

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МУЛЬТИГРАФЕНА ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Бокова А.М., Тучин А.В., Битюцкая Л.А.

Воронежский государственный университет, физический факультет, каф. Физики полупроводников и микроэлектроники, Россия, 394006, г. Воронеж, Университетская пл. 1, Тел.:(473)2208-481, [an4ik-nanotex@mail.ru](mailto:an4ik-nanotex@mail.ru), [a.tuchin@bk.ru](mailto:a.tuchin@bk.ru), [mel144@phys.vsu.ru](mailto:mel144@phys.vsu.ru)

Графен – уникальный материал, обладающий высокой подвижностью носителей заряда и рекордной теплопроводностью, однако он имеет нулевую запрещенную зону, что несколько ограничивает сферу его применения в электронике [1,2]. Сложно получить однослойный графен, более стабильными являются многослойные графеновые структуры, получившие название мультиграфен. Мультиграфен (МГ) с определенным числом слоев - это отдельный материал с уникальными физическими свойствами [1].

Целью работы является теоретическое исследование зависимости межплоскостного расстояния и стабильности МГ с числом слоев до 6 включительно. Расчеты проводились методом теории функционала плотности (DFT) в приближении локальной спиновой плотности (LSDA) в базисе 3-21\*G с использованием программного комплекса Gaussian03. Конфигурация графеновых слоев в моделируемых структурах соответствует структуре  $\alpha$ -графита (упаковка АВА). Начальное межслоевое расстояние в мультиграфене составляло  $r_{sh} = c/2 = 3.35 \text{ \AA}$  ( $c$ -параметр решетки графита).

После обработки результатов моделирования получено, что усредненное межслоевое расстояние  $\overline{r_{sh}}$  во всем интервале исследуемых  $n$  превышает соответствующее расстояние в графите. К аналогичному выводу пришли несколько групп ученых, основываясь на экспериментальных исследованиях МГ [2,3]. Установлено, что уменьшение усредненного межплоскостного расстояния с ростом числа слоев хорошо описывается зависимостью  $\overline{r_{sh}} \sim 1/n^2$ . Однако усреднение не дает полной картины изменения структуры при переходе от графита к МГ. Для двух- и трехслойного мультиграфена наблюдается последовательное уменьшение межплоскостного расстояния  $r_{sh}$ , а при  $n > 3$  происходит чередование минимальных и максимальным межслоевых расстояний от слоя к слою, индивидуальных для каждой МГ структуры.

Приведенная энергия связи  $E_b$  в интервале  $n=1...6$  увеличивается нелинейно. Межплоскостная энергия связи, которая характеризует прочность на отрыв слоев друг от друга, мала. Зависимость  $E_b(n)$  увеличивается с числом слоев, постепенно приближаясь к межплоскостной энергии связи в графите.

## Литература

1. Craciun M.F. et al.//*Nano Today*, Vol.6, N.1, 2011, Pp. 42-60.
2. Yoo E.J. et al.//*Nano Lett.*, Vol.8, N.8, 2008, Pp.2277-2282.
3. Агринская Н.В.// *ФТП*, Т. 47, вып. 2., 2013, стр. 267-272.