

Моделирование из первых принципов фононных свойств графена, модифицированного атомами водорода

В. Н. Мищенко

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск,
Беларусь, e-mail: mishchenko@bsuir.by*

Графен рассматривается в настоящее время как один из наиболее перспективных материалов для создания новых полупроводниковых приборов для различных диапазонов частот. Путем моделирования из первых принципов исследованы фононные свойства графана – одной из модификаций графена с использованием атомов водорода. Полученные характеристики и параметры графана могут служить основой для создания новых гетероструктурных приборов, содержащих слои модифицированного графена и других полупроводниковых материалов.

Ключевые слова: графен; водород; моделирование; графан; полупроводниковая структура.

First-principles modelling of phonon properties of graphene modified with hydrogen atoms

V. N. Mishchanka

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus,
e-mail: mishchenko@bsuir.by*

Graphene is currently considered as one of the most promising materials for creating new semiconductor devices for different frequency ranges. The phonon properties of graphane, one of the modifications of graphene using hydrogen atoms, are investigated by first-principles modelling. The obtained characteristics and parameters of graphane can serve as a basis for the creation of new heterostructured devices containing layers of modified graphene and other semiconductor materials.

Keywords: graphene; hydrogen; modelling; graphane; semiconductor structure.

Введение

Графен стал объектом многочисленных исследований, благодаря своим особым механическими, электрическим и другими свойствам [1]. Но его использование для полупроводниковой электроники показывает, что существуют проблемы, связанные с отсутствием зазора между валентной зоной и зоной проводимости в зонной диаграмме. Модификации графена при использовании атомов водорода, фтора и других атомов стали предметом исследования как возможное решение этой проблемы. С использованием атомов водорода была получена модификация графена, которая получила название графан [2]. Графан относится к структурной группе, которая получила название chair («кресло»). Это соединение состоит из двумерного (x - y) графена, к атомам углерода которого в направлении z присоединены атомы водорода. Полученный таким образом материал представляет собой перспективную основу для фундаментальных исследований и возможных технологических приложений при создании разнообразных электронных и оптических приборов. Основной

задачей в данной работе является моделирование из первых принципов фоновых свойств графана.

1. Метод и особенности моделирования свойств графана

Моделирование из первых принципов было выполнено с помощью программных комплексов Quantum Espresso [3], используя параметризацию Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Были использованы следующие параметры моделирования: энергия отсечки волновой функции составляла величину $60 R_y$ ($1 R_y \approx 13,605$ эВ), энергия отсечки плотности заряда и потенциалов – $240 R_y$. Зона Бриллюэна в программном комплексе Quantum Espresso была представлена с помощью сетки Монкхорста-Пака размером $12 \times 12 \times 1$. Для устранения возможных паразитных осцилляций энергии при выполнении моделирования к рассматриваемой структуре сверху и снизу структуры добавлялись слои вакуума каждый толщиной 20 бор ($1 \text{ бор} \approx 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ м}$).

Первоначально с использованием программы pw.x из программного комплекса “Quantum Espresso” было выполнено самосогласованное энергетическое моделирование гетероструктурного соединения графена с атомами водорода. Для расчета динамических фоновых матриц и констант силового взаимодействия использовались программы ph.x и q2r.x, соответственно. С использованием программ matdyn.x и plotband.x из программного комплекса “Quantum Espresso” были получены дисперсионные фоновые зависимости как для чистого графена, так и для гидрированного графена (графана), особенности построения и зонная диаграмма которого представлены в [4].

2. Результаты моделирования из первых принципов фоновых свойств графана

В результате моделирования получены и исследованы дисперсионные фоновые зависимости для однослойного графена и гидрированного графена (графана), который относится к структурной группе, называемой изомером типа chair («кресло»).

На рис. 1 показаны дисперсионные фоновые зависимости для графена. На этом рисунке можно выделить две группы дисперсионных фоновых зависимостей. Первая группа состоит из мод ZA, TA, LA (кривые 1–3, рис. 1), которая характеризуется процессами рассеивания на акустических фонах вдоль условных продольной и поперечной направлений (координаты x – y), а также ортогональной к ним координате z , соответственно. Вторая группа состоит из мод ZO, TO, LO (кривые 4–6, рис. 1) и связана с рассеиванием на оптических фонах вдоль условных продольной и поперечной направлений (координаты x – y), а также ортогональной к ним координате z , соответственно.

На рис. 2 показаны дисперсионные фоновые зависимости для гидрированного графена (графана). Анализ этих зависимостей для графана показал, что общее число фоновых кривых по сравнению с графеном увеличивается и достигает количества, равного двенадцати. Установлено, что гидрирование графена приводит к

появлению дополнительных шести фоновых мод к шести модам ZA, TA, LA, ZO, TO, LO, которые характерны для обычного графена.

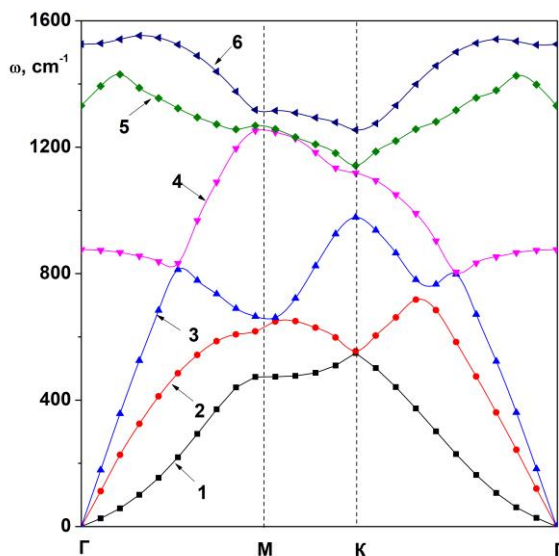


Рис. 1. Дисперсионные фоновые зависимости для графена

Дисперсионные фоновые зависимости мод ZA, TA, LA, ZO, TO, LO для графена представлены на рис. 2 кривыми 1–3, 8–10, соответственно. Среди дополнительных мод, которые появляются в графене и связаны с процессами изгиба структуры, можно отметить две симметричные моды – продольную и поперечную LB и TB, и две несимметричные моды LB* и TB* [5]. Дисперсионные фоновые зависимости для мод TB, LB, TB*, LB* представлены кривыми 4–7 на рис. 2, соответственно.

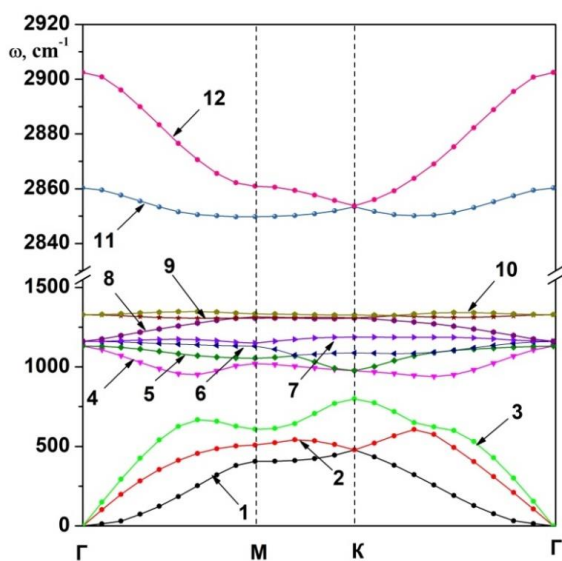


Рис. 2. Дисперсионные фоновые зависимости для графена

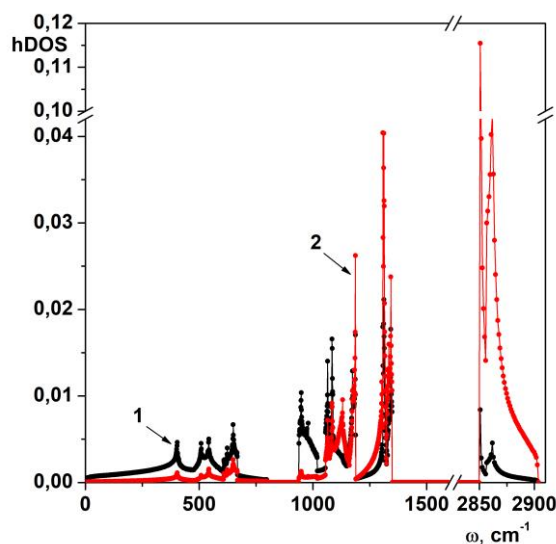


Рис. 3. Зависимости фоновой плотности состояний (параметр hDOS)

В направлении координаты z формируются две моды, связанные с процессами растяжения. Одна из них – симметричная мода ZS , а другая – несимметричная мода ZS^* (кривые 11 и 12, которые представлены на рис. 3, соответственно) [5].

Анализ полученных результатов показывает, что значения фононных частот для акустических мод соответствуют неравенствам $ZA < TA < LA$, для оптических мод – неравенствам $ZO < TO < LO$, для мод, связанных с изгибами, – неравенствам $TB < LB$ ($TB^* < LB^*$) и для мод, связанных с растяжением, – $ZS < ZS^*$. Моделирование показало, что моды в направлении z (за исключением мод, связанных с растяжением) в графене всегда имеют более низкое значение фононной частоты по сравнению с модами, формируемыми в плоскости x – y . При этом поперечные моды в двухмерной плоскости x – y структуры имеют более низкое значение фононной частоты, чем продольные. Моды, связанные с изгибом структуры, также имеют более низкое значение фононной частоты, чем моды, связанные с растяжением структуры ($B < S$).

На рис. 3 показаны зависимости фононной плотности состояний (параметр $hDOS$) в зависимости от значения фононной частоты для гидрированного графена (графана). При этом кривая 1 на рис. 3 соответствует вкладу атомов углерода, а кривая 2 – атомов водорода. Анализ этих зависимостей показывает, что для фононных мод, связанных с рассеиванием на акустических фононах, преобладающий вклад обеспечивается атомами углерода. В диапазоне фононных частот, величина которых превышает значение, равное приблизительно 1100 см^{-3} , преобладает вклад атомов водорода (кривая 2, на рис. 3) над атомами углерода (кривая 1, на рис. 3), что оказывается существенным для формирования мод ZS (кривая 11, рис. 2) и ZS^* (кривая 12, рис. 2).

Заключение

Приведены результаты исследования свойств и характеристик гидрированного графена (графана). Путем моделирования из первых принципов получены и исследованы дисперсионные фононные зависимости для однослойного графена и гидрированного графена (графана). Полученные зависимости и параметры гидрированного графена могут служить основой для создания новых гетероструктурных приборов, содержащих слои графена и других полупроводниковых материалов.

Библиографические ссылки

1. Electric field effect in atomically thin carbon film / K. S. Novoselov [et al.] // Science. 2004. Vol. 306. P. 666–669.
2. First-principles investigation of graphene fluoride and graphane / O. Leenaerts [et al.] // Phys. Rev. 2010. В 82. P. 195436.
3. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi [et al.] // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. Vol. 21. P. 395502.
4. Murav'ev V., V.Mishchanka. Ab-initio simulation of hydrogenated graphene properties // Doklady BGUIR. 2021. Vol. 19. N. 8. P. 5–8.
5. L. Feng Huang, Z. Zeng. Lattice dynamics and disorder-induced contraction in functionalized graphene // J. Appl. Phys. 2013. P. 113 083524.