

ЭФФЕКТ ВЛИЯНИЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ *d*-ЭЛЕКТРОНОВ НА СПИНОВУЮ ПОЛЯРИЗАЦИЮ ВЕРТИКАЛЬНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ НАНОПРИСТОГО БИГРАФЕНА*

Ю.А. Мельчакова¹, П.В. Аврамов²

¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*

² *Кёнбукский национальный университет, г. Тегу, Республика Корея*

Рассмотрен новый композит на основе нанопористого биграфена конфигурации АВ (NPBG(AB)). Исследован эффект влияния типа атома-допанта на электронные свойства гетероструктуры, а также на его положение адсорбции. Предложенный эффект рассматривался на примере Mn@NPBG(AB) и Ca@NPBG(AB) для корректной оценки влияния типа заполнения валентного уровня без воздействия эффекта локального поля, вызванного структурными особенностями NPBG(AA).

Ключевые слова: биграфен, метод функционала плотности, адсорбция, переходные металлы, спиновая поляризация.

Введение

Снятие спинового вырождения в наноразмерных кристаллах и гетероструктурах является фундаментальной задачей физики конденсированного состояния [1]. Недавно в вертикальных двумерных гетероструктурах состава Bi₂Se₃/TMD (TMD = MoS₂, MoSe₂, WS₂, MoSe₂) экспериментально была обнаружена двумерная сверхрешетка электронного газа, локализованная на поверхности интерфейса [1]. Установлено, что регулярный паттерн распределения электронного газа определяется межслоевыми потенциалами, определяемыми атомными муаровыми сверхрешетками. Другая двумерная сверхрешетка квантовых антиточек, определяемая контролируемым образованием пор в двухслойном графене, была теоретически предсказана [2, 3] и позже обнаружена экспериментально [4–6].

Низкоразмерные 2D и 1D квантовые ансамбли наноразмерных сильнополяризованных структурных дефектов (например, нанопоры с оборванными или сильно искаженными химическими связями) могут рассматриваться как перспективные регулярные или стохастические решетки с анизотропными потенциалами, перпендикулярными основной плоскости 2D-материала. В частности, сочетание анизотропии с отсутствием инвариантности инверсии пространства (SII) препятствует аннулированию потенциала в окрестности нанопоры по причинам симметрии. Создание нанопор в низкоразмерных материалах является перспективным способом получения экстремальных локальных электрических полей за счет достижения рекордного значения величины кривизны пор. Нанопористые материалы (NPM) и гетероструктуры на основе NPM с различными атомами, адсорбированными в их порах, представляют большой интерес для создания квантовых материалов и катализа. Чистый и допированный нанопористый биграфен (NPBG) могут стать перспективными наноматериалами для снятия спинового вырождения в двумерных квантовых материалах благодаря чрезвычайно высокой кривизне пор, их сильной поляризации и анизотропии потенциала, перпендикулярного основной плоскости двумерного материала [7].

В настоящее время невозможно предсказать потенциальные свойства объекта, принимая во внимание только исходные свойства его объемного аналога. Одним из доступных и популярных методов оценки таких изменений является использование *ab initio* расчетов электронной структуры с использованием метода функционала плотности (DFT) с периодическими граничными условиями (PBC). В текущей работе в рамках метода DFT был исследован нанопористый биграфен путем дизайна нанорешеток АВ упаковки. Было обнаружено, что в отличие от пор образованных NPBG AA-конфигурации [7], характеризующихся замкнутой структурой с идеальной трехкратной координацией, края нанопор NPBG АВ характеризуются пониженной симметрией, что приводит к образованию меньшего числа координационных связей с адсорбированными в пространство поры элементами. Электронные свойства определяются формой и размером пор, что позволяет созда-

* Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № 0721-2020-0033.

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>