

08

Электронный транспорт в модельных квазидвумерных ван-дер-ваальсовых наноструктурах

© Д.М. Сергеев^{1,2}, А.Г. Дуйсенова¹¹ Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актюбе, Казахстан² Военный институт Сил Воздушной обороны им. Т.Я. Бегельдинова, Актюбе, Казахстан

E-mail: serdau@mail.ru

Поступило в Редакцию 14 октября 2020 г.

В окончательной редакции 1 января 2021 г.

Принято к публикации 2 января 2021 г.

В рамках теории функционала плотности в приближении локальной плотности и метода неравновесных гриновских функций исследован электронный транспорт в модельном наноструктуре, состоящем из комбинации связанных между собой ван-дер-ваальсовой связью графена, силицена и дисульфида молибдена. Рассчитаны вольт-амперные, dI/dV -характеристики и спектры пропускания наноструктур. Выявлено, что комбинация силицена и дисульфида молибдена образует новую наносистему с металлическими свойствами, которые проявляются в ее электротранспортных характеристиках. Показано, что гибридная наноструктура графен–MoS₂–силицен обладает выпрямляющими свойствами из-за образования барьера Шоттки, а на ее вольт-амперной характеристике при положительном напряжении возникают ступеньки кулоновского происхождения.

Ключевые слова: электронный транспорт, графен, силицен, дисульфид молибдена (MoS₂), вольт-амперная характеристика, дифференциальная проводимость.

DOI: 10.21883/PJTF.2021.08.50844.18583

С открытием графена начался поиск новых квазидвумерных наноматериалов и был получен ряд 2D-материалов с необычными свойствами [1,2]. В работе [3] был предложен новый подход — сборка различных атомных плоскостей (2D-материалов) с заранее выбранной последовательностью в ван-дер-ваальсовой гетероструктуре. Такие сверхрешетки, выполненные путем чередования 2D-материалов, обеспечивают обогащение материалов электронной техникой новыми свойствами, а указанный подход дает возможность создавать огромное множество слоистых структур с заданными свойствами. В настоящей работе в рамках теории функционала плотности (ТФП) в сочетании с методом неравновесных гриновских функций (НРГФ) моделируются и анализируются электротранспортные характеристики ван-дер-ваальсовых слоистых наноструктур, состоящих из комбинации графена (G), силицена (Sil) и дисульфида молибдена (MoS₂). Геометрия исследуемых наноструктур представлена на вставках к рис. 1, *a–c*. Наноструктура имеет зигзагообразную форму в виде ступеньки, их длина составляет 54 Å (*Z–X*-плоскость). Electroды (длиной ~ 8.53 Å) являются продолжением графеновой и силиценовой лент и состоят из 56 атомов углерода и кремния соответственно. Графеновые (силиценовые) плоскости наноструктура размером ~ 40 × 15 Å состоят из 266 атомов углерода (кремния). Расстояние между графеновыми плоскостями составляет 7.11 Å (рис. 1, *a*), между силиценовыми — 7.86 Å (рис. 1, *b*), между смешанными — 7.5 Å (рис. 1, *c*). Размер области рассеяния квазичастиц соизмерим с размерами плоскости, образованной MoS₂ (~ 25.25 × 15.36 Å), состоящей

из 55 атомов молибдена и 110 атомов серы. Для описания межатомного взаимодействия и оптимизации наноструктур использовались потенциалы Brenner [4] и StillingerWeber_MoS_2013 [5]. При оптимизации геометрии наноструктура параметры атомной конфигурации релаксировались до тех пор, пока силы на всех атомах не стали ниже заданного порогового значения 0.05 eV/Å. В результате оптимизации структуры расстояние между плоскостями графена и MoS₂ принимает значение ~ 1.97 Å, а между плоскостями силицена и MoS₂ ~ 2.38 Å.

Компьютерное моделирование электрических характеристик рассматриваемых наноструктур производилось в рамках ТФП+НРГФ в приближении локальной плотности (LDA). Моделирование транспортных характеристик наноструктура реализовано в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab [6] (основные уравнения данного метода подробно описаны в наших предыдущих работах [7,8]). Вольт-амперная характеристика (ВАХ) наноструктура рассчитывается на основе известного уравнения Ландауэра, указывающего на фундаментальную связь электрического тока со спектром пропускания:

$$I(V_L, V_R, T_L, T_R) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) \left[f\left(\frac{E - \mu_R}{k_B T_R}\right) - f\left(\frac{E - \mu_L}{k_B T_L}\right) \right] dE, \quad (1)$$

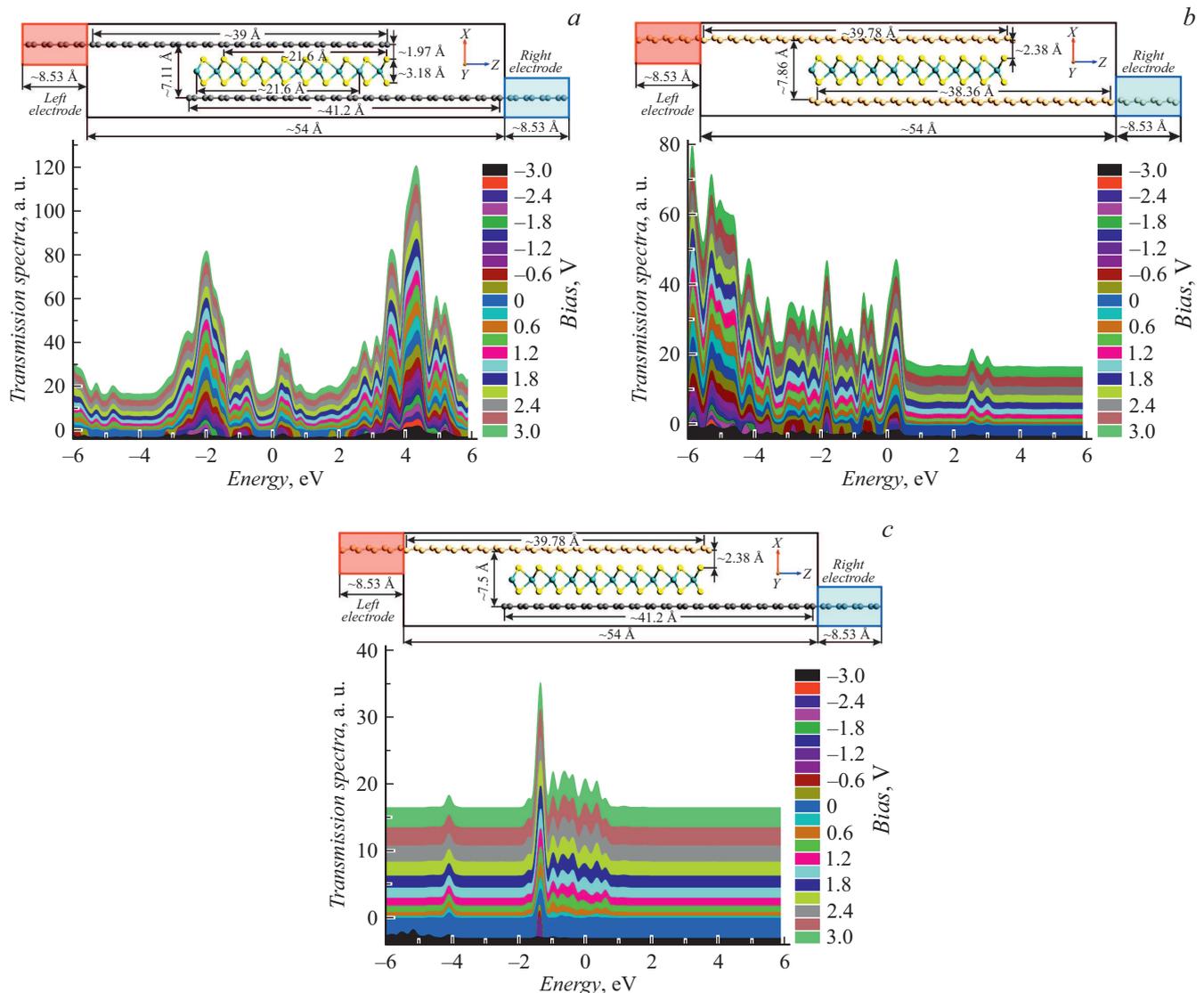


Рис. 1. Эволюция спектра пропускания ван-дер-ваальсовых слоистых наноструктур с увеличением напряжения смещения от -3 до 3 В с шагом 0.3 В. *a* — графен-MoS₂-графен, *b* — силицен-MoS₂-силицен; *c* — графен-MoS₂-силицен. На вставках приведены их геометрические размеры (Z - X -плоскость).

где e — заряд электрона, h — постоянная Планка, E — энергия, $T(E)$ — функция (спектр) пропускания, $f(E)$ — фермиевская функция распределения квазичастиц по энергиям, k_B — постоянная Больцмана, T_R , T_L — текущие температуры, а μ_R , μ_L — электрохимические потенциалы правого и левого электродов. Дифференциальная проводимость наноструктуры была получена путем расчета самосогласованного тока при ряде приложенных смещений и выполнения численного дифференцирования.

Эволюция спектра пропускания $T(E)$ рассматриваемых наноструктур представлена на рис. 1. С увеличением напряжения смещения увеличивается интенсивность спектра пропускания. Как видно, в структуре G-MoS₂-G при положительной энергии пропускная способность квазичастиц больше, чем при отрицатель-

ной (рис. 1, *a*). При отрицательной энергии -1.22 , -2 и -2.5 eV увеличивается вероятность пропускания квазичастиц. Максимальное значение интенсивности спектра наблюдается при 4.3 eV.

Иная структура спектров пропускания наблюдается в слоистой системе Sil-MoS₂-Sil (рис. 1, *b*): при отрицательной энергии пропускание выше, чем при положительной. При положительной энергии наблюдаются три пиковые структуры спектра (при 0.28 , 2.5 и 3 eV). Максимальное значение интенсивности спектра имеет место при -5.86 eV.

Спектр пропускания структуры Sil-MoS₂-G отличается от предыдущих тем, что его особенности в виде восьми пиков проявляются в интервале энергии от -1.9 до 0.8 eV. При энергии -4.1 eV происходит небольшой скачок интенсивности спектра пропускания. Максималь-

ное значение интенсивности спектра наблюдается при -1.35 eV. С увеличением напряжения смещения усложняется структура спектра пропускания наноконтакта, появляются новые пики в спектре, при этом существующие особенности спектра сохраняются.

Результаты компьютерного моделирования ВАХ и дифференциальной проводимости приведены на рис. 2. В интервале напряжении от -0.95 до 0.9 V ВАХ наноструктуры Si1–MoS₂–Si1 квазилинейная (кривая 1 на рис. 2, a). Такое поведение системы обычно свойственно металлическим структурам. Это наводит на мысль, что при взаимодействии силицена, имеющего полуметаллические свойства, и MoS₂, являющегося полупроводником, образуется новая наносистема с металлическими свойствами. Это подтверждается результатом работы [9], где были обнаружены новые особенности зонной структуры сверхрешеток Si1–MoS₂, демонстрирующие проявление металлических свойств, поскольку имеется несколько зон, пересекающих уровень Ферми. Особенность спектра пропускания наноструктуры Si1–MoS₂–Si1, проявляющаяся вблизи энергии Ферми ($E_F = 0$), подтверждает, что Si1–MoS₂ обладает металлическими свойствами (рис. 1, b). Вне указанного интервала ток претерпевает незначительную осцилляцию и наблюдается увеличение сопротивления структуры, что отражается на ее dI/dV -характеристике (кривая 1 на рис. 2, b).

В интервале напряжений от -0.2 до 0.2 V через наноструктуру G–MoS₂–G не протекает ток, а ВАХ имеет „слабые“ ступенчатые участки (кривая 2 на рис. 2, a). Эти особенности ВАХ объясняются существованием пространственной корреляции актов туннелирования отдельных электронов в наноструктуре с двумя туннельными переходами, образованными в области контактирования графена с MoS₂ (рис. 1). При интерпретации работы подобных наноструктур используется модель одно-электронной перезарядки наноконденсатора. Транспорт электронов в подобном наноструктуре происходит следующим образом: при поступлении заряда в квантовую точку устанавливается заряд на поляризуемой поверхности наноструктуры, вызывая кулоновское притяжение между двумя близкорасположенными зарядами, находящимися на границе раздела электрод–молекула, после чего происходит ограничение переноса электронов — кулоновская блокада, т.е. суммарный заряд блокирует ввод и вывод электрона в центральную часть устройства (MoS₂) [10]. Однако с увеличением напряжения смещения электрон выводится из молекулы, а его место занимает другой электрон. Кулоновские лестницы на dI/dV -спектре наблюдаются в виде осцилляции с периодом по напряжению ΔV , значение которого изменяется от 0.67 до 0.8 V (кривая 2 на рис. 2).

Наиболее интересной является гибридная структура G–MoS₂–Si1. На ее ВАХ при положительном напряжении появляются отчетливые ступеньки кулоновского происхождения. Эти ступенчатые структуры возникают на dI/dV -спектре с периодом $\Delta V = e/C_{\min}$ (здесь

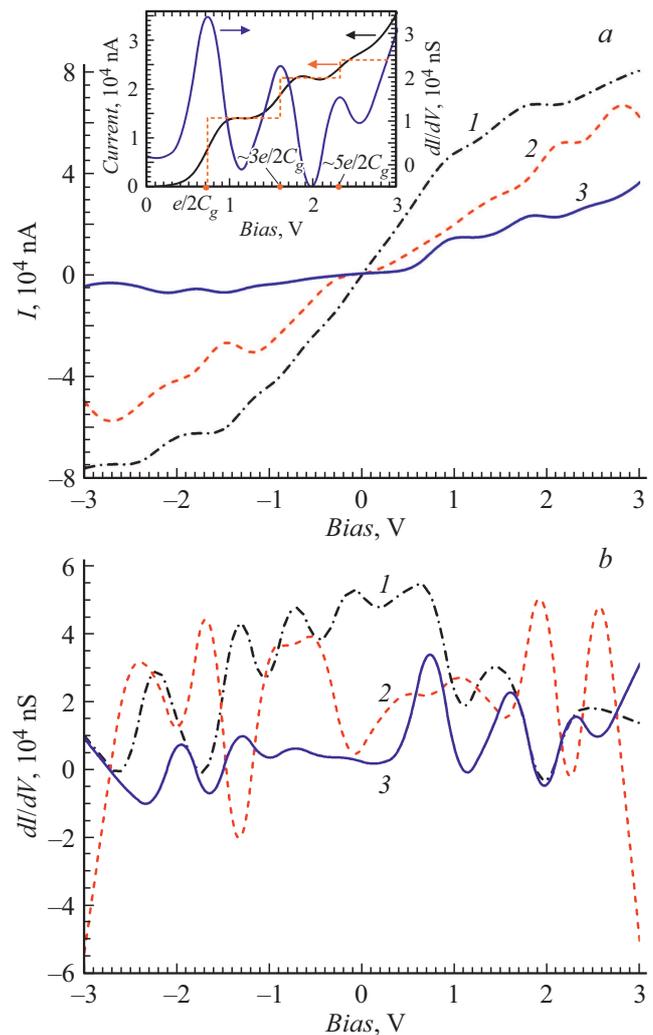


Рис. 2. Вольт-амперные (a) и dI/dV -характеристики (b) слоистых наноструктур. 1 — силицен–MoS₂–силицен, 2 — графен–MoS₂–графен, 3 — графен–MoS₂–силицен. На вставке — кулоновские лестницы на I – V - и dI/dV -характеристиках структуры графен–MoS₂–силицен, а также ВАХ наноконденсатора в случае реализации эффекта кулоновской блокады (штриховая линия).

C_{\min} — емкость перехода с меньшей проводимостью) (рис. 2, b). В интервале напряжений от 0 до 3 V наблюдаются три пиковые структуры дифференциальной проводимости. Значение ΔV варьируется от 0.72 до 0.87 V. Усредненное значение $\Delta V \approx 0.8$ V. Емкость такого наноперехода $C = e/\Delta V$ (при ΔV_{\max} и ΔV_{\min}) изменяется от $1.84 \cdot 10^{-19}$ до $2.23 \cdot 10^{-19}$ F, а усредненное значение емкости составляет $2 \cdot 10^{-19}$ F. При отрицательном напряжении пропускная способность G–MoS₂–Si1 ухудшается, и сквозь наноструктуры протекает ничтожно малый ток ~ 7.5 μ A. Это связано с тем, что рассматриваемая структура представляет собой систему металл–полупроводник, где образуется выпрямляющий барьер Шоттки. Проявление вентиляно-

го свойства позволяет применить подобные структуры в качестве нанодиода.

Таким образом, в работе в рамках ТФП+НРГФ исследованы основные транспортные характеристики наноустройства, состоящего из комбинации графена, силицена и дисульфида молибдена, связанных между собой ван-дер-ваальсовой связью. Показано, что при взаимодействии силицена и дисульфида молибдена образуется новая наносистема преимущественно с металлическими свойствами, проявляющимися в ее спектре пропускания и ВАХ. Установлено, что в гибридной наноструктуре G–MoS₂–SiI образуется барьер Шоттки и она обладает выпрямляющими свойствами диода, а на ее ВАХ при положительном напряжении возникают кулоновские лестницы. Полученные результаты могут быть полезными для расчетов новых элементов наноэлектроники.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках проекта Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант № AP08052562).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, *Science*, **306**, 666 (2004). DOI: 10.1126/science.1102896
- [2] Y.-Ch. Lin, *Properties of synthetic two-dimensional materials and heterostructures* (Springer International Publ., 2018). DOI: 10.1007/978-3-030-00332-6
- [3] A.K. Geim, I.V. Grigorieva, *Nature*, **499**, 419 (2013). DOI: 10.1038/nature12385
- [4] D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, *J. Phys.: Condens. Matter.*, **14**, 783 (2002). DOI: 10.1088/0953-8984/14/4/312
- [5] J-W. Jiang, H.S. Park, T. Rabczuk, *J. Appl. Phys.*, **114**, 064307 (2013). DOI: 10.1063/1.4818414
- [6] S. Smidstrup, T. Markussen, P. Vancaeyveld, J. Wellendorff, J. Schneider, T. Gunst, B. Verstichel, D. Stradi, P.A. Khomyakov, U.G. Vej-Hansen, M.-E. Lee, S.T. Chill, F. Rasmussen, G. Penazzi, F. Corsetti, A. Ojanperä, K. Jensen, M.L.N. Palsgaard, U. Martinez, A. Blom, M. Brandbyge, K. Stokbro, *J. Phys.: Condens. Matter.*, **32**, 015901 (2020). DOI: 10.1088/1361-648X/ab4007
- [7] Д.М. Сергеев, *ЖТФ*, **90** (4), 598 (2020). DOI: 10.21883/JTF.2020.04.49083.79-19 [Пер. версия: 10.1134/S1063784220040180].
- [8] D.M. Sergeev, *J. Nano-Electron. Phys.*, **10**, 03018 (2018). DOI: 10.21272/jnep.10(3).03018
- [9] X. Li, S. Wu, S. Zhou, Z. Zhu, *Nanoscale Res. Lett.*, **9**, 110 (2014). DOI: 10.1186/1556-276X-9-110
- [10] H. Grabert, M.H. Devoret, *Single charge tunneling: Coulomb blockade phenomena in nanostructures* (Springer Science, 1992). DOI: 10.1007/978-1-4757-2166-9