

УДК 538.958

DOI: 10.17223/00213411/62/12/88

Н.Г. БОБЕНКО¹, Б.В. ЛОБАНОВ^{1,2}, Н.В. МЕЛЬНИКОВА², А.Н. ПОНОМАРЕВ¹

СПЕКТР ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МАЛЫХ ФРАГМЕНТОВ УГЛЕРОДНОЙ ПЛОСКОСТИ С ТОПОЛОГИЧЕСКИМИ ДЕФЕКТАМИ *

В модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций получены энергетические спектры малых фрагментов углеродной плоскости как идеальных, так и содержащих топологические дефекты (вакансии, деформация Стоуна – Уэльса). Смоделированы спектры оптического поглощения идеальных и дефектных фрагментов, проанализировано изменение формы кривой поглощения с ростом концентрации вакансий. Получены зависимости величины энергетической щели от типа конфигурации и концентрации дефектов.

Ключевые слова: углеродная плоскость, топологические дефекты, спектр оптического поглощения.

Введение

Графен и родственные ему углеродные материалы (углеродные нанотрубки, наноленты) обладают уникальными свойствами [1–5], которые существенным образом зависят от особенностей атомной структуры углеродной системы. Наличие в структуре тех или иных дефектов может привести к заметному изменению характеристик углеродных наноматериалов, что может быть использовано при создании на их основе чувствительных химических сенсоров [6]. Кроме того, зависимость свойств от дефектности структуры открывает возможность получения материалов с заданными характеристиками [7].

Особый интерес представляют плоские углеродные системы, состоящие из сравнительно небольшого числа атомов, – графеновые квантовые точки, флейки, графеновые наноленты. Электронные свойства таких систем особенно чувствительны к структуре. Их исследованию в зависимости от формы и размера системы посвящены многие теоретические работы. Например, в [8] выполнены первопринципные расчеты ширины запрещенной зоны графеновых нанолент различной ширины. В [9, 10] также из первых принципов проведены расчеты оптических свойств нанолент, в том числе спектров оптического поглощения. Исследованию электронных свойств флейков с помощью функционала электронной плотности посвящены работы [11–13]. Однако в имеющихся теоретических работах зачастую отсутствует сравнение полученных результатов с экспериментальными данными в связи со сложностями синтеза и выделения фрагментов углеродной плоскости, имеющих требуемую структуру.

Известно, что для π -электронной системы углеродной плоскости характерно сильное внутри-узельное кулоновское взаимодействие [14, 15]. В связи с этим для теоретического изучения свойств графена и его фрагментов активно применяется модель Хаббарда [16–19]. Однако исследования графена (как идеального, так и с различными дефектами), опирающиеся на данную модель, в основном направлены на изучение магнитных свойств. Помимо этих свойств, подсистема π -электронов также вносит определяющий вклад в оптические свойства. Учитывая возможность применения фрагментов углеродной плоскости при создании оптоэлектронных устройств [20], исследование влияния дефектов структуры на оптические свойства может оказаться полезным.

Таким образом, целью настоящей работы является изучение электронной структуры малых фрагментов углеродной плоскости с топологическими дефектами и установление зависимости спектра оптического поглощения, а также щели между верхней заполненной и нижней свободной молекулярной орбиталью (ВЗМО – НСМО) от типа конфигурации и концентрации дефектов.

1. Постановка задачи

В качестве исследуемых систем выбраны малые фрагменты углеродной плоскости, состоящие из 44, 66 и 90 атомов. Идеальная структура данных фрагментов представлена на рис. 1. При

* Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-32-50004\19 в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 гг., направление III.23.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>