

Магнитные и электронные свойства δ -графенов

Синица А.С.^{1,2}, Лебедева И.В.^{3,4,5}, Вырко С.А.⁶, Попов А.М.⁷, Книжник А.А.^{1,2},
Поклонский Н.А.⁶

alexsinitsa91@gmail.com

¹ НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия

² ООО “Лаборатория Кинтех”, Москва, Россия

³ Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology (ICN2), Барселона, Испания

⁴ CIC nanoGUNE BRTA, Сан-Себастьян, Испания

⁵ Simune Atomistics, Сан-Себастьян, Испания

⁶ Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

⁷ Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

Графины являются двумерной (2D) аллотропной модификацией углерода, структура которых, в отличие от графена, состоит из комбинации sp - и sp^2 -гибридизованных атомов [1]. В дополнение к предложенным ранее α -, β - и γ -графинам в настоящей работе предложена новая структура, названная δ -графин, в которой шестиугольники соединены двойными углеродными цепочками. С использованием метода функционала плотности исследованы структура, электронные и магнитные свойства δ -графенов, содержащих 6–10 атомов в цепочках. Показано, что δ -графины являются полупроводниками. В δ -графинах с чётным числом атомов в цепочках магнетизма не наблюдается и имеется прямая запрещённая зона ~ 1 эВ в точке K зоны Бриллюэна. В δ -графинах с нечётным числом атомов в цепочке наблюдается ряд магнитных состояний с одинаковым или противоположным направлением магнитных моментов в соседних цепочках. В таких структурах выгодно образование связей между цепочками, что эффективно меняет чётность числа атомов в цепочках. Это приводит к появлению меньших, но конечных запрещённых зон в точках Γ или M . Обнаруженная связь между структурой и магнитными свойствами делает δ -графины перспективными для применения в логических элементах нанoeлектроники и оптоэлектроники. Предложен синтез δ -графенов при облучении электронами в ПЭМ монослоя углеводородов, содержащих сегменты аценов.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 23-42-10010, <https://rscf.ru/en/project/23-42-10010/> и ГПНИ «Конвергенция-2030» Республики Беларусь.

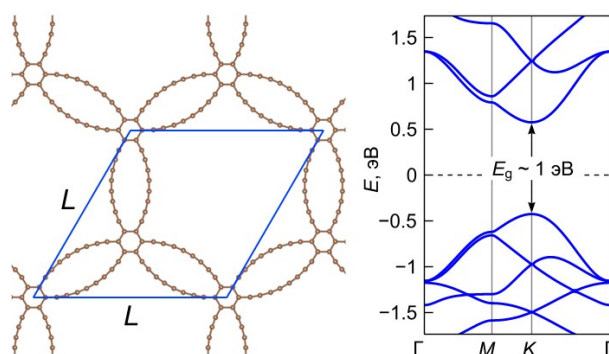


Рис. 1. Атомная структура δ -графина из шестиугольников, соединенными двойными 8-атомными углеродными цепочками (слева). Элементарная ячейка обозначена сплошными линиями. Зонная структура данного δ -графина (справа).

Ссылки

1. R.H. Baughman, H. Eckhardt, M. Kertesz, J. Chem. Phys. (1987) **87**, 6687.