КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВАКАНСИЙ В ГРАФЕНАХ

Покропивный А.В., Солонин Ю.М.
Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины,
03142 Киев, Кржижановского, 3, e-mail: apokr@ipms.kiev.ua

В настоящее время углеродные графены притягивают интерес в не меньшей степени, чем нанотрубки и фуллерены и с прикладной, и с фундаментальной точек зрения.

Влияние вакансионных дефектов на электронные и фононные свойства графенов изучается с моделями, основанными на элементарной ячейке из 180 углеродных атомов и 1, 2, 3, 6 и 24 вакансиями. Упорядоченные, с единственным дефектом на элементарную ячейку, и неупорядоченные, со случайно расположенными вакансиями вычислены из первых принципов и методом молекулярной динамики [1].

Случайно ориентированные вакансии при концентрациях до 6 на ячейку приводят к созданию характерных дефектов V_1(*5-9*), как показано на рис.1,а а при концентрациях больших чем 24 на ячейку – к аморфизации графена с различными типами дефектов, как показано на рис.1,б.

Проанализированы электронные и фононные плотности состояний. Переключение электронной проводимости от металлической к полупроводниковой наблюдается при увеличении размеров дефекта от одной и трех вакансий к большим числам дефектов, как показано на рис.2 и вакансионным кластерам. Характерные фононные моды в области ~19 и ~48 ТГц найдены во всех этих случаях для будущих экспериментальных отождествлений.

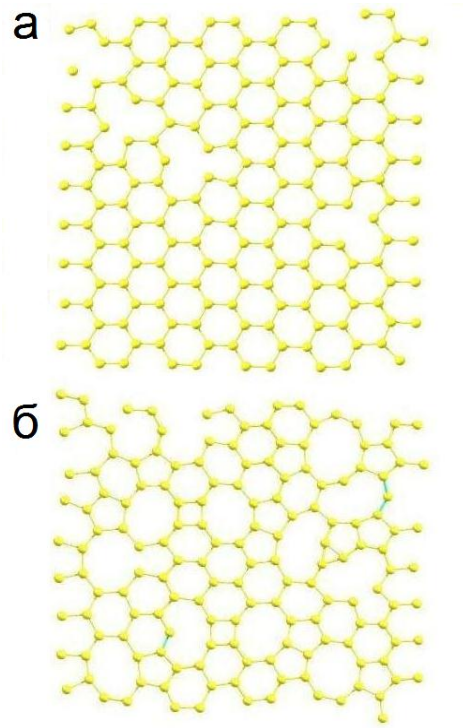

Рис.1 Оптимизированная структура графена с 6 (а) и 24 (б) неупорядоченными вакансиями на ячейку

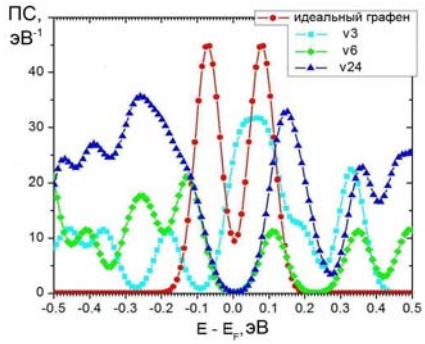

Рис.2 Плотности электронных состояний идеаль-ного графена и графенов со случайно ориентированными вакансиями от 3 до 24 на ячейку

1. 1. A.V. Pokropivny, Y. Ni, Y. Chalopin, Y.M. Solonin, S.Volz. Tailoring properties of graphene with vacancies. Phys. Stat. Sol. B (2014)