

01;05

Изменение электронного спектра при упругой плоской деформации графена

© M.J. Majid, С.С. Савинский

University of Basrah/IRAQ-Basrah

Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия

E-mail: savinsky@uni.udm.ru

Поступило в Редакцию 11 января 2011 г.

Теоретически исследуется энергетический спектр π -электронов графена в зависимости от величины упругой деформации, представляющей собой двумерное „растяжение–сжатие“ графеновой плоскости либо „сдвиг“ при произвольных направлениях деформации относительно элементов симметрии.

Плоская молекулярная углеродная структура графена [1] привлекает к себе внимание благодаря ряду уникальных свойств: высокой подвижности носителей тока, механической прочности, химической инертности, оптической прозрачности. В литературе обсуждаются многочисленные возможные технологические применения графена как газового сенсора, наномеханического резонатора, устройства для хранения водорода, элемента наноэлектронных либо оптоэлектронных устройств и т.д.

Электронные свойства графена могут быть поняты из особенностей sp^2 -гибридизации σ -состояний, ответственных за химические связи атомов углерода с ближайшими соседями, и π -состояний электронов, определяющих проводящие свойства. В настоящее время достаточно точно установлено: графен является бесщелевым полупроводником с линейным законом дисперсии носителей вблизи уровня Ферми. Последнее обстоятельство является препятствием для технологического использования графенового листа в качестве элемента наноэлектронных устройств. Одним из способов устранить данное препятствие, т.е. создать для графена условия возникновения в электронном спектре энергетической щели, является использование графеновой полосы, в которой поперечное квантование импульса приводит к энергетической

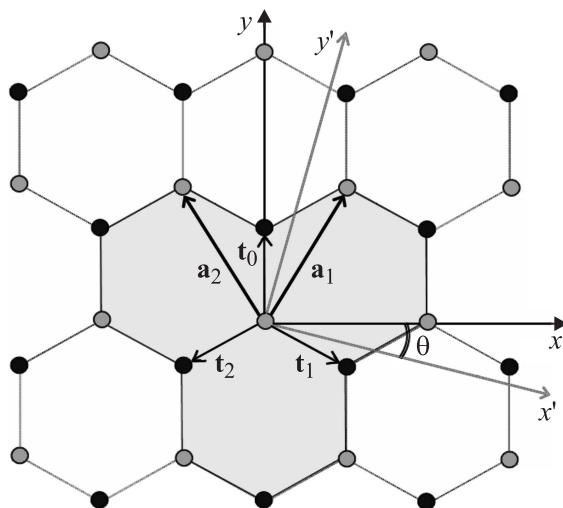


Рис. 1. Атомная структура графена.

щели в электронном спектре. Другой способ заключается в изменении атомной симметрии путем деформации либо реконструкции графеновой плоскости, данный вопрос изучался теоретически в случае простейших деформаций в работах [2–5], в работах [6,7] рассмотрена конечная графеновая полоса при упругой деформации. Нами, в дополнение к указанным работам, теоретически изучено изменение электронной структуры при деформациях типа „растяжение–сжатие“ графеновой плоскости и „сдвиг“ при произвольных направлениях деформации относительно элементов симметрии.

На рис. 1 показана атомная структура графена, \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 — базисные векторы элементарной ячейки; t_0 , t_1 и t_2 — векторы, соединяющие выбранный (нулевой) атом с ближайшими соседями. Выбор системы координат (x, y) на рисунке соответствует ориентации графенового листа относительно координатных осей типа „зигзаг“, система координат (x', y') на рисунке соответствует произвольной ориентации координатных осей относительно графенового листа, в частности угол $\theta = \pi/6$ соответствует случаю ориентации типа „кресло“.

Двумерная упругая деформация в графене определяется через тензор деформации, который можно представить в виде матрицы

$$\hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} \end{pmatrix},$$

где компоненты ε_{xx} и ε_{yy} определяют одноосные деформации в направлении координатных осей, $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx}$ определяют деформацию сдвига. Положительные значения ε_{xx} или ε_{yy} соответствуют деформации удлинения, отрицательные значения соответствуют деформации сжатия. Для произвольно выбранного вектора \mathbf{a} на недеформированной графеновой плоскости деформация приводит к преобразованию вектора:

$$\mathbf{a} \rightarrow (1 + \hat{\varepsilon}) \cdot \mathbf{a}, \quad (1)$$

соответственно векторы, показанные на рис. 1, при деформации преобразуются согласно (1). Изменение базисных векторов $\mathbf{a}_1(a_{1x}, a_{1y})$ и $\mathbf{a}_2(a_{2x}, a_{2y})$ при деформации приводит графен к новой двумерной кристаллической структуре, изменению точечной и пространственной группы симметрии, изменению обратной решетки и зоны Бриллюэна. Общая задача об упругой деформации кристаллических структур и изменении электронного спектра, связанного с деформацией, рассмотрена в книге [8].

Для исследования электронного спектра графена нами используется гамильтониан π -электронов в приближении сильной связи, матричные элементы которого в базисе атомных функций определяются через параметрические функции. В рассматриваемом приближении энергия π -электронов может быть представлена в виде

$$E(k_x, k_y) = \pm \left| \beta_0 + \beta_2 \exp(-i(k_x a_{1x} + k_y a_{1y})) + \beta_1 \exp(-i(k_x a_{2x} + k_y a_{2y})) \right|, \quad (2)$$

где $\beta_{0,1,2}$ — матричные элементы оператора Гамильтониана, построенные на атомных волновых функциях, определяющие амплитуды перехода электрона между атомами — ближайшими соседями. Нумерация нижних индексов матричных элементов $\beta_{0,1,2}$ в (2) соответствует переходам π -электронов между атомами вдоль направлений векторов \mathbf{t}_0 , \mathbf{t}_1 , \mathbf{t}_2 (рис. 1); $\mathbf{k}(k_x, k_y)$ — квазиволновой вектор. Впервые теоретическая задача о спектре электронов уединенной графитовой плоскости —

графене решена в приближении сильной связи в 1947 г. [9] и формула (2) фактически приведена в этой работе. Используемое приближение для вычисления спектра электронов (2) предполагает учет матричных элементов оператора Гамильтона для атомов, расположенных в первой координационной сфере, и малость матричных элементов во второй и дальних координационных сферах. Кроме того, формула (2) справедлива в пренебрежении взаимодействия σ - и π -электронов.

В случае недеформированного графена симметрия атомной плоскости, связанная с поворотной осью C_3 и зеркальными плоскостями, проходящими через поворотную ось, приводит к равенству матричных элементов $\beta_0 = \beta_1 = \beta_2$, в результате формула для спектра π -электронов (2) упрощается. При упругой деформации графена поворотная ось симметрии C_3 исчезает и матричные элементы $\beta_0, \beta_1, \beta_2$ в общем случае не равны между собой. Особый случай представляет деформация графена вдоль направления оси Ox системы координат (ориентация „зигзаг“), как на рис. 1, и деформация вдоль направления оси Ox' при $\theta = \pi/6$ (ориентация „кресло“). При деформации вдоль направления оси Ox у графена сохраняется зеркальная плоскость симметрии yz в результате $\beta_0 \neq \beta_1 = \beta_2$ („зигзаг“), при деформации вдоль направления оси Ox' сохраняется зеркальная плоскость $x'y'$ („кресло“) и $\beta_1 \neq \beta_0 = \beta_2$.

Предположительно, в графене матричные элементы $\beta_0, \beta_1, \beta_2$ зависят от расстояния между атомами и в линейном приближении для малых деформаций они могут быть определены через значения этих элементов и их первых производных в случае равновесных расстояний между атомами в недеформированном графене. В литературе для графена используются различные параметрические функции, определяющие зависимость матричных элементов от расстояний между атомами, среди них степенные [5] и экспоненциальные [2] функции, мы используем параметрические функции из работы [2]

$$\beta_i = \beta e^{-3.37(l_i/a_0-1)},$$

где индекс $i = 0, 1, 2$, a_0 — равновесное расстояние между атомами, $l_i = |t_i|$ — расстояние между ближайшими атомами, энергетический параметр $\beta = 2.7$ eV.

При упругой деформации графена спектр электронов, определяемый из (2), претерпевает трансформацию, связанную с изменением матричных элементов и базисных векторов прямой и обратной решеток.

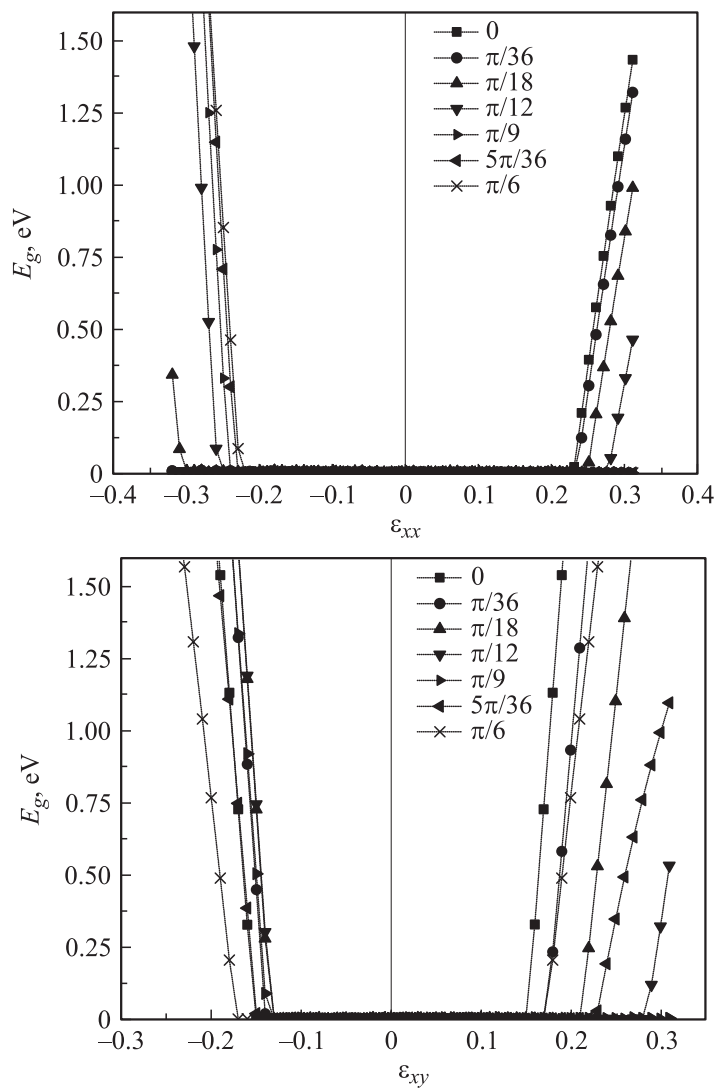


Рис. 2. Зависимость ширины запрещенной щели графена от продольной и поперечной деформации.

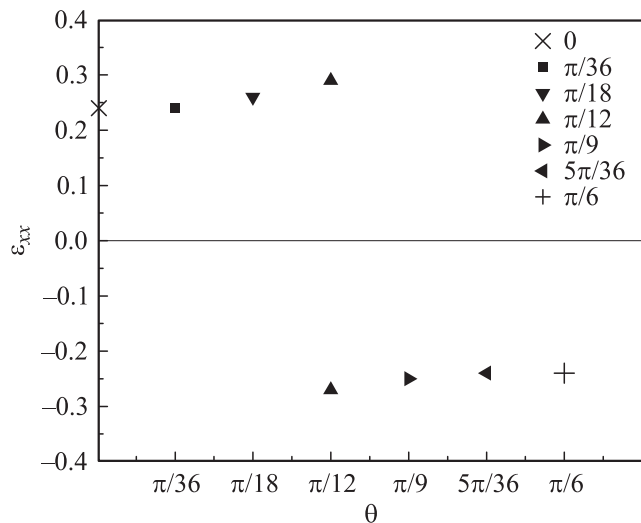


Рис. 3. Зависимость пороговой деформации от угла θ в случае одноосной деформации.

На рис. 2 представлены зависимости энергетической щели графена от величины деформации для различных ориентаций системы координат, определяемой углом θ . При численных расчетах рассматривались состояния π -электронов в зоне Бриллюэна, определялись состояния, в которых энергетическое расстояние между ветвями спектра (2) минимально, что и позволило рассчитать величину энергетической щели. Для упругих деформаций, представляющих собой одноосное растяжение–сжатие в случае конфигурации „зигзаг“, энергетическая щель возникает при $\epsilon_{xx} > 0.24$ (этот случай был отмечен в работе [2]), для одноосной деформации конфигурации „кресло“ энергетическая щель возникает при $\epsilon_{xx} < -0.24$. Результаты численного расчета энергетической щели в зависимости от величины поперечной деформации для разных углов θ представлены на левом рис. 2. При численных расчетах предполагалась связь между диагональными компонентами тензора деформации $\epsilon_{xx} = -\nu\epsilon_{yy}$, где ν — коэффициент Пуассона графена, значение которого в литературе принимается равным коэффициенту Пуассона кристаллического графита для соответствующих деформаций

вдоль атомных плоскостей, в наших расчетах данный коэффициент полагался равным 0.165 [2]. На рис. 3 представлены численные данные пороговой деформации графена, при которой возникает энергетическая щель в спектре электронов в зависимости от угла θ .

В случае упругой деформации, представляющей собой чистый сдвиг, энергетическая щель возникает при $|\varepsilon_{xy}| > 0.16$ в конфигурации „зигзаг“ и $|\varepsilon_{xy}| > 0.18$ в конфигурации „кресло“, на правом рис. 2 показана численно рассчитанная зависимость энергетической щели от угла θ .

Таким образом, в работе для приближения сильной связи с параметрическими матричными элементами оператора Гамильтона, зависящими от расстояния между атомами, приведены численные данные величины энергетической щели в зависимости от компонент тензора деформации. Показано, что образование энергетической щели в спектре электронов графена возникает для деформации ~ 0.15 и носит пороговый характер для различных направлений деформации.

Список литературы

- [1] *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A.* // Science. 2004. V. 306. P. 666–669.
- [2] *Pereira M., Castro A.N.* // Neto-Phys. Rev. (B). 2009. N 80. P. 045401 (1–8).
- [3] *Giulio Cocco, Emiliano Cadelano, Luciano Colombo* // Phys. Rev. (B). 2010. V. 81. P. 241412 (1–4).
- [4] *Seon-Myeong Choi, Seung-Hoon Jhi, Young-Woo Son* // Phys. Rev. (B). 2010. V. 81. P. 081407 (1–4).
- [5] *Yang Li, Xiaowei Jiang, Zhongfan Liu Zhirong* // Nano Research. 2010. V. 3. N 8. P. 545–556.
- [6] *Gui Gui, Jin Li, Jianxin Zhong* // Phys. Rev. (B). 2009. V. 80. P. 167402 (1–2).
- [7] *Young-Woo Son, Marvin L., Cohen, Steven G. Louie* // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. P. 216803 (1–4).
- [8] *Бир Г.Л., Пикус Г.Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1972. 584 с.
- [9] *Wallace P.K.* // Phys. Rev. 1947. 71. P. 622–634.