

Рис. 2. Распределения намагниченности насыщения, в структуре моделирующей границу зерна оксида цинка

Причины их возникновения можно связать с нарушениями трансляционной симметрии системы, которые инициируют значительные зарядовые и спиновые перераспределения, а также обусловленные этим эффекты локализации-делокализации прифермиевских электронов с образованием атомных магнитных моментов.

#### Список литературы

1. Страумал Б. Б., Протасова С. Г. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т.97. с. 415 – 426.
2. Ивановский А. Л. // УФН. 2007. Т. 177, №10, С. 1083-1104.
3. Byung-Sub Kang, Kwang-Pyo Chae. // J. Mag. 2012. 17(3). 163-167.
4. Bin Shao, Hong Liu, Jian Wu et al. // J. Appl. Phys. 2012. 111, 07C301-07C301-3.
5. Bin Shao, Min Feng, Hong Liu et al. // J. Appl. Phys. 2013. 17C728-17C725-3.
6. Xu Zuo, Soack-Dae Yoon, Aria Yang et al. // J. Appl. Phys. 2009. 105. 07C508-1-07C508-3.

УДК 621.794.61

## ВЛИЯНИЕ МОРФОЛОГИИ НА ЗОННУЮ СТРУКТУРУ InAs И GaAs НАНОШНУРОВ

Д.А. ЯЦЫНО, Я.С. АРСИТОВ, Д.Б. МИГАС

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
ул. П. Бровки, 6, г. Минск, 220013, Республика Беларусь  
migas@bsuir.by

Результаты расчетов, проведенных с помощью метода из первых принципов, показали, что свойства  $\langle 111 \rangle$ -ориентированных GaAs и InAs нанощнуров изменяются от металлических до полупроводниковых в зависимости морфологии наноструктур. Отсутствие  $\{112\}$  граней в виде кромок между каждыми соседними  $\{011\}$  гранями, которые характеризуют поверхность GaAs и InAs нанощнуров, приводит к появлению электронных состояний в запрещенной зоне, находящихся на уровне Ферми, и металлических свойств. В то время как наличие  $\{112\}$  граней обеспечивает полупроводниковый характер электронных энергетических зон.

*Ключевые слова:* GaAs и InAs нанощнуры, морфология и зонная структура нанощнуров.

Полупроводниковые наноразмерные шнуры (нанощнуры) являются уникальными структурами для исследования квантоворазмерных эффектов и также представляют собой готовые элементы для изготовления электронных и оптоэлектронных приборов

нового поколения [1]. Для GaAs и InAs экспериментально установлено, что наношнуры этих материалов могут иметь структуру цинковой обманки и структуру вюрцита, причем ориентации роста наноструктур соответственно являются  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 0001 \rangle$ . Для  $\langle 111 \rangle$ -ориентированных GaAs и InAs наношнуров со структурой цинковой обманки характерно сечение шестигранной призмы с  $\{011\}$  или  $\{112\}$  гранями на поверхности. Теоретические расчеты показали, что GaAs и InAs наношнуры с  $\{011\}$  гранями на поверхности обладают металлическими свойствами, так как уровень Ферми пересекает несколько зон в районе запрещенной зоны [2].

Для структурной оптимизации и расчета зонного спектра GaAs и InAs наношнуров применен метод псевдопотенциалов. На рис. 1 представлены сечения исследуемых наноструктур в виде шестигранной призмы с диаметрами около 2,5 – 2,7 нм и с двумя морфологиями: только  $\{011\}$  грани (рис. 1 *а* и *б*), как предполагалось в работе [2], и наличие  $\{112\}$  граней между соседними  $\{011\}$  гранями (рис. 1, *в*, *г*).

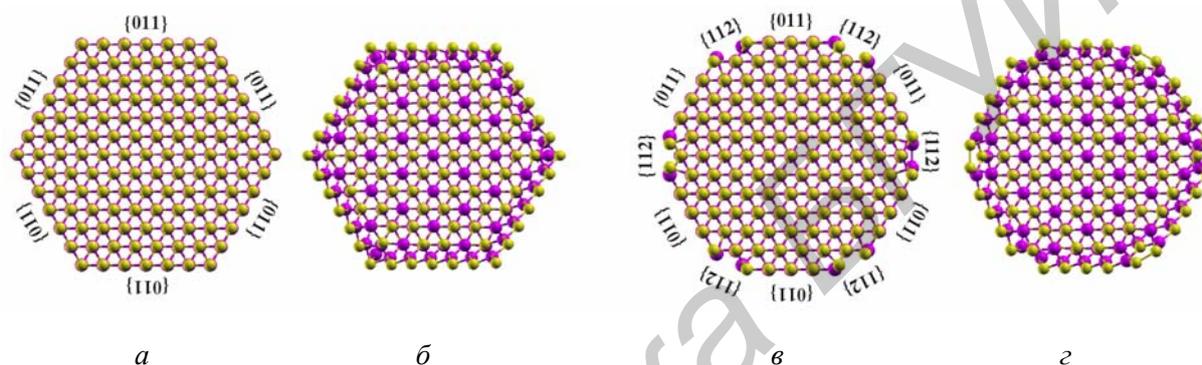


Рис. 1. Сечения GaAs и InAs наношнуров с различной морфологией до (*а* и *в*) и после (*б* и *г*) структурной оптимизации. Грани обозначены

Структуры после релаксации сохраняют свою форму за исключением поверхностных атомов, которые могут формировать димеры атомов мышьяка (рис.1 *г*) на поверхности  $\{112\}$  граней. Следует отметить, что структуры GaAs и InAs наношнуров практически подобны. Проведенные оценки полной энергии GaAs и InAs наношнуров с различной морфологией показывают, что наличие  $\{112\}$  граней приводит к существенному уменьшению полной энергии и повышению стабильности данных систем. Это утверждение особенно справедливо для наношнуров с меньшими диаметрами.

Зонные структуры для GaAs и InAs наношнуров с различными морфологиями показаны на рис. 2. Очевидно, что предложенная морфология в работе [2], где присутствуют только  $\{011\}$  грани (рис. 1, *а*, *б*), действительно приводит к металлическим свойствам наношнуров (рис. 2, *а*, *в*). В данном случае уровень Ферми пересекает группу зон, сформированных *p*-состояниями поверхностных атомов галлия, индия и мышьяка, находящихся в углах между соседними  $\{011\}$  гранями, даже при наличии энергетического зазора. При формировании  $\{011\}$  граней как раз удаляются эти атомы галлия, индия и мышьяка, что влечет за собой появление обычного электронного энергетического спектра с запрещенной зоной, свойственного полупроводникам, без наличия поверхностных состояний в запрещенной зоне.

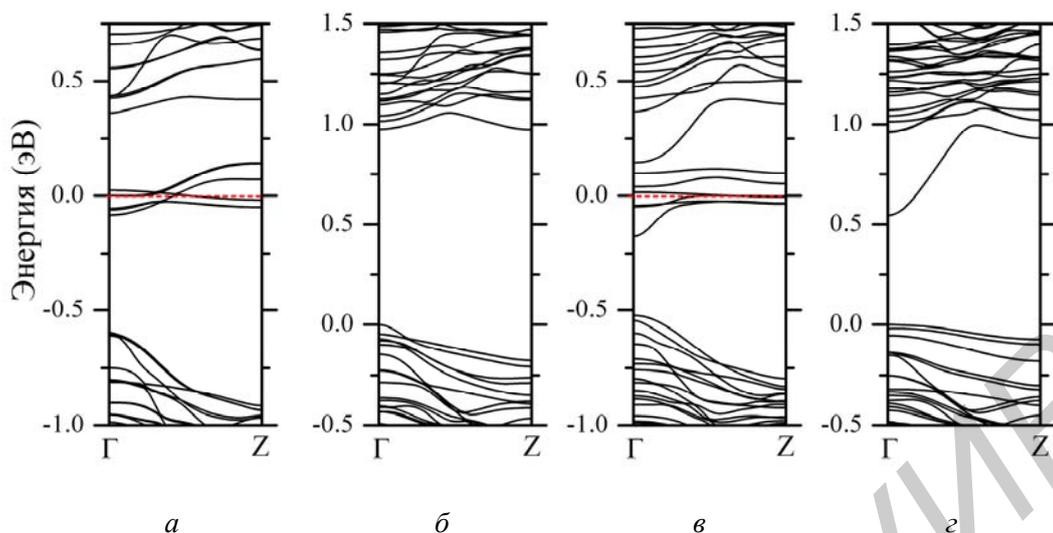


Рис. 2. Зонные структуры GaAs (*a* и *б*) и InAs (*в* и *г*) нанопроволок с различными морфологиями: *a* и *в* – только {011} грани на поверхности, *б* и *г* наличие {112} граней между {011} гранями. Ноль на шкале энергий соответствует уровню Ферми (*a* и *в*) или потолку валентной зоны (*б* и *г*)

В этой работе нами теоретически показано с помощью метода псевдопотенциалов, что появление небольших по размерам {112} граней между соседними {011} гранями в <111>-ориентированных GaAs и InAs нанопроволках является не только термодинамически выгодным, но и приводит к полупроводниковым свойствам, так как уровень Ферми находится в запрещенной зоне, не пересекая никаких зон.

#### Список литературы

1. Lu W., Lieber C. M. Semiconductor nanowires // J. Phys. D: Appl. Phys. 2006. Vol. 39, № 6. P. R387–R406.
2. Rosini M., Magri R. Surface effects on the atomic and electronic structure of unpassivated GaAs nanowires // ACSNano. 2010. Vol. 4, № 10. P. 6021–6031.