

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЕРЕСТРОЙКИ ГЕТЕРОСТРУКТУР МУЛЬТИГРАФЕН/2D-SiC

Калашников А.В., Тучин А.В., Битюцкая Л.А., Бормонтов Е.Н.

Воронежский государственный университет, физический ф-т, каф. ФПП и МЭ,
Россия, 394006, г. Воронеж, Университетская площадь 1,
Тел.: 8(4732)2281160,
E-mail: kalaschnikov.av@mail.ru

Многослойные структуры на основе SiC рассматриваются как одни из перспективных материалов нанoeлектроники, они обладают не нулевой шириной запрещенной зоны [1] и подходят для создания гетероструктур на их основе [2].

В данной работе методами квантовой химии исследованы особенности перестройки электронной структуры многослойных гетероструктур графен/2D-SiC. Для этого проведена серия компьютерных экспериментов с различным соотношением числа слоев 2D-карбида кремния и графена. Согласно полученным данным, последовательное увеличение числа монослоев карбида кремния в гетероструктуре графен/2D-SiC с топологией аналогичной α -графиту сопровождается флуктуацией удельной и межслоевой энергии связи. Так структура графен/ n -слойный SiC с $n=1$ характеризуется удельной энергией связи $E_b=-8.9$ эВ, с $n=2$ $E_b=8.7$ эВ и с $n=3$ $E_b=5.1$ эВ.

Между тем гетероструктура с симметрией слоев аналогичной 2H-аллотропу карбида кремния не проявляет такой особенности, и являются термодинамически стабильной во всем диапазоне числа слоев $n=1-3$. При этом, последовательное увеличение числа слоев карбида кремния в такой структуре приводит к увеличению межслоевой энергии с $E_{sh}=-2.2$ эВ при $n=1$, до $E_{sh}=-0.8$ эВ для структуры с $n=3$ соответственно. Анализ распределения заряда в данной гетероструктуре выявил так же асимметрию в распределении отрицательного заряда, что обусловлено избытком атомов углерода в системе, о чем свидетельствует выравнивание зарядов при послойном росте.

Высокая термодинамическая стабильность (приведенная энергия связи 8.5 эВ/атом), большая ширина запрещенной зоны (1.3–1.9 эВ) определяют интерес к гетероструктурам графен/SiC для разработки приборов нанoeлектроники.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 16-43-360281p_a)

Литература

1. Lin X. Electronic structures of multilayer two-dimensional silicon carbide with oriented misalignment // *J. Mat. Chem* **Vol. 3**, № 35, 2015, P. 9057–9062.
2. Lin S.S. Light-Emitting Two-Dimensional Ultrathin Silicon Carbide. // *J. Phys. Chem. C* **Vol. 119**, № 34, 2015, P. 3951–3955.