

10

Пьезопроводимость графеновых нанолент. Упругопластические деформации

© О.С. Лебедева, Н.Г. Лебедев

Волгоградский государственный университет,
Волгоград, Россия,

E-mail: nikolay.lebedev@volsu.ru

Поступила в Редакцию 24 декабря 2023 г.

В окончательной редакции 5 марта 2024 г.

Принята к публикации 5 марта 2024 г.

Изучены пьезорезистивные свойства двумерного материала на примере фрагмента графеновых нанолент типа „arm-chair“ и „zig-zag“. Проанализирована зависимость продольной компоненты тензора пьезопроводимости нанолент от величины относительной упругопластической деформации. Показано, что проводящие ленты проявляют устойчивые пьезорезистивные свойства, не зависящие от их ширины, а зависящие только от структурной модификации зигзаг или кресло. Малые пластические деформации меняют скачком продольную компоненту у зигзагообразных лент на порядок больше, чем у кресельных. Полупроводниковые ленты относительно малой ширины обладают эффектом „гиперпьезорезистивности“, который исчезает с ростом ширины ленты пропорционально уменьшению запрещенной зоны.

Ключевые слова: стрейнтроники, графен, наноленты, пьезорезистивный эффект, упругопластические деформации.

DOI: 10.61011/FTT.2024.04.57799.254

1. Введение

Одна из ветвей сформировавшегося в начале XXI в. научного направления физики конденсированного состояния — стрейнтроники [1] направлена на изучение влияния механических напряжений на электронные свойства вещества. Изменение энергетической щели и проводимости деформированных полупроводников и диэлектриков приводит к эффекту пьезосопротивления. Пьезорезистивный эффект основан на чувствительности электрического сопротивления (или электропроводности) материалов по отношению к механической нагрузке. На нем базируются основные принципы работы устройств преобразования электромеханической энергии, таких как сенсоры, пьезорезисторы, датчики давления и др. Открытие этого эффекта стало важной предпосылкой для возникновения и развития технологий MEMS (MicroElectroMechanicalSystem) — технологии интеграции механических элементов и датчиков на кремниевом субстрате.

История открытия эффекта пьезосопротивления, или пьезорезистивного эффекта, связана с именем доктора Чарльза С. Смита [2]. В его работе представлены результаты исследований влияния одноосных деформаций на электрическое сопротивление в полупроводниках. Смитом обнаружено, что изменение сопротивления германия и кремния *p*- и *n*-типа при приложении к ним механической нагрузки может оказаться в десятки раз большим, чем для материалов с металлической проводимостью (например, металлов). В статье приведены результаты экспериментальных данных по определению тензора пьезосопротивления (одной из главных харак-

теристик пьезорезистивного эффекта). Открытие Смита послужило толчком для появления новых областей практического применения полупроводников, например, таких как тензометрия, изучающая основы создания полупроводниковых тензорезисторов и тензодатчиков [3,4].

Пьезорезистивный эффект может быть охарактеризован коэффициентами эластопроводимости, эластосопротивления, или так называемым калибровочным фактором [5]. Экспериментальные данные позволяют определить коэффициенты пьезосопротивления или эластосопротивления и калибровочный фактор, теоретическими методами можно вычислить коэффициенты эластопроводимости.

Изучение деформационных эффектов в низкоразмерных структурах, например, семейства графена создает необходимые условия для развития „гибкой электроники“ [6]. Одним из привлекательных свойств таких материалов является способность к значительной упругой деформации. В графене [7,8] собрано уникальное сочетание свойств, которое нигде больше не встречается: проводимость и прозрачность, механическая прочность и эластичность. Он может успешно заменить множество материалов в огромном числе устройств электроники, спинтроники и сенсорики. Одновременно главное достоинство графена затрудняет использование его в качестве основы при разработке комплектующих современной электроники вследствие практически полного отсутствия запрещенной зоны ($E_g < 0.05$ meV), что не дает возможности закрытия канала полевого транзистора на его основе. Это затрудняет его использование в качестве основы для устройств преобразования электро-

механической энергии, таких как транзисторы, резисторы, пьезорезистивные сенсоры, датчики давления.

На современном этапе графен относят к изотропным линейным упругим материалам, при малых деформациях подчиняющимся закону Гука. При больших деформациях наблюдаются отклонения от линейности, начинает проявляться свойство текучести, которое моделируется добавкой квадратичного по деформации слагаемого к линейному закону Гука [6]. Малые пластические деформации в графене могут быть вызваны дислокациями разного вида [9], а также дефектами типа „Стоун–Уэльса“, которые можно рассматривать как дислокационные диполи [10].

В работе [11] проведено исследование влияния размера петлевых дислокаций на электронные свойства и подрешеточный ферримагнетизм в графене с помощью методов теории функционала плотности. Авторы моделировали интерфейс поверхности Co(0001) и монослоя золота с треугольными петлевыми дислокациями, на который помещался графеновый слой. В работе показано, что графен и нижележащий слой золота с петлевыми дислокациями различного размера характеризуются ферримагнитной упорядоченностью внутри атомных слоев. Кроме того, наличие дополнительных адатомов золота под графеном усиливает индуцированное спин-орбитальное взаимодействие в графене и открывает энергетическую щель, но при этом не разрушает ферримагнитный порядок в графене. Управление количеством и размером кластеров в результате интеркаляции может быть использовано для усиления индуцированного взаимодействия Рашбы и получения устойчивой топологической фазы в графене.

В настоящей работе представлены результаты исследования пьезопроводящих свойств двумерных структур семейства графена — графеновых нанолент (GNRs) кресельного и зигзагообразного типов — с учетом малых пластических деформаций.

2. Модель электронного строения деформированного графена

Геометрическая модель нанолент (НЛ) выбирается на основе двумерного гексагонального слоя с двумя атомами в элементарной ячейке (ЭЯ) и векторами основных трансляций $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$ и $\mathbf{a}_2 = a(-1/2, \sqrt{3}/2)$ ($a_1 = a_2 = a$), $a = \sqrt{3}R_0$ — постоянная решетки, $R_0 = 1.42 \text{ \AA}$ — межатомное расстояние в графене (рис. 1).

Если сделать разрез графеновой плоскости вдоль кресельного или зигзагообразного направления, то получатся соответствующие графеновые наноленты (ГНЛ). Классификация ГНЛ осуществляется с помощью одного индекса N [7]. Традиционно обозначают через N -ZGNR зигзагообразные наноленты, где N равно числу атомов углерода, укладываемых в поперечном разрезе ленты, и N -AGNR — кресельные, для которых индекс N равен

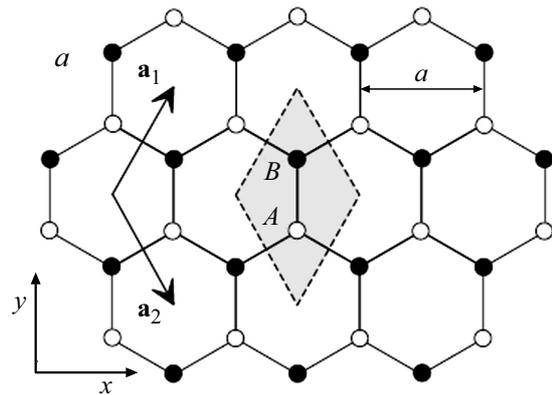


Рис. 1. Элементарная ячейка гексагональной кристаллической решетки графена с двумя атомами в элементарной ячейке и векторами основных трансляций $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$ и $\mathbf{a}_2 = a(-1/2, \sqrt{3}/2)$ ($a_1 = a_2 = a$), a — постоянная решетки [12].

числу димеров углерода на срезе. Ширина ГНЛ также выражается через индекс N следующей формулой [7]:

$$H = \begin{cases} \left(\frac{3}{2}N - 1\right)R_0 \equiv H_z, \\ \frac{\sqrt{3}}{2}(N - 1)R_0 \equiv H_a, \end{cases} \quad (1)$$

где H_z — ширина зигзагообразной ленты, H_a — ширина кресельной ленты.

Основные особенности зонной структуры ГНЛ описываются в рамках приближения сильной связи для π -электронной системы. В качестве отправной точки рассматривается электронный спектр графена $\varepsilon(k_x, k_y)$ [12]:

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \pm \gamma \left\{ 1 + 4 \cos\left(\frac{3k_x R_0}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y R_0}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y R_0}{2}\right) \right\}^{1/2}, \quad (2)$$

где $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ — волновой вектор электрона в зоне Бриллюэна, $\gamma = 2.7 \text{ eV}$ — интеграл перескока (матричный элемент перехода) электрона с одного узла на соседний. Электронный спектр нанолент определяется как линии пересечения двумерной энергетической поверхности графена параллельными плоскостями разрешенных значений волнового вектора $q = 2\pi n/H$ ($n = 1, 2, \dots$), направленного поперек ленты.

Тогда условие квантования волнового вектора \mathbf{k} в поперечном направлении, с учетом замыкания граничных атомов углерода атомами водорода определяется из условия равенства нулю волновой функции на границе ленты, а именно, на атомных рядах с номерами 0 и $N + 1$ [13]. В итоге электронный спектр графеновых НЛ

кресельного и зигзагообразного типов можно представить в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon_a(k, n) &= \\ &= \pm\gamma \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{ka_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi n}{N+1}\right)}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_z(k, n) &= \\ &= \pm\gamma \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) \cos\left(\frac{ka_y}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ka_y}{2}\right)}, \end{aligned} \quad (4)$$

$n = 1, 2, \dots, N,$

где k — продольная компонента волнового вектора, $a_x = 3R_0$ — постоянная решетки кресельных лент, $a_y = \sqrt{3}R_0$ — постоянная решетки зигзагообразных лент.

В рамках рассмотренной модели электронного строения проводниками являются все зигзагообразные наноленты, а также кресельные наноленты с индексом $N = 3m - 1$, где m — целое число. Соответственно кресельные наноленты с индексами $N = 3m$ и $N = 3m + 1$ проявляют полупроводниковые свойства, т.е. имеют малую щель в спектре на уровне Ферми, которая убывает с ростом ширины ленты [7]:

$$E_g = \begin{cases} 0, & N = 3m - 1, \\ \frac{\pi R_0}{H_a + \frac{\sqrt{3}}{2} R_0}, & N = 3m, \\ \frac{\pi R_0}{H_a}, & N = 3m + 1. \end{cases} \quad (5)$$

Деформированное состояние кристаллита в общем случае характеризуется тензором дисторсии $u_{\alpha\beta} = \partial_\beta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})_\alpha$, ($\alpha, \beta = x, y, z$), где \mathbf{r} и \mathbf{r}' — радиус-векторы начального и конечного положения некоторой точки кристаллита [14]. Диагональные элементы тензора характеризуют относительное удлинение образца вдоль соответствующего направления, недиагональные элементы задают угол поворота линейного элемента при деформации.

Деформация продольного растяжения (сжатия) изменяет форму элементарной ячейки и зоны Бриллюэна (ЗБ). При растяжении (сжатии) длина ЭЯ увеличивается (уменьшается), а длина ЗБ уменьшается (увеличивается) соответственно. Преобразования ЭЯ и ЗБ низкоразмерных структур, таких как углеродные нанотрубки и графеновые наноленты, подробно излагались в работах [15–19]. Здесь приведем только краткое описание. Обозначим величину относительной деформации ГНЛ через $\delta = \Delta a/a_0$, где $\Delta a = a - a_0$ — изменение постоянной решетки одномерного кристаллита, a_0 — равновесная постоянная решетки ГНЛ. Тогда текущее значение деформированной постоянной решетки $a = a_0(1 + \delta)$.

Изменение ширины ленты в результате деформации растяжения (сжатия) можно учесть с помощью коэффициента Пуассона ν , который для ГНЛ принимает значения 0.15–0.45 [6]:

$$H = H_0(1 - \nu\delta), \quad (6)$$

где H_0 — ширина недеформированной ГНЛ.

Деформация в элементах тела, находящегося в напряженном состоянии под действием системы сил, в общем случае состоит из обратимой δ , или упругой, и остаточной δ_p , или пластической частей [20]. Т.е. изменение постоянной решетки кристаллита обусловлено упругой и пластической деформацией $a = a_0(1 + \delta + \delta_p)$ [14].

Поэтому с учетом вышесказанного можно предложить феноменологический электронный спектр деформированных ГНЛ кресельного и зигзагообразного типов в следующем виде:

$$\begin{aligned} \varepsilon_a(k, n) &= \pm\gamma(\delta + \delta_p) \left\{ 1 + 4 \cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right) \right. \\ &\quad \times \cos\left[\frac{3}{2} kR_0(1 + \delta + \delta_p)\right] + 4 \cos^2\left(\frac{\pi n}{N+1}\right) \left. \right\}^{1/2}, \\ &-\pi < 3kR_0(1 + \delta + \delta_p) \leq \pi, \quad n = 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_z(k, n) &= \pm\gamma(\delta + \delta_p) \left\{ 1 + 4 \cos\left[\frac{\sqrt{3}}{2} kR_0(1 + \delta + \delta_p)\right] \right. \\ &\quad \times \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) + 4 \cos^2\left[\frac{\sqrt{3}}{2} kR_0(1 + \delta + \delta_p)\right] \left. \right\}^{1/2}, \\ &-\pi < \sqrt{3}kR_0(1 + \delta + \delta_p) \leq \pi, \quad n = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (8)$$

Зависимость прыжкового интеграла $\gamma(\delta)$ от относительной деформации вычислялась в рамках теории функционала плотности с использованием обменно-корреляционного потенциала V3LYP в базисе атомных орбиталей STO-3G. Для осуществления квантово-химических расчетов рассматривался фрагмент поверхности графена размером 6×6 элементарных ячеек. Граничные ненасыщенные связи замыкались одновалентными атомами водорода. Моделирование деформации структуры вдоль направлений „arm-chair“ и „zig-zag“ проводилось путем пошагового замораживания атомов на противоположных границах фрагмента. Полученные численные значения зависимости $\gamma(\delta)$ интерполировались следующим аналитическим выражением:

$$\gamma = \gamma_0 \exp(-2.0162R), \quad R = R_0(1 + \delta), \quad \gamma_0 = 47.42 \text{ eV}. \quad (9)$$

Изменения зонной структуры проводящих и полупроводниковых ГНЛ при наличии малых пластических деформаций показаны на рис. 2.

В расчетах использовались значения относительной деформации растяжения (сжатия) $\delta = \pm 0.1, \pm 0.06, \pm 0.04, \pm 0.02, \pm 0.01$. Учет пластической деформации осуществлялся добавкой $\delta_p = 0.015$.

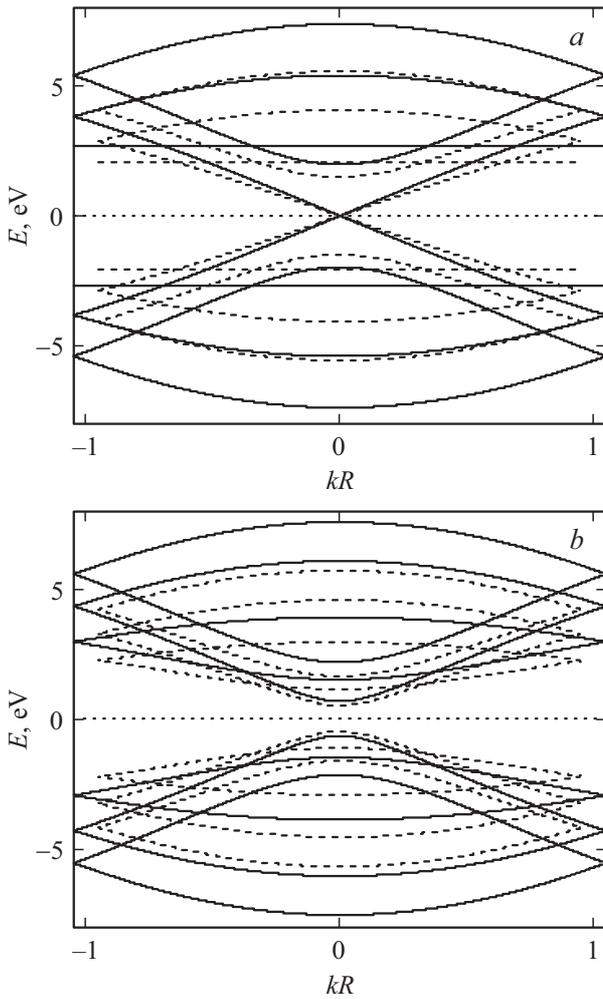


Рис. 2. Зонная структура недеформированных (сплошная линия) и деформированных (пунктирная линия) ГНЛ 5-AGNR (a) и 6-AGNR (b) при $\delta = 0.1$. Энергия отсчитывается от уровня Ферми.

3. Пьезопроводимость графеновых нанолент

Согласно [5], определение тензора пьезопроводимости двумерных кристаллических структур семейства графена можно записать в виде

$$\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{\langle\sigma\rangle} = M_{\alpha\beta\chi\eta} \cdot \delta_{\chi\eta}, \quad \langle\sigma\rangle = \frac{1}{2} \text{Sp}[\sigma] = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2}, \quad (10)$$

где $\sigma_{\alpha\beta}$ — тензор удельной проводимости, $\delta_{\chi\eta}$ — тензор деформаций, $M_{\alpha\beta\chi\eta}$ — тензор пьезопроводимости 4-го ранга, $\alpha, \beta, \chi, \eta = x, y$.

Для двумерных структур можно ввести так называемую пьезорезистивную константу как диагональный элемент $M = M_{xxxx}$ или M_{yyyy} в случае одноосного растяжения вдоль кресельных или зигзагообразных направлений соответственно.

Для случая квазиодномерных структур, таких как ГНЛ, продольная компонента может быть найдена с

помощью следующего выражения:

$$M = \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} \frac{1}{\delta}, \quad (11)$$

где $\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0$ — изменение продольной компоненты тензора удельной проводимости, обусловленное деформацией; σ_0 — продольная компонента σ_{xx} (для кресельных нанолент) или σ_{yy} (для зигзагообразных нанолент) тензора 2-го ранга удельной проводимости недеформированных нанолент, σ — та же компонента σ_{xx} или σ_{yy} деформированных нанолент.

Соответственно калибровочный фактор K [5], определяющий относительное изменение сопротивления одномерного материала, выражается следующей формулой:

$$K = \frac{\Delta P}{P} \frac{1}{\delta} \quad \text{или} \quad P = P_0(1 + K\delta), \quad (12)$$

где P_0 — сопротивление недеформированного образца, P — сопротивление деформированного образца. Коэффициент может быть измерен экспериментально, а формула (12) используется для калибровки пьезорезисторов, тензодатчиков и т.д.

Связь между величинами K и M может быть выражена соотношением

$$K = \left(\frac{-M\delta}{M\delta + 1} \right) \frac{1}{\delta} = \frac{-M}{M\delta + 1}.$$

Для случая упругопластических деформаций в формулах (11) и (12) вместо упругой относительной деформации δ следует использовать сумму $\delta + \delta_p$.

Выражение для расчета продольной компоненты σ тензора удельной проводимости ГНЛ, полученное в рамках теории Кубо–Гринвуда с использованием метода функций Грина и модельного гамильтониана сильной связи, представлено в работе [18]:

$$\sigma = \frac{e^2}{k_B T V} \times \sum_{\mathbf{k}, \beta} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} v(\mathbf{k}) v(\mathbf{q}) \langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle \left[\langle n_{\mathbf{q}\lambda} \rangle + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\beta\lambda} (1 - \langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle) \right], \quad (13)$$

где $V = H \cdot L \cdot d$ — объем наноленты, H — ширина и L — длина ГНЛ, d — ковалентный диаметр атома углерода; T — абсолютная температура; e — элементарный заряд; \mathbf{k}, \mathbf{q} — двух-компонентные волновые векторы в пределах зоны Бриллюэна; β, λ — спиновые индексы; $v(\mathbf{k})$ — продольная компонента вектора скорости электрона в зоне ЗБ; $\langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle$ — среднее число частиц в квантовом состоянии с волновым вектором \mathbf{k} и спином β , выражаемое функцией распределения Ферми–Дирака:

$$\langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle = \left[1 + \exp \left(\frac{\varepsilon_{\beta}(\mathbf{k}) - \mu}{k_B T} \right) \right]^{-1},$$

где $\varepsilon_{\beta}(\mathbf{k})$ — энергия состояния электрона с волновым вектором \mathbf{k} и спином β , k_B — постоянная Больцмана; μ — химический потенциал, который находится

с помощью процедуры самосогласования из условия нормировки функции распределения на полное число π -электронов N_e в системе

$$N_e = \sum_{\mathbf{k}, \beta} \langle n_{\mathbf{k}\beta} \rangle.$$

Число π -электронов определяется числом атомов в кристаллите с учетом половинного заполнения зоны. При наличии донорных (акцепторных) дефектов число электронов увеличивается (уменьшается) на число дефектов N_d .

Вектор скорости $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ определяется стандартным способом через энергию электронов в зоне Бриллюэна (7) и (8):

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}.$$

4. Обсуждение результатов

В данной работе представлены результаты изучения пьезорезистивных свойств кресельных и зигзагообразных ГНЛ разной ширины и с разным типом проводимости, обозначенных N -AGNR и N -ZGNR соответственно.

На рис. 3–5 приведены рассчитанные функциональные зависимости продольной компоненты тензора пьезопроводности $M(\delta)$ от деформаций растяжения и сжатия δ проводящих и полупроводниковых нанолент. Линии на графиках соединяют расчетные точки для выявления характера изменения функции $M(\delta)$. Расчеты проведены при температуре $T = 300$ К. В расчетах задавалась минимальная длина нанолент $L = 10^6 a$. При дальнейшем увеличении длины ГНЛ результаты расчетов не изменялись.

На рис. 3 наглядно продемонстрировано, что в случае проводящих нанолент кресельного типа 8-AGNR компонента M принимает отрицательные значения во всем диапазоне величины δ . При деформациях сжатия ($\delta < 0$) и растяжения ($\delta > 0$) наблюдается монотонное убывание функции $M(\delta)$. Ее поведение полностью объясняют изменения в зонной структуре наноленты, обусловленные деформацией. В области сжатия отрицательное значение M означает, что удельная проводимость увеличивается. Кроме того, функция $M(\delta)$ возрастает в сторону сжатия. Этот эффект является следствием конкуренции нескольких процессов: увеличения прыжкового интеграла и уменьшения плотности состояний вблизи уровня Ферми, обусловленного увеличением ширины зоны проводимости и наклона дисперсионных линий в окрестности дираковской точки (рис. 2).

Увеличение δ в диапазоне растяжения уменьшает прыжковый интеграл, ширину зоны проводимости и наклон дисперсионных линий вблизи точки K и увеличивает плотность состояний в прифермиевской области. Но при этом уменьшается энергия электронов и их скорость в зоне Бриллюэна. И, как следствие, уменьшается удельная проводимость ГНЛ и пьезорезистивная характеристика M .

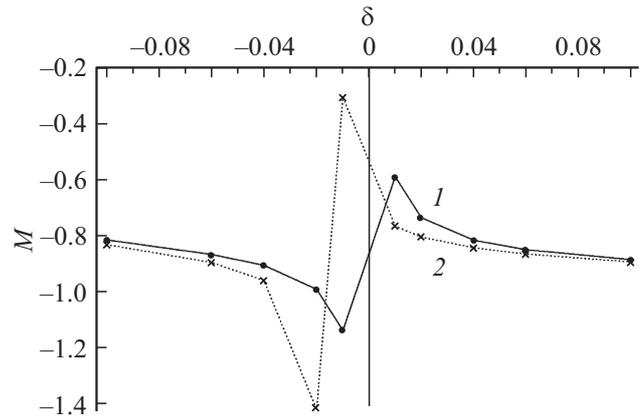


Рис. 3. Зависимость продольной компоненты $M(\delta)$ проводящих графеновых нанолент типа 8-AGNR, 50-AGNR, 8-ZGNR, 9-ZGNR, 10-ZGNR и 50-ZGNR от величины относительной деформации δ при упругих деформациях растяжения-сжатия (1) и упругопластических деформациях с $\delta_p = 0.015$ (2).

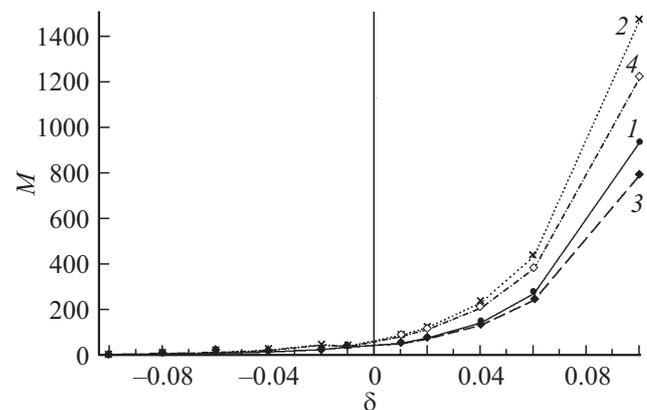


Рис. 4. Зависимость продольной компоненты $M(\delta)$ полупроводниковых графеновых нанолент 9-AGNR и 10-AGNR от величины относительной деформации δ : 9-AGNR, упругие деформации растяжения-сжатия (1), 9-AGNR, упругопластические деформации с $\delta_{pl} = 0.015$ (2), 10-AGNR, упругие деформации растяжения-сжатия (3), 10-AGNR, упругопластические деформации с $\delta_{pl} = 0.015$ (4).

Добавление малой пластической деформации $\delta_{pl} = 0.015$ не изменяет основной тенденции поведения функции $M(\delta)$ (рис. 3). Отличия двух кривых наблюдаются в окрестности δ_{pl} , происходит сдвиг кривых относительно точки $\delta = 0$. Поэтому даже в области сжатия наблюдается резкий скачок компоненты M . Данные результаты свидетельствуют о высокой чувствительности проводящих ГНЛ малой ширины к пластическим деформациям.

Описанное поведение удельной проводимости ГНЛ в результате деформации растяжения (сжатия) качественно согласуется с литературными данными, представленными в обзоре [6].

Пьезорезистивность полупроводниковых нанолент структурной модификации типа „arm-chair“ малой шири-

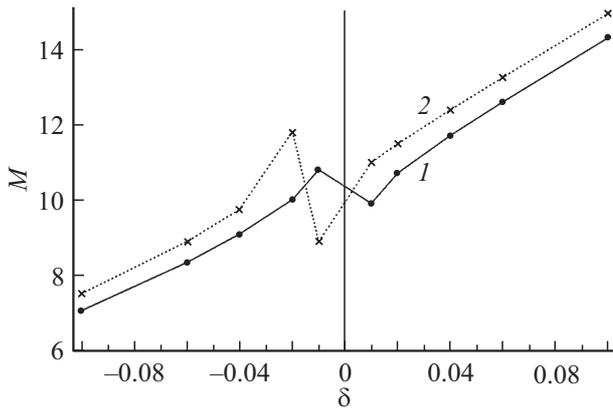


Рис. 5. Зависимость продольной компоненты $M(\delta)$ проводящих графеновых нанолент типа 51-AGNR, 52-AGNR (зависимости практически совпадают) от величины относительной деформации δ при упругих деформациях растяжения-сжатия (1) и упругопластических деформациях с $\delta_p = 0.015$ (2).

ны 9-AGNR и 10-AGNR продемонстрирована на рис. 4. Значения продольной компоненты тензора эластопроводимости M положительны во всем диапазоне δ . В целом на рисунке наблюдается монотонный рост функции $M(\delta)$. Положительная величина M в области деформаций сжатия ($\delta < 0$) означает, что проводимость наноленты уменьшается при деформации. В полупроводниковых ГНЛ при сжатии увеличивается ширина зоны проводимости и величина запрещенной зоны E_g . Эти эффекты приводят к уменьшению удельной проводимости и соответственно функции $M(\delta)$.

В области деформаций расширения ($\delta > 0$) величина M также положительна и сильно возрастает к точке $\delta = 0.1$. Наблюдается так называемая „гиперпьезорезистивность“, когда значения M возрастают на несколько порядков при малых деформациях.

Следует отметить, что для полупроводниковой ГНЛ 10-AGNR график функции $M(\delta)$ для каждой фиксированной деформации δ лежит ниже, чем для 9-AGNR. Это связано с тем, что у всех нанолент типа $3m + 1$ запрещенная щель меньше, чем у ГНЛ типа $3m$, согласно формуле (5). Благодаря чему больше носителей заряда попадает в зону проводимости в результате тепловых флуктуаций, обусловленных распределением Ферми–Дирака.

Пластическая деформация δ_{pl} не изменяет основной тенденции поведения функции $M(\delta)$, так же как и в случае проводящих ГНЛ. Благодаря „гиперпьезорезистивности“ ГНЛ малой ширины наблюдается слабое изменение поведения величины M в окрестности точки δ_{pl} . В области деформации сжатия кривые количественно не различаются, а в области растяжения различия в графиках $M(\delta)$ становятся существенными. Это следствие эффектов уменьшения ширины зоны проводимости и запрещенной зоны.

Увеличение ширины проводящей кресельной ленты не влияет на поведение величины M (рис. 3). Качественно и количественно зависимости $M(\delta)$ для всех проводников подобны. Аналогичный эффект наблюдался для еще одних одномерных углеродных структур — нанотрубок, и подробно описан в работах [15–17].

У полупроводниковых кресельных ГНЛ пьезорезистивные свойства зависят от их ширины, как это видно на примере ленты 51-AGNR (рис. 5). Как наглядно видно из рисунка, эффект „гиперпьезорезистивности“ исчезает. Изменение величины M в рассмотренном диапазоне относительной деформации δ происходят в пределах 10. Сама тенденция поведения $M(\delta)$ остается качественно такой же, как и для узких нанолент. Кроме того, изменения продольной компоненты M в окрестности точки $\delta_p = 0.015$ проявляются заметнее, и составляют несколько единиц. Таким образом, для широких полупроводниковых ГНЛ наличие малых упругопластических деформаций вносит вклад в изменение удельной проводимости.

Подобный эффект обусловлен, на наш взгляд, обратно пропорциональной зависимостью величины запрещенной зоны E_g от ширины ленты. Этот же эффект стирает количественные различия $M(\delta)$ широких лент типа $3m + 1$ и $3m$, благодаря малой ширине запрещенной зоны.

Согласно электронному строению ГНЛ в рамках метода сильной связи, описанному, например, в работе [7], все зигзагообразные ленты являются проводниками, поэтому поведение функции $M(\delta)$ (рис. 3) аналогично проводящим кресельным лентам (рис. 3) и не зависит от ширины ленты. Различия заключаются только в количественном значении продольной компоненты M в пределах точности расчета.

5. Заключение

В работе показано, что наличие малых пластических деформаций в структуре графеновых нанолент оказывает влияние на их пьезорезистивные свойства. Качественное и количественное поведение продольной компоненты тензора эластопроводимости M проводящих ГНЛ, как кресельных, так и зигзагообразных, не зависит от ширины ленты, благодаря особенностям зонной структуры проводников. Таким образом, проводящие ленты проявляют устойчивые пьезорезистивные свойства.

В количественном отношении зависимость $M(\delta)$ у кресельных лент лежит выше, чем у зигзагообразных. Т.е. удельная проводимость сильнее изменяется при деформации у нанолент типа ZGNR. Кроме того, малая пластическая деформация дает скачок компоненты M у зигзагообразных ГНЛ на порядок больше, чем у кресельных.

Пьезорезистивные свойства полупроводниковых кресельных ГНЛ зависят от их ширины, проявляя эффект „гиперпьезорезистивности“ для узких лент. С ростом

ширины зависимость свойств от ширины уменьшается пропорционально тому, как уменьшается запрещенная зона. Поэтому широкие кресельные ГНЛ могут, так же как и проводящие, проявлять устойчивые пьезорезистивные свойства.

Представленные результаты могут быть полезны для разработки и калибровки элементов электроники, которые используют эффект пьезосопротивления, такие как транзисторы (недавно была предложена модель [21]), пьезорезисторы [22], пьезосенсоры, датчики давления, оптические затворы и др.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 22-22-20048 (<https://rscf.ru/project/22-22-20048/>) и за счет средств бюджета Волгоградской области.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликтов интересов.

Список литературы

- [1] А.А. Бухараев, А.К. Звездин, А.П. Пятаков, Ю.К. Фетисов. УФН **188**, 12, 1288 (2018).
- [2] C.S. Smith. Phys. Rev. **94**, 6, 42 (1954).
- [3] М. Дин. Полупроводниковые тензодатчики. Энергия, М. (1968) 215 с.
- [4] Л.С. Ильинская, А.Н. Подмарков. Полупроводниковые тензодатчики. Энергия, М. (1966) 118 с.
- [5] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972). 584 с.
- [6] И.В. Ангонова. УФН **192**, 6, 609 (2022).
- [7] П.Б. Сорокин, Л.А. Чернозатонский. УФН **183**, 2, 113 (2013).
- [8] Л.А. Чернозатонский, П.Б. Сорокин, А.А. Артюх. Успехи химии **83**, 3, 251 (2014).
- [9] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. ФТТ **45**, 9, 1626 (2003).
- [10] А.Х. Ахунова, Ю.А. Баимова. ФТТ **93**, 4, 445 (2023).
- [11] А.Г. Рыбкин, А.В. Тарасов, А.А. Гогина, А.В. Ерыженков, А.А. Рыбкина. Письма в ЖЭТФ **117**, 8, 626 (2023).
- [12] Physics of graphene. Series Nanoscience and Technology / Ed. H. Aoki, M.S. Dresselhaus. Springer International Publishing, Switzerland (2014). 345 p.
- [13] K. Wakabayashi, K. Sasaki, T. Nakanishi, T. Enoki. Sci. Technol. Adv. Mater. **11**, 054504 (2010).
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Физматлит, М. (2003). Т. VII. 264 с.
- [15] О.С. Ляпкосова, Н.Г. Лебедев. ФТТ **54**, 7, 1412 (2012).
- [16] О.С. Лебедева, Н.Г. Лебедев. Хим. физика **33**, 10, 73 (2014).
- [17] O.S. Lebedeva, N.G. Lebedev, I.A. Lyapkoso. Mat. физика и комп. моделирование **21**, 1, 53 (2018).
- [18] O.S. Lebedeva, N.G. Lebedev, I.A. Lyapkoso. J. Phys.: Condens.Matter **32**, 14, 145301 (2020).
- [19] О.С. Лебедева, Н.Г. Лебедев, И.А. Ляпкосова. Журн. физ. химии **94**, 8, 1232 (2020).
- [20] А. Надаи. Пластичность и разрушение твердых тел. ИЛ, М. (1954). Т. 1. 648 с.
- [21] A.C. McRae, G. Wei, A.R. Champagne. Phys. Rev. Appl. **11**, 054019 (2019).
- [22] A. Sinha, A. Sharma, P. Priyadarshi, A. Tulapurkar, B. Muralidharan. Phys. Rev. Res. **2**, 043041 (2020).

Редактор Е.Ю. Флегонтова