

ВОЗДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ИОН ЛИТИЯ В КАНАЛЕ ЛЕГИРОВАННОЙ СИЛИЦЕН-ГРАФИТОВОЙ СИСТЕМЫ

© 2020 г. А. Е. Галашев^{1,2*}, О. Р. Рахманова^{1,2}, К. П. Катин^{3,4}, М. М. Маслов^{3,4}, Ю. П. Зайков^{1,2}

¹Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения
Российской академии наук, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

³Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, Россия

⁴Научно-исследовательский институт

Проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи, Москва, Россия

*E-mail: alexander-galashev@yandex.ru

Поступила в редакцию 11.12.2019;

после доработки 11.12.2019;

принята в печать 20.01.2020

Методом молекулярной динамики исследовано поведение иона лития под действием постоянного электрического поля в канале, образованном листами силицена, легированного фосфором. Показано, что одиночный ион лития может беспрепятственно входить в канал, находящийся на графитовой подложке, слою которой допированы азотом, и продвигаться по нему, если величина межлистового пространства в допированном силицене составляет 0.6 нм. Установлено, что легирующий элемент фосфор оказывает упрочняющий эффект на силицен: двумерные кремниевые структуры мало деформируются, не разрушаются и остаются устойчивыми в течение всего времени расчета (100 пс). Показано, что шероховатость листов силицена и объем межлистового пространства в канале не увеличиваются в результате прохождения иона лития; кристаллическая структура силицена сохраняется.

Ключевые слова: графит, легирование, молекулярная динамика, силицен, фосфор, функция радиального распределения, шероховатость, энергия системы.

DOI: 10.31857/S0207401X20110047

ВВЕДЕНИЕ

Фосфор служит пятивалентной легирующей примесью для кремния. Четыре из пяти внешних электронов создают связи с атомами кремния, а пятый электрон оказывается “свободным” и служит носителем заряда. Для перехода из валентной зоны в зону проводимости “свободный” электрон затрачивает гораздо меньше энергии чем электроны, которые вызывают собственную проводимость кремния. В данном случае фосфор выступает донором электронов. Легирование многих полупроводниковых наноматериалов затруднено из-за большой энергии образования примесей как *n*-, так и *p*-типа [1]. На эффект, производимый фосфором в кремниевых наноматериалах, сильное влияние оказывает химическая среда [2–4]. До сих пор нет однозначного ответа на вопрос: какие места должны занимать атомы Р, замещающие атомы Si, в наночастице или двумерном кремнии [2, 3]? Очевидно, что допирование фосфором наноразмерных материалов кремния будет приводить к изменению в поведении электронного транспорта [5, 6]. Легирование фосфором

вызывает сильное увеличение проводимости из-за вкладов Р-доноров и оборванных Si-связей. Обнаружено, что после проведения отжига атомы Р пассивируют поверхностные состояния, создаваемые оборванными связями в Si-нанокристаллах [7]. Фосфорсодержащие включения в многослойной кремниевой кристаллической пленке могут индуцировать фотолюминесценцию [7]. При этом длина волны излучаемого света соответствует требованиям оптической связи.

Экспериментальное изучение роли фосфора, как допанта кремния, может давать неоднозначные результаты. Например, согласно данным работы [8], допирование кристалла кремния фосфором на уровне концентрации 10^{18} – 10^{19} см⁻³ не выявляет значительного влияния фосфора на разрывную прочность кремния. В работе [9] показано, что имплантированный ион Р увеличивает значения модулей Юнга кристалла кремния. В то же время сообщается [10], что при концентрации фосфора в кремнии порядка $5 \cdot 10^{19}$ см⁻³ разрывная прочность кристалла увеличивается, а значения модулей Юнга уменьшаются. Чтобы прояснить механизм воздей-

ствия допирующего фосфора на кремний, метод молекулярной динамики (МД) может стать удобным инструментом. В работе [11] при расчете этим методом (с использованием модифицированного потенциала погруженного атома МЕАМ) показано, что в пленке α -кремния по мере увеличения концентрации допирующего фосфора наблюдается возрастание устойчивости к напряжению растяжения, т.е. происходит переход от хрупкой чистой кремниевой пленки к пластичной, допированной фосфором структуре. Экспериментально определяемое значение энергии связи Si–P составляет 363.6 кДж/моль, а связи P–P – 325 кДж/моль.

Нейтронное трансмутационное легирование полупроводниковых материалов – это удобный метод точного контроля количества допанта и его однородного распределения по материалу. Метод основан на ядерных реакциях, в которых изотоп полупроводникового материала захватывает медленные (тепловые) нейтроны и формирует нестабильное радиоактивное ядро, которое в результате бета-распада переходит в ядро нового элемента. Например, в результате облучения кремния в нем появляется донорная примесь фосфора, а при облучении углерода – азота.

Цель настоящей работы – молекулярно-динамическое исследование поведения иона лития и его окружения под действием электрического поля в системе “силициновый канал на графитовой подложке”, подвергнутой нейтронному трансмутационному легированию. Такой компьютерный эксперимент важен для оценки перспектив использования нового двумерного материала, модифицированного нейтронным облучением, в качестве анодов литий-ионных батарей (ЛИБ) нового поколения.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Потенциальную энергию между атомами в силицине, а также в графеновых листах, сложенных параллельно, чтобы сформировать графитовую подложку, записывали с помощью многочастичного потенциала Терсоффа [12]:

$$V_{ij} = f_c(r_{ij}) [A \exp(-\lambda^{(1)} r_{ij}) - B b_{ij} \exp(-\lambda^{(2)} r_{ij})], \quad (1)$$

где f_c – функция обрезания потенциала имеет вид

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R^{(1)}, \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\pi (r_{ij} - R^{(1)}) / (R^{(2)} - R^{(1)}) \right], & R^{(1)} < r_{ij} < R^{(2)}, \\ 0 & r_{ij} > R^{(2)}. \end{cases}$$

Потенциальная энергия является функцией положения атомов i, j, k и определяется параметрами

$$b_{ij} = (1 + \beta^{\xi_{ij}})^{-1/(2n)}, \quad \xi_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ij}) g(\theta_{ijk}), \quad (2)$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{[d^2 + (h - \cos \theta_{ijk})^2]}.$$

Здесь: b_{ij} – многочастичный параметр порядка связи, описывающий как создается энергия образования связи (притягательная часть потенциала V_{ij}) при локальном атомном размещении благодаря присутствию других соседствующих атомов; ξ – эффективное координационное число; с помощью индексов i, j, k обозначены атомы Si (или C); r_{ij} – межатомное расстояние; θ_{ijk} – угол между связями $i-j$ и $j-k$; $g(\theta_{ijk})$ – функция этого угла, стабилизирующая структуру с ковалентными связями. Параметры потенциала Терсоффа для внутрилистовых взаимодействий C–C и Si–Si взяты из работы [13] и для моделирования плоских Si–C систем с успехом использованы в работе [14].

Для описания взаимодействий между ионом лития и атомами, принадлежащими разным листам силицинового канала и графитовой подложки, выбран потенциал Морзе [15]:

$$\Phi(r) = D_e [\exp\{-2\alpha(r - r_e)\} - 2 \exp\{-\alpha(r - r_e)\}], \quad (3)$$

где D_e – глубина потенциальной ямы, α – параметр жесткости, r_e – равновесная длина связи. Параметры потенциала взяты из работ [16, 17], недостающие данные получены с использованием простых интерполяционных соотношений [18].

Для учета взаимодействий внутри легированных листов силицена и графита (P–P, N–N, Si–P, C–N) параметры потенциала Морзе получены нами в отдельных квантовомеханических расчетах по методике, предложенной в работе [19]. Были рассмотрены модельные бесконечные двумерные системы с элементарными ячейками для графена, допированного азотом: $C_{23}N$ (одиночный примесный атом), $C_{22}N_2$ (димер из атомов примеси), $C_{18}N_6$ (шестишвенное кольцо, состоящее из легирующих атомов), и аналогично – для силицена, допированного фосфором: $Si_{23}P$, $Si_{22}P_2$, $Si_{18}P_6$. Эти системы были рассчитаны как квантовомеханическими методами, так и с применением комбинированного потенциала Терсоффа + Морзе в молекулярно-динамической модели. Сравнив энергии атомизации, длины связей и модули Юнга при растяжении вдоль осей x и y , мы подобрали параметры потенциала Морзе таким образом, чтобы хорошо воспроизводились данные *ab initio* расчетов. Для определения параметров перекрестных взаимодействий использовали интерполяционные соотношения

ношения [18]. Полученные параметры представлены в табл. 1.

Взаимодействия между атомами углерода (C–C), принадлежащими разным листам графита, вводятся потенциалом Леннард-Джонса. Этим же потенциалом описаны силы, действующие между двухслойным силицином и графитовой подложкой (Si–C). Введение более мягкого леннард-джонсовского притяжения позволило избежать сильных межлистовых взаимодействий и сохранить значения расстояний r_{C-C} и r_{Si-C} , соответствующих их расчетным и экспериментальным значениям [20, 21]. Используемые параметры приведены в табл. 2 [22].

Для моделирования силицевого листа рассматривается случай реконструкции поверхности 4×4 . Единица ячейка такой структуры силицена содержит 18 атомов кремния. Для реализации изогнутой силицевой структуры шесть атомов Si единичной ячейки смещены на расстояние 0.074 нм перпендикулярно поверхности, а остальные атомы Si находятся на одной и той же (исходной) плоскости. В случае верхнего листа двухслойного силицена выступающие атомы Si смещены вверх, а в случае нижнего – вниз. Такая структура силицена наблюдалась в эксперименте на подложке Ag(111) [23]. Лист силицена содержал 300 атомов и имел размер 5.4×4.3 нм. Из этих листов был сформирован плоский канал с различными значениями величины зазора h_g (расстояние между листами силицена): 0.6, 0.7, 0.75 и 0.8 нм. Для исследования прохождения канала, имеющего определенный зазор, ион Li^+ размещался посередине зазора, слегка вдвинутый в канал на стороне, где атомы образуют краевую структуру “кресло”. В начальный момент времени ион имел горизонтальные координаты: $x = 0.71$ нм, $y = 2.4$ нм. Края силицевых листов были фиксированы, что отражало закрепление образца на рамке в физическом эксперименте. В начале каждого расчета проводилась геометрическая оптимизация системы в течение 10 000 временных шагов. Ион двигался под действием постоянного внешнего электрического поля напряженностью 10^5 В/м, вектор которого ориентирован вдоль оси x . Это значение было подобрано нами в ранее проведенных расчетах, при условии, что ион лития мог успешно продвигаться по всей длине дефектного (нелегированного) силицевого канала, расположенного на металлических и неметаллических подложках [24, 25]. Длительность расчета с временным шагом $\Delta t = 1 \cdot 10^{-16}$ с для каждой системы составляла 10^6 временных шагов или 100 пс.

Для моделирования легированной силицевой структуры в каждом из листов создавалось по девять моновакансионных дефектов, которые затем заполнялись атомами фосфора, т.е. лист силицена содержал 3% легирующего элемента. Сили-

Таблица 1. Параметры потенциала Морзе

Тип взаимодействия	Параметры потенциала Морзе		
	D_e , эВ	α , Å ⁻¹	r_e , Å
P–P	1.001	2.322	2.263
Si–P	4.479	2.301	1.3
N–N	2.775	2.233	1.342
C–N	4.44	2.096	1.350
Si–N	0.21326	3.813	2.4572
C–P	1.55737	2.4385	2.38899
Li–P	0.64898	1.55595	2.60557
Li–N	1.08055	1.51145	2.00648
N–P	1.66665	2.2775	2.03591

Таблица 2. Параметры потенциала Леннарда-Джонса

Тип взаимодействия	Параметры потенциала Леннарда-Джонса [22]	
	ϵ , эВ	σ , Å
Si–C	0.01997	2.6006
C–C	0.00284	3.2786

Примечание: ϵ – глубина потенциальной ямы, σ – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю.

цевой канал размещался на графитовой подложке, представляющей собой три графеновых плоскости, сложенных в соответствии с укладкой Бернала (ABAB), типичной для кристаллического графита. Вдоль оси x слои были смещены друг относительно друга на 0.1418 нм. Расстояние между слоями составило $r_{C-C} = 0.335$ нм, что точно соответствовало экспериментально определенной величине [20]. Дистанция между каналом и подложкой $r_{Si-C} = 0.286$ нм получена из *ab initio* расчетов [21]. Все три слоя подложки, в свою очередь, были легированы атомами азота. Степень легирования составила 5%. Листы графена не были закреплены и были связаны с силицином с помощью леннард-джонсовского взаимодействия. Выбор графитовой подложки для канала из легированного силицена обусловлен успешными экспериментами по получению сверхтонких пленок кремния на стеклоуглеродной подложке методом электрохимического осаждения из расплавов солей [26, 27]. Кроме того, проведенные нами ранее молекулярно-динамические расчеты дефектного силицена на графитовой подложке и с графеновой поддержкой показали, что такие системы оказываются стабильными во времени и устойчивыми к циклам литирования [28, 29].

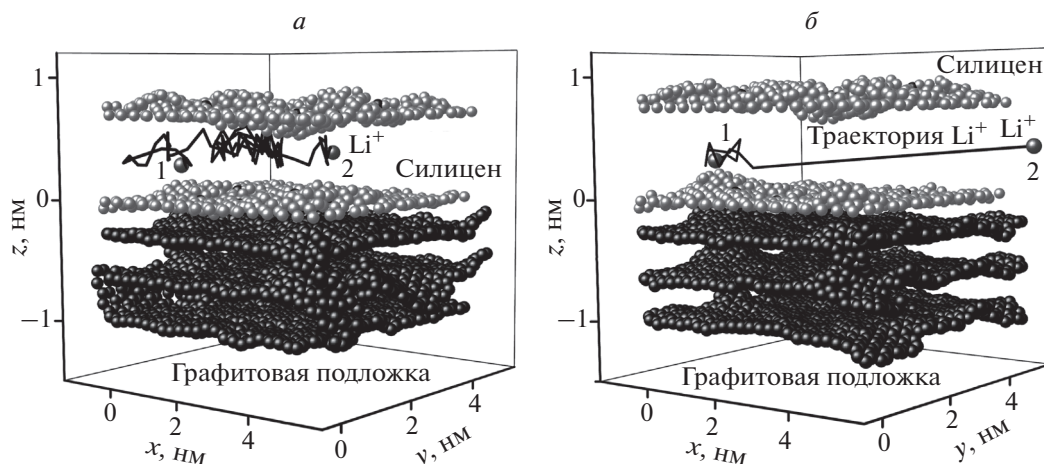


Рис. 1. Конфигурации плоского канала исследуемых систем “силицен/графит – ион Li^+ ”, отнесенные к моменту времени 100 пс; величина зазора h_g между листами силицена составляет: 0.7 нм (а) и 0.8 нм (б); 1 и 2 – начальная и конечная точки траектории иона Li .

Шероховатость поверхности силиценовых листов (или среднее арифметическое отклонение профиля) вычисляли как

$$R_a = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |z_i - \bar{z}|, \quad (4)$$

где N – число узлов (атомов) на поверхности листа силицена, z_i – смещение атома i в направлении оси z , $\bar{z}$ – среднее значение координаты z для силиценовой структуры, величины z_i и $\bar{z}$ определяются в один и тот же момент времени.

Численное решение уравнений движения выполняли методом Рунге–Кутты (Runge–Kutta) четвертого порядка. В расчетах использовался модифицированный нами программный код LAMMPS для параллельных вычислений методом МД [30]. Расчеты выполнены на гибридном вычислителе кластерного типа “Уран” с пиковой производительностью 216 Терафлопс/с и 1864 CPU.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 приведены трехмерные конфигурации исследуемой системы при значениях величины межлистового зазора, h_g , равных: 0.7 нм (рис. 1а) и 0.8 нм (рис. 1б), которые соответствуют моменту окончания времени расчета – 100 пс. Видно, что изгиб нижнего листа силицена практически сглаживается, по форме он становится близок к графитовой подложке, верхний же лист при этом демонстрирует ярко выраженную рифленость поверхности. Приведенные траектории иона лития показывают, что зазор $h_g = 0.7$ нм оказывается непроходимым для иона, т.е. ион Li^+ “застревает” в канале. Однако при величине зазора межсилице-

нового пространства, h_g , равной 0.8 нм, ион Li^+ преодолевает канал без каких-либо препятствий.

Незакрепленные легированные листы графитовой подложки оказываются ощутимо деформированными в z -направлении, но не разрушаются и не теряют своей целостности. Заметим, что исследованные нами ранее модифицированные моновакансиями листы силицена на подложке Ag(111) [31–33], подвергались значительному изгибу и даже частично разрушались, однако при этом вакансионные дефекты сохраняли свою форму. Таким образом, легирование рассматриваемых двумерных материалов упрочняет систему, делая ее стабильной и гибкой, а также более устойчивой к циклу литирования/делитирования. Все это способствует прохождению иона Li^+ по каналу. Очевидно, что результатом дальнейшего увеличения зазора h_g станет более короткий цикл литирования силиценового канала на графитовой подложке. Однако при этом ослабляется сцепление между листами силицена.

Времена выхода иона лития из силиценового канала приведены в табл. 3. Увеличение времени расчета для системы с $h_g = 0.75$ нм еще на 100 пс позволило наблюдать выход иона из канала на 106-й пс.

Из рис. 2а и 2б видно, что к концу расчета, т.е. к моменту времени $t = 100$ пс, как в верхнем, так и в нижнем листах легирующие атомы фосфора оказываются вытесненными из шестизвенных кремниевых колец, где они первоначально занимали вакантные места. В результате наблюдения за динамикой выхода атомов фосфора из вакансий силиценовых листов в течение времени расчета обнаружено, что допирующие атомы фосфора оказываются вытолкнутыми из вакансий уже в самом начале расчета, т.е. через 20 пс. В окрест-

ности каждой вакансии к концу расчета оказывается по три пятизвенных кремниевых кольца. При этом атомы поднимаются или опускаются относительно основной плоскости (т.е. находятся между двумя подрешетками силицена) и связываются с тройками атомов Si. Кроме образования пятизвенных колец, в листе не наблюдается каких-либо значительных структурных перестроек. После выхода из шестизвенных колец легирующие атомы фосфора стабилизируют структуру силицена. Аналогичный эффект показали квантовомеханические расчеты: ближайшие атомы фосфора препятствуют зарождению и распространению дефектов в допированном кремнии [11]. Это связано с тем, что в более плотно упакованных легированных пленках (по сравнению с чистым силиценом) генерирование локальных дефектов тормозится недостатком энергии. Движение иона лития в дефектных силиценовых каналах на различных подложках (когда вакансии не заполнены допирующими элементами), было сопряжено со значительными искажениями, наблюдаемыми в xy -проекциях листов силицена [34, 35]. Взаимодействие с некоторыми металлическими подложками (например, Cu) приводило к разрушению вакансий.

Проекция xy верхнего листа графита (рис. 2а), легированного азотом, демонстрирует практиче-

Таблица 3. Время выхода иона лития из силицевого канала на графитовой подложке при различной величине зазора h_g между легированными листами силицена

h_g , нм	t , пс
0.6	52
0.7	не выходит из канала
0.75	106
0.8	24

ски полное отсутствие искажений и сохранение сотовой структуры графитового листа. Легирующие атомы N удерживаются в плоскости листа, не разрушая его целостность и не вызывая потери устойчивости системы. Таким образом, легирование графитовой подложки в объеме до 5% оказывается вполне допустимым для такой системы.

Средние вертикальные отклонения Δz (нм) положений допирующих атомов фосфора относительно атомов кремния в листах силицена приведены в табл. 4. Величина Δz рассчитана как разность средних координат атомов фосфора и кремния, принадлежащих одному из листов силицена ($\Delta z = z(P) - z(Si)$). Отрицательный знак значения Δz для обоих листов силицена говорит о преиму-

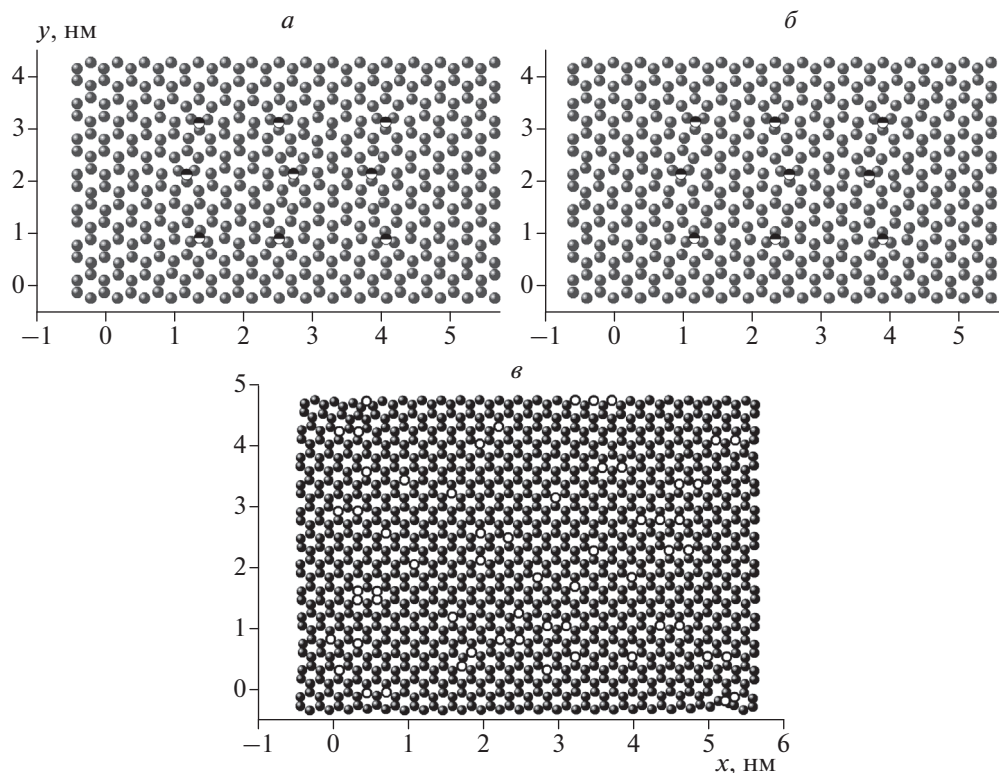


Рис. 2. Горизонтальные xy -проекции верхнего (а) и нижнего (б) листов силицена, а также верхнего слоя графитовой подложки (в), соответствующие моменту времени 100 пс; заполненные кружки — атомы Si и C, полукруглые и открытые кружки — атомы допирующих элементов P и N соответственно.

Таблица 4. Среднее вертикальное отклонение Δz (нм) положения допирующих атомов фосфора относительно атомов кремния в листах силицена, соответствующее моменту времени 100 пс

Зазор h_g , нм	Среднее вертикальное отклонение Δz , нм	
	нижний лист	верхний лист
0.6	0.00621	−0.00572
0.7	−0.0024	−0.00856
0.75	0.00469	0.00425
0.8	0.00152	0.10483

ществленном смещении атомов Р в сторону подложки. Смещение атомов фосфора верхнего листа силицена вглубь канала на значительную величину (например, при величине зазора $h_g = 0.7$ нм), очевидно, может быть причиной непрохождения канала ионом лития. Таким образом, легирующий элемент (фосфор) может оказывать “тормозящее” действие на Li^+ .

Все представленные значения Δz , за исключением верхнего листа канала с зазором 0.8 нм, свидетельствуют о том, что в среднем, вертикальный уровень нахождения атомов Р лежит между уровнями подрешеток атомов Si в одном и том же листе силицена. В настоящей модели точность расчетов для подложки может быть выше, чем для силицена. Действительно, используемый потенциал Терсоффа был апробирован для такого двумерного кристалла, как графен [28, 29, 31]. Одна-

ко в случае силицена этот потенциал может не поддерживать изначально шероховатую поверхность данной двумерной структуры [23].

Функции изменения полной энергии E_{tot} исследуемых систем (величина зазора равна 0.6 и 0.8 нм) в зависимости от времени и от размера межлистового пространства в силицене (на вставке) приведены на рис. 3. С увеличением величины зазора h_g , как правило, наблюдается уменьшение полной энергии исследуемой системы. В течение первых 20 (величина зазора 0.6 нм) и 52 пс (величина зазора 0.8 нм) система релаксирует, пытаясь найти наиболее выгодное энергетическое состояние. В дальнейшем $E_{tot}(t)$ флуктуирует около равновесного значения. При прохождении по каналу иона лития листы допированного силицена и подложки не испытывают возмущений, выводящих систему из стабильного состояния.

Функции радиального распределения (ФРР) Si–Si и C–C, дающие представление о структуре листов силицена и слоев графита, представлены на рис. 4. Силиценовая структура имеет выраженный кристаллический порядок, определяемый тремя пиками, локализованными при 0.2275, 0.3925 и 0.4529 нм соответственно. Изгиб силицена при дрейфе иона Li^+ меняется непропорционально величине канального зазора. Интенсивность пиков функции $g(r)$ (отражающей присутствие соседей) также не находится в прямой зависимости от величины зазора. ФРР C–C отчетливо свидетельствует о кристаллической структуре графеновых листов, формирующих графитовую подложку. Самый интенсивный первый пик ФРР для графита приходится на $r = 0.1475$ нм. На вставках к рисунку приведены zx -проекции силиценовых листов на графитовую подложку при различных зазорах межлистового пространства: 0.6 нм (а) и 0.75 нм (б). Края графитовых листов сильно деформированы вследствие наличия нескомпенсированных C–C связей. Расстояние между нижним листом силицена и верхним листом подложки в течение времени расчета не меняется, при этом рифленость нижнего легированного листа силицена сглаживается и имитирует форму верхнего графитового листа. Аналогичный эффект обнаружен нами при моделировании двухслойного силицена между обкладками графена, когда формы двумерных кристаллов кремния и углерода почти полностью повторяли друг друга [28].

Шероховатость верхнего (ломаная 1) и нижнего (ломаная 2) листов силицена при различных канальных зазорах приведена на рис. 5. Во всех случаях верхний лист силицена имеет несколько большую шероховатость, чем нижний. Некоторое сглаживание нижнего листа происходит под влиянием графитовой подложки. В случаях, когда силиценовый канал находился на металлических подложках (Ag, Cu, Al, Ni) обнаружено значи-

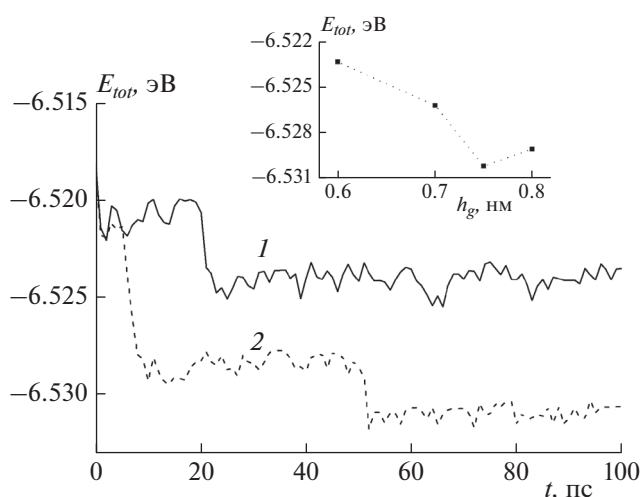


Рис. 3. Зависимость полной (E_{tot}) энергии системы “силицен/графит — ион Li^+ ” от времени действия электрического поля для величин зазора 0.6 нм (1) и 0.8 нм (2); на вставке — зависимость полной энергии исследуемой системы от величины межлистового зазора h_g в силиценовом канале.

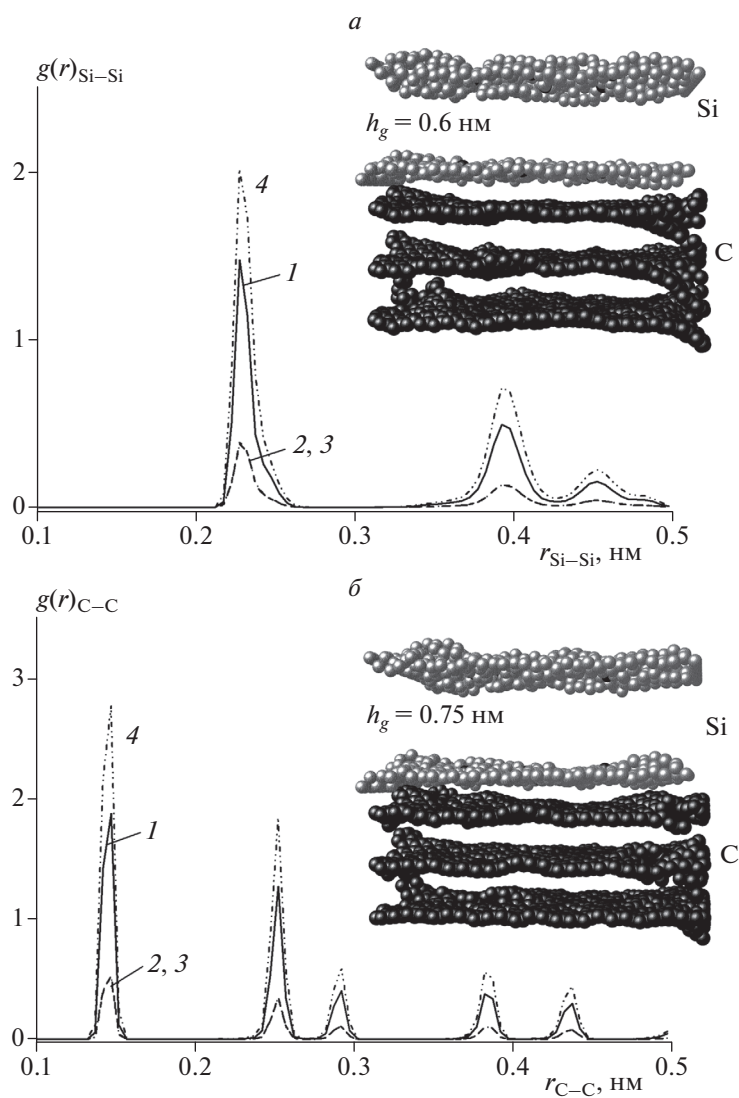


Рис. 4. Функции радиального распределения: Si–Si (а) и C–C (б) для систем “силицен/графит – ион Li^+ ” при различной величине зазора канала h_g : 1 – 0.6 нм, 2 – 0.7 нм, 3 – 0.75 нм, 4 – 0.8 нм; на вставках приведены zx -проекции систем с величиной зазора 0.6 нм (а) и 0.75 нм (б).

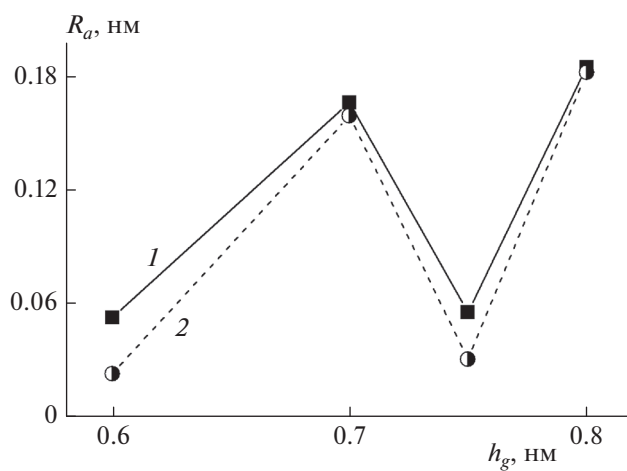


Рис. 5. Рассчитанная функция шероховатости верхнего (1) и нижнего (2) листов силицена в зависимости от величины зазора силицевого канала.

тельное влияние подложки на шероховатость силициновых структур, которая превышала данные настоящих расчетов на 15–20% [28, 35].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью молекулярно-динамических расчетов исследовано поведение иона лития в канале, образованном силициновыми листами, легированными фосфором. Канал располагался на графитовой подложке, допированной азотом. Допирование двумерных кремниевых структур создало возможность иону лития проходить канал даже при небольшой зазоре (0.6 нм). Увеличение размера зазора позволило иону Li^+ практически беспрепятственно входить в канал и преодолевать его. Допированная двумерная система в целом оказывается более приспособлена к прохождению силицинового канала ионом Li^+ . Листы силицена, подвергнутого нейтронной трансмутации, не претерпевают значительной деформации, не разрушаются при движении иона лития по каналу. Однако в некоторых случаях, например, при зазоре канала 0.75 нм, легирующий элемент (фосфор) может оказывать “тормозящее” действие на прохождение иона Li^+ . ФРП показывают, что в легированных графеновых листах лучше сохраняется кристаллическая структура, чем в листах силицена. В течение времени расчета листы силицена не увеличивают свою шероховатость, а нижний лист оказывается всегда менее шероховатым, чем верхний.

Таким образом, легированный фосфором двухслойный (многослойный) силицен является перспективным материалом для анодов ЛИБ. Он может увеличить устойчивость анода при циклировании и улучшить ионную и электронную проводимость, что приведет к увеличению скорости зарядки батареи.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российским научным фондом, проект № 16-13-00061.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dalpian G.M., Chelikowsky J.R. // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. № 22. P. 226802; <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.226802>
2. Xu Q., Luo J.-W., Li Sh.-Sh., Xia J.-B. et al. // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. № 23. P. 235304; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.235304>
3. Pi X.D., Gresback R., Liptak R.W., Campbell S.A. et al. // Appl. Phys. Lett. 2008. V. 92. № 12. P. 123102; <https://doi.org/10.1063/1.2897291>
4. Guerra R., Ossicini S. // J. Amer. Chem. Soc. 2014. V. 136. № 11. P. 4404; <https://doi.org/10.1021/ja5002357>
5. Stegner A.R., Pereira R.N., Klein K., Lechner R. et al. // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100. № 2. P. 026803; <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.026803>
6. Xu J., Xu J., Zhang P.Z., Li W. et al. // Nanoscale. 2013. V. 5. P. 9971; <https://doi.org/10.1039/C3NR03306F>
7. Lu P., Mu W., Xu J., Zhang X. et al. // Sci. Rep. 2016. V. 6. P. 22888; <https://doi.org/10.1038/srep33767>
8. Cook R.F. // J. Mater. Sci. 2006. V. 41. № 3. P. 841; <https://doi.org/10.1007/s10853-006-6567-y>
9. Nagy P.M., Aranyi D., Horvath P., Peto G. et al. // Surf. & Interface Analysis. 2008. V. 40. P. 875; <https://doi.org/10.1002/sia.2777>
10. Zeng Z.D., Ma X.Y., Chen J.H., Zeng Y.H. et al. // J. Appl. Phys. 2010. V. 107. № 12. P. 123503; <https://doi.org/10.1063/1.3436599>
11. Liu B., Li Y., Yue Y., Tao Y. et al. // 2018 3rd Asia-Pacific Electronics and Electrical Engineering Conf. (EEEC 2018). P. 254; ISBN: 978-1-60595-586-5
12. Tersoff J. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. № 14. P. 9902; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.9902>
13. Tersoff J. // Ibid. 1994. V. 49. № 23. P. 16349; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.16349>
14. Галашев А.Е., Иваничкина К.А. // ФТТ. 2019. Т. 61. № 2. С. 365; doi: 10.21883/FTT.2019.02.47139.146
15. Yu R., Zhai P., Li G., Liu L. // J. Electron. Mater. 2012. V. 41. № 6. P. 1465; <https://doi.org/10.1007/s11664-012-1916-x>
16. Das S.K., Roy D., Sengupta S. // J. Phys. F Met. Phys. 1977. V. 7. № 1. P. 5; <https://doi.org/10.1088/0305-4608/7/1/011>
17. Fang T.-E., Wu J.-H. // Comput. Mater. Sci. 2008. V. 43. № 4. P. 785; <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.01.066>
18. Галашев А.Е., Зайков Ю.П., Владыкин П.Г. // Электроника. 2016. Т. 52. № 10. С. 1085; <https://doi.org/10.7868/S0424857016100042>
19. Galashev A.Y., Katin K.P., Maslov M.M. // Phys. Lett. A. 2019. V. 383. P. 252; <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2018.10.025>
20. Pop E., Varshney V., Roy A.K. // MRS Bull. 2012. V. 37. № 12. P. 1273; <https://doi.org/10.1557/mrs.2012.203>
21. Yu E.K., Stewart D.A., Tiwari S. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. № 19. P. 195406; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.195406>
22. Song M.K., Hong S.D., Kyoung T.N. // J. Electrochem. Soc. 2001. V. 148. № 10. P. A1159; <https://doi.org/10.1149/1.1402118>
23. Kawahara K., Shirasawa T., Arafune R., Lin C.-L. et al. // Surf. Sci. 2014. V. 623. P. 25; <https://doi.org/10.1016/j.susc.2013.12.013>
24. Galashev A.Y., Ivanichkina K.A. // J. Electrochem. Soc. 2018. V. 165. P. 1788; <https://doi.org/10.1149/2.0751809jes>
25. Галашев А.Е., Иваничкина К.А. // ЖФХ. 2017. Т. 91. № 12. С. 2126; doi: 10.7868/S004445371712007X

26. *Isaev V.A., Grishenkova O.V., Laptev M.V., Isakov A.V., Zaikov Yu.P.* // *Rus. Metall (Metally)*. 2018. V. 2018. № 4. P. 428;
<https://doi.org/10.1134/S0036029518080086>
27. *Zhuk S.I., Isakov A.V., Apisarov A.P., Grishenkova O.V. et al.* // *J. Electrochem. Soc.* 2017. V. 164. № 8. P. H5135;
<https://doi.org/10.1149/2.0171708jes>
28. *Галашев А.Е., Рахманова О.Р., Зайков Ю.П.* // *ФТТ*. 2016. Т. 58. № 9. С. 1786;
<http://journals.ioffe.ru/articles/43495>
29. *Галашев А.Е., Рахманова О.Р., Иваничкина К.А.* // *ЖСХ*. 2018. Т. 59. № 4. С. 914;
doi: 10.26902/JSC20180418
30. *Plimpton S.* // *J. Comput. Phys.* 1995. V. 117. № 1. P. 1;
doi: 10.26902/JSC20180418
31. *Рахманова О.Р., Галашев А.Е.* // *ЖФХ*. 2017. Т. 91. № 5. С. 887;
doi: 10.7868/S0044453717050211
32. *Галашев А.Е., Иваничкина К.А., Воробьев А.С., Рахманова О.Р.* // *ФТТ*. 2017. Т. 59. № 6. С. 1218;
doi: 10.21883/FTT.2017.06.44496.300
33. *Galashev A.Y., Ivanichkina K.A.* // *Phys. Lett. A*. 2017. V. 381. P. 3079;
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2017.07.040>
34. *Galashev A.Y., Ivanichkina K.A.* // *ChemElectroChem*. 2019. V. 6. № 5. P. 1525;
<https://doi.org/10.1002/celec.201900119>
35. *Galashev A.Y., Zaikov Yu.P.* // *J. Appl. Electrochem.* 2019. V. 49. № 10. P. 1027;
<https://doi.org/10.1007/s10800-019-01344-9>