны выполняться граничные условия (ГУ), например Дирихле или Неймана:

$$(ГУ)_1 \quad U(\vec{x})|_{\vec{x} \in \Sigma} = 0; \quad (ГУ)_2 \quad \partial U(\vec{x}) / \partial \vec{n}|_{\vec{x} \in \Sigma} = 0, \quad (2)$$

где  $\vec{n}$  – внешняя нормаль к поверхности  $\Sigma$ . Такие задачи являются задачами на собственные значения (СЗ), – они имеют решения не при всех значениях параметра  $k^2$ , а только при некоторых:  $k_n^2$ . Например, для заключённой внутри поверхности  $\Sigma$  квантовой частицы массы  $m_0$ , которая описывается стационарным уравнением Шрёдингера [1,2]

$$-(\hbar^2/2m_0)\Delta + U(\vec{x}) \Psi(\vec{x}) = E \cdot \Psi(\vec{x}); \quad U(\vec{x}) = 0; \quad \vec{x} \in G; \quad U(\vec{x}) = \infty; \quad \vec{x} \notin G, \quad (3)$$

имеем ГУ Дирихле, а СЗ энергии  $E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m_0$ . В данной работе сконцентрируем внимание на задачах для областей, которые удобно рассматривать в цилиндрических координатах.

Для решения уравнения Гельмгольца воспользуемся методом разделения переменных. Для оператора Лапласа и функции  $\Psi(\vec{x})$  имеем

$$\Delta = \Delta_\rho + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}; \quad \Psi(\vec{x}) = \Psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z), \quad (4)$$