



DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2023.2.7>

УДК 538.915+975; 544.22.022.343; 544.225.22+25 Дата поступления статьи: 12.03.2023
ББК 24.5 Дата принятия статьи: 15.05.2023

ЭЛАСТОПРОВОДИМОСТЬ ГЕРМАНЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ С ИЗОМОРФНЫМИ ДЕФЕКТАМИ ЗАМЕЩЕНИЯ¹

Антон Сергеевич Чибриков

Аспирант кафедры теоретической физики и волновых процессов,
Волгоградский государственный университет
tf@volsu.ru, a.chibrikov@volsu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-3451-6262>
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Ольга Сергеевна Лебедева

Кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры
теоретической физики и волновых процессов,
Волгоградский государственный университет
tf@volsu.ru, lebedeva_os@volsu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-3502-9570>
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Николай Геннадьевич Лебедев

Доктор физико-математических наук, профессор кафедры
теоретической физики и волновых процессов,
Волгоградский государственный университет
tf@volsu.ru, nikolay.lebedev@volsu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-4400-8982>
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Аннотация. В работе продемонстрированы результаты теоретического исследования пьезорезистивности примесных германеновых нанолент. Наноматериал содержит точечные изоморфные дефекты замещения разных концентраций двух типов изоморфных атомов IV группы: кремния (Si) и олова (Sn). Для изучения характеристик пьезорезистивного эффекта германена представлены функции зависимости продольной компоненты тензора эластопроводимости от величины относительной деформации растяжения (сжатия), типов и

концентрации дефектов. Результаты проведенных расчетов показывают качественное согласие поведения пьезорезистивной константы германеновых нанолент для двух типов изоморфных дефектов и с литературными данными. Количественный анализ позволяет сделать вывод о том, что продольная компонента оказывается выше по модулю у нанолент с примесями олова, что указывает на более ярко выраженную пьезорезистивность материала.

Ключевые слова: пьезорезистивность, тензор эластопроводимости, приближение сильной связи, изоморфные дефекты, деформация растяжения и сжатия.

Введение

Германен является одним из ведущих перспективных 2D-материалов, имеющих структуру, аналогичную графену [7]. Обладая набором уникальных свойств [8], графен не лишен недостатков с точки зрения его интеграции в полупроводниковые устройства и преобразователи электромеханической энергии, такие как пьезорезистивные сенсоры, датчики давления, транзисторы, резисторы и многие другие. К примеру, у графена практически полностью отсутствует запрещенная зона энергий ($E_g < 0,05$ эВ), что не дает возможности закрытия канала полевого транзистора на его основе [8].

Германен, геометрическая структура которого была предсказана в 2009 г., а синтез осуществлен в 2014 г., является одним из самых перспективных наноматериалов «постграфеновой эры» [1]. Его запрещенная зона составляет в соответствии с теоретическими исследованиями величину $E_g \sim 24$ эВ, что на несколько порядков превышает графеновую. Это дает широкий спектр возможности управления его пьезорезистивными и проводящими свойствами. Способы управления можно внедрить путем внешней механической деформации наноматериала и допирования разнообразными дефектами замещения. Если объединить эти два фактора, то можно добиться переменного изменения свойств германена даже в ходе работы прибора на его основе.

В соответствии с поставленной научной задачей цель работы определяется как исследование пьезорезистивных свойств германеновых нанолент с изоморфными дефектами замещения, в качестве которых выбраны атомы кремния и олова. В научной литературе отсутствуют аналогичные расчеты, однако в процессе работы было проведено сравнение со свойствами примесных материалов похожей структуры.

1. Описание модели

Структура энергетических зон деформированных нанолент (NR) описывается одномерным дисперсионным соотношением, получаемым из электронного спектра двумерного гексагонального слоя методом сворачивающихся зон. В рамках модельного подхода Хаббарда в приближении сильной связи и π -электронном приближении Хюккеля электронный спектр NR кресельного (индекс «а») и зигзагообразного (индекс «z») типов соответственно имеет следующий вид [5]:

$$\varepsilon_\alpha(\mathbf{k}) = \pm \gamma(\delta) \sqrt{1 \pm 4 \cos\left(\frac{\pi q}{n}\right) \cos[kR_0(1 + \delta)] + 4 \cos^2\left(\frac{\pi q}{n}\right)},$$

$$\varepsilon_z(\mathbf{k}) = \pm\gamma(\delta)\sqrt{1 \pm 4 \cos [kR_0(1 + \delta)] \cos\left(\frac{\pi q}{n}\right) + 4 \cos^2 [kR_0(1 + \delta)]},$$

где $\gamma(\delta)$ — интеграл перескока электрона между соседними атомами в деформированных нанолентах; $\delta = \Delta R/R_0$ — относительная деформация элементарной ячейки; R_0 — невозмущенная длина межатомной связи; k — продольная компонента волнового вектора в одномерной зоне Бриллюэна; $q = 1, \dots, n$ — поперечная дискретная компонента волнового вектора; n — число элементарных ячеек по ширине ленты.

Для описания энергетического спектра примесных германеновых нанолент используется модельный подход Андерсона, который подразумевает описание структур с предельно малыми концентрациями дефектов [2] и заключается в отдельном рассмотрении коллективизированных (π -электронов) и локализованных электронов. Взаимодействие между этими электронами учитывается посредством модельного параметра гамильтониана — потенциала гибридизации. Такая модель реализована для описания графеновых нанолент с точечными донорными и акцепторными дефектами замещения, однородно распределенными в кристаллической решетке наноматериала [9]. Зонная структура NR в модельном подходе Андерсона имеет следующий вид:

$$E(k) = \frac{1}{2} \left[\varepsilon_l + \varepsilon(\mathbf{K}) \pm \sqrt{(\varepsilon_l - \varepsilon(\mathbf{k}))^2 + 36|V_{GeD}(\delta)|^2 x} \right],$$

где $\varepsilon(\mathbf{k})$ — электронный спектр наноленты без дефектов, описываемой соотношениями выше; ε_l — энергетический уровень электрона на дефекте; $x = N_d/N$ — концентрация примесей; N — число элементарных ячеек в кристалле; N_d — количество дефектов в кристаллите; $V_{GeD}(\delta)$ — потенциал гибридизации, представляющий собой матричный элемент энергии взаимодействия между электронами кристалла и точечного дефекта, как функция δ .

Примеси выбирались с учетом возможного изоморфного замещения атома германия элементами из IV группы: атомы кремния (Si) и олова (Sn). Для оценки энергии электрона на дефекте ε_l использовалась разность потенциалов ионизации атомов примеси и германия, которые отсчитывались от уровня Ферми:

$$\varepsilon_l = I_{Ge} - I_{Si} = 7,88 \text{ эВ} - 8,15 \text{ эВ} = -0,27 \text{ эВ} \text{ — для примеси кремния;}$$

$$\varepsilon_l = I_{Ge} - I_{Sn} = 7,88 \text{ эВ} - 7,34 \text{ эВ} = 0,54 \text{ эВ} \text{ — для примеси олова.}$$

Функциональная зависимость интеграла перескока $\gamma(\delta)$ и потенциала гибридизации $V_{GeD}(\delta)$ от относительной деформации оценивались исходя из расчетов электронного строения германеновых нанолент с помощью метода теории функционала плотности с обменно-корреляционным потенциалом B3LYP в базе атомных орбиталей STO-3G [6]. Квантово-химические расчеты электронного строения NRs осуществлялись для фрагмента поверхности германена размером 6×6 ЭЯ, в котором граничные ненасыщенные связи замыкались одновалентными атомами водорода. Атом точечного дефекта помещался в центр построенного кластера, чтобы уменьшить влияние граничных атомов водорода. Деформация структуры вдоль длины NR реализовывалась методом пошагового замораживания атомов германия на противоположных границах фрагмента. Рассчитанные функциональные зависимости $\gamma(\delta)$ и $V_{GeD}(\delta)$ аппроксимировались аналитическими выражениями экспоненциального вида:

$$\gamma = \gamma_0 \exp(-19523R), \quad \gamma_0 = 171,11 \text{ эВ}, \quad R = R_0(1 + \delta),$$

$$V_{GeD} = V_0 \exp(-18498R), \quad V_0(D = Si) = 132,91 \text{ эВ}, \quad V_0(D = Sn) = 175,28 \text{ эВ}.$$

Путем геометрической оптимизации геометрии построенного фрагмента германена методом теории функционала плотности получены длины межатомных связей недеформированного бездефектного германена, которые составили $R_0 = 2,44 \text{ \AA}$. В расчетах использовались следующие значения деформации однородного растяжения (сжатия) в диапазоне $\delta = -0,1, \dots, 0,1$. Для нахождения продольной компоненты тензора эластопроводимости M [2] в работах [3; 4] предложена следующая формула:

$$M = \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} \frac{1}{\sigma},$$

где $\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0$ — изменение удельной проводимости деформированного германена; σ и σ_0 — проводимость деформированной и недеформированной наночастицы соответственно. Удельная продольная проводимость NR вычислялась в рамках теории Кубо — Гринвуда и модели Хаббарда с помощью метода функций Грина [2]. Итоговое выражение для продольной удельной проводимости NR , входящее в величину M , имеет следующий вид:

$$\sigma = 2 \frac{i\pi e^2}{k_B T V} \sum_{k,\alpha} \sum_{q,\beta} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{q}) \langle n_{k\alpha} \rangle [\langle n_{q\beta} \rangle + \delta_{kq} \delta_{\beta\alpha} (1 - \langle n_{k\alpha} \rangle)],$$

где V — объем; k_B — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура; e — элементарный заряд; \mathbf{k}, \mathbf{q} — двухкомпонентные волновые вектора в пределах зоны Бриллюэна (ЗБ); α, β — спиновые индексы; $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \nabla E(\mathbf{k})/\hbar$ — вектор скорости электрона в ЗБ; $\langle n_{k\alpha} \rangle$ — среднее число частиц в состоянии с волновым вектором k и спином α , выражаемое функцией Ферми — Дирака:

$$N_e = \sum_{k,\alpha} \langle n_{k\alpha} \rangle.$$

Поскольку примеси являются изоморфными, то число π -электронов в NR равно числу атомов в кристаллите. Для бездефектных NR s уровень химического потенциала полагался равным 0 эВ.

Методика расчета продольной компоненты тензора эластопроводимости апробирована в работах [3; 4; 9], посвященных исследованию пьезорезистивных свойств углеродных наноматериалов.

2. Обсуждение результатов

На рисунках 1–6 приведены рассчитанные функциональные зависимости компоненты тензора эластопроводимости M от деформаций растяжения и сжатия δ для проводящих и полупроводниковых германеновых нанолент различной ширины и геометрической конфигурации. На каждом рисунке изображены графики $M(\delta)$ для различных концентраций дефектов обоих видов $N_d = 1, 10, 100, 1000, 10000$. Линии на графиках соединяют расчетные точки для выявления характера изменения эластопроводимости. Расчеты проведены при температуре $T = 300 \text{ К}$. В тексте и на рисунках использованы следующие обозначения кресельных и зигзагообразных нанолент разной ширины: $m\text{Agm}$, где $m = 9, 10, 50, 100 \text{ \AA}$ и $n\text{Zg}$, где $n = 9, 10 \text{ \AA}$ соответственно. Расчетная минимальная длина нанолент выбиралась размером $L = 100000 \text{ \AA}$. При дальнейшем увеличении длины результаты расчета не изменялись.

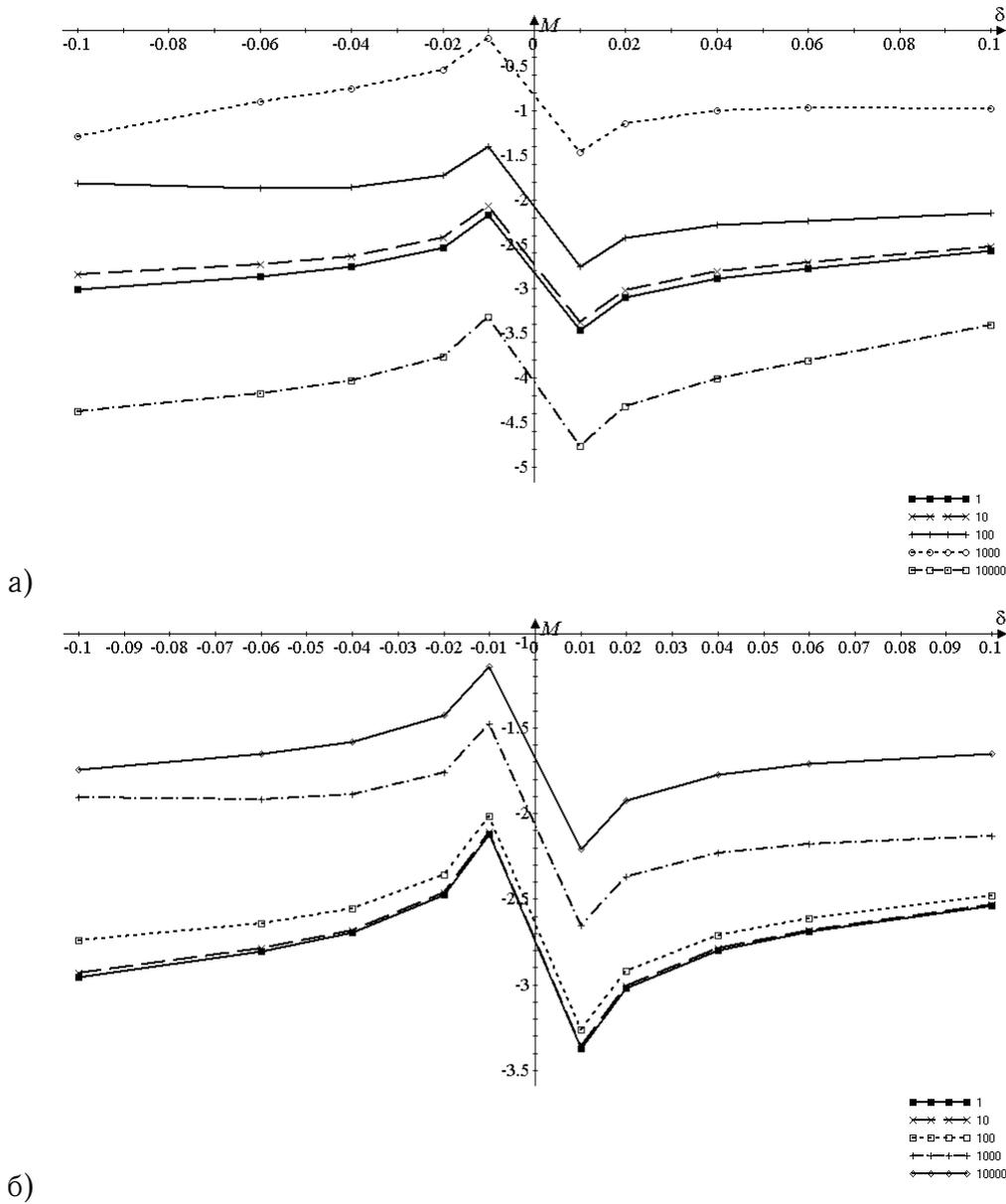


Рис. 1. Продольная компонента M тензора эластопроводимости проводящих 9Agm GeNR как функция относительной деформации δ и концентрации дефектов атомов кремния (а) и олова (б) $N_d = 1, 10, 100, 1000, 10000$

На рисунках 1, 5 и 6 наглядно продемонстрировано, что в случае проводящих нанолент типа 9Agm , 9Zg и 10Zg компонента M принимает отрицательные значения во всем диапазоне δ . Для деформаций сжатия ($\delta < 0$) и растяжения ($\delta > 0$) наблюдается монотонный рост функции $M(\delta)$. Ее поведение полностью объясняют изменения в зонной структуре рассматриваемой деформированной наноленты. В области сжатия отрицательное значение M означает, что удельная проводимость увеличивается при деформации. Это следствие увеличения плотности состояний вблизи уровня Ферми, обусловленное уменьшением угла наклона дисперсионных кривых при сжатии ленты [ХФ]. Увеличение δ , в том числе и в диапазоне растяжения, соответственно увеличива-

ет наклон кривых $E(k)$ и уменьшает плотность состояний в прифермиевской области. И как следствие, уменьшается удельная проводимость. Этот эффект связан с тем, что все большее число носителей заряда с все большими энергиями дает вклад в удельную проводимость кристаллита. Тепловые флуктуации приводят к заполнению электронами зоны проводимости NR согласно функции распределения Ферми — Дирака. Модификация электронного спектра ведет к изменению удельной проводимости, учитывающей все возможные заполненные электронные состояния, а, следовательно, к росту компоненты M с ростом величины δ .

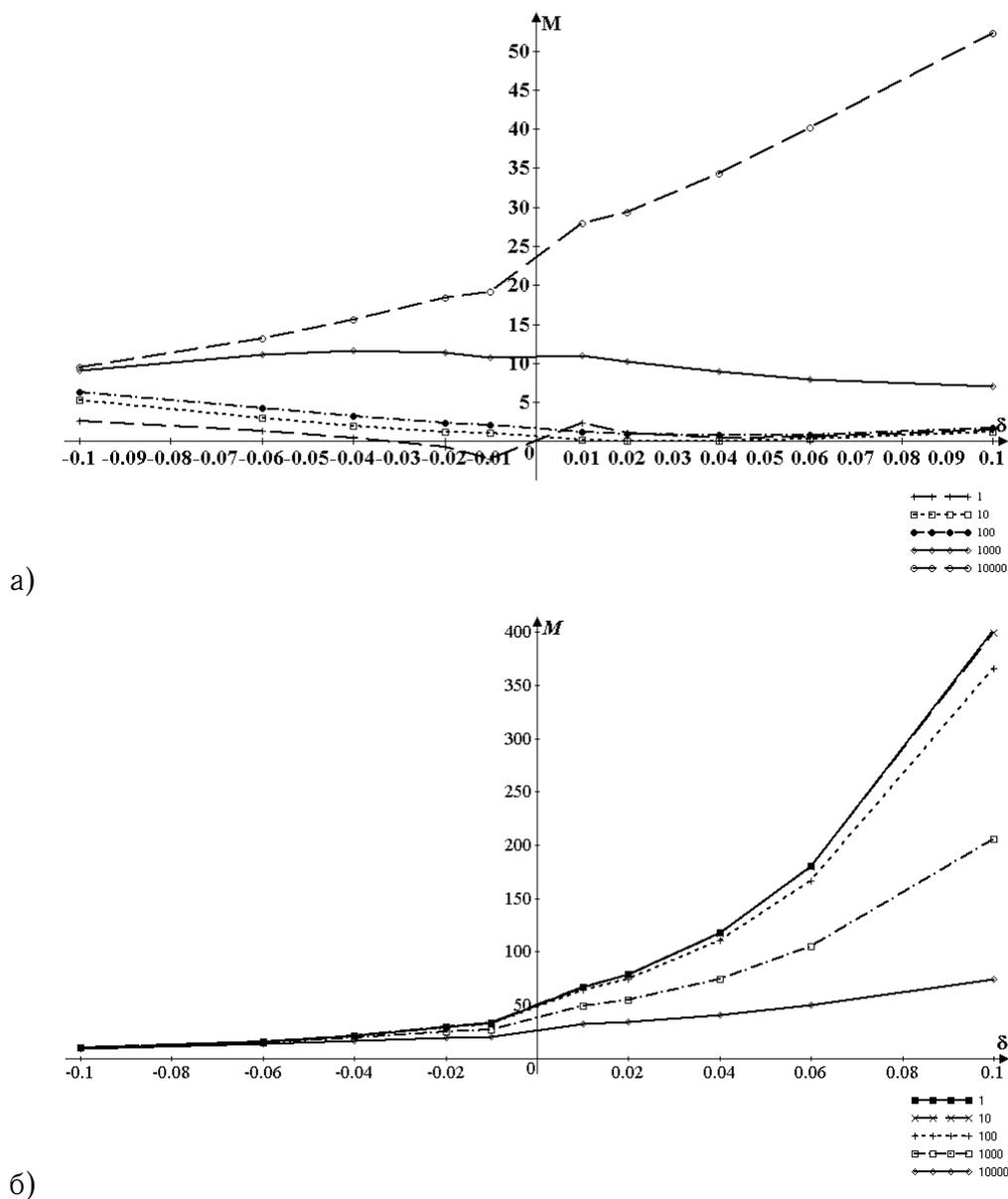


Рис. 2. Продольная компонента M тензора эластопроводимости полупроводниковых $10 \text{ \AA}m$ GeNR как функция относительной деформации δ и концентрации дефектов атомов кремния (а) и олова (б) $N_d = 1, 10, 100, 1000, 10000$

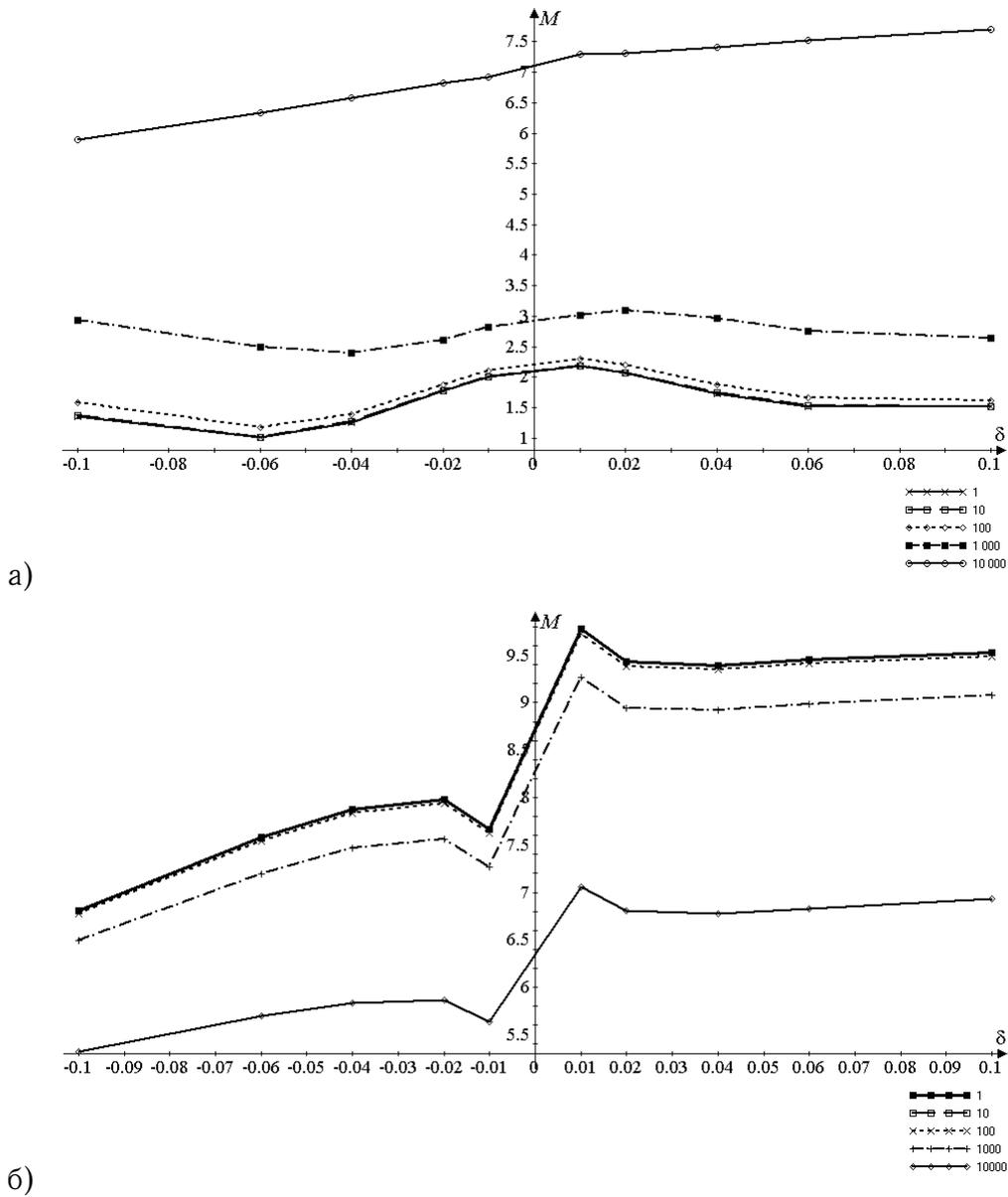


Рис. 3. Продольная компонента M тензора эластопроводимости полупроводниковых 50 Агт GeNR как функция относительной деформации δ и концентрации дефектов атомов кремния (а) и олова (б) $N_d = 1, 10, 100, 1000, 10000$

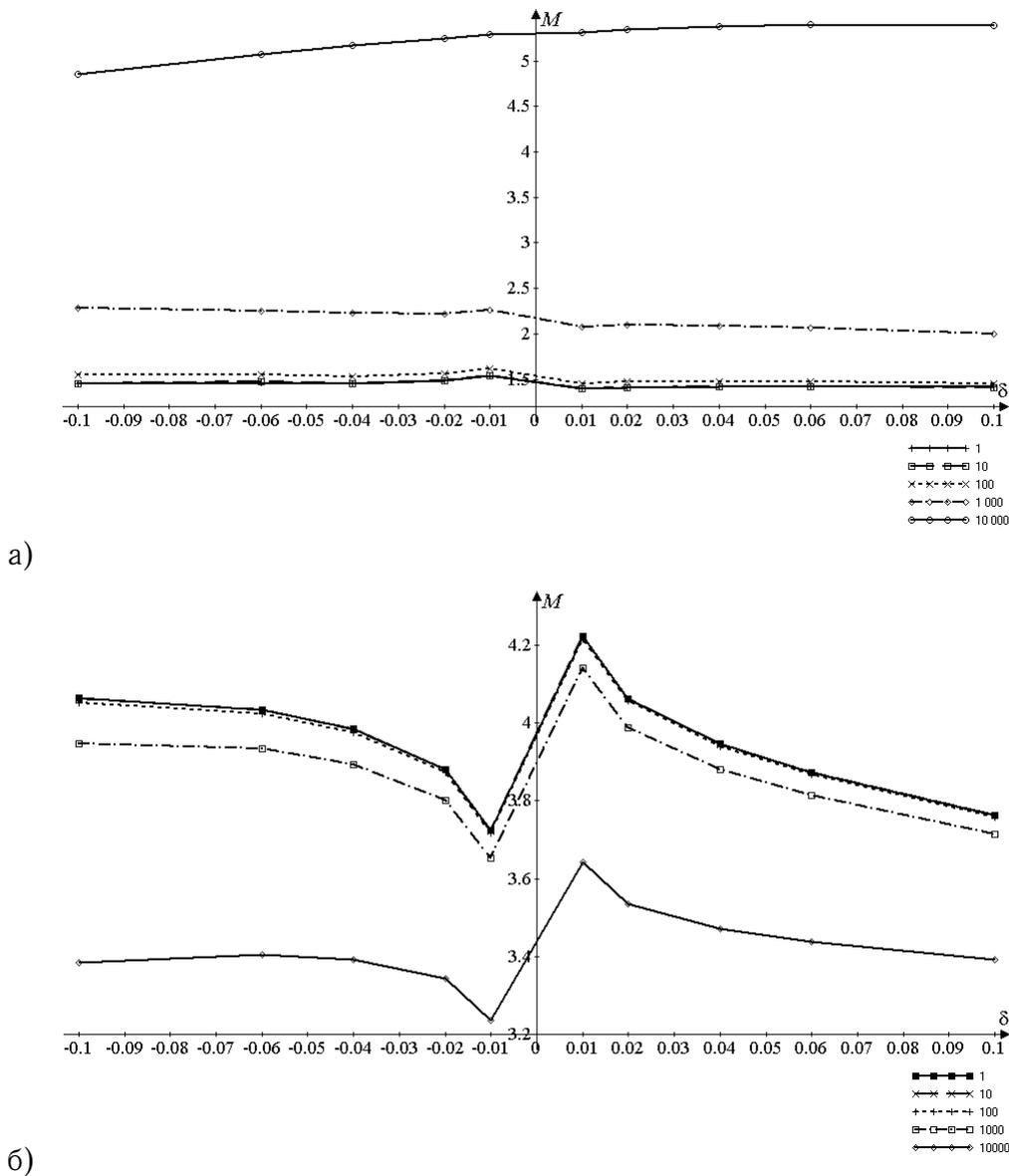


Рис. 4. Продольная компонента M тензора эластопроводимости полупроводниковых 100 Агт GeNR как функция относительной деформации δ и концентрации дефектов атомов кремния (а) и олова (б) $N_d = 1, 10, 100, 1000, 10000$

Рост концентрации дефектов увеличивает численное значение величины M во всем диапазоне δ , не изменяя качественное поведение функций $M(\delta)$. Таким образом, изоморфные дефекты, не изменяющие концентрацию и тип носителей заряда, увеличивают эластопроводимость и удельную проводимость нанолент. В этом эффекте проявляются два конкурирующих процесса — изменение плотности состояний вследствие деформации и изменение плотности состояний вследствие наличия примесей.

Разные типы дефектов (Si и Sn) не влияют на качественное поведение функций $M(\delta)$, дают только количественное различие величины M . Единственное различие проявляется при больших концентрациях дефектов кремния $N_d = 10000$. Здесь график

опускается ниже кривой с $N_d = 1$. Это связано с тем, что уровень электрона на дефекте близок к химическому потенциалу кристаллита (табл. 1). Рост концентрации атомов Si формирует примесную зону вблизи уровня ϵ_l , в которой присутствует энергетическая щель, также увеличивающаяся с ростом концентрации дефектов. Кроме того, примесная зона увеличивает плотность состояний вблизи уровня Ферми. Если уровень химического потенциала попадает в энергетическую щель примесной зоны, то проводимость кристаллита падает, что и наблюдается для кривой с $N_d = 10\,000$.

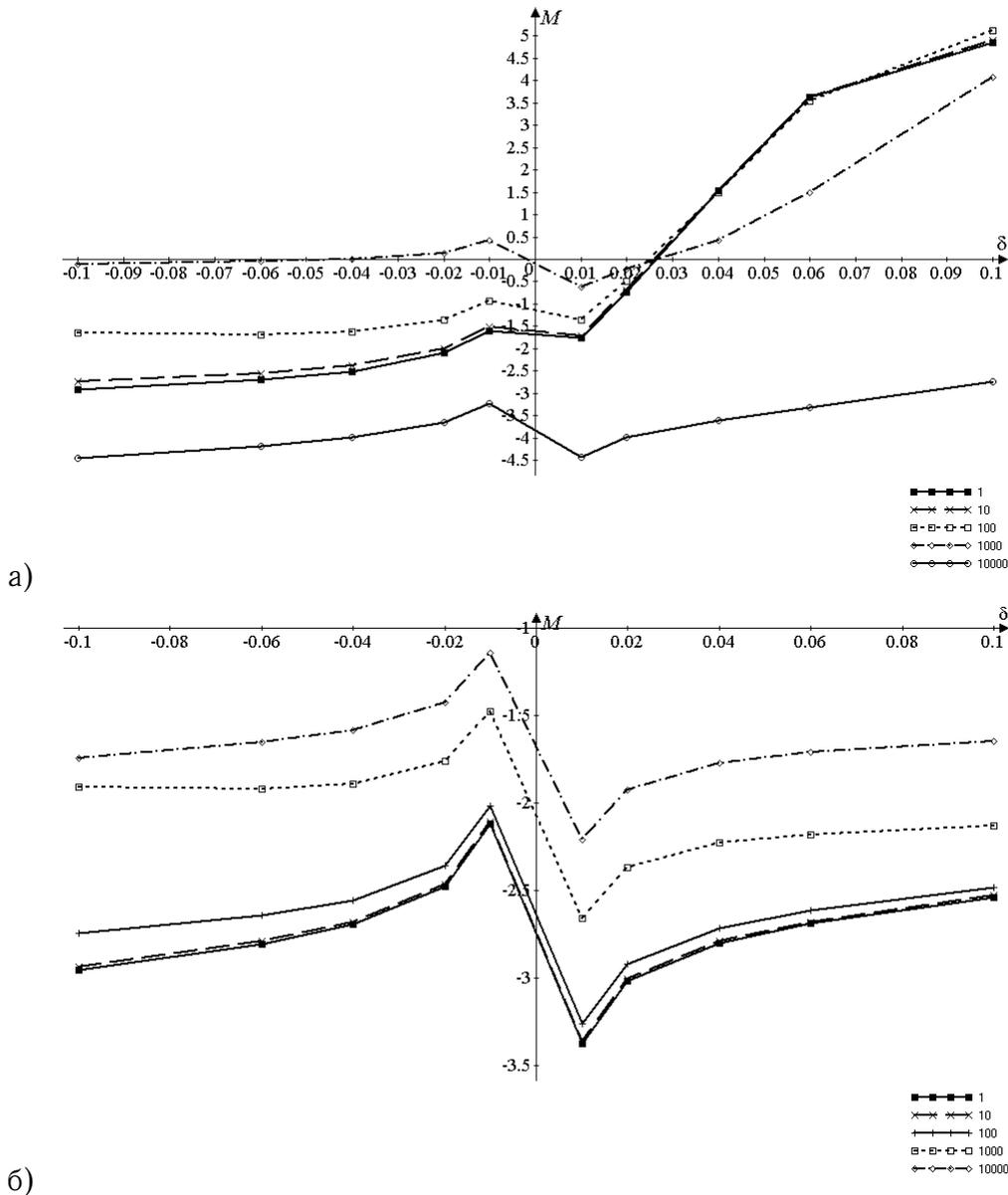


Рис. 5. Продольная компонента M тензора эластопроводимости проводящих 9 Zg GeNR как функция относительной деформации δ и концентрации дефектов атомов кремния (а) и олова (б) $N_d = 1, 10, 100, 1000, 10\,000$

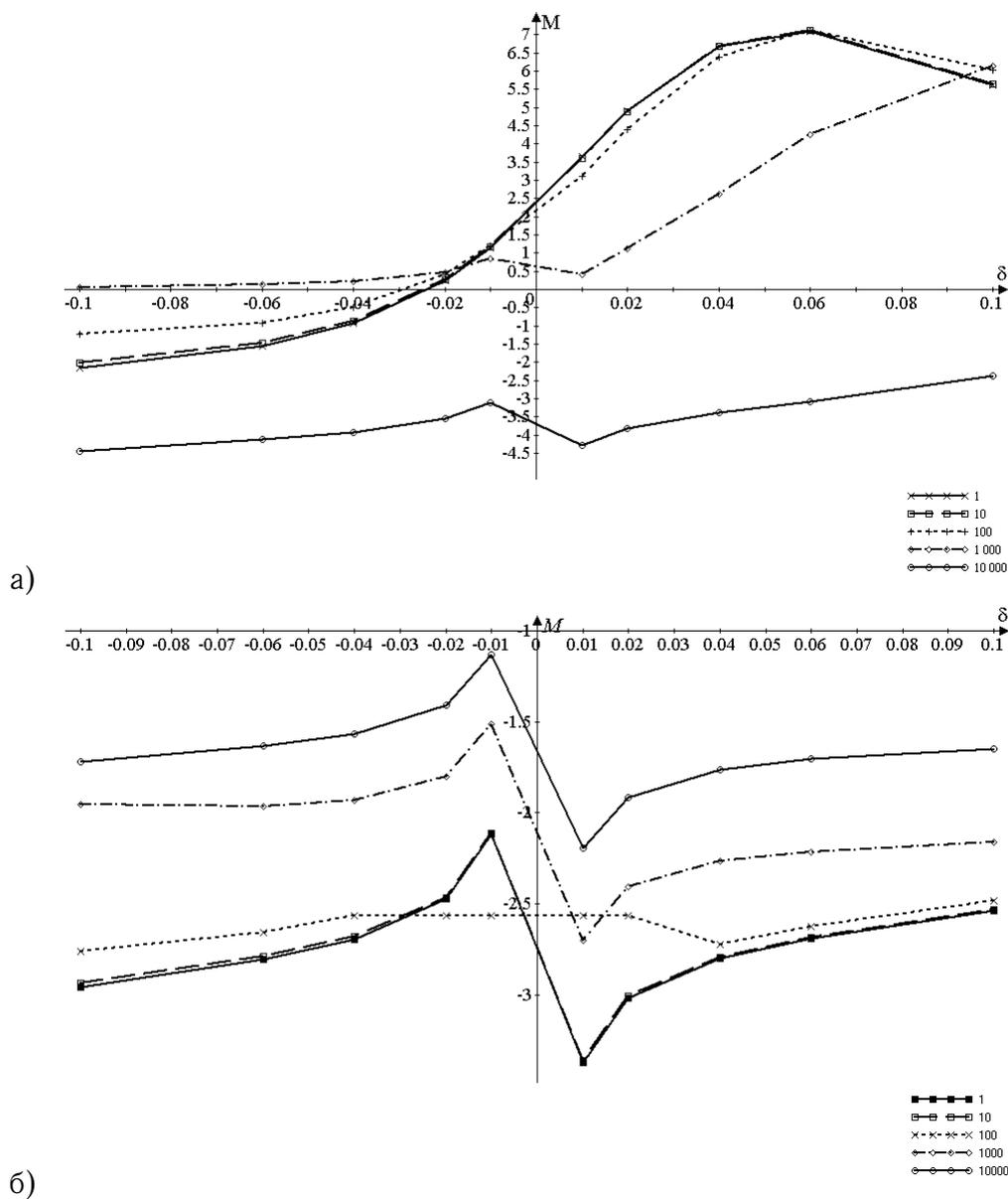


Рис. 6. Продольная компонента M тензора эластопроводимости проводящих 10 Zg GeNR как функция относительной деформации δ и концентрации дефектов атомов кремния (а) и олова (б) $N_d = 1, 10, 100, 1000, 10000$

В случае с изоморфным дефектом олова описанного выше эффекта не наблюдается, поскольку уровень электрона на дефекте расположен относительно далеко от уровня Ферми.

Пьезорезистивность полупроводниковой германеновой наноленты структурной модификации типа «arm-chair» 10 Arm зависит от концентрации дефектов. Значения продольной компоненты тензора эластопроводимости M положительны практически во всем диапазоне δ , а тенденция ее изменения коррелирует с примесной концентрацией. Положительная величина M в области деформаций сжатия ($\delta < 0$) означает, что проводимость наноленты уменьшается при деформации. Поскольку в полупроводниках проводи-

мость обусловлена наличием запрещенной зоны шириной E_g , которая уменьшается при сжатии, то этот эффект связан с уменьшением плотности состояний. Тепловые флуктуации заполняют электронами зону проводимости NR согласно функции распределения Ферми — Дирака. Поэтому все меньшее число носителей заряда дает вклад в удельную проводимость кристаллита.

Таблица 1

Химический потенциал μ (мэВ) германеновых нанолент с изоморфным дефектом Si как функция относительной деформации δ и концентрации дефектов N_d

9 Arm	N_d				
δ	1	10	100	1 000	10 000
-0,1	-423,31	-412,63	416,04	-466,74	-934,34
-0,06	-406,07	-406,3	-408,64	-440,59	-807,24
-0,04	-403,06	-403,25	-405,19	-430,93	-752,11
-0,02	-400,1	-400,26	-401,87	-422,77	-702,0
-0,01	-398,62	-398,77	-400,24	-419,1	-678,62
0	-397,38	-397,52	-398,86	-416,0	-657,75
0,01	-395,73	-395,85	-397,07	-412,51	-635,43
0,02	-394,3	-394,41	-395,52	-409,51	-615,48
0,04	-391,47	-391,56	-392,48	-403,98	-578,76
0,06	-388,65	-388,73	-389,49	-398,95	-546,22
0,1	-382,94	-382,99	-383,51	-389,99	-493,5
10 Arm	N_d				
δ	1	10	100	1 000	10 000
-0,1	-469,23	-436,72	-444,27	-503,44	-869,53
-0,06	-434,78	-416,94	-420,96	-462,75	-754,31
-0,04	-425,34	-410,76	-413,61	-446,7	-704,87
-0,02	-418,14	-405,82	-407,87	-433,42	-660,4
-0,01	-415,04	-403,63	-405,4	-427,75	-639,94
0	-401,71	-401,86	-403,4	-423,13	-621,7
0,01	-409,51	-399,62	-400,96	-418,07	-602,36
0,02	-406,87	-397,69	-398,87	-413,92	-585,16
0,04	-401,19	-393,57	-394,58	-406,63	-553,76
0,06	-394,13	-388,3	-389,35	-400,01	-526,05
0,1	-378,52	-375,08	-376,14	-386,04	-480,3

Положительное и практически монотонное поведение функции $M(\delta)$ в области растяжения ($\delta > 0$) связано с ростом удельной проводимости нанолент, что, в свою очередь, обусловлено конкуренцией двух эффектов. Это увеличение ширины запрещенной зоны с ростом деформации и увеличение плотности состояний в прифермиевской области энергий.

Разные типы дефектов (Si и Sn) в полупроводниковых нанолентах существенно влияют на качественное поведение функций $M(\delta)$. В случае примеси кремния графики монотонно убывают. То есть в этом случае преобладает эффект увеличения E_g . Кривые для примеси олова монотонно возрастают, поскольку преобладает эффект увеличения

плотности состояний. Проявление того или иного эффекта обусловлено различными уровнями электрона на дефекте ϵ_l и удаленностью его от уровня химического потенциала. Следствием этого же является увеличение численного значения M с ростом концентрации атомов Si при фиксированной деформации в нанолентах. И, наоборот, уменьшение величины M с ростом концентрации атомов олова.

Таблица 2

Химический потенциал μ (мэВ) германеновых нанолент с изоморфным дефектом Sn как функция относительной деформации δ и концентрации дефектов N_d

9 Arm	N_d				
δ	1	10	100	1 000	10 000
-0,1	-0,17	-1,69	-16,48	-135,42	-722,12
-0,06	-0,12	-1,18	-11,59	-99,7	-571,63
-0,04	-0,1	-0,99	-9,71	-85,19	-506,85
-0,02	-0,08	-0,82	-8,13	-72,6	-448,31
-0,01	-0,08	-0,75	-7,43	-66,9	-421,21
0	-0,07	-0,69	-6,86	-62,24	-398,08
0,01	-0,06	-0,63	-6,22	-56,85	-371,08
0,02	-0,06	-0,57	-5,69	-52,35	-347,94
0,04	-0,05	-0,48	-4,76	-44,31	-305,23
0,06	-0,04	-0,4	-3,98	-37,44	-266,98
0,1	-0,03	-0,28	-2,78	-26,6	-202,38
10 Arm	N_d				
δ	1	10	100	1 000	10 000
-0,1	-22,01	-23,03	-36,22	-0,15782	-697,42
-0,06	-3,05	-4,47	-17,95	-0,11246	-550,58
-0,04	-1,03	-2,21	-13,38	-0,09435	-487,42
-0,02	-0,4	-1,33	-10,27	-0,0789	-430,37
-0,01	-0,27	-1,09	-9,07	-0,07208	-403,98
0	-0,2	-0,94	-8,16	-0,06647	-381,5
0,01	-0,14	-0,79	-7,17	-0,06006	-355,2
0,02	-0,11	-0,69	-6,4	-0,05479	-332,69
0,04	-0,07	-0,54	-5,14	-0,04556	-291,2
0,06	-0,05	-0,43	-4,16	-0,03786	-254,08
0,1	-0,03	-0,28	-2,77	-0,02613	-191,58

При увеличении ширины полупроводниковых GeNRs на примере 50 и 100 Arm наблюдается в целом такое же поведение функции $M(\delta)$, что было описано выше. Отличием является уменьшение численного значения величины M по сравнению с узкой лентой 10 Arm. Здесь проявляется еще один эффект, связанный с тем, что величина запрещенной зоны E_g обратно пропорциональна ширине ленты. Расчеты показывают, что уровень химического потенциала μ всех изученных GeNR монотонно возрастает с ростом относительной деформации δ . Деформационный пиннинг химпотенциала обусловлен изменением зонной структуры GeNR вследствие взаимодействия электронов проводимости с дефектами структуры (Андерсоновской локализации). Поэтому увеличение концентрации точечных дефектов уменьшает значение величины μ при фиксированной деформации.

Выводы

В результате проведенного теоретического исследования изучены пьезорезистивные свойства германеновых нанолент — поведение продольной компоненты тензора эластопроводимости, основной характеристики пьезорезистивного эффекта. Проанализированы ее зависимости от двух конкурирующих факторов: относительной деформации растяжения и сжатия и концентрации и типов примесей. Показано качественное согласие поведения тензора эластопроводимости в зависимости от добавления в структуру германена двух вариантов изоморфных дефектов из той же группы, но разных периодов.

В результате можно сделать вывод о том, что более ярко выраженными пьезорезистивными свойствами обладает германен с примесью олова. Это объясняется высокой подвижностью электронов валентной оболочки данного элемента по сравнению с атомом германия, которая оказывается более восприимчивой к деформации структуры наноленты. В соответствии с этим фактором такой материал может быть более эффективно интегрирован как базовый элемент устройств полупроводниковой электроники по причине высокой восприимчивости его свойств к эффектам деформаций и концентрации дефектов структуры, что в свою очередь дает возможность эффективного управления такими характеристиками, как проводимость и пьезорезистивность даже в ходе работы прибора на основе германена.

ПРИМЕЧАНИЕ

¹ Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 22-22-20048 (<https://rscf.ru/project/22-22-20048/>) и за счет средств бюджета Волгоградской области.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Герт, А. В. Эффективный гамильтониан силицена в присутствии электрического и магнитного полей / А. В. Герт, М. О. Нестоклон, И. Н. Ясиевич // ЖЭТФ. — 2015. — Т. 148, № 1. — С. 133–139. — DOI: 10.7868/S004445101611016X
2. Изюмов, Ю. А. Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала / Ю. А. Изюмов, Н. И. Чашин, Д. С. Алексеев. — М. : Регулярная и хаотическая динамика, 2006. — 384 с.
3. Лебедева, О. С. Влияние деформаций растяжения и сжатия на пьезорезистивность углеродных нанотрубок и графеновых нанолент / О. С. Лебедева, Н. Г. Лебедев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2014. — Т. 189, вып. 1. — С. 26–34.
4. Лебедева, О. С. Пьезорезистивный эффект. В примесных однослойных углеродных нанотрубках. В приближении «хаббард-*i*» / О. С. Лебедева, Н. Г. Лебедев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2014. — Т. 195, вып. 2. — С. 149–161.
5. Лебедева, О. С. Эластопроводимость кресельных германеновых нанолент с донорными дефектами / О. С. Лебедева, Н. Г. Лебедев, И. А. Ляпкосова // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2019. — Т. 12, № 4. — С. 38–49. — DOI: 10.18721/JPM.14101
6. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия / Н. Ф. Степанов. — М. : Мир : Изд-во Моск. ун-та, 2001. — 519 с.

7. Чернозатонский, Л. А. Новые наноструктуры на основе графена: физико-химические свойства и приложения / Л. А. Чернозатонский, П. Б. Соколин, А. А. Артюх // Успехи химии. — 2014. — Т. 83, № 3. — С. 251–279. — DOI: <https://doi.org/10.1070/RC2014v083n03ABEH004367>

8. Aoki, H. *Physics of Graphene* / H. Aoki, M. S. Dresselhaus. — Cham : Springer, 2014. — 350 p. — DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-02633-6>

9. Lebedeva, O. S. The Effect of Isomorphic Impurities on the Elastic Conductivity of Dirac Structures / O. S. Lebedeva, N. G. Lebedev, I. A. Lyapkosova // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2020. — Vol. 32, № 14. — Article ID: 145301. — DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab5f45>

REFERENCES

1. Gert A.V., Nestoklon M.O., Yassievich I.N. Effektivnyy gamiltonian silitsena v prisutstvii elektricheskogo i magnitnogo poleya [The Effective Hamiltonian of Silicene in the Presence of and a Magnetic Field]. *ZhETF* [Journal of Experimental and Theoretical Physics], 2015, vol. 148, no. 1, pp. 133-139. DOI: [10.7868/S004445101611016X](https://doi.org/10.7868/S004445101611016X)

2. Izyumov Yu.A., Chashchin N.I., Alekseev D.S. *Teoriya silno korrelirovannykh sistem. Metod proizvodnyashchego funktsionala* [Theory of Strongly Correlated Systems. Generating Functional Method]. Moscow, Regul'yarnaya i khaoticheskaya dinamika Publ., 2006. 384 p.

3. Lebedeva O.S., Lebedev N.G. Vliyaniye deformatsiy rastyazheniya i szhatiya na pezorezistivnost uglerodnykh nanotrubok i grafenovykh nanolent [The Influence of the Stretching and Compression Deformations on the Piezoresistance of the Carbon Nanotubes and Graphene Nanoribbons]. *Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPbGPU. Fiziko-matematicheskie nauki*, 2014, vol. 189, iss. 1, pp. 26-34.

4. Lebedeva O.S., Lebedev N.G. Pezorezistivnyy effekt. V primesnykh odnosloynnykh uglerodnykh nanotrubkakh. V priblizhenii «khabbard-i» [The Piezoresistive Effect in Doped Single-Walled Carbon Nanotubes in the “Hubbard-I” Approach]. *Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPbGPU. Fiziko-matematicheskie nauki*, 2014, vol. 195, iss. 2, pp. 149-161.

5. Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A. Elastoprovodimost kreselnykh germanenovykh nanolent s donornymi defektami [Elastic Conductivity of Germanene “Arm-Chair” Nanoribbons with Donor Impurities]. *Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPbGPU. Fiziko-matematicheskie nauki*, 2019, vol. 12, no. 4, pp. 38-49. DOI: [10.18721/JPM.14101](https://doi.org/10.18721/JPM.14101)

6. Stepanov N.F. *Kvantovaya mekhanika i kvantovaya khimiya* [Quantum Mechanics and Quantum Chemistry]. Moscow, Mir Publ., Izd-vo Mosc. un-ta, 2001. 519 p.

7. Chernozatonskiy L.A., Sorokin P.B., Artyukh A.A. Novye nanostrukturny na osnove grafena: fiziko-khimicheskie svoystva i prilozheniya [Novel Graphene-Based Nanostructures: Physicochemical Properties and Applications]. *Uspekhi khimii* [Russian Chemical Reviews], 2014, vol. 83, no. 3, pp. 251-279. DOI: <https://doi.org/10.1070/RC2014v083n03ABEH004367>

8. Aoki H., Dresselhaus M.S. *Physics of Graphene*. Cham, Springer, 2014. 350 p. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-02633-6>

9. Lebedeva O.S., Lebedev N.G., Lyapkosova I.A. The Effect of Isomorphic Impurities on the Elastic Conductivity of Dirac Structures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2020, vol. 32, no. 14, article ID: 145301. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab5f45>

**ELASTOCONDUCTIVITY OF GERMANENE NANORIBBONS
WITH ISOMORPHIC SUBSTITUTIONAL DEFECTS****Anton S. Chibrikov**

Postgraduate Student, Department of Theoretical Physics and Wave Processes,
Volgograd State University
tf@volsu.ru, a.chibrikov@volsu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-3451-6262>
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Olga S. Lebedeva

Candidate of Sciences (Physics and Mathematics), Senior Lecturer,
Department of Theoretical Physics and Wave Processes,
Volgograd State University
tf@volsu.ru, lebedeva_os@volsu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-3502-9570>
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Nikolay G. Lebedev

Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor,
Department of Theoretical Physics and Wave Processes,
Volgograd State University
tf@volsu.ru, nikolay.lebedev@volsu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-4400-8982>
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Abstract. The results of the theoretical study of the impurity germanium nanoribbons piezoresistance are demonstrated in this article. The nanomaterial contains point isomorphic substitution defects of different concentrations of two types of isomorphic atoms of group IV: silicon (Si) and tin (Sn). The functions of the dependence of the longitudinal component of the elastic conductivity tensor on the magnitude of the strain of tension (compression), types and concentrations of defects are presented to study the characteristics of the piezoresistance effect. The results of the calculations show a qualitative agreement of the behavior of the piezoresistance constant of germanene nanoribbons for two types of isomorphic defects and with the literature data. Quantitative analysis allows us to conclude that the longitudinal component is higher in modulus in nanofilms with tin impurities, which indicates a more pronounced piezoresistance of the material. Conclusions are showed, that the impurity germanene with the tin atoms manifested more pronounced piezoresistance properties. It was explained by high the electron mobility of the valence shell of this element compared to the germanium atom. This shell of the atom turns out to be more sensitive to deformations of the structure. Such material can be more effectively integrated as a basic element of semiconductor electronics devices due to the high susceptibility of its properties to the effects of deformations and the concentration of structural defects in accordance with this factor.

Key words: piezoresistance, elastoconductivity tensor, tight coupling approximation, isomorphic defects, tensile and compressive deformation.