

# ИССЛЕДОВАНИЕ СЖАТОГО МУЛЬТИГРАФЕНА КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

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

Сочетание высокой подвижности электронов и дырок, теплопроводности, термодинамической стабильности и жесткости определяют интерес к мультиграфену (МГ) для создания устройств наноэлектроники, наноэлектромеханических систем и сенсоров [1, 2]. Развитие методов квантовой и вычислительной химии позволяет их успешно применять для решения задач в области исследования электронной структуры углеродных наноматериалов как в основном состоянии, так и при наличии внешних воздействий, таких как избыточное давление [2]. Целью настоящей работы является исследование зависимости межплоскостных расстояний и эффективного заряда двух- и трехслойного МГ от внешнего давления в интервале 0–50 ГПа методом теории функционала плотности (DFT) в приближении LSDA с использованием программного комплекса Gaussian09.

На основе исследования геометрических параметров и стабильности МГ установлено уменьшение межплоскостного расстояния двух- и трехслойного МГ на 47% (с 3.61 до 1.90 Å) и на 36% (с 3.56 до 2.28 Å) соответственно, в интервале давлений  $P = 0–50$  ГПа. Барическая зависимость эффективного заряда для двух- и трехслойного МГ линейная. Исследование перераспределения электронной плотности показало деформацию молекулярных орбиталей, определяющую увеличение вероятности нахождения электронов на внешних границах слоев МГ.

Обнаружено формирование межплоскостных  $\pi$ -связей при критическом значении давления 10 и 30 ГПа для двух и трехслойного МГ. Межплоскостные  $\pi$ -связи выступают в роли каналов электронного переноса в направлении перпендикулярно слоям, уменьшая анизотропию электропроводности МГ. Из результатов исследования следует, что критическое давление формирования каналов проводимости растет с числом графеновых слоев в МГ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №14-02-31315 мол\_а).

## 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. Бокова А.М. и др. Исследование мультиграфеновых структур на основе квантово-химической модели // *Известия вузов. Электроника*, Т. 20, № 1, 2015. Стр. 5–9.