УДК 537.9:004.94

**Предсказательное моделирование новых двумерных АЛЛОТРОПОВ кремния**

*Прохоренко Анастасия Валерьевна, аспирант, младший научный сотрудник1,  
 aimpva@pnu.edu.ru*

*Чибисов Андрей Николаевич, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник1, 2,*

*Гниденко Антон Александрович, к.ф.-м.н., научный сотрудник1, 3,*

*Чибисова Мария Анатольевна, к.ф.-м.н., научный сотрудник1, 2*

*Фёдоров Александр Семёнович, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник4*

*1ТОГУ, г. Хабаровск*

*2ВЦ ДВО РАН, г. Хабаровск*

*3ФГБУН ИМ ХНЦ ДВО РАН, г. Хабаровск*

*4ИФ ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск*

Аннотация: С помощью программного пакета прогнозирования структур CALYPSO были найдены кристаллографические группы новых двумерных фаз кремния, рассчитаны их энергии формирования и когезии.

Ключевые слова: теория функционала плотности, метод псевдопотенциала, кремний.

Введение

Исследование двумерных материалов находится на начальном этапе, и наиболее целесообразным представляется поиск аналогов графена среди элементов группы IV периодической таблицы. Согласно периодическому закону, особое внимание следует уделить кремнию. Его внешние орбитали содержат по четыре электрона, относящихся к *p*- и *s*-орбиталям. С энергетической точки зрения кристаллы кремния имеют оптимальную пятиугольную структуру. Эта кристаллическая решётка включает две взаимопроникающие гранецентрированные подрешётки (fcc), в которых каждый атом окружён четырьмя соседними атомами. Все ковалентные связи в данной решётке эквивалентны и характеризуются гибридизацией *s*, *px*, *py* и *pz* (*sp*³).

Результаты расчёта и их анализ

Для определения стабильных конфигураций моно- и двуслойного кремния был использован программный пакет CALYPSO [1-3]. В процессе моделирования применялся алгоритм оптимизации роя частиц (PSO). Для углубленного анализа полученных структур были проведены квантово-механические расчёты в рамках теории функционала плотности с использованием программного пакета VASP [4-6]. Межатомные взаимодействия исследовались с применением подхода проекционных присоединенных волн (PAW) [7,8]. Расчёты учитывали спин-орбитальное неколлинеарное взаимодействие [9]. Энергия обрезания базиса плоских волн составила 600 эВ.

Для нахождения наиболее вероятных кремниевых систем, необходимо рассмотреть ряд возможных структур. При создании элементарной ячейки было задано два атома для монослойного кремния и два атома на слой для двуслойного. Для каждого случая были отобраны четыре оптимальные структуры для дальнейшего исследования. На следующем этапе выбранные структуры были оптимизированы и рассчитаны их энергии формирования и когезии (таблица ниже).

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Si2** | | | | **Si4** | | | |
| **Точечная группа** | **Энтальпия, eV** | ***Eform*, eV** | ***Ecoh*, eV** | **Точечная группа** | **Энтальпия, eV** | ***Eform*, eV** | ***Ecoh*, eV** |
| Pmma | -6.722 | 0.770 | -4.919 | P1 | -6.880 | 0.612 | -5.077 |
| P6/mmm | -6.691 | 0.801 | -4.888 | P1 | -6.900 | 0.592 | -5.098 |
| P-3m1 | -6.691 | 0.801 | -4.888 | P2/c | -6.848 | 0.644 | -5.045 |
| P6/mmm | -6.691 | 0.801 | -4.888 | Pmma | -6.846 | 0.647 | -5.043 |

Первая и наиболее энергетически выгодная структура Si2 принадлежит пространственной группе Pmma и имеет примитивную тетрагональную кристаллическую структуру с параметрами решётки *a* = *b* = 2.416 Å (рис. 1а).

В случае двуслойного кремния (Si4) оптимальной является вторая по списку конфигурация кристаллографической группы P1 с примитивной орторомбической сингонией, где *a* =2.351 и *b* = 2.516 Å (рис. 1б).

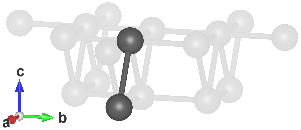
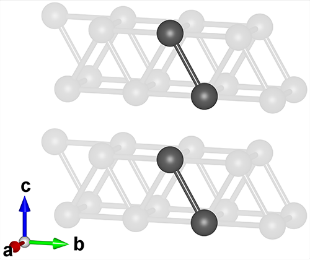
 

Рисунок 1. Элементарные ячейки оптимальных модификаций: а) Si2, b) Si4

Выводы

Результаты данного исследования показывают, что наиболее оптимальной конфигурацией является кристаллическая решётке типа Pmma (энергия формирования 0.770 эВ) для однослойного кремния и P1 (энергия формирования 0.592 эВ) с различными параметрами ячейки *a* и *b* для двуслойного кремния.

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».

Список использованных источников

1. Wang Y. et al. CALYPSO: A Method for Crystal Structure Prediction // Comput. Phys. Commun., 2012. Vol. 183, pp. 18.

2. Luo X. et al. Predicting Two-Dimensional Boron-Carbon Compounds by the global optimization method // J. Am. Chem. Soc., 2011. Vol. 133, pp. 21.

3. Wang Y. et al. An effective Structure Prediction Method for Layered Materials Based on 2D Particle Swarm Optimization Algorithm // J. Chem. Phys., 2012. Vol. 137, pp. 22

4. Kresse G.; Hafner, J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B, 1993. Vol. 47, pp. 558

5. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Comput. Mater. Sci., 1996. Vol. 6, pp. 15–50

6. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B, 1996. Vol. 54, pp. 11169

7. Blöchl, P.E. Projector augmented-wave method. Phys. Rev. B 1994, 50, 17953

8. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B, 1999. Vol. 59, pp. 1758.

9. Hobbs D., Kresse G., Hafner J. Fully unconstrained noncollinear magnetism within the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B, 2000. Vol. 62, pp. 11556.

PREDICTIVE MODELING OF NEW 2-DIMENSIONAL SILICON ALLOTROPES

A.V. Prokhorenko, A.N. Chibisov, A.S. Fedorov

Abstract: Using the CALYPSO structure prediction software package, crystallographic groups of new two-dimensional silicon phases were found and their formation and cohesion energies were calculated.

Key words: density functional theory, pseudopotential method, silicon.