

Влияние гидрирования и фторирования на структуру и свойства муарового биграфена

Демин В.А.¹, Квашнин Д.Г.¹, Чернозатонский Л.А.¹

victordemin88@gmail.com

¹ ИБХФ РАН им. Н.М. Эмануэля, Москва, Россия

В 2009г. в работе [1] была предложена структура, которая может быть получена из AA- или AB-биграфена путем его помещения в водородную плазму. В такой слоистой структуре каждый углеродный атом sp^3 гибридизован, причем С атомы одной подрешетки ковалентно связаны с атомами водорода, а второй – образуют межслоевые С-С связи. Такая структура может быть представлена как тончайший алмаз и была названа «диаман» Dn .

Помимо AA- и AB- упаковок, слои биграфена могут быть повернуты друг относительно друга на угол θ . При адсорбции легких атомов на поверхность такого биграфена также будет происходить образование межслоевых связей с формированием диамана $Dn\theta$ с новой структурой. В докладе будут представлены результаты DFT моделирования структуры и свойств муаровых диаманов, полученных на основе биграфена с $\theta=21.8^\circ$ и 27.8° [2].

Особенности структуры свернутого биграфена приводят к тому, что в $Dn\theta$ межслоевые связи отклонены от нормали к поверхности пленки. Напряженность структуры приводит к тому, что муаровые диаманты обладают большей запрещенной зоной, чем обычные Dn на основе AA- и AB-биграфена. Величина запрещенной зоны зависит от типа адсорбированных атомов. Были получены результаты для гидрированных, фторированных диамантов, а также Янус-структур, в которых одна поверхность покрыта атомами водорода, а вторая – атомами фтора. Наибольшее значение $E_g=4.1$ эВ соответствует фторированному диаманту с $\theta=27.8^\circ$. Полученные результаты показывают энергетическую стабильность таких муаровых диамантов.

Расчеты были выполнены с использованием ресурсов МСЦ РАН. Работа выполнена в рамках проекта РНФ №24-22-00444.

Ссылки

1. L. A. Chernozatonskii, P. B. Sorokin, A. G. Kvashnin, and D. G. Kvashnin, JETP Lett. (2009) 90, 134.
2. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and D. G. Kvashnin, Appl. Phys. Lett. (2020) 117, 253104.