

# DFT-ПРЕДСКАЗАНИЕ НОВЫХ 2D-СТРУКТУР КРЕМНИЯ

---

Прохоренко Анастасия В., аспирант, младший научный сотрудник

Чибисов А.Н., док. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник

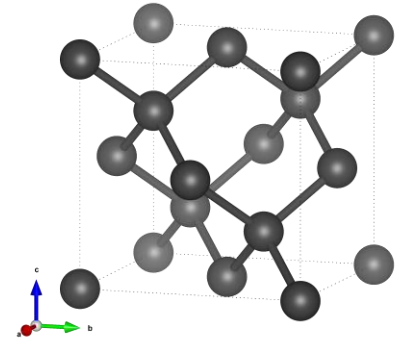
Гниденко А.А., канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник

Чибисова М.А., канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник



# Введение

- Поиск аналогов графена среди элементов *IV группы периодической таблицы*.
- Внешние орбитали содержат по *четыре электрона, относящихся к s- и p-орбиталям*.
- Обладают *выгодной пятиугольной структурой*.
- Потенциальное использование в *технологии квантовых материалов*.



- Тонкие кремниевые пластины не заняли значительную долю рынка, что связано с *падением цен на поликремний, низкой выходной способностью тонких пленок и отсутствием широкого внедрения высокопроизводительных архитектур для их производства*.

# Методы расчёта

- Программный пакет прогнозирования структур **CALYPSO**.



- CALYPSO работает в три основных:

1) Для создания исходных структур используются ограничения симметрии.

2) Локальная оптимизация этих структур выполняется с использованием ТФП.

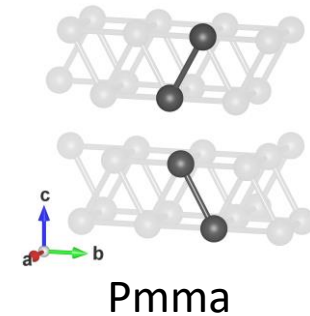
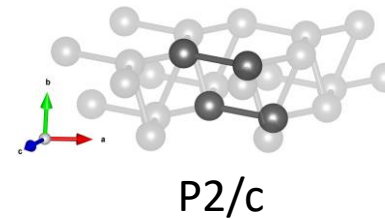
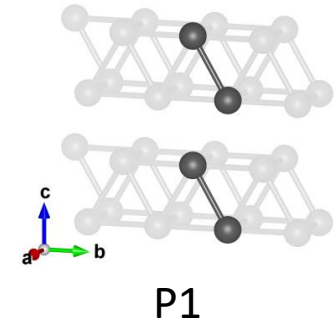
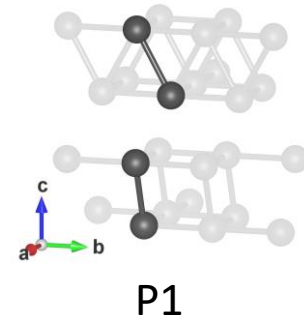
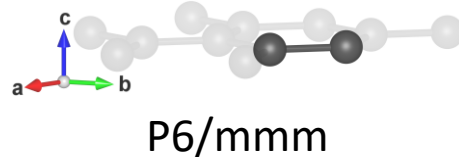
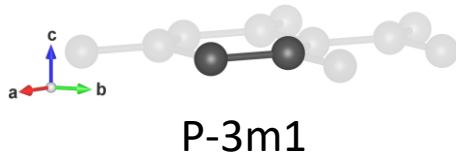
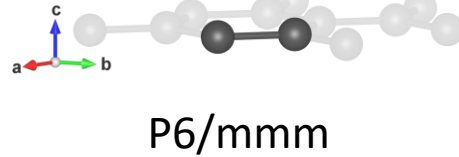
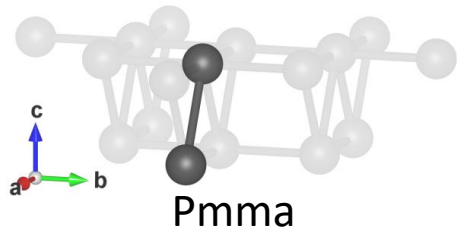
3) Для выполнения объективного структурного поиска эволюция этих структур осуществляется с помощью алгоритма оптимизации роя частиц (**PSO**).

- Пакета программ **VASP**, основанный на теории функционала плотности (**DFT**) и методе псевдопотенциала.
- Метод аппроксимации локальной плотности с применением Хаббардовской коррекции **LDA+U** в представлении **PBE**.
- Межатомные взаимодействия рассмотрены в рамках подхода проекционных присоединенных волн **PAW**.
- Энергия обрезания базиса плоских волн **600 эВ**.
- Сетка k-точек задавалась по схеме **Монкхорста-Пэка** с центром в Г-точке.

# Энтальпия отобранных модификаций $\text{Si}_2$ и $\text{Si}_4$

$\text{Si}_2$	
Space Groups	Enthalpy, eV
<b>Pmma</b>	-6.7200
<b>P6/mmm</b>	-6.6934
<b>P-3m1</b>	-6.6914
<b>P6/mmm</b>	-6.6913

$\text{Si}_4$	
Space Groups	Enthalpy, eV
<b>P1</b>	-6.8792
<b>P1</b>	-6.8764
<b>P2/c</b>	-6.8482
<b>Pmma</b>	-6.8460



# Оптимизация выбранных структур

- Энергия формирования:

$$E_{form} = \frac{E_{Si_{result}}}{n} - \frac{E_{Si_{cube}}}{8},$$

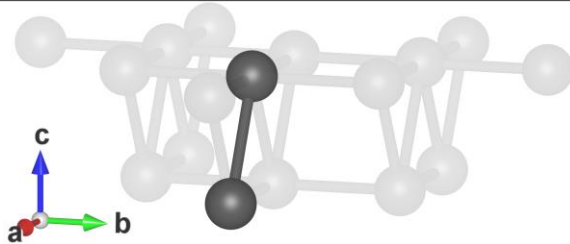
$E_{Si_{result}}$  – полная энергия результирующей системы,  $n$  – число атомов в системе,  $E_{Si_{cube}}$  полная энергия объёмного кремния  $Si_8$ .

- Энергия когезии:

$$E_{coh} = E_{result}/n - E_{isolate},$$

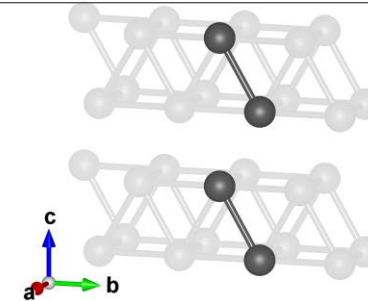
$E_{isolate}$  – полная энергия изолированного атома кремния.

Si <sub>2</sub>			
Space group	Enthalpy, eV	$E_{form}$ , eV	$E_{coh}$ , eV
<b>Pmma</b>	-6.722	0.770	-4.919
<b>P6/mmm</b>	-6.691	0.801	-4.888
<b>P-3m1</b>	-6.691	0.801	-4.888
<b>P6/mmm</b>	-6.691	0.801	-4.888
<b>Silicene</b>	-6.692	0.800	-4.889



Группа Pmma с примитивной тетрагональной кристаллической решёткой, где  $a = b = 2.417 \text{ \AA}$

Si <sub>4</sub>			
Space group	Enthalpy, eV	$E_{form}$ , eV	$E_{coh}$ , eV
<b>P1</b>	-6.880	0.612	-5.077
<b>P1</b>	-6.900	0.592	-5.098
<b>P2/c</b>	-6.848	0.644	-5.045
<b>Pmma</b>	-6.846	0.647	-5.043

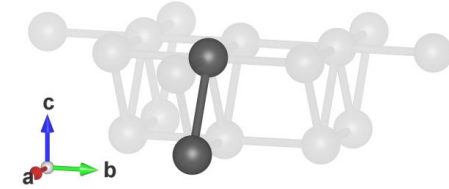


Группа P1 с примитивной орторомбической кристаллической решёткой, где  $a = 2.351 \text{ \AA}$  и  $b = 2.516 \text{ \AA}$ .

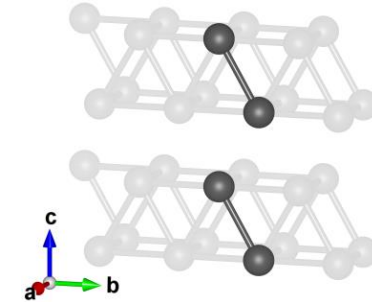
# Заключение

- В работе проведен поиск новых двумерных равновесных фаз кремния.
- Найдены точечные группы симметрии, энергии формирования и энергии связи данных фаз.

- Для **однослойного кремния** самая оптимальная конфигурация соответствует кристаллографической **решётке типа  $Pm\bar{3}m$**  (энергия формирования **0.770 эВ**).



- Для **двуслойного** —  **$P1$**  с разными параметрами ячейки **a** и **b** (энергия формирования **0.592 eV**).



- Полученные нами результаты имеют перспективное значение для материаловедения новых нанoeлектронных материалов в области проектирования и синтеза новых квантовых материалов.

*Часть работы, посвященная расчетам атомной и электронной структуры, выполнена в соответствии с Государственным заданием Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FEME-2024-0005). Расчеты выполнены с использованием методов и методик, разработанных в рамках Государственного задания Вычислительного центра ДВО РАН (ВЦ ДВО РАН). Исследования выполнены с использованием ресурсов ЦКП «Центр данных ДВО РАН».*

# ВЛИЯНИЕ ОРБИТАЛЬНОГО МАГНИТНОГО МОМЕНТА НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ НАМАГНИЧЕННОСТИ В МОНОСЛОЕ $\text{Co:ZnO}$

---

Прохоренко Анастасия В., аспирант, младший научный сотрудник

Чибисов А.Н., док. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник



*Вычислительный центр ДВО РАН, Лаборатории многомасштабного компьютерного моделирования новых материалов*

# Введение

---

- Новое направление в современной наноэлектронике – исследование 2D-материалов.
- Монослой ZnO привлек внимание исследователей из-за полезных оптоэлектронных характеристик.
- В 2021 Рю Чен предложили самый тонкий магнит на основе монослоев оксида цинка с внедренными примесными атомами кобальта демонстрирующий дальний ферромагнитный порядок при комнатной температуре.

*Tunable room-temperature ferromagnetism in Co-doped two-dimensional van der Waals ZnO / R. Chen, F. Luo, Y. Liu, Y. Song, Y. Dong, S. Wu, J. Cao, F. Yang, A. N'Diaye, P. Shafer, Y. Liu, S. Lou, J. Huang, X. Chen, Z. Fang, Q. Wang, D. Jin, R. Cheng, H. Yuan, R.J. Birgeneau, J. Yao // Nature Communications. 2021. Vol. 12. P. 3952.*

- Нами впервые теоретически показано применение этого нового сверхтонкого двумерного магнита Co:ZnO в качестве магнитной подложки для управления дырочными кубитами в тонких слоях германия.

*Possibilities of Controlling the Quantum States of Hole Qubits in an Ultrathin Germanium Layer Using a Magnetic Substrate: Results from ab Initio Calculations / A.N Chibisov, M.A. Chibisova, A.V. Prokhorenko, K.V. Obrazcov, A.S. Fedorov, Y.-X. Yu // Nanomaterials. 2023. Vol. 13. P. 3070.*



# Методы расчёта

---

- Пакета программ **VASP**, основанный на теории функционала плотности (**DFT**) и методе псевдопотенциала.
- Метод аппроксимации локальной плотности с применением Хаббардовской коррекции **LDA+U** в представлении **PBE**.
- Межатомные взаимодействия рассмотрены в рамках подхода проекционных присоединенных волн **PAW**.
- Энергия обрезания базиса плоских волн **600 эВ**.
- Сетка k-точек задавалась по **схеме Монкхорста-Пэка** с центром в  $\Gamma$ -точке.  
Для элементарных ячеек  $36 \times 36 \times 1$ , для увеличенных ячеек —  $9 \times 9 \times 1$ .
- Анализ зарядов в системе проводился с использованием **метода Бэйдера**.
- Программный пакет прогнозирования структур **CALYPSO** с использованием метода глобальной оптимизации **PSO**.



# Оптимизация объёмного и монослойного ZnO

- Для гексагональной решётки **объёмного оксида цинка**:

параметр  $a = 3.078 \text{ \AA}$ ,

параметр  $c = 4.719 \text{ \AA}$ ,

соотношение  $c/a$  равно 1.533.

Межатомные расстояния связей Zn–O:

лежащее в плоскости  $ab$  равно  $d_a = 1.870 \text{ \AA}$ ,

расстояние вдоль оси  $c$  равно  $d_c = 1.843 \text{ \AA}$ ,

угол между связями O–Zn–O равен  $113.21^\circ$ .

Прямозонный полупроводник, ширина запрещённой зоны равна 3.30 эВ.

- Монослой** с гексагональной точечной группой симметрии **P-6m2 (#187)**:

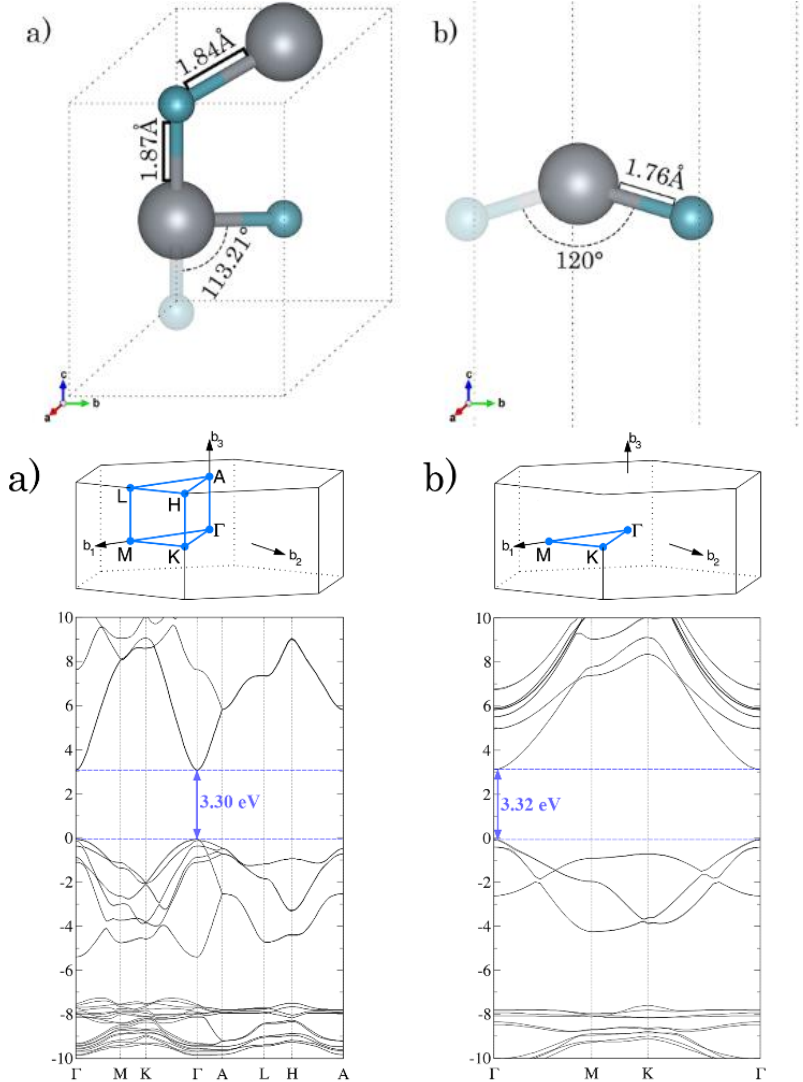
параметры ячейки  $a = b = 3.041 \text{ \AA}$ ,

длина связи Zn–O —  $1.756 \text{ \AA}$ ,

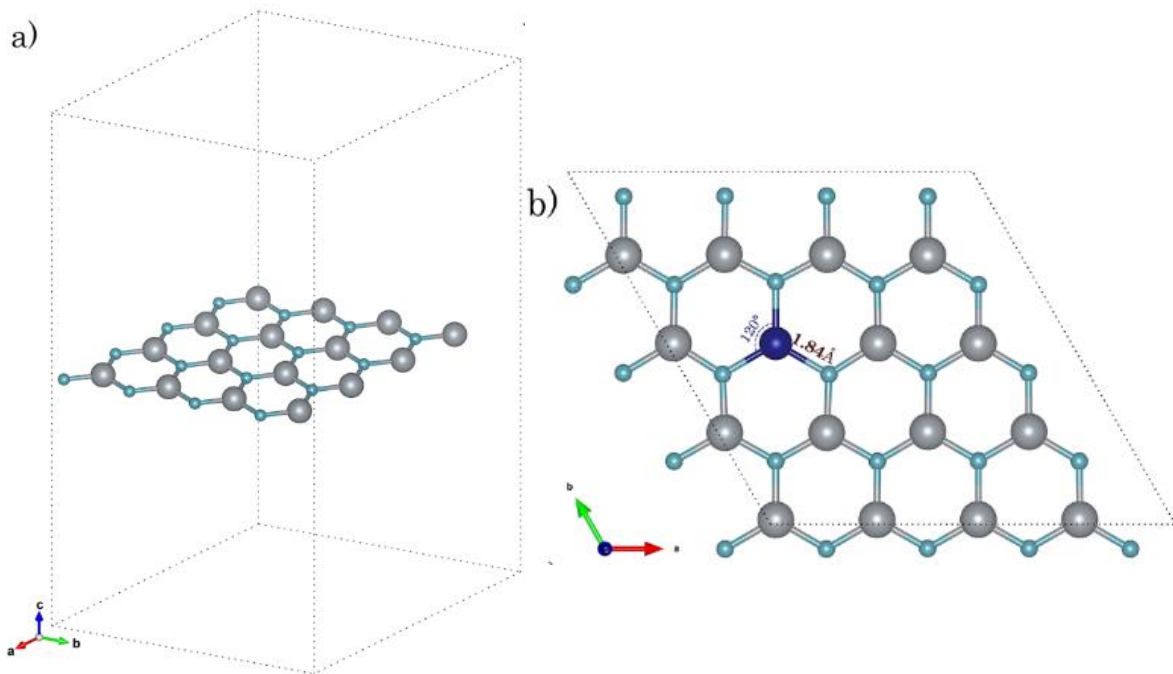
угол между связями O–Zn–O равен  $120^\circ$ .

Энергия формирования составила 1.03 эВ.

Прямозонный полупроводник, ширина запрещённой зоны равна 3.32 эВ.



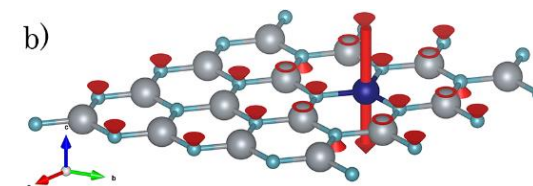
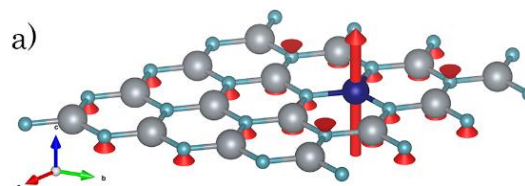
# Влияние примесного атома кобальта



- Концентрация вводимой примеси составляла **6.25 at.%**.
- Межатомное расстояние **Co – O** составляет  $\approx 1.84 \text{ \AA}$ .

- На остальных атомах цинка и кислорода величины намагниченности варьируют от -0.002 до 0.102  $\mu\text{Bohr}/\text{cell}$ .
- Наиболее выгодное состояние со спином вниз по сравнению с стоянием со спином вверх на 5  $\mu\text{eV}$ .

Структура	$M_z(\text{Co1}), \mu\text{B}/\text{cell}$	Total magnetization, $\mu\text{B}/\text{cell}$	Band gap, eV
$\text{Zn}_{16}\text{O}_{16}$	—	—	3.32
$\text{Zn}_{15}\text{O}_{16}\text{Co}\uparrow$	2.630	3.003	2.08
$\text{Zn}_{15}\text{O}_{16}\text{Co}\downarrow$	-2.630	-3.003	2.08



# Заключение

---

- Проведены квантово-механические расчеты двумерной системы оксида цинка **Co:ZnO** содержащей **примесные ионы кобальта** в количестве **6.25 at.%**.
- При переходе оксида цинка в **двухмерное состояние** **межатомное расстояние Zn-O уменьшается**, **угол связи O-Zn-O растет**, а **ширина запрещенной зоны увеличивается**.
- Наличие **примесных ионов кобальта** приводит к **увеличению межатомного расстояния**.
- Наиболее **выгодным** состоянием является состояние **со спином вниз** по сравнению с состоянием **вверх** на **5  $\mu\text{eV}$** .

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 24-13-20024). Авторы выражают благодарность за предоставление доступа к кластеру высокопроизводительных вычислений в ЦКП научным оборудованием и Центре обработки и хранения научных данных ДВО РАН и Межведомственном суперкомпьютерном центре Российской академии наук (МСЦ РАН).*

Спасибо за внимание

---