

Spiridonov Oleg Borisovich

E-mail: o.spiridonoff@gmail.com.

Phone: +78634312018.

The Department of Security in Data Processing Technologies; Associate Professor.

Linets Lyudmila Gennad'evna

E-mail: linetslg@gmail.com.

Phone: +78634371611.

The Department of Micro- and Nanoelectronics; Postgraduate Student.

Kolomiytsev Alexey Sergeevich

E-mail: alexey.kolomiytsev@gmail.com.

Phone: +78634371611.

The Department of Micro- and Nanoelectronics; Postgraduate Student.

Smirnov Vladimir Alexandrovich

E-mail: sva@fep.tti.sfedu.ru.

Phone: +78634371611.

The Department of Micro- and Nanoelectronics; Associate Professor.

Volkov Evgeniy Yurievich

E-mail: eyvolkov@gmail.com.

Phone: +78634371611.

The Department of Micro- and Nanoelectronics; Postgraduate Student.

УДК 537.533.2

А.Н. Дмитриев, П.Г. Музыков, Тангали Сударшан, Д.И. Чередниченко

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА АВТОЭМИССИИ
ГРАФИТИЗИРОВАННЫХ СЛОЕВ НА ПОВЕРХНОСТИ КАРБИДА
КРЕМНИЯ**

Токи автоэлектронной эмиссии с графитизированной поверхности карбида кремния, полученной высокотемпературной диссоциацией материала в вакууме, на пять порядков превышают токи с поверхности металлов. Эффективность работы графитизированной поверхности карбид кремниевого автокатода исследована на основе триодной структуры электронного микростройства. Применение метода конформных преобразований позволило рассчитать распределение электрического поля и токи автоэмиссии без использования форм-фактора.

Карбид кремния; автоэмиссия; конформное отображение.

A.N. Dmitriev, P.G. Muzy'kov, Tangali Sudarshan, D.I. Cherednichenko

**FIELD EMISSION FROM THE GRAPHITIZED SURFACE OF SILICON
CARBIDE**

Field emission currents from the graphitized surface of silicon carbide obtained by dissociation of the material in high vacuum are five orders of magnitude higher than the currents from the surface of metals. The effectiveness of the graphitized surface of silicon carbide cathode has been investigated on the basis of an electronic micro device triode structure. Application of the conformal mapping method allowed calculating the density distribution of the field emission current without the use of the shape factor.

Silicon carbide; field emission; conformal mapping.

В последнее десятилетие, с появлением новых материалов и усовершенствованных технологических методов, открылись новые перспективы применения устройств на основе эффекта полевой эмиссии электронов. На сегодняшний день автокатоды с размерами порядка микрометра применяются в электронных и туннельных микроскопах, рентгеновских трубках, плоских дисплеях и других приборах вакуумной микроэлектроники [1]. Достоинствами автоэмиссионных источников электронов, по сравнению с другими, являются отсутствие нагрева, безынерционность, высокая плотность тока и радиационная стойкость. Основными критериями выбора материала для автокатада являются малое и стабильное значение работы выхода электронов, отсутствие сублимационного распыления в глубоком вакууме, механическая прочность, высокая электро- и теплопроводности.

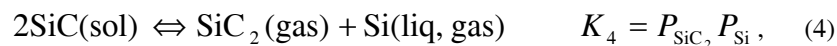
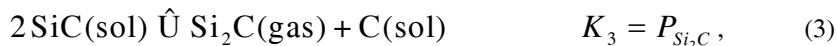
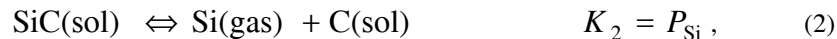
Традиционно в вакуумной электронике применялись тугоплавкие металлы, такие как вольфрам и молибден. В свою очередь, в вакуумной микроэлектронике применялись полупроводниковые материалы, например кремний [1]. Однако в настоящее время наметилась тенденция применения углеродных материалов: фуллеренов, углеродных нанотрубок, углеродных волокон и, в перспективе, графена. Углерод обладает большим числом аллотропических модификаций с широким спектром свойств, что позволяет для конкретного технологического применения подобрать углеродный материал с оптимальными автоэмиссионными характеристиками.

Целью данной работы является исследование автоэмиссионных свойств графитизированной поверхности карбида кремния, полученной диссоциативным испарением в вакууме, а также расчет автоэмиссионных характеристик и параметров микроструктуры с эмиттером на основе графитизированной поверхности SiC.

Формирование графитизированной поверхности SiC. Исследования, проведенные с помощью масс-спектрологии [2], показали, что при термической диссоциации карбида кремния основными компонентами пара являются SiC, Si, Si₂C и SiC₂. В результате детального термодинамического анализа также было установлено, что при давлении внешней среды большем, чем давление насыщенного пара кремния, все компоненты, участвующие в реакции диссоциации SiC, находятся в конденсированной фазе:



Только при температуре $T > 3150 \text{ K}$ реакция (1) сопровождается уменьшением свободной энергии Гиббса: $\Delta G_T^0 = \Delta H_T^0 - T \cdot \Delta S_T^0 < 0$ (где ΔH_T^0 и ΔS_T^0 – суммарное изменение энтальпии и энтропии реакции). Это свидетельствует о том, что при этой температуре SiC полностью разлагается и её можно считать предельной, лимитирующей существование карбида кремния. При более низких температурах процесс диссоциативного испарения карбида кремния представляется системой следующих реакций [3]:



Здесь K_i – константа равновесия; P_i – парциальное давление равновесного состояния i -го компонента ($i = 2, 3, 4, 5$). Константы равновесного состояния реакций (2)–(5) вычислялись из изотерм химических реакций $\Delta G_T^0 = -RT \ln K_i$ (где R – универсальная газовая постоянная).

При наличии вакуума или в нейтральных относительно SiC-средах (например, аргоне) по величине парциальных давлений Si, Si₂C, SiC₂ и SiC можно судить об особенностях процесса сублимации SiC в закрытых системах во всем диапазоне температуры (1500–3100 К).

Из уравнений химических реакций (2)–(5), описывающих процесс диссоциативного испарения SiC, видно, что в рассматриваемом диапазоне температуры все атомы кремния $N_{Si}(SiC) = (\rho N_A / 2M)$, образующие кремниевую подрешетку (Si-подрешетку) кристалла при сублимации, уходят в вакуум (где ρ – плотность кристалла SiC; M – молекулярный вес SiC; N_A – число Авогадро). Тогда, в соответствии с законом сохранения вещества, количество атомов кремния, сублимирующих с единицы поверхности подложки SiC, можно оценить по формуле [4]

$$N_{Si}^* = \frac{\rho}{2M} N_A S, \quad (6)$$

где S – толщина сублимированного слоя.

Соответствующее количество атомов углерода, которые уходят в вакуум в составе молекул с кремнием, определяется по формуле

$$N_C^* = N_{Si}^* / \eta. \quad (7)$$

Здесь коэффициент стехиометрии пара

$$\eta(T) = \frac{\sum_i n P_i(Si_h, C_k)}{\sum_i j P_i(Si_h, C_k)}, \quad (8)$$

где $n = 1, 2$, $j = 0, 1, 2$ и $h = 1, 2$, $k = 0, 1, 2$ детально определяют возможные комбинации четырех главных компонент сублимации SiC пара $i = 1, 2, 3, 4$.

При известной температуре сублимации коэффициент стехиометрии $\eta(T)$ определяется по парциальным давлениям компонент пара [3], а толщина сублимирующего слоя, исходя из закона сохранения вещества:

$$S = \Omega \cdot \int_0^\tau F \cdot dt, \quad (9)$$

где общий поток молекул в вакуум вычисляется по формуле Кнудсена [5]:

$$F = \sum_i \frac{P_i}{\sqrt{2\pi \cdot m_i \cdot kT}}. \quad (10)$$

Здесь Ω – объем молекулы SiC; m_i – масса молекулы (атома) i -го компонента; k – постоянная Больцмана. Итоговое количество атомов остаточного углерода на единицу площади поверхности можно найти как разницу:

$$N_R = (N_C^0 - N_C^*), \quad (11)$$

где $N_C^0 = \frac{\rho}{2M} \cdot N_A \cdot S$ – поверхностная плотность атомов углерода в C-подрешетке

SiC. На рис. 1 представлена микрофотография графитизированной поверхности SiC. Более подробно образование слоя остаточного углерода в процессе сублимации карбида кремния в вакууме рассмотрено в работе [4].

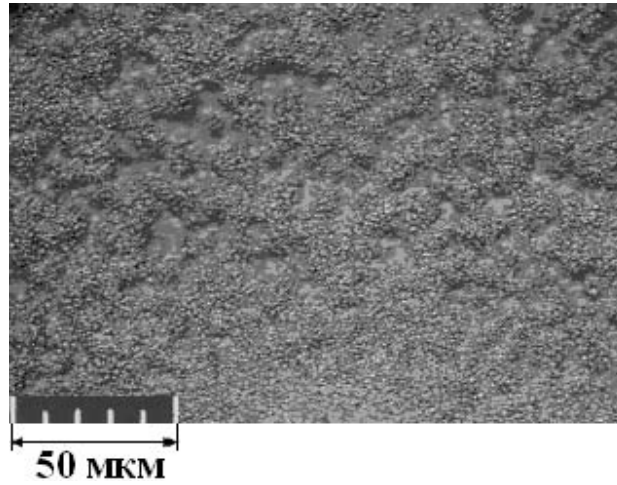


Рис. 1. Графитизированная поверхность SiC

Автоэлектронная эмиссия с графитизированной поверхностью SiC. Для изучения автоэлектронной эмиссии применялась вакуумная установка с высоковольтным источником постоянного напряжения Spellman SL300 с максимальным выходным напряжением 50 кВ и током 6.3 мА. Для измерения тока эмиссии использовался электрометр Keithley 6514. Измерения производились при комнатной температуре в вакууме $\sim 10^{-6}$ мм рт. ст. Нижний предел измерения тока соответствовал $\sim 10^{-14}$ А. Для защиты электрометра от возможного пробоя последовательно с электрометром включался резистор, ограничивающий ток пробоя, а также электрометр шунтировался встречно включенными диодами с малыми токами утечки. Контроль выходного напряжения и сбор измеряемых данных, включая эмиссионный ток, осуществлялись с помощью программы, написанной авторами на языке Labview. Анодное напряжение изменялось в пределах от 0 до 5.0 кВ. Расстояние катод-анод равнялось 100 мкм, что давало усредненную величину напряженности электрического поля в межэлектродном пространстве порядка $(2-5) \cdot 10^7$ В/м.

Для теоретического анализа экспериментальных вольт-амперных характеристик графитизированная область, имеющая шероховатую поверхность, представлялась ансамблем микровыступов различной амплитуды и ширины. Индивидуальный микровыступ как концентратор электрического поля обычно характеризуется фактором формы, величину которого можно аппроксимировать простым соотношением [6]:

$$\beta = \lambda^2 / [\ln(\lambda) - 0.3], \quad (12)$$

где $\lambda = (2 \cdot h)/b$ – удвоенное отношение высоты микровыступа к ширине основания. Функция распределения микровыступов по размерам форм-факторов в ансамбле может быть записана в виде [7]:

$$N(\beta) = \begin{cases} C \cdot \exp\left(-\left(1/\beta - 1/\beta_{\max}\right)^2 / 2 \cdot \sigma_1^2\right), & \beta \leq \beta_{\max} \\ C \cdot \exp\left(-\left(1/\beta - 1/\beta_{\max}\right)^2 / 2 \cdot \sigma_2^2\right), & \beta \geq \beta_{\max} \end{cases}, \quad (13)$$

где $N(\beta)$ – плотность микровыступов с форм-фактором β ; β_{\max} – величина форм-фактора, соответствующая $N(\beta)$ в точке максимального значения, $\sigma_2 > \sigma_1$ –

дисперсия нормального закона распределения, C – константа. Для расчетов непрерывную функцию распределения удобно заменить кусочно-непрерывным аналогом, если разделить весь интервал значений β на участки, в пределах которых форм-фактор и соответствующее ему значение $N(\beta)$ можно считать постоянным. Кусочно-непрерывная функция распределения может быть записана в форме

$$N(\beta) = \sum_i^m N_i, \quad (14)$$

где m – число однородных участков кусочно-непрерывной функции распределения и i – индекс участка.

Для оценок использовалась работа выхода графена 4.5 эВ [8] (для графита работа выхода 5.0 эВ) и кусочно-непрерывный аналог функции распределения составлялся из шести участков ($m = 6$). Количество микровыступов и “форм-фактор” для каждой группы подбирался эмпирически с учетом того, что суммарная площадь, занимаемая микровыступами, должна равняться площади графитизированной области SiC, имевшей диаметр 250 мкм. Высота микронеровности h принималась равной 1 мкм, для всех групп, а ширина основания b – подбиралась эмпирически, для каждой группы. Тогда, с помощью уравнения Фаулера-Нордгейма [9] можно оценить суммарный ток, эмитированный графитизированной поверхностью SiC:

$$I = \sum_i^m N(\beta_i) \cdot I(A_i, \beta_i), \quad (15)$$

где $I(A_i, \beta_i)$ – ток Фаулера-Нордгейма с индивидуального эмиттера в группе;

$A_i = (\pi \cdot b_i / 2) \cdot ((b_i / 2)^2 + h^2)^{1/2}$ – площадь поверхности эмиттера. Экспериментальная и аппроксимированная с помощью формулы Фаулера-Нордгейма вольтамперные характеристики тока автоэмиссии представлены на рис. 2.

Из рис. 2 видно, что графитизированная поверхность SiC при напряжении 4.5 кВ эмитирует ток порядка 10^{-5} А, в то время как металлическая поверхность испускает всего $4 \cdot 10^{-8}$ А при напряжении в 9 кВ [10]. Таким образом, ток автоэмиссии с графитизированной поверхности SiC достигает существенно больших значений, чем токи с поверхности металлов.

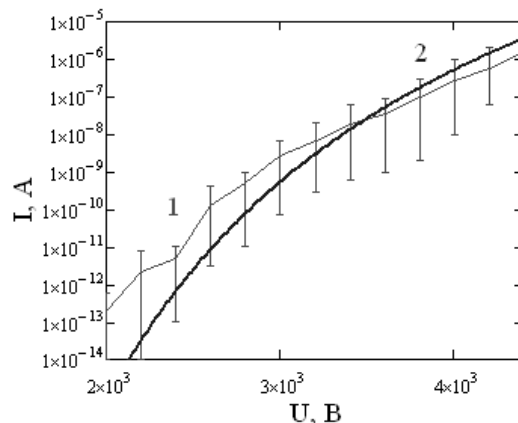


Рис. 2. Ток автоэмиссии с графитизированной поверхностью карбида кремния:
1 – экспериментальная кривая; 2 – расчетная кривая

Следует отметить, что расчетную вольт-амперную характеристику тока автоэмиссии из гладкого графитового слоя, хорошо совпадающую с экспериментальной, можно получить, полагая работу выхода электронов равной ~ 1.0 эВ. Поэтому, учитывая, что работа выхода из металлов имеет тот же порядок, что и работа выхода графита, остается не совсем ясным, является ли единственной причиной аномальной автоэмиссии фрактальность поверхности как концентратора электрического поля.

Автокатод на основе углерода в триодной структуре. В настоящее время интенсивно исследуются автоэлектродные структуры на основе углерода. Существует целый ряд приборов, в которых в качестве эффективных эмиттеров выступают углеродные материалы [7]. Предложены конструкции плоских дисплеев триодной конфигурации, рентгеновские трубки сверхвысокого разрешения с управляющим электродом, микроволновые усилители и генераторы терагерцового излучения [1].

Одной из главных проблем исследования условий работы и возможностей эмиттеров на основе углерода в триодных структурах является расчет распределения электрического поля в межэлектродном пространстве. Для линейной конфигурации катода ($l/b \geq 10$) расчет можно произвести методом конформных преобразований, используя интеграл Кристофера-Шварца [11]. Хотя наиболее часто используется осевая симметрия структуры, линейная конфигурация не является фундаментальным ограничением и, лишь несущественно ослабляя концентрацию поля на острие катода, дает возможность аналитически исследовать задачу.

Интеграл Кристофера-Шварца и комплексный электрический потенциал в случае триодной структуры с эмиттером треугольной формы могут быть записаны в виде

$$z(\chi) = C_z \cdot \int_0^\chi \frac{(t - g_3)}{(t - g_4)^{\frac{1}{2}} \cdot (t)^{1-\gamma} \cdot (t - g_1)^{\gamma + \frac{1}{2}}} dt, \quad (16)$$

$$\omega(\chi) = C_w \cdot \int_0^\chi \frac{(t - g_2)}{(t - g_4)^{\frac{1}{2}} \cdot (t)^1 \cdot (t - g_1)} dt, \quad (17)$$

где $\omega = F + iU$ – комплексный потенциал; $z = x + iy$ – обобщенная координата; $\gamma = (\pi - \gamma_1)$, $2\gamma_1$ – угол острия автокатода; χ – безразмерная переменная. Константы C_z , C_w , g_1 , g_2 , g_3 определяются конфигурацией, пространственным расположением и потенциалами на электродах. Параметр g_4 выбирается произвольно. Данные, используемые при расчете, занесены в табл. 1. Для упрощения вычислений, при конформном отображении триодной структуры, сделано допущение, что точка, где боковая поверхность катода переходит в подложку, удалена на бесконечность. Это приводит к тому, что у основания катода силовые и эквипотенциальные линии обрываются. Однако напряженность поля на этом участке мала и, как будет показано далее, на расчете плотности тока автоэмиссии это никак не скажется.

Таблица 1

Данные, используемые при расчете

Высота эмиттера h, мкм	Ширина основания эмиттера b, мкм	Отверстие в управляющем электроде (УЭ) Δ, мкм	Дистанция катод-УЭ da, мкм	Расстояние катод-анод d, мкм	Работа выхода φ, эВ
1	1	1,2	0,4	2	4,5

Распределение напряженности электрического поля внутри триодной структуры определяется по формуле

$$E = \left| \frac{d\omega/d\chi}{dz/d\chi} \right| = \left| - \frac{C_w \cdot (\chi - g_2) \cdot (\chi)^{1/2-\gamma} \cdot (\chi - g_1)^{\gamma-1/2}}{C_z \cdot (\chi - g_3)} \right|. \quad (18)$$

Распределение напряженности электрического поля вблизи катода в триодной структуре показано на рис. 3.

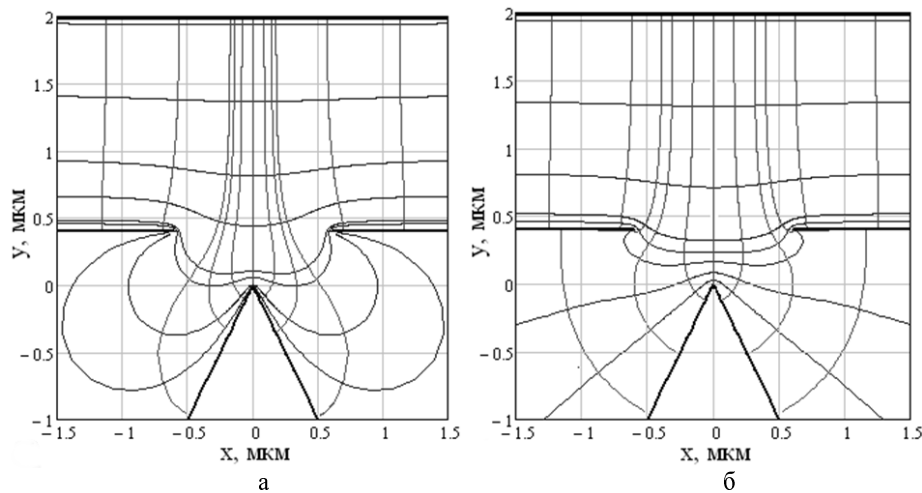


Рис. 3. Распределение напряженности (красные линии) и потенциала электрического поля (синие линии) в триодной структуре: а – $V_C = 0 \text{ В}$, $V_A = 300 \text{ В}$; б – $V_C = 30 \text{ В}$, $V_A = 300 \text{ В}$

По характеру распределения электрического поля на рис. 3,б видно, что при положительном потенциале ($V_C > 0$) на управляющем электроде (УЭ) структура работает в режиме токораспределения. Потенциал на аноде обозначается V_A . Судя по величине напряженности поля $E < 10^6 \text{ В/см}$, автоэмиссия с сетки на анод отсутствует. Распределение напряженности электрического поля вдоль поверхности острой катоды для различных значений потенциала на УЭ представлено на рис. 4.

Из графиков на рис. 4 следует, что в триоде имеет место экранизация анода сеткой и, одновременно, потенциал на УЭ существенно влияет на распределения напряженности поля вдоль эмитирующей поверхности катода. При увеличении ширины отверстия в сетке эффект экранирования ослабевает. При данной геометрии структуры, когда ширина отверстия в сетке приближается к величине $\Delta = 3 \text{ мкм}$ эффект экранирования исчезает, при этом распределение поля на катоде триода совпадает с диодным. Таким образом, изменяя потенциал сетки, получаем возможность управлять током автоэмиссии.

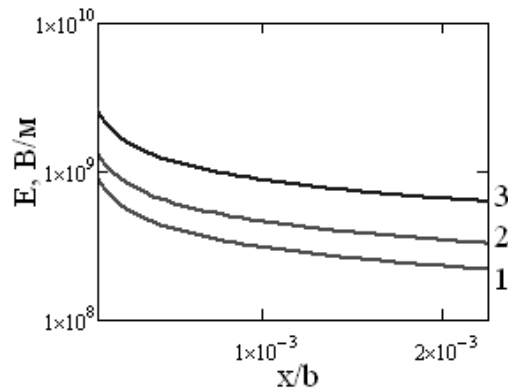


Рис. 4. Напряженность электрического поля вдоль поверхности катода в триодной и диодной структурах. $V_A = 300 \text{ В}$; 1 – $V_C = 0 \text{ В}$; 2 – $V_C = 30 \text{ В}$; 3 – для диода

Расчет напряженности поля, выполненный по формуле (18), позволяет определить плотность тока эмиссии непосредственно из уравнения Фаулера-Нордгейма [9], не прибегая к оценкам форм-фактора. Рассчитанное распределение плотности тока по поверхности эмиттера, для различных значений потенциала сетки при постоянном напряжении анода показано на рис. 5.

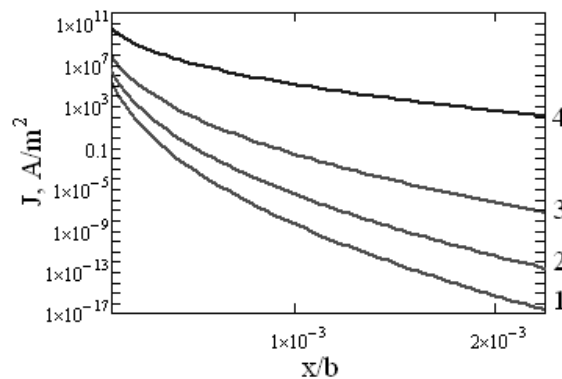


Рис. 5. Распределение плотности тока в пределах эмитирующей поверхности катода триодной и диодной структуры. $V_A = 300 \text{ В}$; 1 – $V_C = 0 \text{ В}$, 2 – $V_C = 10 \text{ В}$, 3 – $V_C = 30 \text{ В}$, 4 – диода

Из кривых на рис. 5 видно, что триодная структура проявляет высокую эффективность управления эмиссионным током с помощью изменения потенциала сетки. Крутизна управляющей характеристики триодной структуры имеет достаточно большое значение $S_M = \Delta J / \Delta V_C \cong 10^7 \text{ А/В} \cdot \text{м}^2$.

Выводы. Графитизированная поверхность SiC, образованная при диссоциативном испарении материала, является эффективным источником автоэмиссии электронов. Вакуумные триодные микроэлектронные структуры с автокатадами на основе углерода проявляют высокую эффективность управления эмиссионным током с помощью изменения потенциала сетки. Крутизна управляющей характеристики имеет значение порядка $10^7 \text{ А/В} \cdot \text{м}^2$, что указывает на перспективность

разработки приборов с эмиттерами на основе углерода. Применение методов конформных преобразований для исследования электрических полей в сложных структурах вакуумной микроэлектроники позволяет производить расчет плотности тока автоэмиссии непосредственно из уравнения Фаулера–Нордгейма [9] в зависимости потенциалов на электродах, не прибегая к оценкам форм-факторов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Wei Zhu*. Vacuum microelectronics. John Wiley & Sons, Inc. – 2001.
2. *Drowart J., De Maria G.* Silicon Carbide. Oxford: Pergamon. 1960.
3. *Lilov S.K.* Study of the equilibrium processes in the gas phase during silicon carbide sublimation // Materials Science and Engineering B. – 1993. – Vol. 21, Issue 1. – P. 65-69.
4. *Дмитриев А.Н., Чередниченко Д.И.* Формирование слоев графена сублимацией карбида кремния в вакууме сканирующим источником тепла // Известия вузов. Электроника. – 2010. – № 6. – С. 12-18.
5. *Хирс Д., Панд Г.* Испарение и конденсация. – М.: Металлургия, 1966. – 196 с.
6. *Latham R.* High Voltage Vacuum Insulation. London: Academic Press, 1995.
7. *Шешин Е.П.* Структура поверхности и автоэмиссионные свойства углеродных материалов. – М.: Физматкнига, 2001. – 288 с.
8. *Young-Jun Yu et al.* Tuning the Graphene Work Function by Electric Field Effect // Nano Letters. – 2009. – Vol. 9, № 10. – P. 3430-3434.
9. *Fowler, R.H.; Dr. L. Nordheim* Electron Emission in Intense Electric Fields // Proceedings of the Royal Society of London. – 1928. – Vol. 119, № 781. – P. 173-181.
10. *Muzykov P.G., Xianyun Ma, Cherednichenko D.I. and Sudarshan T.S.* High field breakdown of narrow quasi uniform field gaps in vacuum // Journal of Applied Physics. – 1999. – Vol. 85, № 12. – P. 8400-8404.
11. *Лаурентьев М. А.* Конформные отображения с приложениями к некоторым вопросам механики. – М.; Л., 1946. – 158 с.

Статью рекомендовал к опубликованию д.т.н. Е.А. Рындин.

Дмитриев Андрей Николаевич

Технологический институт федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге.

E-mail: a.dmitriev86@gmail.com.

347900, г. Таганрог, пер. Некрасовский 17, кв. 101.

Тел.: +79613138686.

Кафедра технологии микро- и нанoeлектроники; аспирант.

Чередниченко Дмитрий Иванович

E-mail: cheredni@fep.tti.sfedu.ru.

347900, г. Таганрог, ул. 1-я Котельная, д. 71, кв. 339.

Тел.: 88634371940.

Кафедра технологии микро- и нанoeлектроники; к.т.н.; доцент.

Музыков Петр Геннадиевич

Университет штата Южная Каролина.

E-mail: muzykovp@cec.sc.edu.

США, 29208, штат Южная Каролина, г. Колумбия, ул. 301 Саус Майн Стрит, комната 3А80.

Тел.: 18037777025; факс: 18037778045.

Кафедра электротехники; профессор-ассистент по научным исследованиям.

Тангали Сударшан

E-mail: sudarsha@cec.sc.edu.

США, 29208, штат Южная Каролина, г. Колумбия, ул. 301 Саус Майн Стрит, комната 3А79.

Тел.: 18037775174; факс: 18037778045.

Кафедра электротехники; профессор; председатель кафедры.

Dmitriev Andrey Nikolaevich

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: a.dmitriev86@gmail.com.

17, Nekrasovsky Street, Rm. 101, Taganrog, 347900, Russia.

Phone: +79613138686

The Department of Micro- and Nanoelectronics; Postgraduate Student.

CherednichenkoDmitriy Ivanovich

E-mail: cheredni@fep.ti.sfedu.ru.

71, 1-ya Kotelnaya Street, Rm. 339, Taganrog, 347900, Russia.

Phone: 88634371940.

The Department of Micro- and Nanoelectronics; Cand. of Eng. Sc.; Associate Professor.

Muzykov Peter Genadievich

University of South Carolina.

E-mail: muzykovp@enr.sc.edu

301 South Main Street, Rm. 3A80, Columbia, SC 29208, USA.

Phone: 18037777025; Fax: 18037778045.

The Department of Electrical Engineering; Research Assistant Professor.

Tangali Sudarshan

E-mail: sudarsha@cec.sc.edu.

301 South Main Street, Rm. 3A79, Columbia, SC 29208, USA.

Phone: 18037775174; Fax: 18037778851.

The Department of Electrical Engineering; Chair the Department; Professor.

УДК 621.315

**А.А. Лаврентьев, Б.В. Габрельян, П.Н. Шкумат, Б.Б. Кулагин,
И.Я. Никифоров**

**ВЛИЯНИЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА
ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ МОНОСУЛЬФИДОВ
3D-ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В AB INITIO РАСЧЕТАХ С УЧЕТОМ
ПРИБЛИЖЕНИЯ LDA+U**

Модифицированным методом LAPW+lo проведены расчеты электронно-энергетической структуры моносulfидов 3d-металлов с учетом антиферромагнитного упорядочения в различных кристаллографических слоях. Показано, что расщепление d-состояний переходного металла при учете антиферромагнитного упорядочения в слоях приводит к переходу части моносulfидов из металлического в полупроводниковое состояние. Для достижения близких к эксперименту значений E_g проводилась корректировка появившейся щели с помощью приближения LDA+U.

Моносulfиды; переход металл-диэлектрик; электронно-энергетическая структура; антиферромагнитное упорядочение; запрещенная зона.

A.A. Lavrent'ev, B.V. Gabrel'yan, P.N. Shkumat, B.B. Kulagin, I.Ya. Nikiforov

**THE INFLUENCE OF ANTIFERROMAGNETIC ORDERING ON
ELECTRONIC STRUCTURE OF 3D-TRANSITION METALS
MONOSULFIDES IN AB INITIO CALCULATIONS WITH LDA+U
CORRECTION**

The calculations of electronic structure of 3d-metal monosulfides with different crystallographic layers antiferromagnetic ordering were performed using LAPW+lo modified method. It was shown that the transition metal-semiconductor occurs in several monosulfides, caused by