ФОРМИРОВАНИЕ ВАКАНСИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В ДВУМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ

И.А. Какорин, *студент*
Волгоградский государственный университет
(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2024-2-3-18-21

Аннотация. *В работе описывается образование вакансионных дефектов в двумерных структурах, приведены факторы, которые влияют на этот процесс. Вакансионные дефекты могут изменять как геометрию и структуру слоя, так и его электронные состояния. Более подробно представлено образование вакансии на примере плоского бора, расчеты выполнены полуэмпирическим методом – MNDO.*

Ключевые слова: *плоский бор, вакансия, метод MNDO, графен, слой.*

В последние годы двумерные материалы привлекают к себе внимание благодаря своим уникальным свойствам и широкому применению в различных областях, таких как электроника и оптика [1]. Графен, представляющий собой один слой атомов углерода, расположенных в гексагональной решетке, является одним из наиболее известных двумерных материалов. Однако изучение двумерных структур выходит за рамки графена и включает в себя другие материалы, такие как дихалькогениды переходных металлов, фосфорен и гексагональный нитрид бора [2].

Хотя двумерные материалы обладают замечательными свойствами, они не застрахованы от дефектов. Одним из распространенных типов дефектов является вакансия, когда один или несколько атомов отсутствуют в кристаллической решетке [3]. На образование вакансий влияют следующие факторы:

1. Тепловые флуктуации: повышение температуры приводит к усилению атомных колебаний, что облегчает атомам смещаться со своих мест в решетке.

2. Радиационное облучение: облучение высокоэнергетическими частицами, такими как электроны или ионы, может вызвать образование вакантных дефектов в двумерных материалах. Удар этих частиц может вытеснить атомы из мест решетки, создавая вакансии. Этот эффект особенно важен в тех случаях, когда двумерные материалы подвергаются облучению.

3. Химические реакции: воздействие газов или жидкостей может привести к удалению атомов из решетки в результате химических реакций. Это особенно актуально для конкретных применений, когда химические модификации могут непреднамеренно приводить к появлению вакантных дефектов.

4. Механическая деформация: деформация может нарушить кристаллическую решетку, что приведет к образованию вакансий, поскольку материал пытается снять напряжение. Это важно, когда двумерные материалы испытывают механическую нагрузку или интегрированы в гибкие устройства [4].

Наличие вакантных дефектов может существенно изменить геометрические, электронные, оптические и механические свойства двумерных материалов. В некоторых случаях вакантные дефекты могут выступать в качестве носителей заряда, влияя на проводимость структуры. Понимание влияния вакансий необходимо для оптимизации характеристик двумерных материалов в электронных устройствах, сенсорах и катализе.

Исследование образование вакансии рассматривалось на структуре плоского бора [5]. Расчеты проводились полуэмпирическим методом – MNDO. Чтобы смоделировать образование вакансионного дефекта один из атомов бора (рис. 1) пошагово удалялся от поверхности слоя с интервалом 0,1 Å.

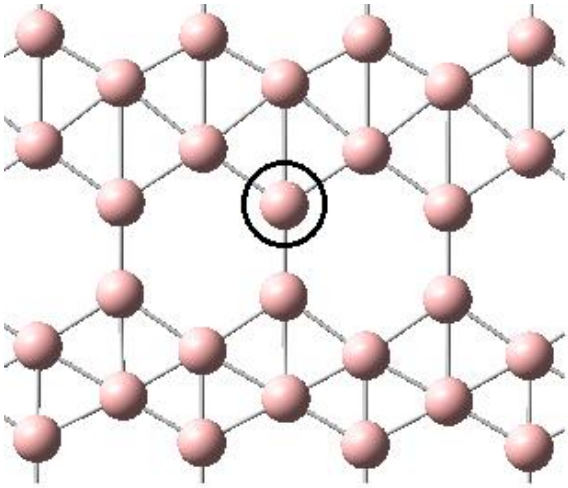

Рис. 1. Атом бора, участвующий в образовании вакансии

В каждой точке вычислялась энергия системы, зависимость энергии от расстояния представлена на рисунке 2. Энергия формирования дефекта рассчитывалась по формуле: $E_d = E_{слоя} – (E_{деф} + E_B)$, где $E_{слоя}$ – энергия идеального слоя плоского бора, $E_{деф}$ – энергия структуры с вакансией, E_B – энергия атома бора. Энергия образования дефекта оказалась равной 14,9 эВ.

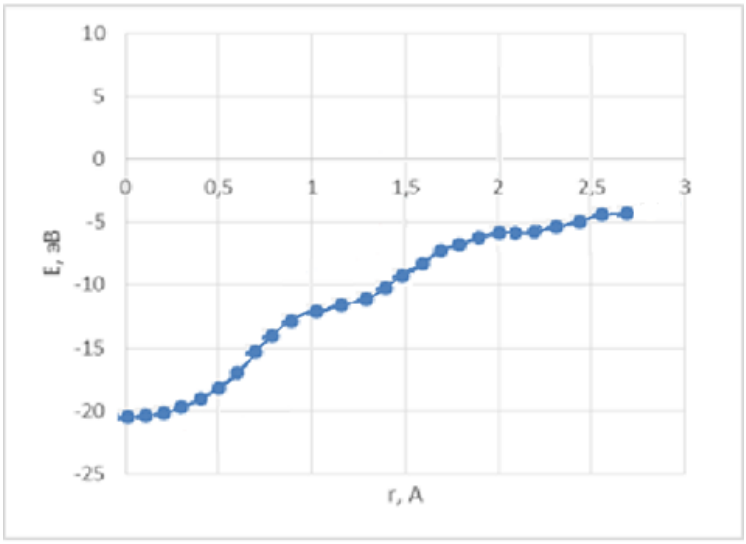

Рис. 2. Зависимость энергии от расстояния между вырываемым атомом бора и поверхностью слоя плоского бора

Поиск устойчивого положения системы показал, что атомы, находящиеся вокруг вакансии, смещаются к месту локализации вакансии. Подробное изучение геометрических параметров слоя при отрыве атома бора показало, что на расстоянии 0,4 Å от плоскости происходит нарушение плоской структуры бора, а именно вместе с удаляющемся атомом соседние атомы приподнимаются. На расстоянии 0,7 Å происходит удлинение и разрыв B-B связей, при этом атомы поверхности возвращаются в исходное состояние и слой становиться плоским. Дальнейшее удаление атома приводит к тому, что атомы вблизи вакансии изменяют своё положение и в структуре образовались пентагоны (рис. 3). Далее происходит незначительное перераспределение атомов в слое. На расстоянии 2,6 Å влияние атома B, удаленного из слоя становится незначительным.

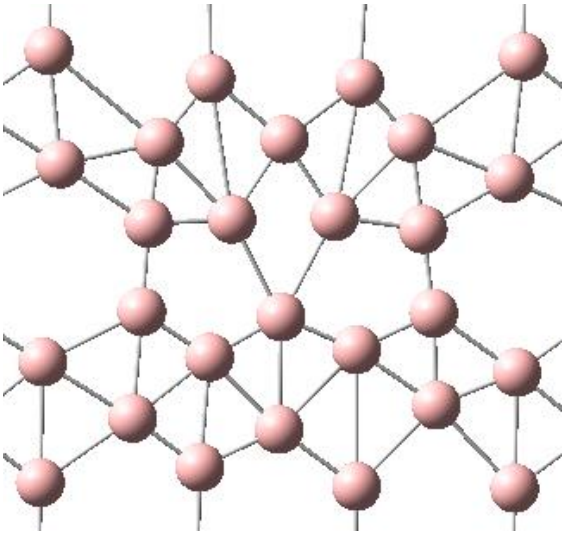

Рис. 3. Фрагмент слоя плоского бора с дефектом поверхности

Образование вакансионных дефектов в двумерных структурах - сложное явление, на которое влияют различные факторы, такие как температура, радиационное облучение, химические реакции и механическая деформация. Хотя дефекты неизбежны, всестороннее понимание механизмов их образования имеет решающее значение для использования всего потенциала двумерных материалов. Необходимо изучать способы образования и манипулирования вакантными дефектами для изменения свойств двумерных материалов.

Библиографический список

1. Давлетова, О.А. Структура и электронные характеристики пиролизованного полиакрилонитрила: специальность 05.27.01 "Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах": автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Давлетова Олеся Александровна. – Волгоград, 2010. – 17 с.

2. Панченко, А.Н. Двумерные материалы, их свойства и применение / А.Н. Панченко // Международный журнал гуманитарных и естественных наук. – 2023. – № 2-2(77). – С. 132-134. – DOI 10.24412/2500-1000-2023-2-2-132-134.

3. Эволюционный поиск и расшифровка двумерной структуры нового материала – оксинитрида бора / З.И. Попов, К.А. Тихомирова, В.А. Демин [и др.] // Биохимическая физика : труды XXI ежегодной молодежной конференции с международным участием ИБХФ РАН-вузы, Москва, 15-16 ноября 2021 года. – Москва: Российский университет дружбы народов (РУДН), 2022. – С. 73-75.

4. Мурзаханов, Ф.Ф. Вакансионные центры в карбиде кремния 4H-SiC и нитриде бора hBN: электронная структура и спиновая поляризация триплетных состояний: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Мурзаханов Фадис Фанилович, 2023. – 124 с.

5. Boroznina, E.V. Boron monolayer X3-type. formation of the vacancy defect and pinhole / E.V. Boroznina, O.A. Davletova, I.V. Zaporotskova // Журнал нано- и электронной физики. – 2016. – Vol. 8, № 4. – P. 04054. – DOI 10.21272/jnep.8(4(2)).04054.

FORMATION OF VACANCY DEFECTS IN TWO-DIMENSIONAL STRUCTURES

I.A. Kakorin, *Student*
Volgograd State University
(Russia, Volgograd)

Abstract. *The work describes the formation of vacancy defects in two-dimensional structures and lists the factors that influence this process. Vacancy defects can change both the geometry and structure of the layer and its electronic states. The formation of a vacancy is presented in more detail using the example of a flat boron; calculations were performed using the semi-empirical method – MNDO.*

Keywords: *flat boron, vacancy, MNDO method, graphene, layer.*