

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики
наименование кафедры

**Электронные и электрические свойства Ван-дер-Ваальсовых
гетероструктур на основе арсенида бора**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАРВСКОЙ РАБОТЫ

Студентки 4 курса 4033 группы

направления 03.03.03 «Радиофизика»
код и наименование направления

Института физики

наименование факультета

Острогоровой Елизаветы Дмитриевны

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель
доцент, к.ф.-м.н., доцент
должность, уч. степень, уч. звание

08.06.2026

дата, подпись

М.М. Слепченков
инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:
д.ф.-м.н., профессор
должность, уч. степень, уч. звание

08.06.2026
дата, подпись

О.Е. Глухова
инициалы, фамилия

Саратов 2026

ВВЕДЕНИЕ

Современная микроэлектроника вступила в эпоху поиска принципиально новых материалов, способных обеспечить дальнейшее развитие вычислительной техники за пределы масштабирования кремниевых транзисторов. Основными ограничениями традиционной кремниевой электроники становятся высокие тепловые потери и фундаментальные физические пределы увеличения быстродействия. В этом контексте особое внимание исследователей привлекают двумерные (2D) материалы и создаваемые на их основе ван-дер-ваальсовы гетероструктуры. Возможность комбинирования атомарно тонких слоев с различными электронными свойствами без ограничений, связанных с несоответствием кристаллических решеток (как в классической гетероэпитаксии), открывает путь к созданию устройств с принципиально новыми функциями. Ван-дер-Ваальсовы гетероструктуры были предложены для создания вертикальных полевых транзисторов [1–4]. По сравнению с обычными кремниевыми транзисторами, туннельные полевые транзисторы (FET) на основе вертикальных гетероструктур способны работать в режиме низкой мощности [5,6]. Кроме того, в отличие от транзисторов на основе 2D полупроводниковых материалов, транзисторы на основе вертикальных гетероструктур Ван-дер-Ваальса обладают лучшими характеристиками благодаря более низкому контактному сопротивлению [7,8]. Превосходные оптоэлектронные свойства 2D материалов делают вертикальные гетероструктуры Ван-дер-Ваальса перспективными материалами для фотодетектирования [9,10].

Одним из наиболее перспективных, но пока малоизученных кандидатов для создания таких структур является гексагональный арсенид бора (h-BAs). В отличие от своего кубического аналога, известного рекордной теплопроводностью, двумерная форма арсенида бора, согласно теоретическим предсказаниям, может сочетать в себе свойства широкозонного полупроводника и высокую подвижность носителей заряда. Его структурное сходство с графеном

и гексагональным нитридом бора (h-BN) делает h-VAAs идеальным «конструктором» для интеграции в уже существующее семейство графеноподобных материалов. Однако экспериментальные и теоретические данные об электронных и электрических свойствах именно гетероструктур на основе h-VAAs на сегодняшний день фрагментарны и требуют систематизации и углубленного анализа.

Актуальность выбранной темы дипломной работы обусловлена необходимостью поиска новых материалов и архитектур для пост-кремниевой электроники. Формирование гетероструктур на основе гексагонального арсенида бора и графеноподобных материалов (таких как графен, h-BN, диалкогениды переходных металлов) открывает широкие перспективы для управления электронным спектром и транспортными свойствами. Например, использование h-VAAs в качестве подложки или барьерного слоя может минимизировать рассеяние носителей в графене (как это делает h-BN), одновременно обеспечивая лучший теплоотвод из-за высокой теплопроводности материала. Кроме того, современные исследования указывают на возможность значительной вариации ширины запрещенной зоны в гетероструктурах с участием h-VAAs под влиянием деформации или внешнего электрического поля, что критически важно для создания туннельных транзисторов (TFET) и оптоэлектронных приборов. Тем не менее, вопрос о влиянии межслоевого взаимодействия на электрические характеристики (контактное сопротивление, туннельные токи, подвижность) таких структур остается открытым. Таким образом, изучение возможности формирования и анализ электронных свойств ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе h-VAAs является важной научной задачей, решение которой необходимо для оценки перспектив их практического применения в электронике будущего.

Целью данной работы является изучение возможности формирования Ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе гексагонального арсенида бора и графеноподобных материалов и оценка перспективы их применения в

электронике. Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1) Выбор графеноподобных материалов в пару к арсениду бора для формирования из них ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе проведенного аналитического обзора статей;

2) Построение энергетически устойчивых супер-ячеек ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе арсенида бора и графеноподобных материалов;

3) Предварительная оценка электронного строения построенных супер-ячеек на основе рассчитанных зонных энергетических диаграмм и распределений DOS;

4) Анализ электрических свойств исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур.

Работа состоит из введения, трех глав, заключения и использованных источников. Во введении обосновывается актуальность темы исследования, формулируются цели и задачи работы. Первая глава посвящена критическому обзору исследований ван-дер-ваальсовых гетероструктур, арсенида бора и нитрида галлия. Вторая глава включает в себя описание используемого в работе физико-математического аппарата. В третьей главе приведены результаты расчета электронно-энергетических и электропроводных характеристик ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе арсенида бора и нитрида галлия. В заключении сформулированы основные результаты и выводы проведенного исследования.

Основное содержание работы.

Для формирования ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе арсенида бора был выбран двумерный гексагональный нитрид галлия (GaN), обладающий полупроводниковыми свойствами. Формирование гетероструктур проводилось из следующих соображений:

1. Сочетаемые слои гетероструктуры должны иметь малое расхождение по векторам кристаллической решетки.

2. Атомная конфигурация образованной гетероструктуры должна быть энергетически стабильна.

Построение атомистической модели суперъячейки ван-дер-ваальсовой гетероструктуры VAs/GaN осуществлялось путём наложения слоёв друг на друга и последующей оптимизации атомной структуры методом функционала плотности (DFT) в программном пакете SIESTA. На рисунке 1 представлено наложение монослоёв VAs и GaN.

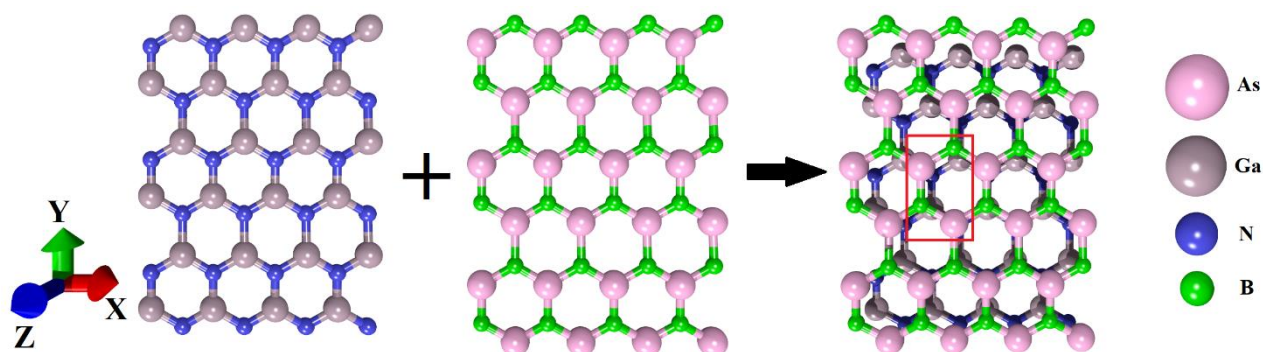


Рисунок 1 – Построение атомистические модели ван-дер-ваальсовых гетероструктур VAs/GaN.

Получена равновесная конфигурация суперъячейки гетероструктуры с указанием векторов трансляции по осям X и Y. Как можно увидеть на Рисунке 2, суперъячейка состоит из 8 атомов. Расстояние по оси Z составило 4.5 Å, как можно увидеть на рисунке 3.

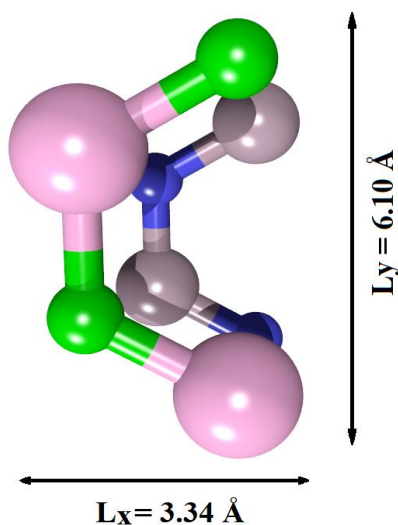


Рисунок 2 – Суперъячейка гетероструктуры VAs/GaN.

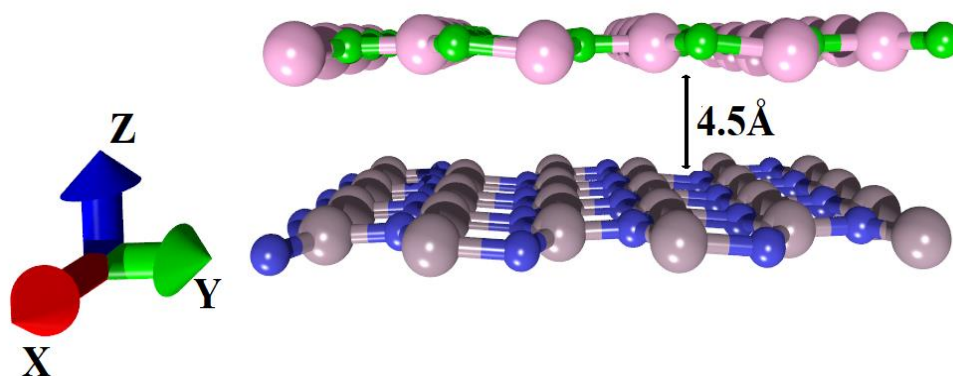


Рисунок 3 - Атомистическая модель суперъячейки ван-дер-ваальсовой гетероструктуры BAAs/GaN с указанием расстояния между слоя по оси Z

Энергетическая устойчивость суперъячейки оценивалась по величине энергии связи E_b как разность полной энергии гетероструктуры BAAs/GaN и суммы энергий отдельных монослоев BAAs и GaN. Результат расчёта показал, что величина энергии связи составляет -0.32 мэВ/атом. Отрицательное значение свидетельствует об экзотермическом процессе формирования, а значит, о выгодности по энергии конфигурации гетероструктуры.

На основе расчётов были получены энергетическая зонная диаграмма и распределение плотности состояний DOS по атомным орбиталям исследуемой гетероструктуры. Установлено, что гетероструктура BAAs/GaN характеризуется интервалом энергий с нулевой плотностью состояний DOS вблизи уровня Ферми шириной 0.6 эВ, что свидетельствует о её полупроводниковых свойствах. На рисунке 4 представлена парциальная плотность состояний (PDOS) вблизи уровня Ферми. Наибольший вклад в плотность состояний в валентной зоне вносят $2p$ орбитали атомов азота, в зоне проводимости — $2p$ орбитали атомов бора. Наличие запрещённой зоны шириной 0.6 эВ вблизи уровня Ферми подтверждает, что предложенная гетероструктура обладает полупроводниковым типом проводимости.

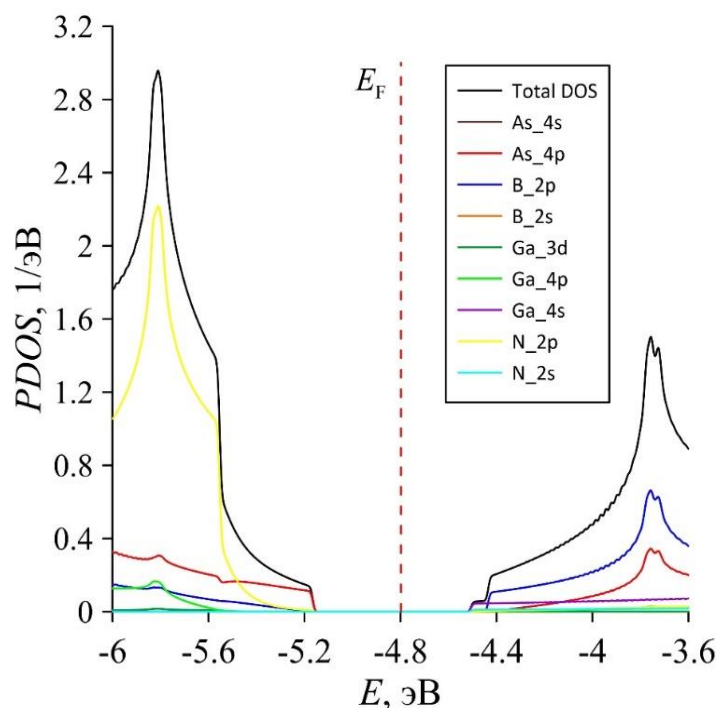


Рисунок 4 - Парциальная плотность состояний (PDOS) вблизи уровня Ферми

Электрические свойства оценивались в рамках формализма Ландауэра-Буттикера. Проводился расчёт функции пропускания электронов и электропроводных параметров. Расчет тока через гетероструктуры проводился в рамках формализма Ландауэра-Буттикера с использованием метода неравновесных функций Грина-Келдыша [11], реализованный в программе TranSiesta [12]. Расчеты проводились для двух направлений токопереноса: вдоль краев с кресельной конфигурацией (armchair) и зигзагообразной конфигурацией (zigzag) монослоев GaN и ВAs. Согласно проведенным результатам квантового транспорта при температуре 300 К, для гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO характерна анизотропия электропроводящих свойств: в направлении «zigzag» ток в 5 раз больше, чем в направлении «armchair». Для объяснения причины появления анизотропии тока были рассчитаны графики функции пропускания электронов $T(E)$, представленные на рисунке 5. На основе рассчитанных $T(E)$ было определено, что анизотропия тока объясняется тем, что в направлении «armchair» количество каналов проводимости на уровне Ферми (смещен в 0 эВ) в несколько раз меньше (~ 3), чем в направлении «zigzag».

Следовательно, канал проводимости в направлении края «zigzag» обладает меньшим сопротивлением.

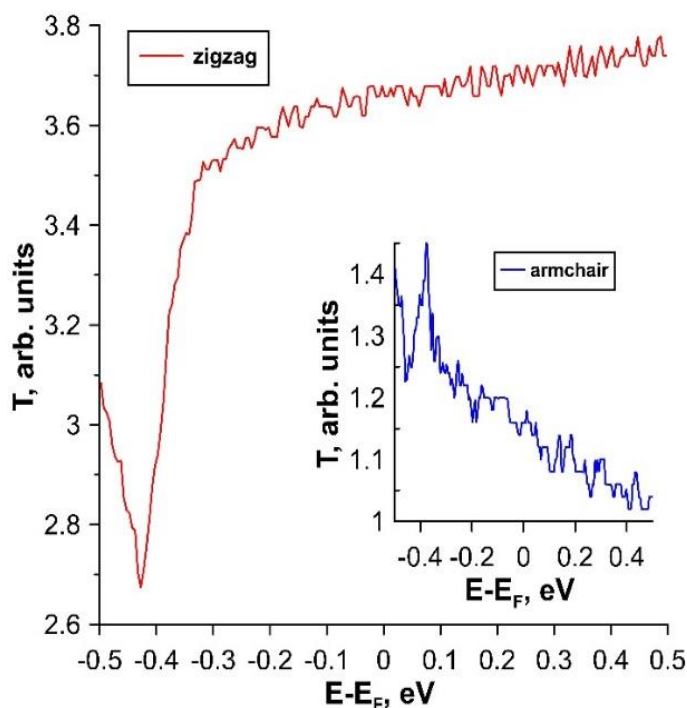


Рисунок 5 - Функции пропускания $T(E)$ гетероструктуры BAs/GaN в направлениях токопереноса «zigzag» и «armchair»

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам выполненной работы можно сделать следующие выводы:

1. Предложенная атомная конфигурация ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе арсенида бора BAs и нитрида галлия GaN является энергетически устойчивой, о чём свидетельствует отрицательная величина энергии связи ($-0,32$ мэВ/атом).
2. Показано, что гетероструктура BAs/GaN характеризуется интервалом энергий с нулевой плотностью состояний DOS вблизи уровня Ферми шириной $0,6$ эВ, что свидетельствует о её полупроводниковых свойствах. Наибольший вклад в плотность состояний в валентной зоне вносят $2p$ орбитали атомов азота, в зоне проводимости — $2p$ орбитали атомов бора.
3. Выявлено наличие анизотропии электропроводящих свойств гетероструктур в зависимости от направления токопереноса. Обнаруженный эффект анизотропии

тока может быть использован при реализации полевых транзисторов с проводящим каналом на базе ван-дер-ваальсовой гетероструктуры VAs/GaN.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Di Bartolomeo A. Emerging 2D Materials and Their Van Der Waals Heterostructures // *Nanomaterials* 2020, 10, 579.
2. Chakraborty S. K.; Kundu B.; Nayak B.; Dash S. P.; Sahoo P. K. Challenges and opportunities in 2D heterostructures for electronic and optoelectronic devices // *iScience* 2022, 25, 103942.
3. Liang S.; Cheng B.; Cui X.; Miao F. Van der Waals Heterostructures for High-Performance Device Applications: Challenges and Opportunities // *Adv. Mater.* 2020, 32, 1903800.
4. Shehzad N.; Saeed S.; Shahid I.; Khan I.; Saeed I.; Zapien J.A.; Zhang L. Two-dimensional van der Waals heterostructures (vdWHs) with band alignment transformation in multi-functional devices // *RSC Adv.* 2022, 12, 31456–31465.
5. Wang Z.; Xu B.; Pei S.; Zhu J.; Wen T.; Jiao C.; Li J.; Zhang M.; Xia J. Recent progress in 2D van der Waals heterostructures: fabrication, properties, and applications // *Sci. China Inf. Sci.* 2022, 65, 211401.
6. Shin Y.S.; Lee K.; Kim Y.R.; Lee H.; Lee I.M.; Kang W.T.; Lee B.H.; Kim K.; Heo J.; Park S.; Lee Y.H.; Yu W.J. Mobility Engineering in Vertical Field Effect Transistors Based on Van der Waals Heterostructures // *Adv Mater.* 2018, 30, 10.
7. Li J.; Chen X.; Zhang D.W.; Zhou P. Van der Waals Heterostructure Based Field Effect Transistor Application // *Crystals* 2018, 8, 8.
8. Kim G.; Kim S-S.; Jeon J.; Yoon S.I.; Hong S.; Cho Y.J.; Misra A.; Ozdemir S.; Yin J.; Holwill M.; Ghazaryan D.; Mishchenko A.; Andreeva D.V.; Kim Y.J.; Jeong H.Y.; Jang A.R.; Chung H.J.; Geim A.; Novoselov K.; Sohn B.H.; Shin H.S. Planar and van der Waals heterostructures for vertical tunnelling single electron transistors // *Nat. Commun.* 2019 10, 230.

9. 20. Babar Z.U.D.; Raza A.; Cassinese A.; Iannotti V. Two Dimensional Heterostructures for Optoelectronics: Current Status and Future Perspective // *Molecules* 2023, 28, 2275.
10. Zhou X.; Hu X.; Yu J.; Liu S.; Shu Z.; Zhang Q.; Li H.; Ma Y.; Xu H.; Zhai T. 2D Layered Material-Based van der Waals Heterostructures for Optoelectronics // *Adv. Funct. Mater.* 2018, 28, 1706587.
11. Datta, S. *Quantum Transport: Atom to Transistor*, 2nd ed.; Cambridge University Press: New York, USA, 2005.
12. Soler J.M.; Artacho E.; Gale J.D.; García A.; Junquera J.; Ordejón P.; Sánchez-Portal, D. The SIESTA method for ab-initio order-N materials simulation // *J. Phys.: Condens. Matt.* — 2002. — Vol. 14. — P. 2745-2779.