

ЭНЕРГЕТИКА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ФРАГМЕНТА ГРАФЕНА С ТОПОЛОГИЧЕСКИМИ ДЕФЕКТАМИ

А. Т. Власов, Н. А. Поклонский, С. А. Вырко

Белорусский государственный университет, Минск

E-mail: poklonski@bsu.by

Топологический дефект в графеновой плоскости обусловлен нарушением структуры решетки: включением в графеновую плоскость вместо некоторых шестиугольников 5- или 7-угольников [1]. Такой дефект может приводить к искривлению плоскости, обычно сопровождаемому перераспределением электронов по поверхности. Достаточно быстрое «выворачивание» дефекта, обладающего электрическим дипольным моментом, изменяет величину диполя, в результате чего возможно излучение фотона. Перспективны также аналогичные процессы в ферромагнитных наноструктурах [2]. Для быстрого выворачивания нужна большая энергия, поскольку смещаются не электроны, а несколько атомов углерода. Представленные ниже результаты исследования деформирования фрагментов графена с топологическими дефектами показывают, что быстрое переключение возможно. В принципе, это может быть использовано для создания на фрагменте графена наноразмерных функциональных элементов устройств мехатроники, оптоэлектроники и спинтроники.

Графеновый лист с дефектами можно классифицировать по топологии химических связей между атомами углерода в дефекте (рис. 1). Однако, взаимное расположение атомов в пространстве (т.е. их конфигурация) топологией не определяется. Конфигурацию можно рассчитать, используя начальные положения атомов и граничные условия – внешние воздействия на лист. Это открытая динамическая система с большим числом степеней свободы, причем для одинаковых граничных условий бывает несколько метастабильных конфигураций. Поэтому сначала необходимо исследовать простейшие воздействия и соответствующие им метастабильные состояния (статика), а затем переходы между метастабильными состояниями, вызванные изменением во времени граничных условий (динамика). Далее приведены результаты расчетов (блочно-регулярным методом [3]) силы воздействия и энергии деформированного фрагмента для двух дефектов (#1 и #2), показанных на рис. 1, *а* и 1, *б*. Внешняя сила F (механического или электрического происхождения) приложена к центральным атомам дефектов #1 и #2, вдавливая их в направлении графеновой плоскости. Положения граничных атомов фрагмента фиксированы. Предполагается, что внешняя сила F действует на дефекты настолько медленно, что все остальные атомы фрагмента графена успевают

перестроиться. На рис. 2 показана сила F (для дефекта #1; рис. 2, *a*) и энергия E фрагмента (для дефекта #2; рис. 2, *б*), в зависимости от величины смещения z , которое происходит здесь до полного выворачивания дефекта, а затем до возвращения его в исходное состояние.

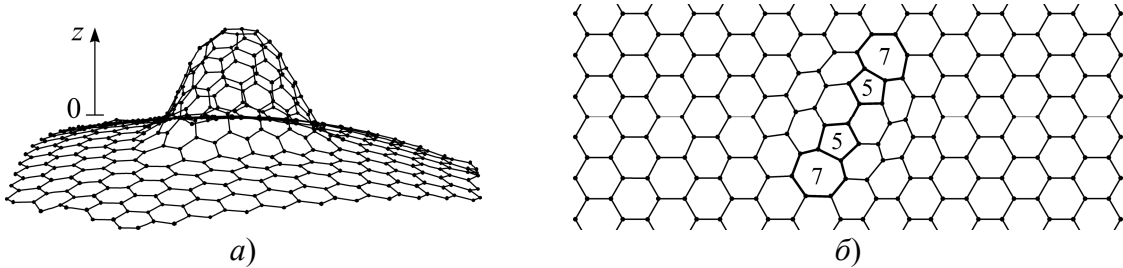


Рис. 1. *a*) Дефект #1 получен «вклеиванием» углеродной воронки в графеновую плоскость. Границей этого фрагмента является 6-угольник из зигзаг-линий (вид сбоку). *б*) Прямоугольный фрагмент графена с дефектом #2, состоящим, как и дефект

Стоуна–Уэльса (SW-дефект), из двух 5- и двух 7-угольников (вид сверху)

Деформация дефекта #1 (рис. 1, *a*) подробнее изложена в [3]. Дефект #2 инвариантен относительно отражения в графеновой плоскости. Это дает два метастабильных состояния с одинаковой энергией. На рис. 2, *б* эта симметрия нарушена из-за граничных условий, зафиксированных в состоянии с координатой $z = 2$.

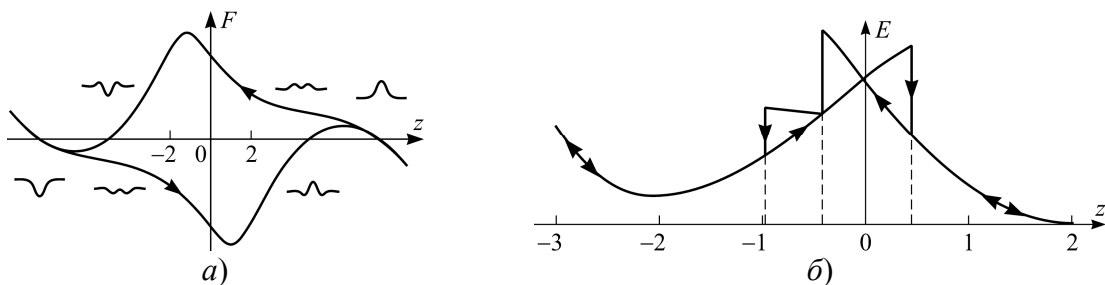


Рис. 2. Замкнутый цикл выворачивания выпуклости дефекта:

Стрелки показывают направление движения. *a*) Для дефекта #1 вдоль кривой показаны соответствующие поперечные сечения дефекта. *б*) Для дефекта #2 при трех значениях z происходят резкие переходы в метастабильные состояния с меньшей энергией. Смещения z измеряются в единицах длины С–С-связи (0,142 нм) в графене, а внешняя сила F и энергия фрагмента графена E – в условных единицах

Обнаруженные гистерезис и скачкообразное переключение между метастабильными состояниями графенового листа с дефектом #2 происходят под действием внешней силы в процессе деформации листа, что можно использовать как функциональный элемент в квантовой электронике.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (грант № Ф14В-003).

1. Опенов Л. А., Подливаев А. И. // ФТТ. 2015. Т. 57, № 7. С. 1450–1454.
2. Фраерман А. А. // УФН. 2012. Т. 182, № 12. С. 1345–1351.
3. Власов А. Т., Поклонский Н. А., Вырко С. А. // Актуальные проблемы физики твердого тела (ФТТ-2013): сб. докл. Междунар. науч. конф. Минск: Ковчег, 2013. Т. 1. С. 41–43.