# 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 C атомы одной подрешетки ковалентно связаны с атомами водорода, а второй – образуют межслоевые C-C 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 Dnθ с новой структурой. В докладе будут представлены результаты DFT моделирования структуры и свойств муаровых диаманов, полученных на основе биграфена с θ=21.8° и 27.8° [2].

Особенности структуры свернутого биграфена приводят к тому, что в Dnθ межслоевые связи отклонены от нормали к поверхности пленки. Напряженность структуры приводит к тому, что муаровые диаманы 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 диаманов, а также Янус-структур, в которых одна поверхность покрыта атомами водорода, а вторая – атомами фтора. Наибольшее значение Eg=4.1 эВ соответствует фторированному диаману с θ=27.8°. Полученные результаты показывают энергетическую стабильность таких муаровых диаманов.

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.