

18,12

Модельные оценки свойств флюорографена

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergei_Davydov@mail.ru

Поступила в Редакцию 30 августа 2020 г.

В окончательной редакции 30 августа 2020 г.

Принята к публикации 2 сентября 2020 г.

Методом функций Грина в приближении сильной связи получены аналитические выражения для дисперсии электронных зон. Предложена параболическая аппроксимация спектра, в рамках которой определены значения эффективной массы носителей и квантовой емкости. С использованием моделей Костера–Слэтера и Халдейна–Андерсона рассмотрена задача о локальных состояниях моно- и бивакансии. Приведены оценки характерных фононных частот и упругих постоянных. Полученные результаты сопоставлены с данными расчетов других авторов.

Ключевые слова: эффективная масса, квантовая емкость, вакансии, фононные частоты, упругие постоянные.

DOI: 10.21883/FTT.2021.01.50416.179

1. Введение

Флюорографен (фтористый графен), представляет собой графен, каждая p_z -орбиталь которого насыщена атомами фтора, расположенными в чередующемся порядке по обеим сторонам углеродной двумерной (2D) решетки (плоскость (x, y)), был, как и графен, сперва теоретически предсказан [1,2] и вскоре синтезирован [3–5]. Свойства флюорографена — полупроводника с широкой запрещенной зоной ($E_g \sim 3$ eV [3]) описаны в обзорных работах [6,7]. Что касается теории, то все работы по этой тематике являются численными расчетами, использующими различные варианты DFT (density functional theory). Имея в виду возможное использование флюорографена в приборных структурах, хотелось бы иметь простую аналитическую теорию, описывающую его свойства. В работе [8] нами были предложены достаточно простые схемы расчета электронных и фононных характеристик графана, которую мы используем здесь и для флюорографена.

2. Электронный спектр

Рассмотрим димер C–F, в котором взаимодействие между атомами углерода и фтора описывается матричным элементом t_{\perp} . Соответствующие функции Грина такого димера имеют вид

$$G_{C(F)}(\omega) = \frac{g_{C(F)}(\omega)}{1 - g_C(\omega)g_F(\omega)t_{\perp}^2}, \quad (1)$$

где ω — энергетическая переменная, $g_{C(F)}(\omega) = (\omega - \varepsilon_{c(f)} + i0^+)^{-1}$ — функция Грина изолированного атома углерода (фтора) с энергией p -орбитали $\varepsilon_{c(f)}$. Теперь построим из этих димеров гексагональную

2D-решетку, включив взаимодействие t между ближайшими углеродными атомами димеров. Тогда получим функции Грина флюорографена в виде

$$\tilde{G}_C(\omega, \mathbf{k}) = \frac{G_C(\omega)}{1 - G_C^2(\omega)t^2 f^2(\mathbf{k})}, \quad (2)$$

где $f(\mathbf{k}) = \sqrt{3 + 2 \cos(k_x a \sqrt{3}) + 4 \cos(k_x a \sqrt{3}) \cos(3k_y a/2)}$ (ось x направлена вдоль зигзагообразной кромки), $a = 1.58 \text{ \AA}$ [7] — расстояние между ближайшими атомами углерода, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ — волновой вектор для движения электрона в плоскости (x, y) . Легко показать [8], что электронный спектр флюорографана есть

$$E_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left(\sqrt{[|\varepsilon| + t f(\mathbf{k})]^2 + 4t_{\perp}^2} + t f(\mathbf{k}) \right) \\ = -E_4(\mathbf{k}), \quad (3)$$

$$E_2(\mathbf{k}) = E_C(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left(\sqrt{[|\varepsilon| - t f(\mathbf{k})]^2 + 4t_{\perp}^2} - t f(\mathbf{k}) \right) \\ = -E_3(\mathbf{k}) = -E_V(\mathbf{k}), \quad (4)$$

где мы положили $\varepsilon_c = -\varepsilon_f = \varepsilon$; индексы 1–4 нумеруют зоны, расположенные по убыванию их энергии, а индексы C и V отвечают соответственно зоне проводимости и валентной зоне. Характерные энергетические щели спектра можно представить в следующем виде (Γ, K, M — точки зоны Бриллюэна): $\Delta_K = E_C(K) - E_V(K) = r_0$, $r_0 = \sqrt{\varepsilon^2 + 4t_{\perp}^2}$, $\Delta_M = E_C(M) - E_V(M) = r_{2-} - 2t$, $r_{2\pm} = \sqrt{(\varepsilon \pm 2t)^2 + 4t_{\perp}^2}$, $\Delta_{\Gamma} = E_g = E_C(\Gamma) - E_V(\Gamma) = r_{3-} - 3t$, $r_{3\pm} = \sqrt{(\varepsilon \pm 3t)^2 + 4t_{\perp}^2}$ [8]. Согласно результатам расчетов [2,9–11], имеем: $E_g = 2.75 - 3.2$ eV, $\Delta_K \sim 10 - 11$ eV, $\Delta_M \sim 7 - 8$ eV. Полагая

$E_g = 3\text{ eV}$, $\Delta_K = 10\text{ eV}$, $t = 2.8\text{ eV}$, получим $\varepsilon = 2.40\text{ eV}$, $t_\perp = 4.85\text{ eV}$. Далее, как и в [8], аппроксимируем зоны (3) и (4) следующими выражениями:

$$E_C(\mathbf{k}) = -E_V(\mathbf{k}) = \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e},$$

$$E_1(\mathbf{k}) = -E_4(\mathbf{k}) = \frac{E_g}{2} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1}, \quad (5)$$

где электронные эффективные массы равны

$$m_e = \frac{4\hbar^2}{3a^2 t} \left(1 - \frac{3t - \varepsilon}{r_{3-}} \right)^{-1},$$

$$m_1 = \frac{4\hbar^2}{3a^2 t} \left(1 + \frac{3t + \varepsilon}{r_{3+}} \right)^{-1}. \quad (6)$$

Полагая длину связи С–С равной $a = 1.58\text{ \AA}$ [7], получим $m_e^* = m_e/m_0 \approx 3.1$, $m_1^* = m_1/m_0 \approx 0.8$, где m_0 — масса свободного электрона. В случае графана $m_e^* = m_e/m_0 \approx 1.9$, $m_1^* = m_1/m_0 \approx 1.2$ [8]. Отметим, что доказательства приемлемости параболической аппроксимации спектра, приведенные для графана в [8] (см. рис. 2), справедливы и в настоящем случае.

3. Квантовая емкость

Обратимся к оценке квантовой емкости флюорографена C_Q , выражение для которой удобно представить в виде [12]:

$$C_Q(V^*) = (e^2/4TS) \int_0^\infty \rho(\omega) A(\omega, V^*) d\omega,$$

$$A(\omega, V^*) = \text{sch}^2[(\omega - V^*)/2T] + \text{sch}^2[(\omega + V^*)/2T], \quad (7)$$

где $V^* = eV_{el}$ — сдвиг электронных состояний в электростатическом поле, V_{el} — внешний электростатический потенциал, e — величина заряда электрона, T — температура в энергетических единицах, S — площадь, приходящаяся на один атом углерода. В (7) предполагается, что при $V^* = 0$ химический потенциал совпадает с центром запрещенной зоны флюорографена.

В двумерных системах спектрам отвечают плотности состояний $\rho(\omega) = \text{const}$ [13]. Как и в [8], положим $\rho_C(\omega) = \rho_V(\omega) = 2/W_C$ при $E_C(\Gamma) \leq |\omega| \leq E_C(K)$, где $W_C = W_V = (3t + r_0 - r_3)/2 = 3.50\text{ eV}$ — ширина зон проводимости и валентной (модель типа „пьедестал“); $\rho_1(\omega) = \rho_4(\omega) = 2/W_1$ при $E_1(K) = E_C(K) \leq |\omega| \leq E_1(\Gamma)$, где $W_1 = W_4 = (3t + r_{3+} - r_0)/2 = 6.5\text{ eV}$. В приближении средней ширины зоны (см. подробнее [8]) при комнатной температуре получим окончательно

$$C_Q(V^*) \approx \frac{4e^2 \text{ch}(V^*/T)}{S\bar{W}} \exp(-E_g/2T). \quad (8)$$

Квантовая емкость $C_Q^0 \equiv C_Q(0) \approx (16/3\sqrt{3})(e^2/\bar{W}a^2) \times \exp(-E_g/2T)$, так что для комнатной температуры получаем $C_Q^0 = 0$ (для графена $C_Q^0 \approx 16\mu\text{F}/\text{cm}^2$ [15]); $C_Q(E_g/2) \approx (8/3\sqrt{3})(e^2/\bar{W}a^2) = 0.2\text{ mF}/\text{cm}^2$ (как и у графана [8]).

4. Локальные состояния вакансий

Перейдем теперь к оценкам электронных характеристик вакансий в флюорографене, воспользовавшись для этого моделями Костера–Слэтера и Халдейна–Андерсона [8,15]. В первой из этих моделей предполагается, что возмущение, вносимое дефектом, сосредоточено в одном узле решетки и равно V , а локальные состояния, лежащие в запрещенной зоне ($|w_l| < E_g/2$), определяются (после ряда упрощений) уравнением

$$\frac{2V}{\bar{W}} \ln \left(\frac{E_g/2 - \omega}{E_g/2 + \omega} \right) \approx 1. \quad (9)$$

Плотности состояний этих уровней $\rho_l(\omega)$ и числа их заполнения n_l при $T = 0$ равны $\rho_l(\omega) = \nu_l \delta(\omega - \omega_l)$ и $n_l = \nu_l \Theta(E_F - \omega_l)$, где $\delta(\dots)$ — функция Дирака, $\Theta(\dots)$ — функция Хэвисайда, E_F — уровень Ферми, а факторы заполнения ν_l есть

$$\nu_l \approx \frac{\bar{W} [(E_g/2)^2 - \omega^2]}{2E_g V^2}. \quad (10)$$

Свойства модели Костера–Слэтера подробно обсуждаются в [8,15]. Здесь отметим только, что в этой модели предел $|V| \rightarrow \infty$, при котором $\omega \rightarrow 0$ и $\nu_l \rightarrow 0$, соответствует наличию вакансии в матрице. При этом углеродная вакансия означает удаление димера С–Н в случае графана и димера С–F в случае флюорографена.

По данным [16], энергия одиночной углеродной вакансии в флюорографене $\omega_l^c = 0.78\text{ eV}$. Тогда из (9) получим $V^c = -2.2\text{ eV}$, а из (10) находим $\nu_l \approx 0.3$. То же значение ν_l получено в [8] для графана. В случае вакансии фтора $\omega_l^f = -0.17$ [16], так что аналогичным образом получаем $V^f = 11\text{ eV}$ и $\nu_l \approx 0$. Здесь следует, однако, отметить, что в работе [16] зонная структура флюорографена рассматривалась в многочастичном варианте DFT, в результате чего рассчитанное значение E_g в два раза превысило экспериментальную величину [3] (ситуация, типичная в такого рода расчетах — см., например, [17,18]). Так как в настоящей работе ширина запрещенной зоны принята равной 3 eV , полученные значения параметров V и ν_l нужно рассматривать лишь как достаточно грубые оценки.

Модель Халдейна–Андерсона, по сравнению с моделью Костера–Слэтера, во-первых, содержит дополнительный параметр ε_d — уровень дефекта. Во-вторых, потенциал V_d взаимодействия дефекта с матрицей принципиально отличается от возмущения V модели Костера–Слэтера: первый отвечает туннелированию

электрона между уровнем дефекта ε_d и зонными состояниями матрицы, тогда как второй описывает возмущение, вызванное заменой атома матрицы на чужеродный атом [15]. В упрощенном варианте (см. подробнее [8]) энергия дефектного состояния в запрещенной зоне ω_l определяется корнем уравнения

$$\omega - \varepsilon_d - \frac{2V_d^2}{W} \ln \left(\frac{E_g/2 - \omega}{E_g/2 + \omega} \right) \approx 0, \quad (11)$$

а фактор заполнения есть

$$v_l = \left(1 + \frac{2E_g V_d^2}{W [(E_g/2)^2 - \omega^2]} \right)^{-1}. \quad (12)$$

Положив для простоты $V_d = t$ [8] и вновь воспользовавшись значением энергетического уровня вакансии фтора $\omega_l^f = -0.17$ eV [16], получим из (12) фактор заполнения $v_l^f \approx 0.19$, а из (11) найдем $\varepsilon_d \approx -0.88$ eV.

Рассмотрим теперь ситуацию, когда удалены два атома фтора, связанные изначально с соседними атомами углерода, или бивакансию. В рамках модели Халдейна–Андерсона такую ситуацию можно представить как взаимодействующий с флюорографаном дополнительный (С–С)-димер. Функция Грина такого „примесного димера“ равна $G_{\text{dim}}(\omega) = g_d(\omega)[1 - g_d^2(\omega)]^{-1}$, где $g_d^{-1}(\omega) = \omega - \varepsilon_d - \Lambda(\omega) + i\Gamma(\omega)$ — функция Грина моновакансии [8,19]. Таким образом, энергетические уровни бивакансии определяются корнями уравнений

$$\omega - \varepsilon_d - \frac{2V_d^2}{W} \ln \left(\frac{E_g/2 - \omega}{E_g/2 + \omega} \right) \pm t \approx 0. \quad (13)$$

В результате получаем: $\omega_{l-}^f \approx -0.67$ eV, $v_{l-}^f = 0.16$; $\omega_{l+}^f \approx 0.36$ eV, $v_{l+}^f = 0.18$. Отметим, что в [20] рассматривалась принципиальная возможность использования аналогичной двухуровневой системы, созданной водородной бивакансией в графене, для квантовых вычислений.

5. Фононные частоты и упругие постоянные

Обратимся теперь к оценкам упругих и фононных характеристик флюорографана, для чего воспользуемся моделью связывающих орбиталей Харрисона [21,22]. Энергию E_b связи С–Н и соответствующую силовую константу центрального взаимодействия $k_{0\perp}$ можно представить в виде

$$E_b = 2V_2 \alpha_c^{-1} (1 - 2\alpha_c/3), \\ k_{0\perp} = 4\alpha_c V_2 (1 - 2\alpha_p^2) / a_{\perp}^2, \quad (14)$$

где V_2 — ковалентная энергия, $\alpha_c = V_2 / \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ и $\alpha_p = \sqrt{1 - \alpha_c^2}$ — ковалентность и полярность связи С–F (длина которой равна $a_{\perp} = 1.4$ Å [6]), V_3 — по-

лярная энергия (см. подробнее [21–23]). Полагая, что имеет место σ -связь p -орбиталей атомов С и F, имеем $V_2 = V_{pp\sigma} = \eta_{pp\sigma} (\hbar^2 / m_0 a_{\perp}^2)$, где $\eta_{pp\sigma} = 2.22$ [22], так что $V_2 = 8.63$ eV. Полярная энергия $V_3 = (\varepsilon_{cp} - \varepsilon_{fp})/2$, где $\varepsilon_{cp} = -11.07$ eV — энергия p -состояния углерода и $\varepsilon_{fp} = -19.87$ eV — энергия p -состояния фтора [24], равна 4.40 eV, так что $\alpha_c = 0.89$ и $\alpha_p = 0.45$. Из (14) получим $E_b = 7.89$ eV (в [3] приводится значение 5.3 eV) и $k_{0\perp} = 9.3$ eV/Å. Характерная частота нормальных колебаний атома фтора с массой M_F относительно неподвижного углеродного листа (см. подробнее [8]) равна $\Omega_{\perp} = \sqrt{k_{0\perp} / M_F} = 0.045$ eV = 364 cm^{-1} . Такая частота перекрываются с зоной акустических фононов флюорографана (от 0 до ~ 1100 cm^{-1}) [25]. В случае графана частота колебания атома водорода $\Omega_{\perp} = \sqrt{k_{0\perp} / m_p}$ (m_p — масса протона) равна 0.344 eV, или 2774 cm^{-1} [8], что совпадает с полученным в [25] значением. Столь существенное различие частот объясняется большой разницей масс атомов F и H.

Если считать, что σ -связь атомов С и F осуществляется соответственно sp^3 - и p -орбиталями, то $V_2 = V_{p/sp^3} = \eta_{p/sp^3} (\hbar^2 / m_0 a_{\perp}^2)$, где $\eta_{p/sp^3} = 2.63$ [26], получим $V_2 = 10.22$ eV, $\alpha_c = 0.95$ и $\alpha_p = 0.31$. Энергия sp^3 -орбитали атома углерода $\varepsilon_{csp^3} = (\varepsilon_{cs} + 3\varepsilon_{cp})/4 = -13.12$ eV (таблицы [24]), так что $V_3 = 3.36$ eV. Получаем: $E_b = 7.89$ eV, $k_{0\perp} = 16.0$ eV/Å, $\Omega_{\perp} = 0.059$ eV = 475 cm^{-1} .

Оценим также характерную энергию электрон-фононной связи $\lambda = w^2 / k_{0\perp}$, где деформационный фактор $w = -\partial V_2 / \partial a_{\perp}$ [27]. Так как $-\partial V_2 / \partial a_{\perp} = 2V_2 / a_{\perp}$ и $k_{0\perp} \approx 4V_2 / a_{\perp}^2$, получим $\lambda \approx V_2$. Эта величина гораздо выше, чем значения λ для адсорбированных на графене двух-, трех- и четырехатомных молекул газа, адсорбированных на графене [27]. Так как $\lambda \propto a_{\perp}^{-2}$, такой результат объясняется малой длиной связи С–F. Та же ситуация имеет место для графана [8].

Перейдем к колебаниям в плоскости углеродного листа флюорографана. Оценки показывают, что сделанное в [8] предположение о жесткой связи атомов димера С–Н в случае димера С–F не работает. Воспользуемся поэтому моделью двух связанных осцилляторов, предложенной нами для описания положения G-пики раман-спектра в эпитаксиальном графене [28].

Рассмотрим длинноволновые (соответствующие точке Γ) оптические колебания атомов углерода, образующих 2D-гексагональную решетку. Такие колебания отвечают G-пику раман-спектра. Для свободного графана их частота $\bar{\Omega} = 1580$ cm^{-1} [29]. Учтем, что в флюорографене длина С–С-связи $a = 1.58$ Å, тогда как в графене она равна $\bar{a} = 1.42$ Å. Тогда $k_0 / \bar{k}_0 = (\bar{a} / a)^4 \approx 0.65$, если предполагать, что σ -связи в листах флюорографана и графана образованы орбиталями с одним и тем же типом гибридизации. Если же считать, что для графана имеет место sp^2 -гибридизация, а для флюорографана — sp^3 -гибридизация, то $k_0 / \bar{k}_0 = (\eta_{sp^3} / \eta_{sp^2}) (\bar{a} / a)^4 \approx 0.64$, где $\eta_{sp^2} = 3.26$ и $\eta_{sp^3} = 3.22$ [22]). Тогда (без учета

Результаты оценок безразмерных эффективных масс m_C^* и m_I^* , квантовых емкостей C_Q^0 в ед. $\mu\text{F}/\text{cm}^2$, фононных частот Ω_\perp и Ω в cm^{-1} , силовых констант $k_{0\perp}$, α , β в ед. N/m и отношения k_0/\bar{k}_0 , где \bar{k}_0 — силовая константа центрального взаимодействия графена, для флюорографена (FGr), графана (HGr) [8] и графена (Gr) [14,23].

Параметры	m_C^*	m_I^*	C_Q^0	Ω_\perp	Ω	$k_{0\perp}$	k_0/\bar{k}_0	α, β
FGr	3.1	0.8	0.7	364 475	1280 1268	9.3 16.0	0.65	41, 53
HGr	1.9	1.2	0.7	2774 3230	1325 1317	28.5 38.6	0.76 0.75	43, 59
Gr	—	—	1.6	—	1580	—	1	77, 69

Примечание. Для частот Ω_\perp , Ω , силовой константы $k_{0\perp}$ и отношения k_0/\bar{k}_0 приводятся два значения, зависящие от гибридизации орбиталей, образующих σ -связи C–F и C–H (см. текст). В качестве Ω для графена приведено экспериментальное значение частоты G-пика раман-спектра.

атомов фтора), для частоты колебаний Ω связи C–C получим соответственно $\Omega/\bar{\Omega} = (\bar{a}/a)^2 \approx 0.81$ и $\Omega/\bar{\Omega} = (\bar{a}/a)^2 \sqrt{\eta_{sp3}/\eta_{sp2}} \approx 0.80$, т.е. $\Omega \approx 1280 \text{ cm}^{-1}$ и $\Omega \approx 1268 \text{ cm}^{-1}$. Для графана в [8] эти частоты равны 1325 cm^{-1} при sp^2 -гибридизации и 1317 cm^{-1} при sp^3 -гибридизации. Как для графана, так и для флюорографена полученные значения частот вполне удовлетворительно согласуются с результатами работы [25].

Учтем теперь связь между колебаниями C–F и C–C, которую будем описывать силовой константой κ . Воспользовавшись результатами [28] и полагая для простоты $\kappa \ll k_0, k_{0\perp}$, получим перенормированные за счет взаимной связи значения частот $\tilde{\Omega}_\perp$ и $\tilde{\Omega}$:

$$\tilde{\Omega}_\perp \approx \Omega_\perp (1 + \kappa/2k_{0\perp}), \quad \tilde{\Omega} \approx \Omega (1 + \kappa/2k_0). \quad (15)$$

Таким образом, учет связи колебаний приближает частоты $\tilde{\Omega}$ флюорографена к частотам Ω графана [8].

Упругие постоянные c_{11} и c_{12} , полученные в рамках модели Китинга для графена [8,23] и описывающие реакцию гексагональной двумерной решетки на деформацию в плоскости листа, имеют вид

$$c_{11} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(4\alpha + \beta + 18 \frac{\alpha\beta}{4\alpha + \beta} \right),$$

$$c_{12} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(4\alpha + \beta - 18 \frac{\alpha\beta}{4\alpha + \beta} \right), \quad (16)$$

где α и β — силовые константы центрального и нецентрального взаимодействий. Значения силовых констант определим из рассчитанных в [9] модуля Юнга $E = (c_{11}^2 - c_{12}^2)/c_{11} = 226 \text{ N}/\text{m}$, коэффициента Пуассона $\sigma = c_{12}/c_{11} = 0.10$ и упругих постоянных $c_{11} = 228 \text{ N}/\text{m}$ и $c_{12} = 23 \text{ N}/\text{m}$. (Отметим, однако, что в единственной, насколько известно автору, экспериментальной работе [3] приведено значение $E = 100 \text{ N}/\text{m}$). Из (16) получаем $\alpha = 41 \text{ N}/\text{m}$ и $\beta = 53 \text{ N}/\text{m}$. Как и в случае графана [8], отношение $\beta/\alpha > 1$; для графана $\beta/\alpha = 0.90$ [23].

В случае классических полупроводников типа $A_N B_{8-N}$ отношение $\beta/\alpha < 1$ и уменьшается с ростом ионности связи [30].

Следует отметить, что центральная силовая константа $k_{0\perp}$ описывает реакцию графана на сжатие или растяжение связи в направлении, перпендикулярном листу, и поэтому является одномерным аналогом объемного модуля сжатия. Полученные нами здесь значения $k_{0\perp} = 9.3 \text{ N}/\text{m}$ (связь $p-p$) и $16 \text{ N}/\text{m}$ (связь sp^3-p) для флюорографена значительно ниже значений $k_{0\perp} = 28.5 \text{ N}/\text{m}$ (связь $p-s$) и $38.6 \text{ N}/\text{m}$ (связь sp^3-s) для графана [8].

6. Заключение

Основные результаты работы сведены в таблицу. Из таблицы следует, что главное различие между флюорографеном и графаном — значения частот Ω_\perp , причем это различие продиктовано разницей как силовых констант $k_{0\perp}$, так и (в большей степени) масс атомов фтора и водорода. Второе по величине различие — значения эффективных масс. В остальном, следует отметить близость характеристик флюорографена и графана.

Отметим, что интерес к графану и флюорографену является проявлением общей тенденции — поиска (в большей степени, теоретического) новых 2D материалов, которые могут представить интерес для нанoeлектроники [31–33]. Поэтому, вообще говоря, можно было бы обобщить результаты настоящей работы и работы [8] на флюорографено- и графаноподобные структуры, в которых вместо атомов углерода в узлах гексагональной 2D решетки находятся атомы А и В. Отметим, что для реализации этой программы в [8] уже получено уравнение для нахождения соответствующих электронных зон, а в [23] приведены формулы, необходимые для расчетов силовых констант и, как следствие, характерных фононных частот. Нам, однако, подобная работа представляется преждевременной из-за достаточно ограниченной экспериментальной информации по исходным соединениям — графану и флюорографену.

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] J.O. Sofo, A.S. Chaudhari, G.D. Barber. Phys. Rev. B **75**, 153401 (2007).
- [2] O. Leenaerts, H. Peelaers, A.D. Hernández-Nieves, B. Partoens, F.M. Peeters. Phys. Rev. B **82**, 195436 (2010).
- [3] R.R. Nair, W. Ren, R. Jalil, I. Riaz, V.G. Kravets, L. Britnell, P. Blake, F. Schedin, A.S. Mayorov, S. Yuan, M.I. Katsnelson, H.-M. Cheng, W. Strupinski, L.G. Bulusheva, A.V. Okotrub, I.V. Grigorieva, A.N. Grigorenko, K.S. Novoselov, A.K. Geim. Small **6**, 2877 (2010).

- [4] R. Zboril, F. Karlicky, A.B. Bourlinos, T.A. Steriotis, A.K. Stubos, V. Georgakilas, K. Safarova, D. Jancik, C. Trapalis, M. Otyepka. *Small* **6**, 2885 (2010).
- [5] K.-J. Jeon, Z. Lee, E. Pollak, L. Moreschini, A. Bostwick, C.-M. Park, R. Mendelsberg, V. Radmilovic, R. Kostecki, T.J. Richardson, E. Rotenberg. *ACS Nano* **5**, 1042 (2011).
- [6] W. Feng, P. Long, Y. Feng, Y. Li. *Adv. Sci.* **3**, 1500413 (2016). DOI: 10.1002/advs.201500413.
- [7] D.D. Chronopoulos, A. Bakandritsos, M. Pykal, R. Zboril, M. Otyepka. *Appl. Mater. Today* **9**, 60 (2017).
- [8] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **62**, 2151 (2020).
- [9] E. Muñoz, A.K. Singh, M.A. Ribas, E.S. Penev, B.I. Yakobson. *Diamond Rel. Mater.* **19**, 368 (2010).
- [10] D.K. Samarakoon, Z. Chen, C. Nicolas, X.-Q. Wang. *Small* **7**, 965 (2011).
- [11] W. Wei, T. Jacob. *Phys. Rev. B* **87**, 115431 (2013).
- [12] D.L. John, L.C. Castro, D.L. Pulfrey. *J. Appl. Phys.* **96**, 5180 (2004).
- [13] T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [14] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, П.В. Булат, А.В. Зубов. *Письма в ЖТФ* **46**, 15, 7 (2020).
- [15] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. *Элементарное введение в теорию наносистем. Изд-во „Лань“, СПб (2014).*
- [16] S. Yuan, M. Rösner, A. Schulz, T.O. Wehling, M.I. Katsnelson. *Phys. Rev. Lett.* **114**, 047403 (2015).
- [17] W. Wei, T. Jacob. *Phys. Rev. B* **87**, 115431 (2013).
- [18] F. Karlicky, M. Otyepka. *Ann. Phys. (Berlin)* **526**, 408 (2014).
- [19] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **54**, 2193 (2012).
- [20] L. Hao, H.-Yan Lu, C.S. Ting. *Phys. Rev. Mater.* **3**, 024003 (2019); arXiv: 1812.0777v1.
- [21] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел. Мир, М.(1983).*
- [22] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B* **27**, 3592 (1983).
- [23] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. *ФТТ* **57**, 819 (2015).
- [24] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B* **31**, 2121 (1985).
- [25] H. Peelaers, A.D. Hernández-Nieves, O. Leenaerts, B. Partoens, F.M. Peeters. *Appl. Phys. Lett.* **98**, 051914 (2011).
- [26] С.Ю. Давыдов, Г.И. Сабирова. *Письма в ЖТФ* **37**, 11, 51 (2011).
- [27] С.Ю. Давыдов. *Письма в ЖТФ* **44**, 3, 40 (2018).
- [28] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **59**, 610 (2017).
- [29] Z.H. Ni, W. Chen, X.F. Fan, J.L. Kuo, T. Yu, A.T.S. Wee, Z.X. Shen. *Phys. Rev. B* **77**, 115416 (2008),
- [30] J.C. Phillips. *Rev. Mod. Phys.* **42**, 317 (1970).
- [31] A.K. Geim, I.V. Grigorieva. *Nature* **499**, 419 (2013).
- [32] C.-J. Tong, H. Zhang, Y.-N. Zhang, H. Liu, L.-M. Liu. *J. Mater. Chem. A* **2**, 17971 (2014).
- [33] И.В. Антонова. *ФТП* **50**, 67 (2016).

Редактор К.В. Емцев