

Tytuł projektu:	Funkcjonalizowany silicen z pierwszych zasad
Kierownik:	mgr Agata Podsiadły-Paszkowska
Numer grantu:	2014/15/N/ST3/03816
Źródło finansowania:	Narodowe Centrum Nauki
Kwota finansowania:	57820 PLN
Czas trwania:	2015 - 2016

Celem projektu jest funkcjonalizowanie silicenu, co powinno doprowadzić do zwiększenia jego użyteczności dla praktycznych zastosowań. Czysta, swobodna warstwa silicenu charakteryzuje się strukturą elektronową ze stożkami Diraca w punktach K i K' strefy Brillouina, zatem ma charakter półprzewodnika o zerowej przerwie energetycznej. Mimo znakomitych właściwości transportowych (duża prędkość Fermiego, ruchliwość nośników ładunku i przewodnictwo elektryczne) taki materiał nie jest użyteczny w elektronice, gdzie ze względu na konieczność regulowania przepływu prądu zastosowanie znalazły półprzewodniki. Z drugiej strony oddziaływanie silicenu z otoczeniem prowadzi do zmiany jego struktury atomowej i elektronowej. Złamanie symetrii pomiędzy podsieciami silicenu (równoważnymi w przypadku swobodnej warstwy) prowadzi do utworzenia przerwy energetycznej wokół poziomu Fermiego. W naszych badaniach chcemy dowiedzieć, że poprzez odpowiedni dobór procesów wpływających na strukturę silicenu i ich parametrów można sterować szerokością przerwy energetycznej. Proponujemy zastosowanie kilku mechanizmów (parametrów):

1. adsorpcja pojedynczych atomów (rodzaj atomów i stopień pokrycia powierzchni),
2. jednowymiarowa modulacja geometrii układu - połażowanie w skali nanometrowej,
3. domieszkowanie elektronowe i dziurowe (gęstość powierzchniowa domieszkowanego ładunku),
4. zewnętrzne pole elektryczne prostopadłe do płaszczyzny silicenu (natężenie pola),
5. jedno- i dwuwymiarowe odkształcenie sieci.

Niektóre z powyższych mechanizmów były już zaproponowane w literaturze, jednak rozważane były oddzielnie. W proponowanych badaniach chcemy w szczególności skupić się na funkcjonalizowaniu silicenu poprzez adsorpcję pojedynczych atomów lekkich i ciężkich pierwiastków i zastosowanie dodatkowych mechanizmów, jak domieszkowanie ładunkowe, zewnętrzne pole elektryczne i odkształcenia sieci. Dla wszystkich przypadków chcemy określić zależność pomiędzy parametrami modyfikującymi strukturę silicenu a szerokością powstającej przerwy energetycznej, co umożliwi nam zaproponowanie najefektywniejszego sposobu sterowania przerwą energetyczną.

Otrzymane w obliczeniach struktury dadzą też sposobność określenia właściwości magnetycznych silicenu z pojedynczym atomem oraz właściwości kinetycznych

(w szczególności parametrów dyfuzji i desorpcji) atomu na silicenie w zależności od odkształcenia, domieszkowania i zewnętrznego pola elektrycznego.

W przypadku pofałdowania silicenu w skali nanometrowej (kilka stałych sieciowych) w jednym kierunku oczekujemy, że takie zaburzenie geometrii silicenu prowadzi będzie do zmiany nachylenia pasm wokół punktów K strefy Brillouina w tym kierunku, przy czym dokładny kształt stożka Diraca zależał będzie od geometrii pofałdowania. Efekt ten został stwierdzony dla grafenu, jednak ze względu na różnice w budowie pomiędzy siliceniem a grafenem taka zmiana geometrii może prowadzić do utworzenia przerwy energetycznej w jednym kierunku, zatem także może być jednym z potencjalnych mechanizmów funkcjonalizacji. W tym przypadku także chcemy przeanalizować wpływ dodatkowych mechanizmów (domieszkowanie ładunkowe i zewnętrzne pole elektryczne) na strukturę silicenu.