

УДК 538.9

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ

© 2020 г. М. В. Лукомская^а, *, О. В. Павловский^а, **

^а Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, ул. Ленинские горы, 1-3, Москва, 119991 Россия

*E-mail: mv.lukomskaya@physics.msu.ru

**E-mail: ovp@goa.bog.msu.ru

Поступила в редакцию 08.05.2020 г.

После доработки 04.08.2020 г.

Принята к публикации 04.08.2020 г.

В настоящее время физика графена направлена на то, чтобы найти способ управления запрещенной зоной графена — это необходимо для применения графена в наноэлектронике. Целью данной работы является исследование систем, нарушающих инверсионную симметрию гексагональной решетки. В работе получены электронные свойства графеновых нанолент типа кресло и зигзаг и показана зависимость электронных свойств от краевых эффектов.

Ключевые слова: графен, графеновые наноленты, дефект

DOI: 10.1134/S2079562920040120

1. ВВЕДЕНИЕ

Графен — двумерный материал, экспериментально был получен в 2004 г. А.К. Геймом, К.С. Новоселовым и др. [1]. Привлекательной особенностью графена является наличие безмассовых носителей заряда. Данное свойство делает графен очень перспективным материалом в области нанотехнологий. Существование таких носителей обусловлено симметрией кристаллической решетки, которая и ведет к отсутствию запрещенной зоны в зонной структуре. В случае нарушения подрешеточной симметрии спектр графена изменяется и возникает запрещенная зона.

Понимание механизмов влияния дефектов в графене на его энергетический спектр, а именно обретение способности управления энергетической щелью — это актуальная проблема современной физики графена, решение которой является необходимым шагом для будущего развития электроники. Существуют разные способы нарушения симметрии например нарушение за счет использования различных подложек таких, как h-VN [2] или за счет нарушения симметрии кристаллической решетки графена.

В данной работе изучено нарушение инверсионной симметрии, которое возможно, как в направлении оси x , так и в направлении оси y . Гексагональная решетка может быть разрезана тремя способами — это границы типа: кресло, зигзаг и смешанные границы [3–5]. Используя приближение сильносвязанных электронов мы получили зонную структуру графеновых нанолент с границами типа кресло и зигзаг (рис. 1), а так же по-

казали, что энергетический спектр меняется в зависимости от типа границы.

2. ЗОННАЯ СТРУКТУРА ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ

2.1. Элементарная ячейка

Ширина наноленты N определяется количеством димерных линий для нанорибона типа кресло и количеством зигзагообразных цепей для нанорибона типа зигзаг. Наименьшая ширина для нанорибонов типа кресло равна $N = 3$, такая элементарная ячейка содержит $n = 6$ атомов (рис. 2),

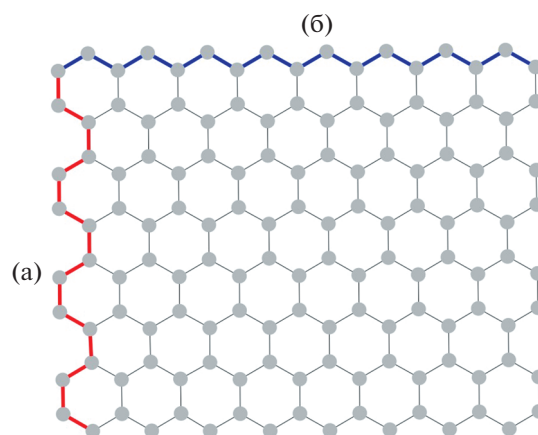


Рис. 1. Типы границ, которыми можно разрезать гексагональную решетку: (а) тип границы кресло, (б) тип границы зигзаг.

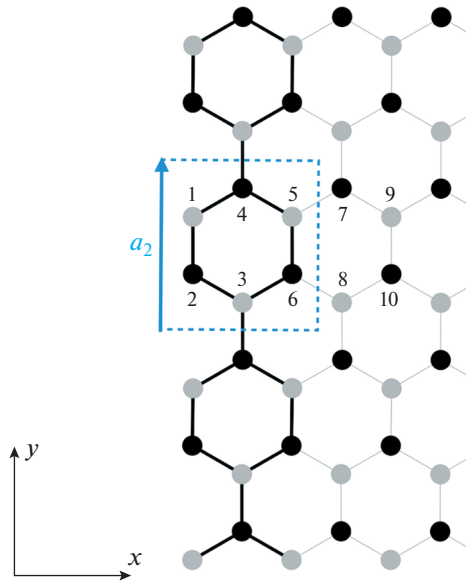


Рис. 2. Элементарная ячейка графеновой наноленты типа кресло. Номером обозначено положение атома в элементарной ячейке. Подрешетки А и В выделены разными цветами. Вектор a_1 – основной вектор решетки.

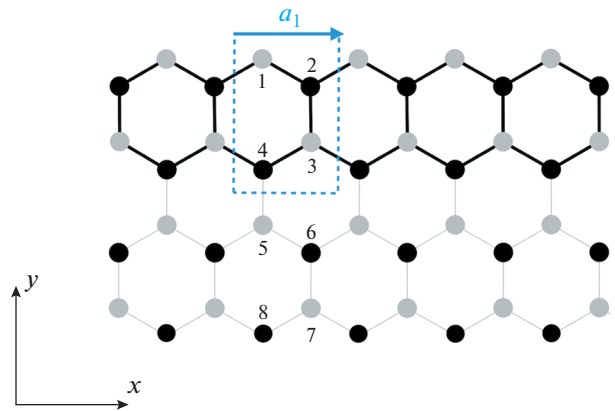


Рис. 3. Элементарная ячейка графеновой наноленты типа зигзаг. Номером обозначено положение атома в элементарной ячейке. Подрешетки А и В выделены разными цветами. Вектор a_1 – основной вектор решетки.

для нанорибонов типа зигзаг $N = 2$ (рис. 3), а в элементарной ячейке содержится $n = 4$ атома. Основные векторы элементарных ячеек нанорибонов типа зигзаг и типа кресло $\mathbf{a}_1 = ax$ и $\mathbf{a}_2 = a\sqrt{3}y$ соответственно. Тогда основные векторы обратной решетки будут иметь вид $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}x$ и $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}y$.

2.2. Зонная структура

Зонная структура графеновых нанолент может быть рассчитана из Гамильтоновой матрицы. Количество зон соответствует количеству состояний включенных в модель. Так как мы рассматриваем только π -орбиталь каждого атома, число зон будет эквивалентно количеству атомов n , что есть также размерность Гамильтоновой матрицы

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \dots & H_{nn} \end{pmatrix} \quad (1)$$

расписывая H_{ij}

$$\psi_i H \psi_j = t_1 \left(e^{\frac{i a_x k_x}{\sqrt{3}}} + e^{\frac{i a_x}{2\sqrt{3}}(-k_x + \sqrt{3}k_y)} + e^{\frac{i a_x}{2\sqrt{3}}(-k_x - \sqrt{3}k_y)} \right), \quad (2)$$

$$\psi_j H \psi_i = t_1 \left(e^{\frac{i a_x}{2\sqrt{3}}(k_x - \sqrt{3}k_y)} + e^{\frac{i a_x}{2\sqrt{3}}(k_x + \sqrt{3}k_y)} + e^{-\frac{i a_x k_x}{\sqrt{3}}} \right). \quad (3)$$

Матричные элементы H_{ij} Гамильтоновой матрицы получаются путем учета взаимодействия каждого атома с его соседями, находящимися в той же элементарной ячейке и/или в соседних ячейках. Если i -й атом взаимодействует с j -м атомом, находящимся в той же элементарной ячейке, то $\langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$ или элемент H_{ij} будет равен t_{ij} . Если же i -й атом взаимодействует с j -м атомом, находящимся в другой элементарной ячейке, то $\langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$ или элемент H_{ij} будет равен $t_{ij} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$, где \mathbf{R} – вектор трансляции.

В данной работе учитываются хоппинги только между ближайшими соседями. Накладываем периодические граничные условия по оси y для нанолент типа кресло и по оси x для нанолент типа зигзаг. Выпишем исходя из (рис. 2) необходимые \mathbf{k} и \mathbf{R} для получения матричных элементов Гамильтоновой матрицы

$$\mathbf{R} = a(\pm 1, R_y), \quad \mathbf{R} = a\left(\pm \frac{1}{2}, R_y\right), \quad \mathbf{k} = (0, k_y); \quad (4)$$

тогда матрица для нанолент типа кресло с $N = 3$ ($n = 6$), будет иметь вид

$$H(k_y) = \begin{pmatrix} \mathcal{E} & t & 0 & t & 0 & 0 \\ t & \mathcal{E} & t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & \mathcal{E} & t_{ij} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} & 0 & t \\ t & 0 & t_{ij} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} & \mathcal{E} & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t & \mathcal{E} & t \\ 0 & 0 & t & 0 & t & \mathcal{E} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Из положения атомов нанорибона типа зигзаг (рис. 3) получим \mathbf{k} и \mathbf{R}

$$\mathbf{R} = a \left(R_x, \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{k} = (k_x, 0); \quad (6)$$

тогда Гамильтонова матрица для наноленты типа зигзаг с $N = 2$ ($n = 4$) примет следующий вид

$$H(k_x) = \begin{bmatrix} \mathcal{E} & t \cos a \frac{\sqrt{3}}{2} k_x & 0 & 0 \\ t \cos a \frac{\sqrt{3}}{2} k_x & \mathcal{E} & t & 0 \\ 0 & t & \mathcal{E} & t \cos a \frac{\sqrt{3}}{2} k_x \\ 0 & 0 & t \cos a \frac{\sqrt{3}}{2} k_x & \mathcal{E} \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Здесь мы используем типичные параметры сильной связи для графена $\mathcal{E} = 0$ эВ и $t = -2.74$ эВ [6], несмотря на это матрицы остаются довольно сложными для аналитического решения, при этом рассмотренные выше системы имеют минимально возможные элементарные ячейки. Для решения таких систем и более сложных необходимо применять численные методы. В настоящей работе для исследования описанных выше систем, а так же и для более сложных, была написана про-

грамма на языке программирования C с использованием LAPACK.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В результате численного решения задачи были получены графики зонной структуры для графеновых нанолент с краями типа кресло и зигзаг, имеющих разную ширину N и соответственно разное количество атомов в элементарной ячейке.

На рис. 4 построены графики графеновых нанолент типа кресло с числом димерных линий

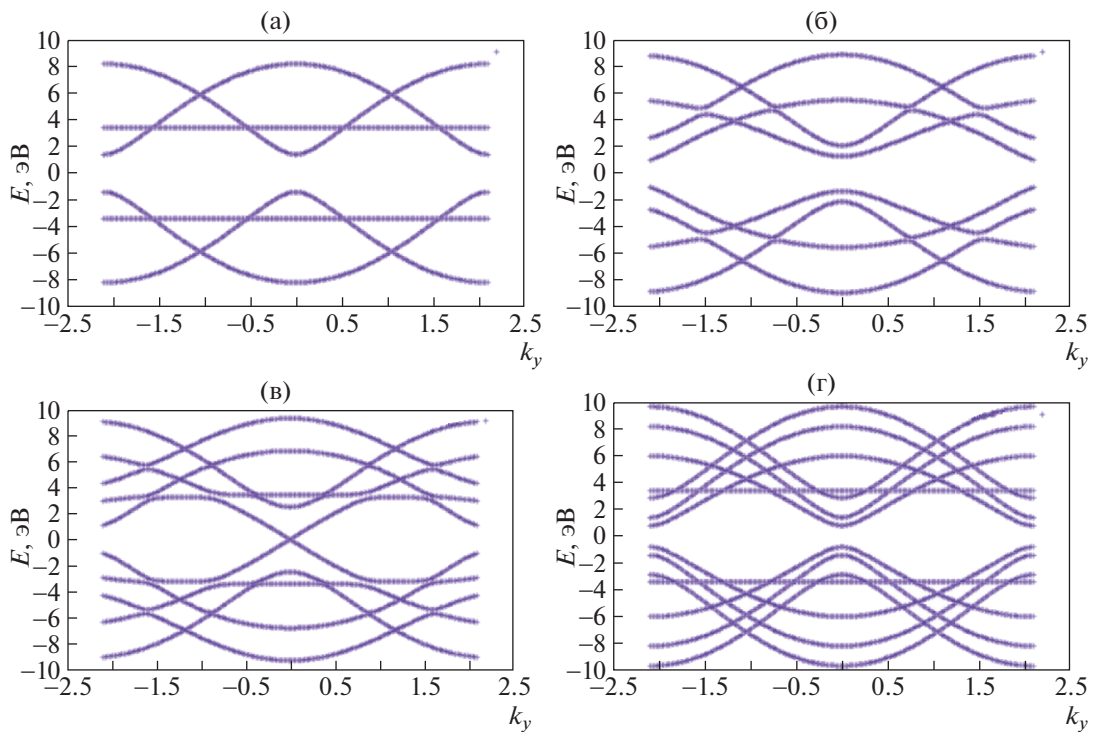


Рис. 4. Зонная структура графеновых нанолент типа кресло. Они будут либо полупроводниками при $N = 3p + 2$ (такому состоянию соответствуют графики: (а) $N = 3$, (б) $N = 4$, (г)), $N = 7$ либо полуметаллами при $N = 3p$ или $N = 3p + 1$ – график (в) $N = 5$. Здесь N – длина наноленты.

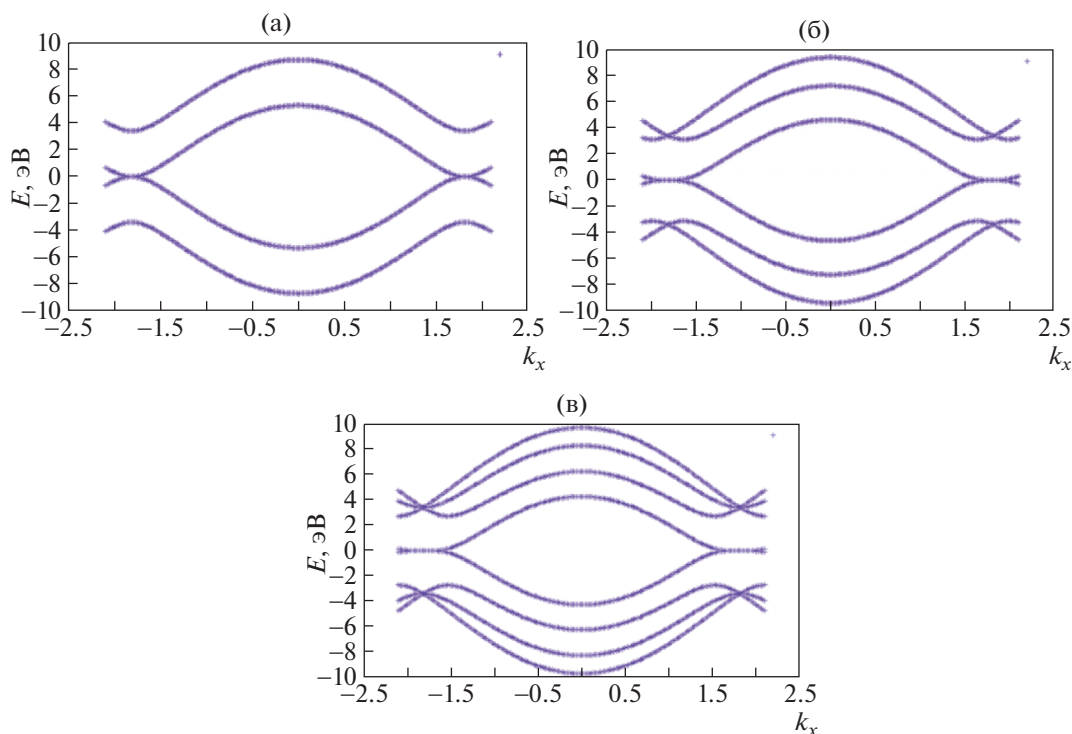


Рис. 5 Зонная структура графеновых нанолент типа зигзаг. Наноленты этого типа всегда являются металлическими: (а) $N = 2$, (б) $N = 3$, (в) $N = 4$, где N – длина наноленты.

$N = 3, 4, 5, 7$ и количеством атомов в элементарных ячейках $n = 6, 8, 10, 14$ соответственно. В этих моделях наноленты типа кресло являются либо полуметаллами, либо полупроводниками в зависимости от ширины ленты. Рассмотрим подробнее каждый случай. На графиках (а) $N = 3$, (б) $N = 4$, (г) $N = 7$ (рис. 4) присутствует запрещенная зона, наноленты в этом случае являются полупроводниками. Видно, что ширина запрещенной зоны нанолент типа кресло уменьшается по мере увеличения ширины ленты. Заметим, что наноленты типа кресло могут быть полупроводниками при следующем условии $N = 3p + 2$ (где p – положительное целое число). Теперь остановимся на графике рис. 4в, здесь зона проводимости и валентная зона соприкасаются в одной точке, таким образом наноленты типа кресло являются полуметаллами при $N = 3p$ или $N = 3p + 1$.

На рис. 5 представлены графики для графеновых нанолент типа зигзаг с числом зигзагообразных линий $N = 2, 3, 4$ и соответственно количеством атомов в элементарных ячейках $n = 4, 6, 8$. Как видно из спектра (рис. 5: (а) $N = 2$, (б) $N = 3$, (в) $N = 4$, наноленты типа зигзаг всегда металлические, так как при любой длине наноленты происходит перекрытие зон.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Расчеты показывают, что наноленты с границей типа зигзаг не обладают энергетической щелью и являются проводящими. Более сложная картина наблюдается в случае нанолент с краем типа кресло. Для таких нанолент практически любой ширины мы наблюдаем запрещенную зону, кроме некоторых случаев. Эти случаи интересны тем, что в нанолентах шириной 10, 16 и т.д. генерируется только одна точка Ферми, а не две, как в случае свободного графена. Это указывает на исключительный характер такой конфигурации, что интересно как с физической точки зрения, так и с точки зрения технологических приложений.

В данной работе мы рассмотрели модель, в которой учитывается хоппинг только между ближайшими соседями. Стоит отметить, что учет дальних хоппингов также возможен, анализ такой системы будет проведен в будущей работе. Что касается графена, то опыт его исследования говорит, что качественно картина не поменяется, учет дальних хоппингов дает небольшое уточнение.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа О.В.П. поддержана грантом Рос-сийского научного фонда (проект № 16-12-10059).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Dubonos S.V., Zhang Y., Jiang D.* // arXiv: cond-mat/0410631. 2004.
2. *Nakada K., Fujita M., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S.* // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 17954.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.17954>
3. *Aliofkhaezai M., Ali N., Milne W.I. et al.* Graphene Science Handbook. Nanostructure and Atomic Arrangement. 2016. Boca Raton, FL, USA: CRC.
4. *Wakabayashi K., Fujita M., Ajiki H., Sigrist M.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 8271.
5. *Son Y.-W., Cohen M.L., Louie S.G.* // Phys. Rev. B. 2006. V. 97. P. 216803.
6. *Kundu R.* // arXiv:0907.4264 [cond-mat.mtrl-sci]. 2009.

Electronic Properties of Graphene Nanoribbons

M. V. Lukomsкая^{1, *} and O. V. Pavlovsky^{1, **}

¹ *Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*

**e-mail: mv.lukomsкая@physics.msu.ru*

***e-mail: ovp@goa.bog.msu.ru*

Received May 8, 2020; revised August 4, 2020; accepted August 4, 2020

Abstract—Nowadays, graphene physics is aimed at finding a way to control the band gap of graphene, which is necessary for application of graphene in nanoelectronics. The purpose of this work is to investigate the systems that break an inversion symmetry of a hexagonal lattice. The electronic properties of armchair and zigzag graphene nanoribbons are obtained and the dependence of the electronic properties on the edge effects is shown.

Keywords: graphene, graphene nanoribbons, defect