

Диэлектрическая щель в нанолентах из графана

© Л.А. Опенов[†], А.И. Подливаев

Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“,
115409 Москва, Россия

(Получена 16 июня 2010 г. Принята к печати 9 ноября 2010 г.)

Теоретически рассчитана величина диэлектрической щели E_g в нанолентах из графана—монослоя графена, полностью насыщенного водородом с обеих сторон. Показано, что E_g возрастает при уменьшении ширины наноленты и практически не зависит от атомной структуры ее границ (зигзагообразные или кресельные).

Большое внимание, уделяемое в последние годы графену (graphene) — гексагональному монослою атомов углерода, — во многом объясняется перспективой его использования в нанoeлектронике [1]. Однако для большинства практических приложений (например, полевые транзисторы) требуются материалы с достаточно большой запрещенной зоной E_g , тогда как графен представляет собой бесщелевой полупроводник. Для перевода графена в диэлектрическое состояние было, в частности, предложено [2] вырезать из него узкие полоски (наноленты), что приводит к увеличению E_g до ~ 0.5 эВ при ширине наноленты $w \approx 10$ нм [3,4]. Недостатком этого способа диэлектризации графена является сложность контроля величины E_g , которая очень чувствительна как к ширине наноленты, так и к структуре ее границ, существенно различаясь для зигзагообразных (zigzag) и кресельных (armchair) конфигураций граничных атомов.

В этой ситуации можно попытаться использовать в качестве диэлектрических компонентов наноструктур не графен, а графан (graphane) — недавно предсказанный [5] и вскоре синтезированный [6] квазидвумерный углеводородный материал, представляющий собой монослой графена, полностью насыщенный водородом с обеих сторон. Графан, в отличие от графена, является широкозонным диэлектриком с $E_g \approx 5$ эВ [7,8]. Поскольку в нанoeлектронных приборах графановые элементы (например, все те же наноленты) могут иметь размеры $\sim (1-10)$ нм, то важно знать зависимость E_g от ширины w таких нанолент. Численный расчет этой зависимости и составляет предмет данной работы.

Мы использовали неортогональный метод сильной связи, предложенный в работе [9] для углеводородных систем и хорошо описывающий электронные характеристики как небольших кластеров (например, кубана C_8H_8 [10–12] и метилкубана C_9H_{10} [13]), так и макроскопических систем [9]. По точности он практически не уступает первопринципным методам, но требует гораздо меньших затрат компьютерных ресурсов. Ранее мы с успехом использовали его при моделировании термической десорбции водорода из графана [14] и эффекта спонтанной регенерации границы раздела графен/графан при ее разупорядочении [15]. Для диэлектрической щели в графане этот метод дает $E_g = 5.34$ эВ — в хорошем соответствии с величиной $E_g = 5.4$ эВ, полученной путем расчетов из первых принципов [8]. Распределение

плотности электронных состояний $g(\varepsilon)$ по энергии ε в валентной зоне и зоне проводимости графана приведено на рис. 1.

Наноленты из графана мы моделировали сверхъядчейками с периодическими граничными условиями по одному направлению (x) и свободными — по другому (y). Примеры таких сверхъядчек для нанолент с зигзагообразными и кресельными границами приведены на рис. 2. Ширина нанолент w определялась как расстояние между атомами углерода, максимально отстоящими друг от друга по оси y . Величина E_g полагалась равной разности энергий нижней незаполненной (LUMO) и верхней заполненной (HOMO) молекулярных орбиталей. При каждом значении w мы проводили расчеты для сверхъядчек с различной длиной L вдоль оси x , добиваясь неизменности E_g по мере увеличения L с относительной точностью не менее 10^{-4} . Как правило, для этого было достаточно $L = 10-15$ Å.

Мы обнаружили, что при уменьшении w вид плотности состояний в валентной зоне и в зоне проводимости (рис. 1) изменяется очень мало, тогда как E_g монотонно увеличивается (см. рис. 3). При этом зависимо-

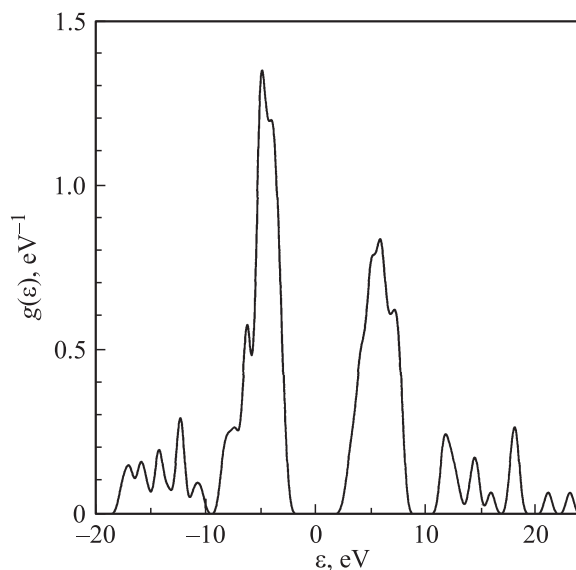


Рис. 1. Плотность электронных состояний $g(\varepsilon)$ в графане (в расчете на спин и на элементарную ячейку). Результаты для сверхъядчейки $C_{60}H_{60}$ с периодическими граничными условиями по обоим направлениям. За начало отсчета энергии принят уровень Ферми.

[†] E-mail: LAOpenov@mephi.ru

сти E_g от w в нанолентах с зигзагообразными и кресельными границами (в отличие от графеновых нанолент) практически не различаются, т.е. величина E_g определяется главным образом не структурой границ наноленты, а ее шириной. Поэтому для нанолент с другим типом границ [16,17] можно ожидать такой же связи E_g и w .

Анализ результатов расчета показал, что зависимость $(E_g - E_{g0})^{-1}$ от w (здесь $E_{g0} = 5.34$ эВ — щель в графене, т.е. при $w \rightarrow \infty$) очень хорошо аппроксимируется квадратичным полиномом, гораздо лучше, чем полином того же порядка аппроксимирует зависимость E_g от w^{-1} . Определение коэффициентов этого разложения методом наименьших квадратов приводит к следующей формуле:

$$E_g = E_{g0} + \frac{3.16}{1 + 0.34w + 0.044w^2}, \quad (1)$$

где E_g измеряется в эВ, а w — в Å. Видно, что при $w > 10$ Å разность $E_g - E_{g0}$ с ростом w быстро умень-

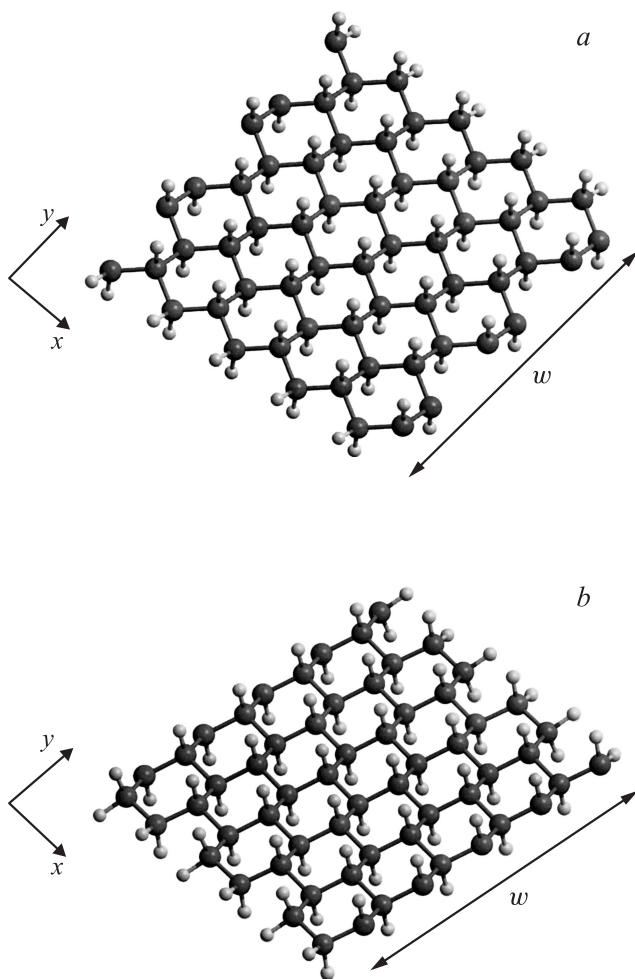


Рис. 2. Сверхъячейки $C_{60}H_{70}$ (a) и $C_{60}H_{72}$ (b), моделирующие графеновые наноленты с зигзагообразными и кресельными границами соответственно. Большие шары — атомы углерода, малые шары — атомы водорода. Ширина наноленты $w = 11.64$ (a) и 11.34 Å (b).

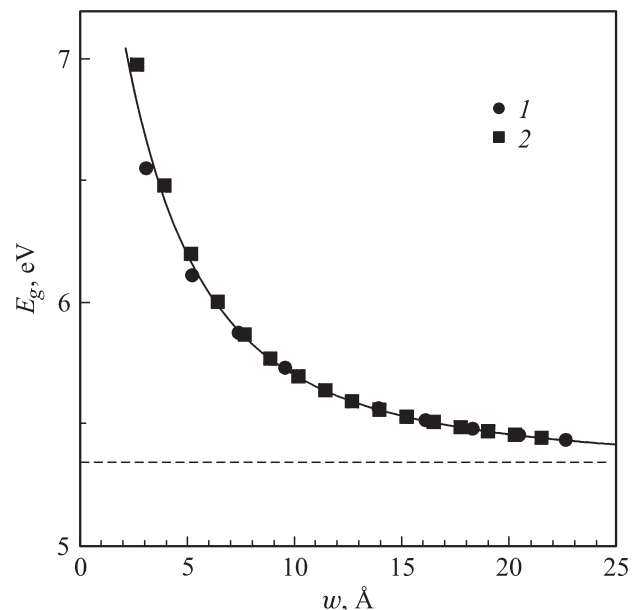


Рис. 3. Зависимость диэлектрической щели E_g от ширины w графеновых нанолент с зигзагообразными (1) и кресельными (2) границами. Сплошная линия — аппроксимация по формуле (1). Штриховая линия отвечает величине $E_{g0} = 5.34$ эВ в графене (при $w \rightarrow \infty$).

шается по закону $E_g - E_{g0} \propto w^{-2}$, поэтому отличие E_g от E_{g0} становится существенным только для очень узких нанолент.

В заключение заметим, что систему чередующихся графеновых и графеновых нанолент (а также более сложные конфигурации графена и графана) можно получить путем селективной сорбции водорода на графен. Если при этом поперечные размеры областей графана составляют ~ 10 Å, то для количественного определения характеристик соответствующих наноструктур следует обязательно учитывать факт увеличения диэлектрической щели таких областей по сравнению с ее значением в собственно графене (квиздвумерном материале, макроскопическом по двум направлениям).

Авторы признательны М.М. Маслову за помощь в работе и обсуждение результатов.

Работа выполнена в рамках реализации проектов ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 годы (Государственный контракт № П416) и РФФИ (№ 09-02-00701-а).

Список литературы

- [1] A.K. Geim, K.S. Novoselov. *Nature Mater.*, **6** (3), 183 (2007).
- [2] Л.А. Чернозатонский, П.Б. Сорокин, Е.Э. Белова, Й. Брюнинг, А.С. Федоров. *Письма ЖЭТФ*, **85** (1), 84 (2007).
- [3] Y.-W. Son, M.L. Cohen, S.G. Louie. *Phys. Rev. Lett.*, **97** (21), 216 803 (2006).
- [4] M.Y. Han, B. Özyilmaz, Y. Zhang, P. Kim. *Phys. Rev. Lett.*, **98** (20), 206 805 (2007).

- [5] J.O. Sofo, A.S. Chaudhari, G.D. Barber. *Phys. Rev. B*, **75** (15), 153 401 (2007).
- [6] D.C. Elias, R.R. Nair, T.M.C. Mohiuddin, S.V. Morozov, P. Blake, M.P. Halsall, A.C. Ferrari, D.W. Boukhvalov, M.I. Katsnelson, A.K. Geim, K.S. Novoselov. *Science*, **323** (5914), 610 (2009).
- [7] Y. Lin, F. Ding, B.I. Yakobson. *Phys. Rev. B*, **78** (4), 041 402 (2008).
- [8] S. Lebegue, M. Klintonberg, O. Eriksson, M.I. Katsnelson. *Phys. Rev. B*, **79** (24), 245 117 (2009).
- [9] M.M. Maslov, A.I. Podlivaev, L.A. Openov. *Phys. Lett. A*, **373** (18–19), 1653 (2009).
- [10] Л.А. Опенев, А.И. Подливаев. *ФТТ*, **50** (6), 1146 (2008).
- [11] М.М. Маслов, Д.А. Лобанов, А.И. Подливаев, Л.А. Опенев. *ФТТ*, **51** (3), 609 (2009).
- [12] М.М. Маслов. *Хим. физика*, **28** (4), 43 (2009).
- [13] М.М. Маслов. *Хим. физика*, **29** (2), 92 (2010).
- [14] Л.А. Опенев, А.И. Подливаев. *Письма ЖТФ*, **36** (1), 69 (2010).
- [15] Л.А. Опенев, А.И. Подливаев. *Письма ЖЭТФ*, **90** (6), 505 (2009).
- [16] M. Ezawa. *Phys. Rev. B*, **73** (4), 045 432 (2006).
- [17] R. Balog, B. Jørgensen, L. Nilsson, M. Andersen, E. Rienks, M. Bianchi, M. Fanetti, E. Lægsgaard, A. Baraldi, S. Lizzit, Z. Slijvančanin, F. Besenbacher, B. Hammer, T.G. Pedersen, P. Hofmann, L. Hornekær. *Nature Mater.*, **9** (4), 315 (2010).

Редактор Л.В. Шаронова

Dielectric gap in graphane nanoribbons

L.A. Openov, A.I. Podlivaev

National Research Nuclear University „MEPhI“,
115409 Moscow, Russia

Abstract Theoretically calculated is the dielectric gap E_g in nanoribbons of graphane — a graphene monolayer fully saturated with hydrogen on both sides. It is shown that the value of E_g increases as the nanoribbon width decreases and is almost independent on the atomic structure of nanoribbon edges (zigzag or armchair).