

Simetrijos įtaka grafeno energijos spektro pokyčiams

Symmetry-related effects in graphene energy spectrum

Stepas Toliautas, Jelena Strelcova

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Teorinės fizikos katedra, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

Elektroninis paštas susirašinėjimui: stepas.toliautas@ff.vu.lt

Pastaruoju metu stebimas susidomėjimas anglies dariniais, tikintis juos pritaikyti įvairiose sparčiai besivystančiose nanotechnologijų srityje. Grafenas – vieno ar kelių atomų storio grafito sluoksnis – ilgą laiką nagrinėtas tik teoriškai, kol 2004 m. A. Geim grupei pavyko jį susintetinti [1]. Tai atvėrė galimybes palyginti įvairius teorinius rezultatus su eksperimentiniais duomenimis.

Yra žinoma, kad vieno grafito sluoksnio elektrono energijos spektras atitinka puslaidininkio spektrą su nuliniu draustinės juostos tarpu, t.y. valentinė ir laidumo juostos liečiasi ties Fermio lygmeniu, bet lietimosi taške būsenų tankis lygus nuliui. Dvisluoksnio grafeno valentinė ir laidumo juostos kiek persikloja; eksperimentai rodo, kad juostų išsidėstymas priklauso nuo išorinio poveikio, kuris keičia sluoksnių simetriją [2]. Teorinis šio galimo simetrijos kitimo poveikio elektroniniam grafeno spektrui nagrinėjimas ir bus pateiktas šiame pranešime. Pažymėtina, jog anglies nanovamzdeliai – tai susukti grafeno sluoksniai, kurių elektrines savybes lemia sukimo būdas.

Grafeno struktūrai modeliuoti naudojome kvantinės mechanikos skaičiavimų paketą VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package). Paketas remiasi tankio funkcionalo teorija; naudojama plokščiųjų bangų bazė ir Vanderbilt tipo pseudopotencialai.

Iš pradžių apskaičiavome vieno ir dviejų sluoksnių grafeno energijos spektrus pusiausvyros būsenoje. Grafeną nagrinėjome kaip begalinę plokštumą su anglies atomais, išsidėsčiusiais taisyklingųjų šešiakampių viršūnėse. Dvisluoksnio grafeno modeliui pasirinktas sluoksnių išdėstymas, kuris atitinka grafitą, nes būtent tokia struktūra ir yra naudojama eksperimentuose. Gauti spektrai atitiko anksčiau minėtus teiginius. Be to, įsitikinome, kad kitoks sluoksnių išdėstymas duoda kitokią energijos spektrą.

Taip pat modeliavome dvisluoksnį grafeną elektriniame lauke, kuris statmenas medžiagos plokštumai, ir skaičiavome jo energijos spektrą Fermio lygmens aplinkoje, esant įvairioms lauko stiprio vertėms. Dėl elektrinio lauko valentinė ir laidumo juostos išsiskiria ir atsiranda draustinės energijos tarpas. Iš rezultatų matyti, kad draustinės energijos $\Delta\varepsilon$ priklausa nuo lauko stiprio E beveik atitinka įtampos kritimą tarp grafeno sluoksnių:

$$\Delta\varepsilon = E \cdot d, \quad (1)$$

čia d – atstumas tarp grafeno plokštumų ($d = 3,354 \text{ \AA}$). Be to, didinant elektrinio lauko stiprį, Fermio lygmuo beveik nesikeičia ir lieka draustinės energijos srityje,

t.y. elektriniame lauke dvisluoksnis grafenas įgyja puslaidininkio savybių.

Buvo taip pat modeliuojama situacija, kai ant dvisluoksnio grafeno buvo nusodinti kalio atomai. Šiuo atveju taip pat atsiranda elektrinis laukas tarp grafeno sluoksnių, indukuojantis draustinės energijos tarpą. Be to, dėl valentinių kalio elektronų, kurie pereina į viršutinį grafeno sluoksnį, Fermio lygmuo gerokai pakyla ir atsiduria laidumo juostoje, t.y. grafenas virsta metalu.

Erdvinės simetrijos poveikį nagrinėjome skaičiuodami anglies vamzdelių, atitinkančių skirtingą grafeno plokštumos sukimą, spektrus. Kad grafeno ir nanovamzdelių elektrinės savybės susijusios, matyti iš „krėslo“ (angliškai armchair) tipo vamzdelio spektro, kuriame egzistuoja analogiškas valentinės ir laidumo juostų lietimosi taškas. Remiantis vien grafeno geometrija, galima numatyti, kad vieni nanovamzdeliai turės metalo, o kiti – puslaidininkio savybių. Tačiau skaičiavimai rodo, jog siauriausi nanovamzdeliai nebūna grynai puslaidininkiniai. Taip yra dėl didelio jų sienelės kreivumo [3].

Reikšminiai žodžiai: grafenas, VASP, anglies nanovamzdeliai.

Literatūra

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, Science **306**, 666 (2004).
- [2] T. Ohta, A. Bostwick, E. Rotenberg, Science **313**, 951 (2006).
- [3] C. D. Spataru, S. Ismail-Beigi, L. X. Benedict, Appl. Phys. A **78**, 1129 (2004).