

УДК; 535.343.2; 538.915; 538.958

С.А. Кутень¹, А.Л. Пушкарчук^{1,2}, Т.С. Пивоварчик¹, А.А. Хрущинский¹,
А.Г. Поддубская¹, Н.И. Волынец¹,
Dmitry Lyakhov³, Dominik Ludewig Michels³, К.Г. Батраков¹

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ НА СПЕКТРЫ НАНОГРАФЕНА МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

¹ Институт ядерных проблем, БГУ, ул. Бобруйская 11, 220030 Минск, Беларусь,

² Институт физико-органической химии, НАНБ, ул. Сурганова 13, 220072 Минск, Беларусь

³Computer, Electrical and Mathematical Science and Engineering Division, 4700 King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal 23955-6900, Saudi Arabia

[*kgbatrakov@mail.ru](mailto:kgbatrakov@mail.ru)

Слой графена одноатомной толщины обладает способностью сильного поглощения падающего излучения в широком спектральном диапазоне: от микроволнового до оптического. Поэтому, графен является отличным кандидатом для использования в качестве рабочего элемента при разработке высокочувствительных детекторов и сенсоров. Основной вклад в поглощение излучения графеном в оптическом диапазоне вносят межзонные электронные переходы, приводя к коэффициенту поглощения всего лишь одним слоем атомов $\sim \pi a^2/3$ % (a — постоянная тонкой структуры) [1]. В микроволновом и терагерцовом (ТГц) диапазоне, в отличии от оптического, преобладает влияние на поглощение внутризонных переходов. В этом диапазоне поглощение может быть очень большим и, в зависимости от уровня легирования электронной системы графена, параметров подложки и угла падения волны на плоскость графена, изменяется от нескольких десятков процентов до почти полного поглощения [2]. При поперечных пространственных размерах слоя графена порядка микрона и меньше, размерный эффект начинает оказывать влияние на структуру электронных уровней и спектры поглощения. В этом случае, ввиду ограничения движения электронов в поперечном направлении, для характерной энергии пиков поглощения может быть использована следующая оценка $\sim v_F p = v_F \pi / L$ (L — поперечный размер, v_F и p — скорость Ферми и квазимпульс электронов графена), а частота пиков соответствует терагерцовому и оптическому диапазону частот для микронных и нанометровых поперечных размеров соответственно. В работе путем квантово-химического моделирования размерные эффекты анализируются в диапазоне поперечных длин \sim от одного до десяти нанометров.

При расчетах использовалась программа ZINDO/S [3]. Рассчитываемые модели графеновых квантовых точек (ГКТ) C_6H_6 , $C_{10}H_8$, $C_{30}H_{16}$, $C_{90}H_{28}$, $C_{234}H_{48}$, $C_{462}H_{64}$ изображены на рис. 1. Расстояния С-С в полагались равными стандартным значениям 1,421 Å. Оборванные связи на границах ГКТ насыщались атомами водорода с последующей оптимизацией их положения методами молекулярной механики.

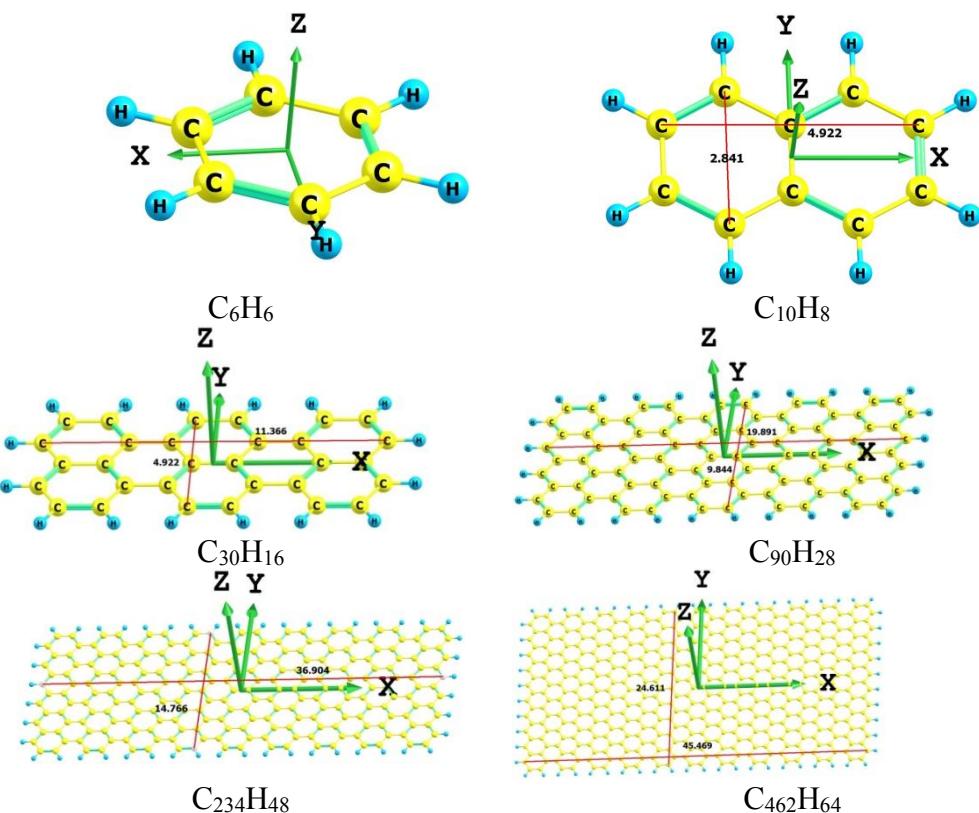


Рисунок 1. Набор рассчитываемых моделей ГКТ: C_6H_6 , $C_{10}H_8$, $C_{30}H_{16}$, $C_{90}H_{28}$, $C_{234}H_{48}$, $C_{462}H_{64}$. Цифры над красными линиями обозначают расстояния между граничными атомами углерода в \AA

Исследована зависимость от размеров ГКТ энергий пиков поглощения и разности ΔE_{HL} между значениями энергий LUMO (низшая свободная молекулярная орбиталь) и HOMO (высшая занятая молекулярная орбиталь). Результаты расчетов показывают уменьшение этих величин с увеличением размера системы и находятся в качественном соответствии с предварительными оценками.

Работа выполнена при поддержке ГПНИ «Конвергенция 2025» D.L. and D.M. were partially supported by KAUST baseline funding. All Gaussian16 package computations were performed on KAUST's Ibex HPC. The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Sky-lake nodes

- [1] R.R. Nair, et al., Fine structure constant defines visual transparency of graphene// Science – 2008.- V. 320 – P. 1308.
- [2] K. Batrakov, et al., Enhanced microwave-to-terahertz absorption in graphene.// Applied Physics Letters, - 2016 – V.108(12) – P. 123101.
- [3] Adachi M., Comparison of the INDO/S and the CNDO/S Method for the Absorption Wavelength Calculation of Organic Dyes / Adachi M., Nakamura S. // Dyes Pigm. – 1991. – V. 17. – P. 287-296