

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СЖАТОГО МУЛЬТИГРАФЕНА

Каспер Ю. В., Тучин А.В., Битюцкая Л.А.

Воронежский Государственный Университет, физический ф-т, каф. ФПП и МЭ
Россия, 394006, г. Воронеж, Университетская площадь, 1
Тел. +7(4732)2281160
E-mail: solnce-juli_94@mail.ru

Мультиграфен является слоистым материалом, однако в настоящее время не достаточно изучено влияние внешнего давления на его свойства и структуру [1]. Поэтому актуальной задачей является изучение мультиграфена при наличии внешнего воздействия, как электрического поля, так и давления. Целью работы является исследование влияния электрического поля на свойства и перестройку электронной структуры мультиграфена при одноосном сжатии внешним давлением 0-50 ГПа.

Исследование электронной структуры МГ проводилось методом теории функционала электронной плотности (DFT) в приближении локальной спиновой плотности (LSDA) с использованием программного комплекса Gaussian09.

В интервале $n=2-6$ межслоевое расстояние уменьшается с 3.61 \AA до 3.49 \AA , что на 7.8% и 4.2% больше, чем в графите. В работе Агринской Н.В. [2] усредненное межплоскостное расстояние восьмислойного МГ $\overline{r_{sh}} = 3.39 \pm 0.02 \text{ \AA}$, что на 1.9-3.1% меньше рассчитанного нами значения $\overline{r_{sh}} = 3.475 \text{ \AA}$.

По результатам исследования перераспределения электронной плотности граничных орбиталей сжатого мультиграфена предложена модель проводимости МГ, в соответствии с которым в МГ, подверженному одноосному сжатию, между слоями возникает дополнительное электростатическое взаимодействие. В результате сближения слоев орбитали деформируются, вероятность нахождения электронов на внешних границах слоев растет.

Обнаружено усиление полевой модуляции ширины запрещенной зоны в сжатом мультиграфене. Из полученных результатов следует, что в сжатом МГ полевые эффекты проявляются сильнее, например, в поле напряженностью 0.25 В/нм при давлении 50 ГПа полевое изменение ширины запрещенной зоны в 5 раз больше, чем при напряженности поля $E=0.05 \text{ В/нм}$.

Литература.

1. Liu Y., et al. Temperature dependence of the electrical transport properties in few-layer graphene interconnects // *Nanoscale Research Letters*, Vol. 8:335, 2013. Pp. 1–7.
2. Агринская Н.В. и др. Структура и транспортные свойства наноуглеродных пленок, полученных сублимацией на поверхности на 6H-SiC // ФТП, 2013, Т.47, №2. С. 267-273.