УДК 538.915

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Ванчугов А.А., Миронов Г.И.

Марийский государственный университет,

Республика Марий Эл, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, 1

alvanch@mail.ru

В наше время одним из самых перспективных и одновременно самых неизученных материалов в мире является графен. Во всем мире изучаются фундаментальные свойства данного материала. Данная работа также является исследованием свойств графена. В работе исследуются изменения энергетических спектров, химических потенциалов, энергий основного состояния, а также электронных плотностей во время роста размера структуры графена.

ВВЕДЕНИЕ

Графен – это наноматериал, который является самым тонким в мире в настоящее время по одной простой причине: он имеет толщину всего в один атом. Никакой материал не имеет толщину тоньше. Однако, графен прочнее стали благодаря своей ячеистой структуре, имеет лучшую электропроводность, чем у меди, и по многим предсказаниям может в ближайшем будущем заменить кремний в сфере электроники [1-3].

Начинать говорить о графене лучше с представления его структуры. Графен – это множество соединенных в плоскость шестиугольников, в углах которых, в свою очередь находятся атомы углерода.

На рисунке 1 представлена модель нанокластера графена с 294 атомами углерода в своем составе. Как видно из рисунка плоскость графена яв-

ляется множеством гексагонов, напоминающая по своему внешнему виду пчелиные соты.

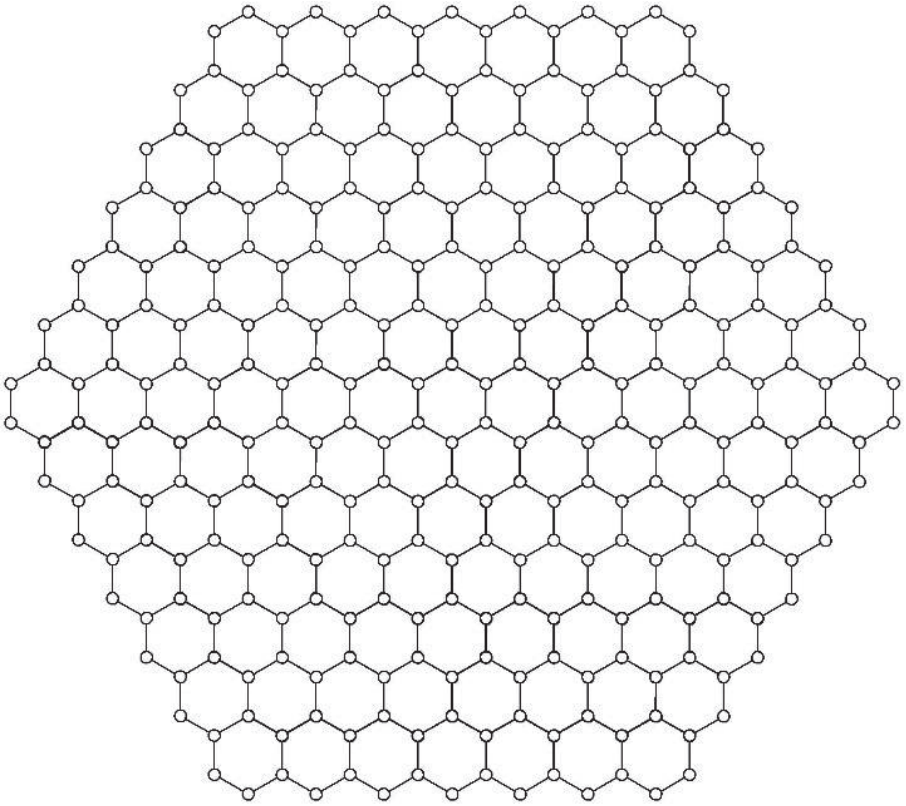

Рис. 1. Графеновая плоскость с 294 атомами углерода.

Если говорить упрощенно, то графен это множество соединенных между собой гексагонов, в виде пчелиных сот. Гексагон – это 6 атомов углерода, соединенных в виде правильного шестиугольника. На рисунке 1 представлена рассматриваемая нами система, состоящая из 294 атомов углерода.

ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В самом начале изучения свойств графена необходимо было найти подходящую модель, описывающую все основные свойства структуры и отрезала не нужные усложняющие свойства. Так как нанокластер графена содержит в своем составе множество атомов углерода, то чтобы не писать

множество уравнений движения, мы упростили модель. Атомы не имеют разницы между собой, поэтому чтобы упростить модель достаточно было взять любой из центральных атомов. Углерод имеет 4 валентные связи, а углеродные шестиугольники в решетке соединены так, что каждый атом, имеет 3 ближайших соседа, за исключением самых крайних.

В результате гибридизации орбиталь пи-электронов растягивается перпендикулярно плоскости, а сигма-электроны связываются друг с другом в плоскости. Когда атомы находятся рядом друг с другом волновые функции пи-электронов перекрываются и пи-электроны имеют возможность перескока с одного на другой атом.

Сигма-электроны имеют более низкую энергию, чем пи-электроны [4]. Поэтому сигма-электроны можно не учитывать при теоретическом исследовании, так как на основные физико-химические свойства влияет взаимодействие пи-электронов. Рассматриваемая система пи-электронов является сильнокоррелированной [5]. Для исследования сильнокоррелированных систем подходит модель Хаббарда [6], которая и была взята, как модель описания основных свойств графена.

Гамильтониан модели Хаббарда имеет вид [6-7]:

$$\hat{\mathrm{H}} = \varepsilon \sum_{f,\sigma} a^{+}_{f\sigma} a_{f\sigma} + \sum_{f \neq f'} \mathrm{B}_{f,f'} \left(a^{+}_{f\sigma} a_{f'\sigma} + a^{+}_{f'\sigma} a_{f\sigma} \right) + U \sum_{f} \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow} \quad (1)$$

где ε – собственная энергия π-электрона,

$B_{ff'}$– интеграл перескока электрона с узла f на соседний узел f ' и обратно, с узла f ' на узел f,

U – кулоновский потенциал,

$a^{+}_{f\sigma} a_{f'\sigma}$– операторы рождения и уничтожения электрона на узле f с проекцией спина σ, индекс f нумерует узлы кристаллической решетки.

Работа представляет собой рассмотрение свойств структуры графена по мере увеличения размера нанокластера. Первые работы по этой темати-

ке были опубликованы ранее [7-9] и данная работа является продолжением.

Для примера можно привести фурье-образ антикоммутаторной функции Грина, который получен для одного гексагона, то есть для шести атомов углерода.

$$<< a_{1\uparrow}^{+} \mid a_{1\downarrow} >>_{E} = \frac{i}{2\pi}\left\{\frac{1/3(1- < \hat{n}_{1\downarrow} >)}{\mathrm{E}-\varepsilon-\mathrm{B}} + \frac{1/3(1- < \hat{n}_{1\downarrow} >)}{\mathrm{E}-\varepsilon+\mathrm{B}} + \frac{1/6(1- < \hat{n}_{1\downarrow} >)}{\mathrm{E}-\varepsilon-2\cdot\mathrm{B}} + \right.$$

$$\left. \frac{1/6(1- < \hat{n}_{1\downarrow} >)}{\mathrm{E}-\varepsilon+2\cdot\mathrm{B}} + \frac{1/3(< \hat{n}_{1\downarrow} >)}{\mathrm{E}-\varepsilon-U-\mathrm{B}} + \frac{1/3(< \hat{n}_{1\downarrow} >)}{\mathrm{E}-\varepsilon-U+\mathrm{B}} + \frac{1/6(< \hat{n}_{1\downarrow} >)}{\mathrm{E}-\varepsilon-U-2\cdot\mathrm{B}} + \frac{1/6(< \hat{n}_{1\downarrow} >)}{\mathrm{E}-\varepsilon-U+2\cdot\mathrm{B}} \right\}$$

Увеличение атомов происходило послойно, слой за слоем к центральному гексагону. Модель, которая имеет в своем составе 150 атомов углерода, представляет собой центральный гексагон, окруженный 5 слоями гексагонов. По аналогии модель с 216 атомами имеет в своем составе 6 слоев, модель с 294 атомами углерода 7 слоев, модель с 384 слоями имеет 8 слоев.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Энергетический спектр был рассчитан в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций [5].

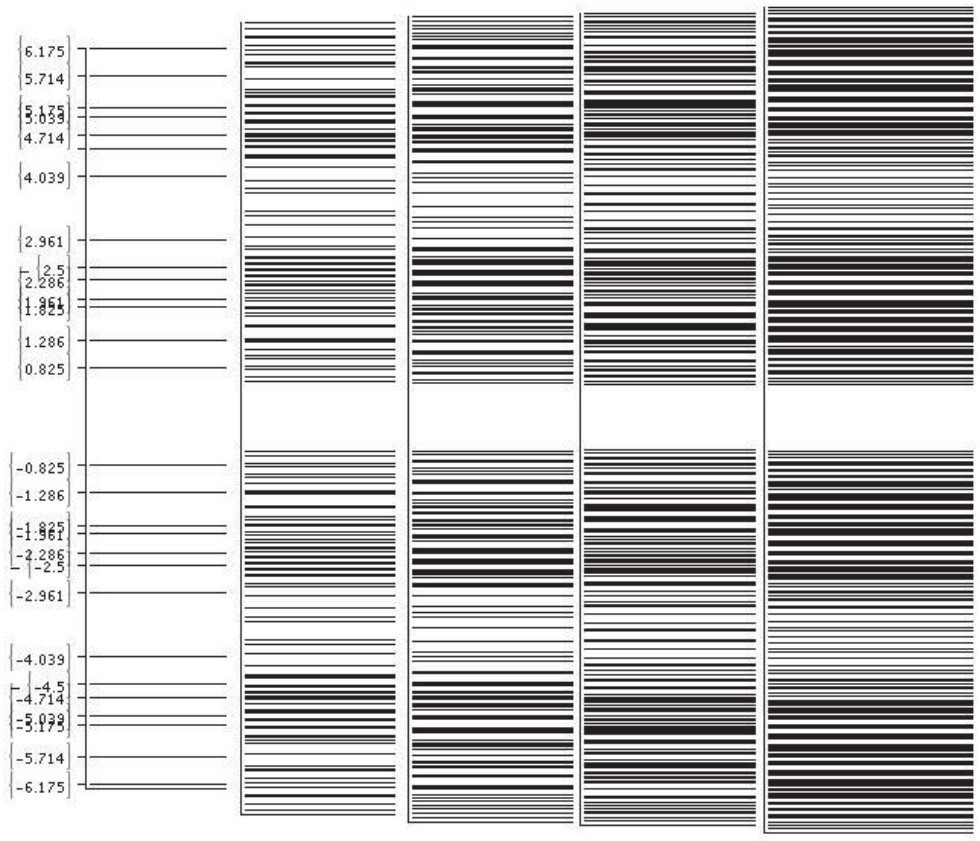

Рис. 2. Сравнение энергетических спектров структур графена различного размера (слева-направо): C13 (модель с 13 атомами), C150, C216, C294, C384, с заданные параметрами ε=3,5 эВ, B=–1 эВ, U=7 эВ.

На рисунке 2 представлены энергетические спектры. Их сравнение приводит к выводу, что при увеличении общего количества атомов углерода в нанокластере улучшаются проводниковые свойства материала, так как щель запрещенной зоны уменьшается. Посмотреть как уменьшается ширина запрещенной зоны можно на рисунке 3.

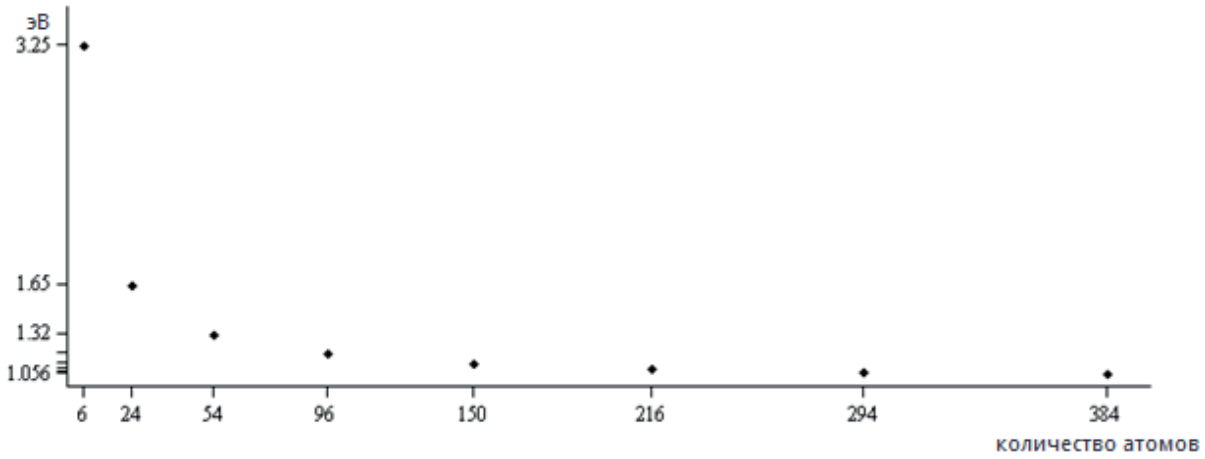

Рис. 3. Зависимость ширины запрещенной зоны от размера структуры графена.

Химический потенциал определяет значение собственной энергии электрона от количества электронов в структуре.

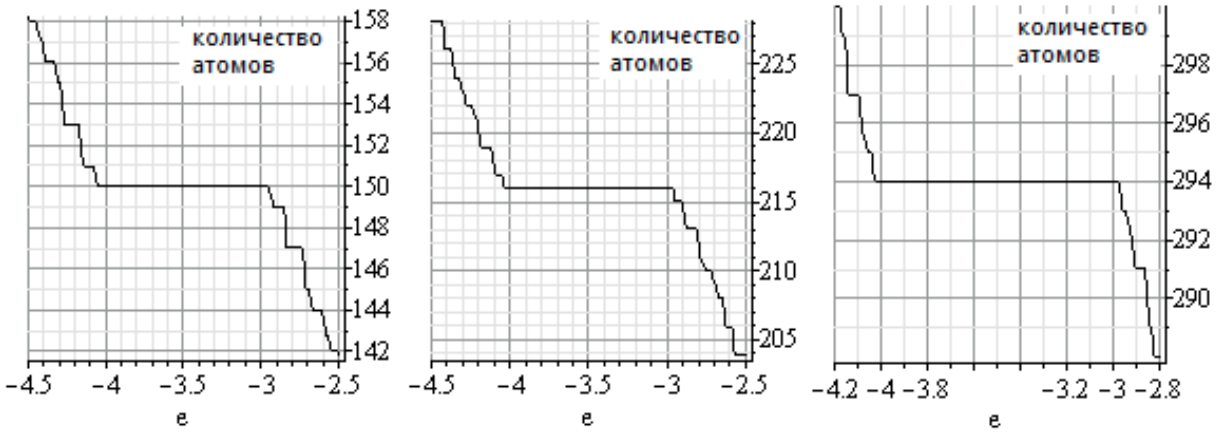

Рис. 4. Уравнения на химический потенциал структур со 150 атомами, с 216 атомами и с 294 атомами, рассчитанные при следующих параметрах: ε=3,5 эВ, B=–1 эВ, U=7 эВ.

Анализ графиков приводит к выводу, что при количественном соответствии атомов и электронов, последние будут иметь собственную энергию равную -3,5 эВ. При добавлении к структуре со 150 атомами в составе дополнительный электрон собственная энергия электронов в такой структуре уменьшается до -4,15 эВ, а при уменьшении количества электронов в структуре увеличивается до -2,92 эВ.

В структуре с 216 атомами прибавление электрона ведет к уменьшению собственной энергии до -4,1 эВ, а добавление дырки увеличивает значение собственной энергии до -2,96 эВ.

Добавка лишнего электрона к структуре с 294 атомами уменьшает значение собственной энергии до -4,06 эВ, а недостаток одного электрона в системе ведет к увеличению значения собственной энергии до значения равного -2,96 эВ.

Энергия основного состояния показывает интенсивность переноса электронов с узла на узел.

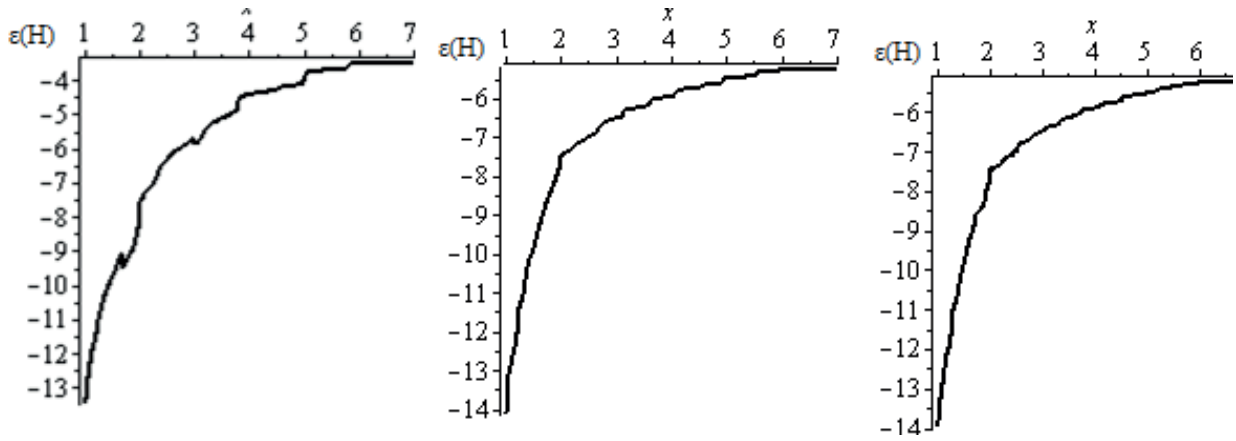

Рис. 5. Энергия основного состояния для структур графена (слева-направо) со 150 атомами, 216 атомами и 294 атомами, рассчитанные при следующих параметрах: ε=3,5 эВ, B=–1 эВ, U=7 эВ.

Из рисунка 5 видно, что увеличение количества атомов в нанокластере графена приводит к выравниванию графика энергии основного состояния. Это связано с тем, что при увеличении размеров электроны более дальнего порядка начинают все меньше влиять на электрон в центре рассматриваемой структуры. На крайне правом графике – структуре с 294 атомами, график энергии основного состояния практически выровнен. Следует сделать вывод, что данную структуру можно будет рассматривать как бесконечную, так как со следующим увеличением график меняться не будет.

Также с увеличение количества атомов в нанокластере разглаживаются и плотности электронных состояний в графене, как видно из рисунков 6 и 7.

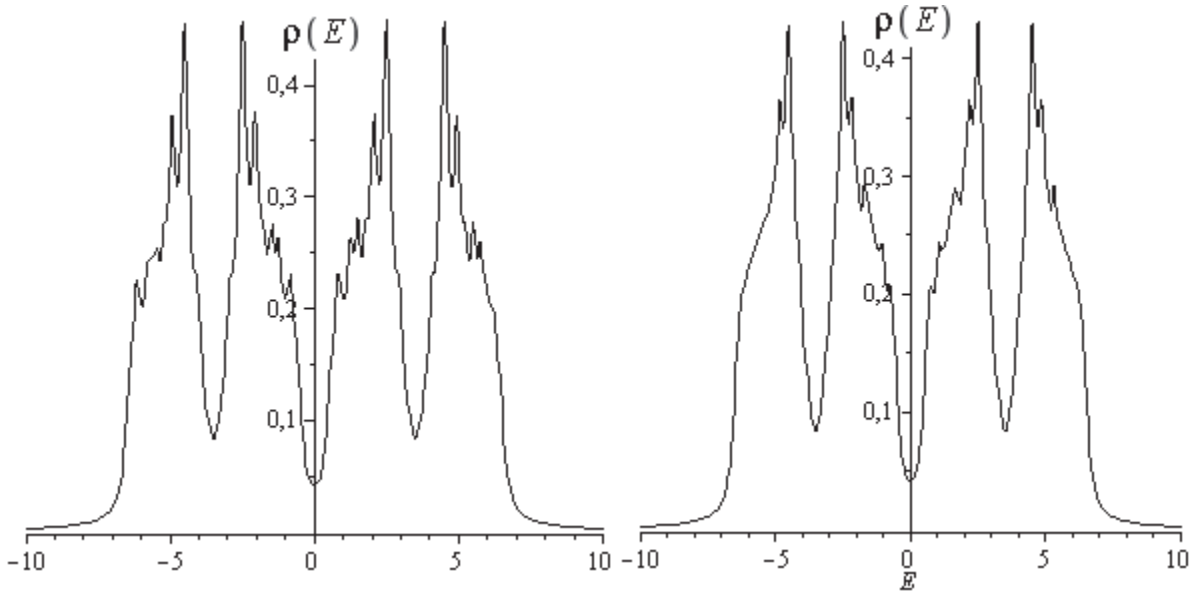

Рис. 6. Электронная плотность структуры графена со 150 атомами (слева) и 216 атомами (справа), рассчитанные при следующих параметрах: ε=3,5 эВ, B=–1 эВ, U=7 эВ.

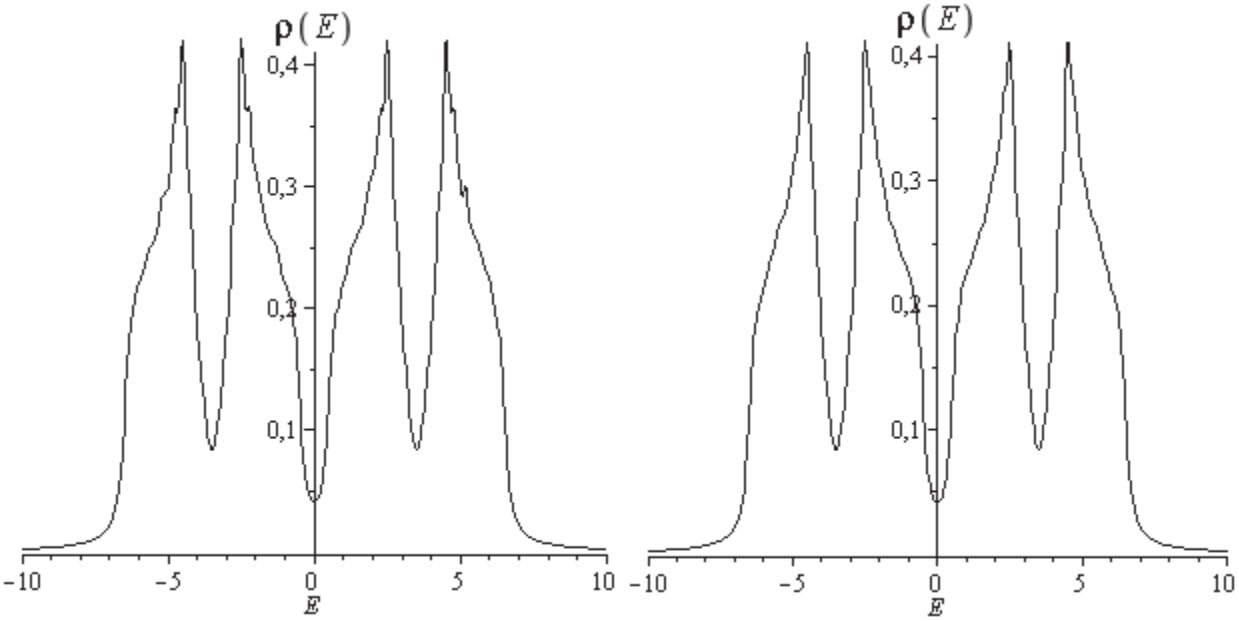

Рис. 7. Электронная плотность структуры графена с 294 атомами (слева) и с 384 атомами (справа), рассчитанные при следующих параметрах: ε=3,5 эВ, B=–1 эВ, U=7 эВ.

На рисунках 6 и 7 представлены кластеры графена со 150, 216, 294 и 384 атомами и эти рисунки показывают, что спектральные плотности практически не меняются. Это может говорить, что дальнейшее увеличение количества атомов не будет влиять на центральный атом. И можно рассматривать структуру с 384 атомами как бесконечную.

Поиск бесконечной модели привел к графику, представленному на рисунке 8. Получившаяся структура практически не отличается от структуры графена с 384 атомами.

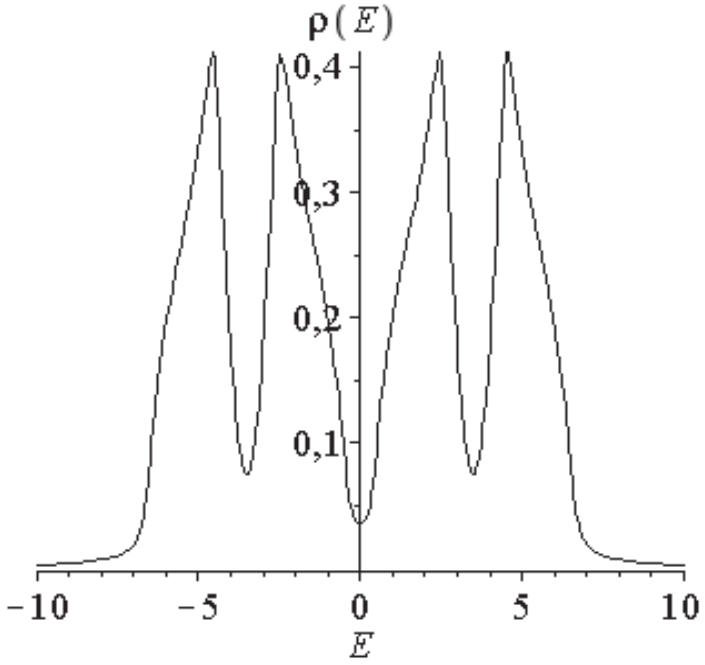

Рис.8. График электронной плотности для бесконечной плоскости графена

Следовательно, можно сделать вывод, что модель с 384 атомами углерода можно приравнять к модели бесконечной плоскости графена и таким образом её можно будет использовать в дальнейших теоретических расчетах.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Novoselov K. S. Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y.* /Electric field effect in atomically thin carbon films/ Science. 2004. V.306. P.666-669.
2. *Novoselov K. S., Geim A.K.* /Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene/ Nature. 2005. V.438. P.197.
3. *Castro Neto A., Guinea H.F., Peres N.M.R, Novoselov K.S., Geim A.K.* /The electronic properties of graphene/ Reviews of Modern Physics. 2009. V.81. P.109-162.

4. *Дьячков П.Н.* /Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применение/ Бином. Лаборатория знаний. 2006. С.8-10.
5. *Миронов Г.И.* /Вычисление функций Грина для наноструктур в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Физика металлов и металловедение. 2006. Т.102, №6. С.611-620.
6. *Hubbard J.* /Electron correlations in narrow energy bands/ Proceeding of the Royal Society. 1963. V.276. P.238.
7. *Ванчугов А.А.* /Теоретическое исследование свойств графена/ Студенческая наука и XXI век. 2017. №1(14). С.18-20.
8. *Ванчугов А.А.* /Нанокластеры графена в модели Хаббарда/ Молодой исследователь: от идеи к проекту. 2017. С.3-7.
9. *Ванчугов А.А*. /Теоретическое изучение электронных свойств кластеров графена/ Материалы всероссийской научно-практической конференции преподавателей высшей и средней школы XV Емельяновские чтения. 2017. С.48-54.
10. *Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C., Curl R.F., Smalley R.E.* /Buckminsterfullerene/ Nature. 1985. V.318. P.167.