

Графеновые наноленты с зигзагообразно модифицированными краями: структура и электронные свойства

© В.А. Сороко¹, К.Г. Батраков¹, Л.А. Чернозатонский²

¹ Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск, Белоруссия

² Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

E-mail: 40.ovasil@gmail.com

(Поступила в Редакцию 15 апреля 2014 г.)

Управление шириной запрещенной зоны графеновых нанолент является важной задачей для изготовления эффективных детекторов и преобразователей излучения в разных диапазонах частот. Периодическая зигзагообразная модификация края ленты (ЗМКЛ) предоставляет два дополнительных параметра для управления шириной запрещенной зоны таких структур — два плеча ЗМКЛ. Методом сильной связи для π -электронов изучена зависимость ширины запрещенной зоны E_g от этих параметров. Для рассмотренных лент наблюдаются осцилляции E_g в зависимости от ширины ленты не только в случае края типа „кресло“ (как для обычных графеновых нанолент), но и для зигзажных краев ЗМКЛ. Показано, что изменения E_g за счет вариации длины одного плеча ЗМКЛ в несколько раз меньше изменений за счет вариации ширины ленты, что предоставляет возможность „плавной перестройки“ ширины запрещенной зоны энергетического спектра графеновых нанолент рассмотренного типа.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ № 13-02-90919, а также частично поддержана проектами 7РП FP7-318617 FAEMCAR, FP7-61228 CANTOR.

1. Введение

Графеновые наноленты — это квазиодномерные углеродные структуры, получаемые в результате „разрезания“ графенового листа на полосы нанометровой ширины [1]. В качестве теоретической модели для изучения краевых свойств графита они были рассмотрены еще в работе [2]. С получением графена в свободном состоянии [3] эти объекты стали активно изучаться как теоретически [4–8], так и экспериментально [9–11]. Параллельно этим исследованиям стремительно развивались и методы синтеза [1,11–12]. Вслед за простейшими однослойными лентами были исследованы и двухслойные системы [14–16], рассмотрено влияние укладки слоев на их свойства [17]. Было исследовано влияние электрического поля [18], механического напряжения [19], краевых дефектов [20] и разупорядоченности края [6,21] на свойства подобных систем. К настоящему моменту на основе графеновых нанолент также рассмотрен ряд сверхрешеток [22–24] и „дорожек“ на графеновом листе [25–27]. Разработка метода синтеза графеновых нанолент, позволяющего получать путем самосборки ленты типа „кресло“ с атомарно гладкими краями, а также ленты с более сложной формой края [13], стимулировала дальнейшее исследование систем наподобие сверхрешеток [28,29]. В настоящей работе изучаются графеновые наноленты с зигзагообразно модифицированными краями (ЗМКЛ). Рассматриваются структуры, отличающиеся асимметрией относительно продольной оси ленты от структур, изученных в работе [24], и наличием вершинного угла от структур в работах [28,29]. Нами предлагается метод описания ЗМКЛ, разработанный на основе формализма

для углеродных нанотрубок, который допускает рассмотрение асимметричных относительно поперечной оси, лежащей в плоскости ленты, структур, которые не укладываются в рамки работ [28,29], что позволило обнаружить новые интересные зависимости в поведении ширины запрещенной зоны в энергетических спектрах ЗМКЛ.

2. Кристаллическая структура и классификация

Ниже рассматриваются графеновые наноленты, имеющие периодическую зигзагообразную модификацию края (ЗМКЛ), рис. 1. Отличительной особенностью таких структур является наличие следующих элементов: двух плеч (L_1 и L_2) — прямолинейных участков и вершинного угла φ между ними. В данных структурах один край может быть получен посредством простой трансляции другого края на некоторый вектор \mathbf{W} , модуль которого определяет „ширину“ ЗМКЛ (см. рис. 1). Таким образом, любая ЗМКЛ может быть описана набором векторов L_1 , L_2 , \mathbf{W} . Поскольку каждый из них является вектором кристаллической решетки графена, они могут быть выражены через вектора \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 его элементарной ячейки. Произвольный вектор кристаллической решетки графена \mathbf{V} может быть представлен в виде

$$\mathbf{V} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2. \quad (1)$$

Среди всех возможных направлений вектора \mathbf{V} есть такие, вдоль которых при разрезании графенового листа будут получаться границы типа „кресло“ (A — armchair) или „зигзаг“ (Z — zigzag) — линии 1–1 и 2–2 соот-

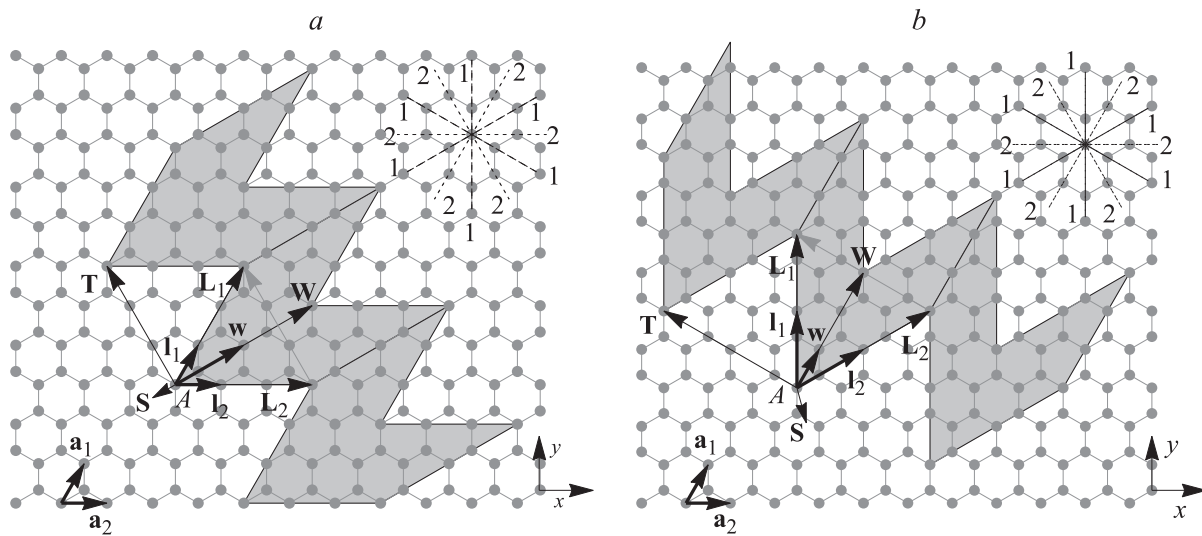


Рис. 1. Структура графеновой ленты с периодически изрезанными краями и характеризующие ее векторы: L_1 , L_2 , W (их элементарные векторы I_1 , I_2 , w), T — период трансляции элементарной ячейки ЗМКЛ. A — атом углерода из A -подрешетки графена (атом из B -подрешетки занимает место начала координат). В левом нижнем углу приведены базисные вектора элементарной ячейки гексагональной решетки графена a_1 , a_2 . При параллельном переносе на S серая область накрывает все атомы решетки графена, входящие в состав ЗМКЛ. a) — ЗМКЛ с краями типа „зигзаг“ (ср. с рис. 2, a); b) — ЗМКЛ с краями типа „кресло“ (ср. с рис. 2, c).

ветственно на рис. 1. Для таких направлений вектор V может быть записан в виде

$$V = \nu v, \quad (2)$$

где v — вектор элементарной трансляции вдоль данного направления, ν — некоторое целое число. Если при рассмотрении векторов L_1 , L_2 , W ограничиться лишь их направлениями Z и A , то для каждого из них можно ввести элементарный вектор (см. рис. 1), и тогда величина вектора выразится через некоторый целочисленный индекс. Для одного заданного набора элементарных векторов I_1 , I_2 , w возможно целое множество наборов индексов (l_1, l_2, w) каждый из которых соответствует определенному набору векторов L_1 , L_2 , W . Поэтому можно говорить о том, что набор элементарных векторов I_1 , I_2 , w задает тип лент, а набор целочисленных индексов определяет конкретную ленту в рамках заданного типа. Структуры, характеризующиеся различными наборами элементарных векторов, по существу отличаются лишь типом края плеча и значением вершинного угла φ , который также можно определить как угол между векторами I_1 и I_2 . Ограничимся рассмотрением ЗМКЛ четырех типов ($T \varphi$), где T (от англ. Type) принимает значения „ Z “ или „ A “ для случаев лент с плечами типа „зигзаг“ или „кресло“ соответственно, а φ соответствует значению вершинного угла $\varphi = 60^\circ$ или $\varphi = 120^\circ$ (рис. 2). Другие типы лент с $\varphi = 30^\circ$, 90° , 150° , если придерживаться направлений Z , A для векторов I_1 и I_2 , а также с другими φ , при отступлении от указанных направлений, можно рассмотреть аналогично. В таблице представлены координаты элементарных векторов I_1 , I_2 , w в базисе из

векторов a_1 , a_2 для каждого из четырех типов ЗМКЛ. Для рассматриваемых структур характерны также следующие две особенности: вектор „ширины“ W является биссектрисой вершинного угла φ , а один край элементарной ячейки сверхрешетки ЗМКЛ, перенесенный на вектор W , совпадает с другим ее краем.

Период трансляции элементарной ячейки ЗМКЛ T может быть выражен через введенные величины следующим образом:

$$T = L_1 - L_2 = l_1 I_1 - l_2 I_2, \quad (3)$$

а число атомов в элементарной ячейке

$$N = \lambda(l_1 + l_2)w, \quad (4)$$

где $\lambda = 2$ в случае лент Z60, Z120 и A60 и $\lambda = 6$ в случае лент A120. Различие в значениях λ для разных типов лент связано с тем, что в первом случае увеличение ширины ленты на 1 (т.е. индекса w) соответствует добавлению цепочки димеров, состоящих из атомов, относящихся к различным A и B подрешеткам графена, а во втором — добавлением цепочки шестиугольников (см. рис. 3).

Координаты элементарных векторов, характеризующих ЗМКЛ различных типов

Elementary vectors	Z60	Z120	A60	A120
I_1	(1, 0)	(1, -1)	(2, -1)	(2, -1)
I_2	(0, 1)	(0, 1)	(1, 1)	(-1, 2)
w	(1, 1)	(1, 0)	(1, 0)	(1, 1)

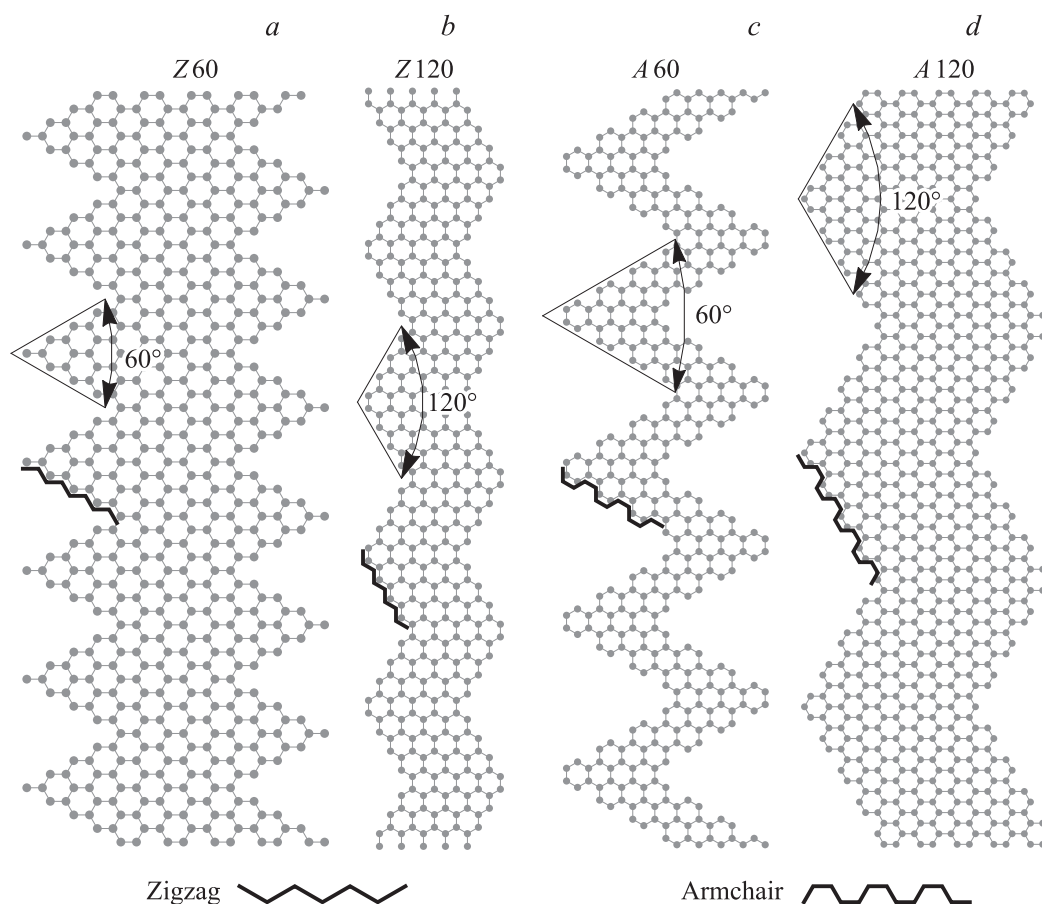


Рис. 2. Четыре типа ЗМКЛ с разными типами плеч и углами φ : а) Z60, б) Z120, в) A60, г) A120.

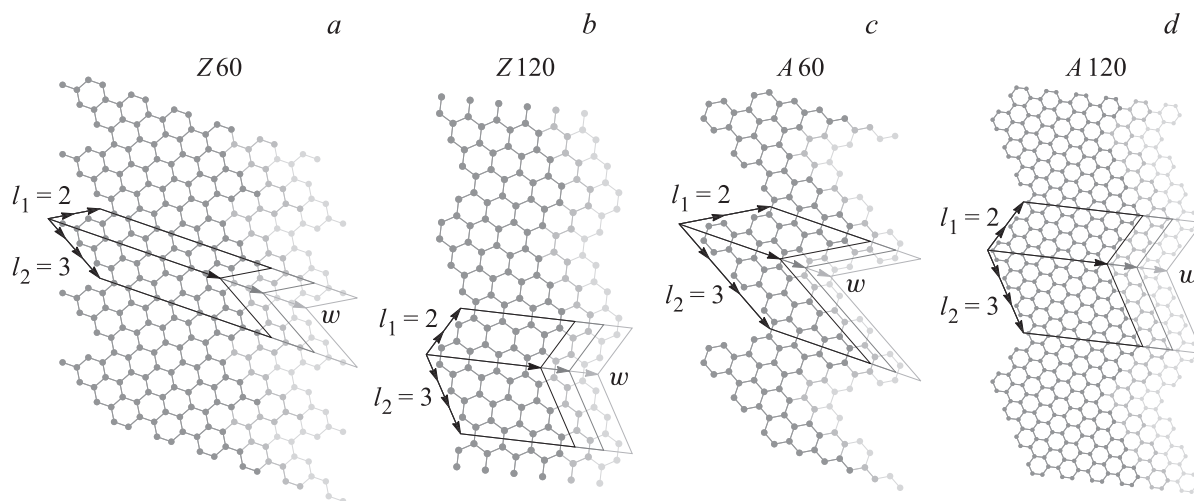


Рис. 3. Увеличение ширины ЗМКЛ: а) Z60, б) Z120, в) A60, г) A120.

3. Связь с другими углеродными наноструктурами

Прежде чем исследовать электронные свойства ЗМКЛ, установим их связь с другим классом углерод-

ных наноструктур, а именно углеродными нанотрубками (УНТ). Как можно заметить, рассмотренные выше ЗМК-ленты могут быть свернуты в сплошные цилиндры, представляющие собой не что иное, как нанотрубки. Верно и обратное, графеновая ЗМК-лента, как и обычная

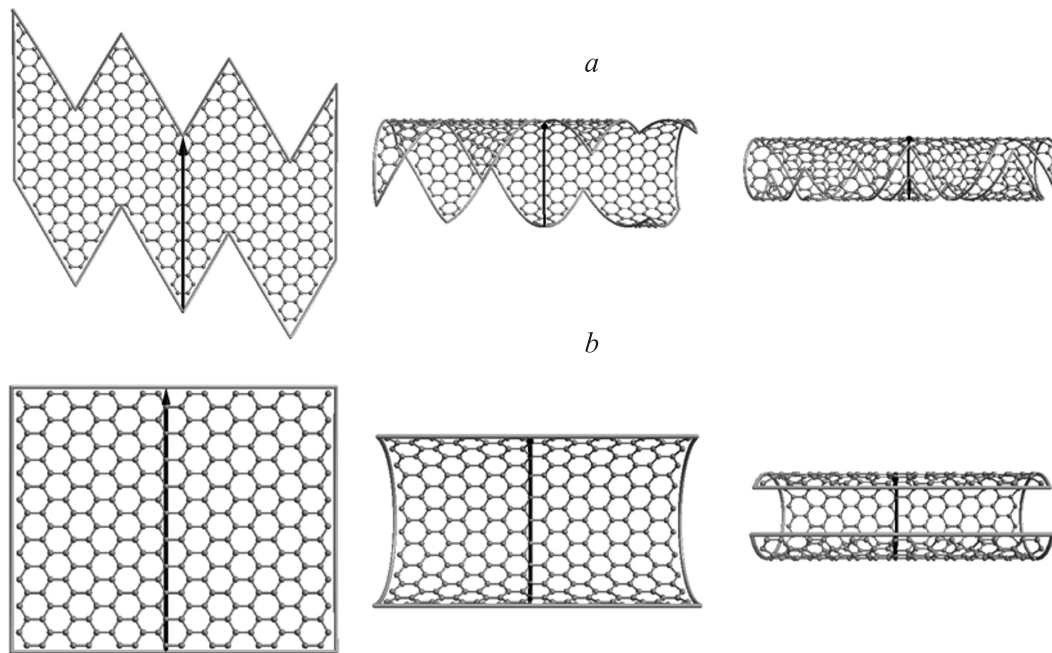


Рис. 4. Свертка *a*) ЗМКЛ А60 ($4,3,10$) и *b*) обычной графеновой ленты типа „кресло“ в УНТ(10,0). Вектор на рисунке представляет собой вектор ширины \mathbf{W} ЗМКЛ (вектор ширины ГНЛ и хиральности соответствующей УНТ). Аналогично этот рисунок можно интерпретировать как зигзагообразное и прямое (для ГНЛ) разрезание УНТ.

графеновая нанолента (ГНЛ) [12], может быть получена путем „разрезания“ какой-либо УНТ. В нашем случае (рис. 4) это может быть нанотрубка типа „зигзаг“ или „кресло“. Естественно, что в отличие от случая обычных ГНЛ, в случае ЗМКЛ разрезание УНТ должно происходить по ломаной зигзагообразной (не путать с краем типа „зигзаг“) линии, которая формируется векторами \mathbf{L}_1 , \mathbf{L}_2 и при развороте нанотрубки превращается в края рассматриваемых лент. Для ЗМКЛ любого типа существует простая связь между вектором хиральности УНТ \mathbf{C} [30] и вектором „ширины“ ЗМКЛ \mathbf{W} : $\mathbf{W} = \mathbf{C}$. Используя формулы (1–2), легко получить для рассматриваемых ЗМКЛ соотношение

$$\begin{aligned} \mathbf{W} = w\mathbf{w} = \mathbf{C} &= n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \\ &= \begin{matrix} n\mathbf{a}_1 + 0\mathbf{a}_2, & zigzag \\ n\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2, & amchair \end{matrix} = \begin{matrix} n(\mathbf{a}_1 + 0\mathbf{a}_2) \\ n(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \end{matrix}, \end{aligned}$$

из которого следует, что $n = w$, где n — индекс, которым могут быть охарактеризованы УНТ „зигзаг“ или „кресло“ [30].

4. Метод

Для исследования электронных свойств был использован метод сильной связи для π -электронов [30,31]. Этот метод отличается простотой и экономичностью в отношении требуемых вычислительных мощностей и, соответственно, времени. При этом он адекватно

воспроизводит характер зонных спектров рассматриваемых углеродных наноструктур [1]. В рамках этого метода энергетические зоны получаются в результате решения задачи на собственные значения матрицы-гамильтониана. Размерность этой матрицы равна $\sigma \times \sigma$, где σ — число атомов углерода в элементарной ячейке ленты. Если пронумеровать атомы в элементарной ячейке, то каждый элемент матрицы-гамильтониана H_{ij} имеет вид

$$H_{ij} = \sum_{p=1}^n t_{ij0} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_{ijp}) \vartheta(\Delta - |r_{ij0} - r_{ijp}|), \quad (7)$$

где t_{ij0} — интеграл перескока между атомами i и j (его значение для ближайших соседей было выбрано равным 3.12 eV [31]), расстояние между которыми r_{ij0} ; r_{ij1} — расстояние между атомами i и j в данной ячейке, r_{ijp} — расстояние между атомом i в данной ячейке и атомом j одной из смежных ячеек ($p \neq 1$), \mathbf{k} — квазиволновой вектор электрона, \mathbf{r}_{ijp} — вектор, соединяющий положения атомов i (начало вектора) и j (конец вектора), ϑ — функция Хевисайда. Как можно заметить из формулы (7), если расстояние между атомами i и j (r_{ijp}) отличается от расстояния между этими атомами в идеальной решетке графена (r_{ij0}) более чем на Δ (для понимания следует представить ЗМКЛ, встроенную в решетку графена как на рис. 1; в данном случае графен выполняет роль эталонной системы), то связь между этими атомами не учитывается. Поэтому Δ можно назвать чувствительностью используемого алгоритма. На самом деле, при больших значениях Δ значение

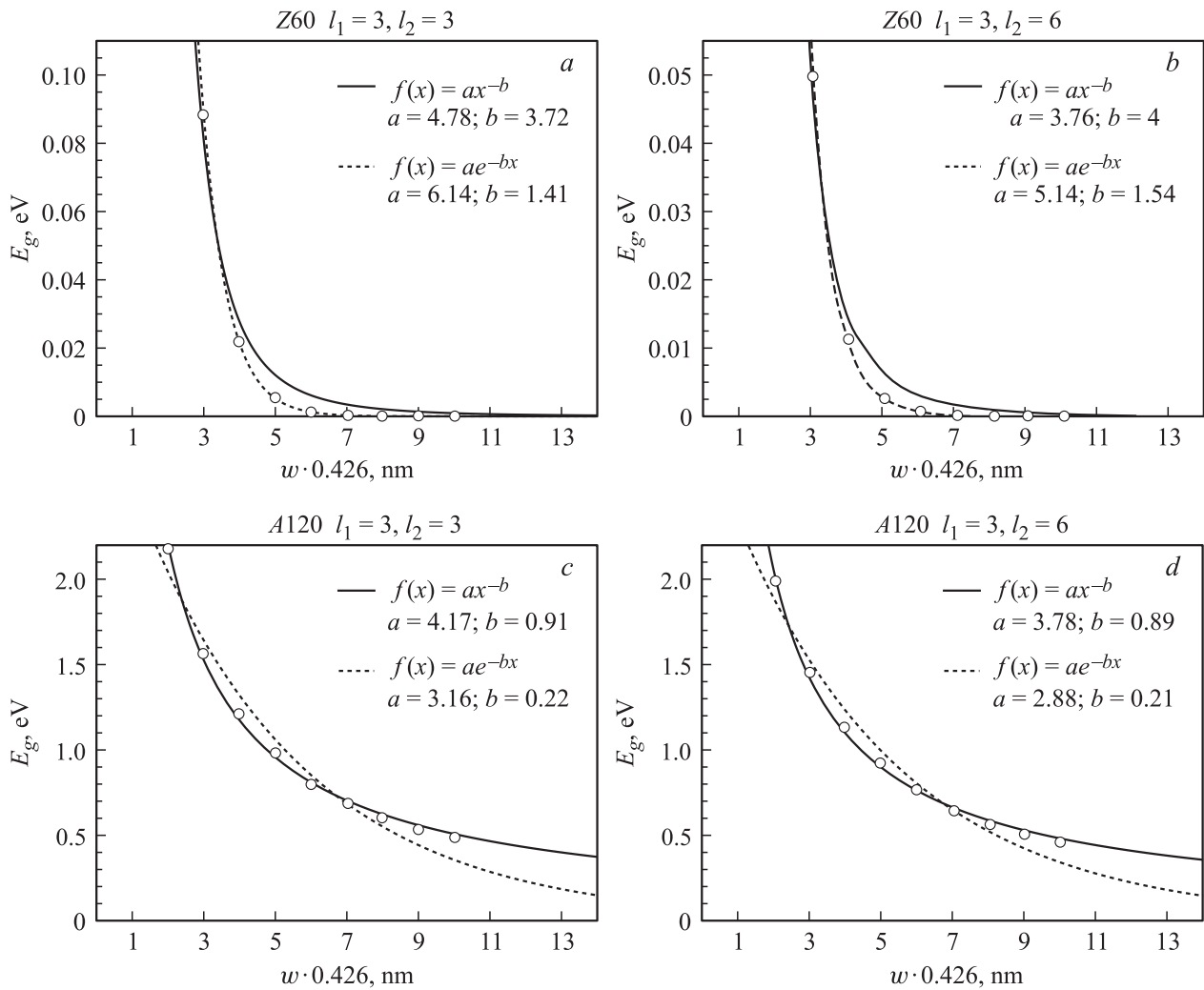


Рис. 5. Зависимость ширины запрещенной зоны E_g от ширины ЗМКЛ Z60: a — ($l_1 = l_2 = 3$), b — ($l_1 = 3, l_2 = 6$), A120: c — ($l_1 = l_2 = 3$), d — ($l_1 = 3, l_2 = 6$).

соответствующего интеграла перескока также должно изменяться: увеличиваться при сжатии С–С связи и уменьшаться при ее растяжении. Такие деформации имеют место на краю ленты. Для их учета формула (7) допускает следующее обобщение [32]:

$$H_{ij} = \sum_{p=1}^n t_{ij} \exp(i\mathbf{k}r_{ijp}) \vartheta(\Delta - |r_{ij0} - r_{ijp}|), \quad (8)$$

где t_{ij} — интеграл перескока, зависящий от расстояния между атомами. В формуле (8) зависимость интеграла перескока от расстояния была выбрана в виде формулы (2) из работы [32]

$$t_{ij} = t_{ij0} \exp\left(\beta \frac{r_{ij0} - r_{ijp}}{r_{ij0}}\right),$$

где $\beta = 3$ — параметр, определяющий скорость убывания интеграла перескока с увеличением расстояния между атомами.

Алгоритм заполнения матрицы, соответствующий формуле (8), был протестирован на заполнении матрицы для ГНЛ [5], углеродных нанотрубок [33], графена и биграфена [31]. Результаты расчетов для этих наноструктур показали отличное сходство с результатами указанных работ, воспроизводя такие особенности зонных структур, как конус для графена, тригональную структуру зон вблизи точки K при учете интегралов перескока между атомами А–А и А–В в соседних слоях для биграфена, дважды вырожденные уровни для УНТ, а также особые состояния на краях типа „зигзаг“ для ГНЛ [2].

Расчеты электронных зонных структур проводились для оптимизированных геометрий ЗМКЛ. Края ленты пассивировались атомами водорода, после чего геометрия структуры оптимизировалась в пакете LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [34]. Данный пакет реализует классическую молекулярную динамику на основе заданных потенциалов. Для оптимизации геометрии системы ис-

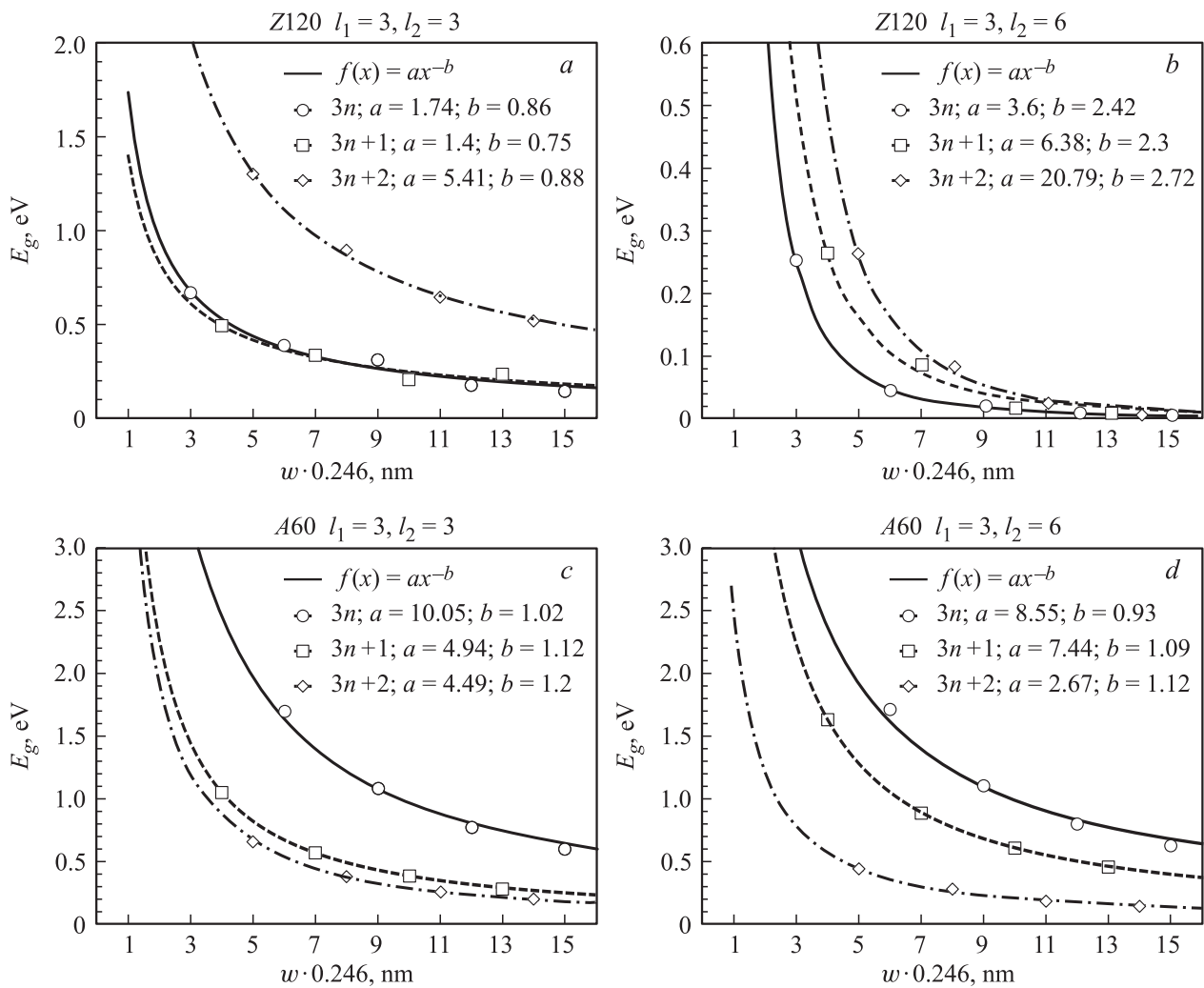


Рис. 6. Зависимость ширины запрещенной зоны E_g от ширины ЗМКЛ Z120: a — ($l_1 = l_2 = 3$), b — ($l_1 = 3, l_2 = 6$), A60: c — ($l_1 = l_2 = 3$), d — ($l_1 = 3, l_2 = 6$).

пользовался AIREBO (Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order) потенциал Стюарда для систем, состоящих из атомов углерода и водорода. В LAMMPS этот потенциал реализован в своей изначальной формулировке 2000 года [35]. При оптимизации использовался метод сопряженного градиента в версии Полака–Рибьера, которая оказывается более эффективной в сравнении с другими версиями метода сопряженного градиента. Алгоритм минимизирует не только потенциальную энергию системы, но и силы, действующие на отдельные атомы, отслеживая при этом, чтобы изменения энергии были только отрицательными. При этом использовались следующие критерии для прерывания итераций: относительное изменение энергии меньше 10^{-4} ; все силы, действующие на атомы, не превышают 10^{-6} eV/Å; изменение положения атомов меньше машинной точности вычислений; превышение максимального числа итераций (15 000); превышение максимального числа вычислений энергий/сил (30 000).

5. Ширина запрещенной зоны

Используя методы, описанные выше, мы исследовали зависимости ширины запрещенной зоны E_g от значений индексов, характеризующих ЗМКЛ. Сначала была рассмотрена зависимость запрещенной зоны от ширины лент при неизменных плечах ЗМКЛ. Результаты представлены на рис. 5 и 6. Наше внимание привлек тот факт, что для ЗМКЛ Z60 ширина запрещенной зоны проявляла сильный спад с ростом ширины ленты, поэтому мы решили использовать два вида функций для аппроксимации расчетных данных: экспоненциальную функцию и обратную степенную пропорциональность.

Из рис. 5 видно, что экспоненциальная функция лучше описывает набор данных для лент Z60. В противоположность этому зависимость E_g от ширины ленты A120 лучше описывается обратной степенной пропорциональностью. Отметим, что степенной спад E_g характерен и для обычных ГНЛ типа „кресло“ [7,8,36]. Экспонен-

циальный спад упоминался в работе [37], в которой авторы в наиболее общем виде исследовали периодические модификации краев гексагональной решетки графена. В указанной работе, однако, авторы ограничились рассмотрением так называемого минимального края, в котором каждому атому углерода на границе соответствует одна связь, пассивированная атомом водорода. В то же время в случае лент Z60 наличие углового атома, имеющего два присоединенных атома водорода, заставляет нас отнести их к более общему случаю, для которого экспоненциальный спад ширины запрещенной зоны еще не был подтвержден численными расчетами.

Для лент Z120, A60, как видно из рис. 6, наблюдаются осцилляции ширины запрещенной зоны. Период этих осцилляций кратен 3, таким образом, ленты этого типа, также как и обычные ГНЛ типа „кресло“, могут быть условно разделены на 3 серии. Каждая из таких серий ведет себя в соответствии с законом обратной пропорциональности E_g . Существует, однако, принципиальное отличие между осцилляциями E_g для лент Z120 и A60. В первом случае осцилляции затухают при увеличении разности между индексами плеч ЗМКЛ, а также при увеличении индексов обоих плеч ЗМКЛ, а во втором для лент A60 — они сохраняются.

Подобного рода осцилляции известны для УНТ типа „зигзаг“ (ЗМКЛ Z120 и A60 сворачиваются в такие УНТ), ГНЛ типа „кресло“ [36] и некоторых других полупроводниковых лент [4]. Интересно, что в работе [4] авторы наблюдали в ГНЛ затухание осцилляций E_g в зависимости от угла хиральности исходной нанотрубки. В указанной работе ГНЛ рассматривались как развернутые нанотрубки различной хиральности (развертку ахиральной УНТ типа „зигзаг“ см. на рис. 4, b). Однако, как отмечалось выше, вектор ширины ЗМКЛ соответствует вектору хиральности УНТ, поэтому в нашем случае кристаллографическая ориентация лент оставалась постоянной. Затухание осцилляций E_g можно объяснить следующим образом. В зависимости от того, как соотносятся между собой значения индексов (l_1, l_2, w), все ленты можно условно разделить на три группы

1. $l_1, l_2 < w$.
2. $l_1(l_2) < w < l_2(l_1)$.
3. $w < l_1, l_2$.

Ленты из первой группы можно представить как ГНЛ (для лент Z120 и A60 это будет ГНЛ типа „кресло“, см. соответствующие ленты на рис. 2), из которых, чтобы создать ЗМК, вырезаются треугольные участки, а ленты из третьей группы — как последовательность соединенных под определенными углами ГНЛ (ГНЛ типа „зигзаг“ для лент Z120 и ГНЛ типа „кресло“ для лент A60). При больших значениях индексов плеч влияющие области соединений на изменение E_g становится пренебрежимо малым, и зонная структура лент Z120 стремится к зонной структуре ГНЛ типа „зигзаг“, в которой, если не учитывать упорядочение спинов на краю ленты [2,36], запрещенная зона отсутствует. В то же время зонная структура лент A60 стремится к

зонной структуре ГНЛ типа „кресло“, для которых, как уже отмечалось, характерно наличие осцилляций [7,8]. При малых значениях индексов плеч поведение E_g повторяет поведение ширины запрещенной зоны ГНЛ типа „кресло“.

Известно, что ширина ГНЛ является хорошим управляющим параметром для ширины запрещенной зоны. В соответствии с нашими расчетами это же справедливо и для графеновых лент ЗМК-типа. Такое поведение объясняется локализацией носителей заряда в одном из направлений двумерной решетки графена за счет отражения от потенциального краевого барьера. Однако в квантовой механике частица с некоторой вероятностью может отражаться не только от барьера, но и от потенциальной ступеньки, что также может быть причиной локализации носителей заряда. В рассматриваемых структурах в соответствии с их геометрией потенциал испытывает повороты в области вершинных углов, которые представляют собой такие ступеньки. В связи с тем что вероятность отражения от ступеньки ниже вероятности отражения от барьера (в случае с краем ленты практически бесконечного, так как частице некуда туннелировать), локализация носителей заряда должна быть более слабой. Другими словами, изменения ширины запрещенной зоны за счет параметров l_1, l_2 будут меньше, чем изменения ширины запрещенной зоны за счет параметра w . Чтобы проверить это, мы исследовали зависимость E_g от параметра l_1 для каждого типа ЗМКЛ (рис. 7,8). На рис. 7 представлены зависимости для лент A60 серий $3n = 1$ и $3n + 2$. Линия E_g , соответствующая серии $3n$ лент A60, как можно заметить из рис. 5, практически не меняет своего положения. Как видно из рис. 7, a, b, для различных серий лент A60 зависимости ширины запрещенной зоны от длины плеча ЗМКЛ имеют противоположный характер. В обоих случаях заметно, что при увеличении длины плеча l_1 эти зависимости E_g стремятся к некоторому пределу, близкому к значению запрещенной зоны соответствующих ГНЛ типа „кресло“, из которых состоит ЗМКЛ. В случае ленты A60 $w = 7$ ширина запрещенной зоны соответствующей ГНЛ типа „кресло“, имеющей 14 атомов углерода в элементарной ячейке, составляет 1.3 eV, а предельные значения на соответствующем графике 1–1.2 eV (см. рис. 7, a). Кроме этого можно отметить, что наиболее эффективное управление запрещенной зоной посредством изменения длины плеча наблюдается для небольших значений индексов плеч $l_1 < 10$. Впрочем, данное наблюдение справедливо и в отношении других типов ЗМКЛ, представленных на рис. 7, 8. Как можно заметить для лент Z60 на рис. 7, c, если исключить из рассмотрения точку $l_1 = 1$, зависимость носит монотонный характер — в ней отсутствуют максимумы, которые присутствуют, например, на графике рис. 7, d для лент A120. На нем положение максимума смещается в сторону больших значений l_1 при увеличении значений l_2 , и при этом края максимума становятся более пологими. Интересно, что максимальное значение E_g на

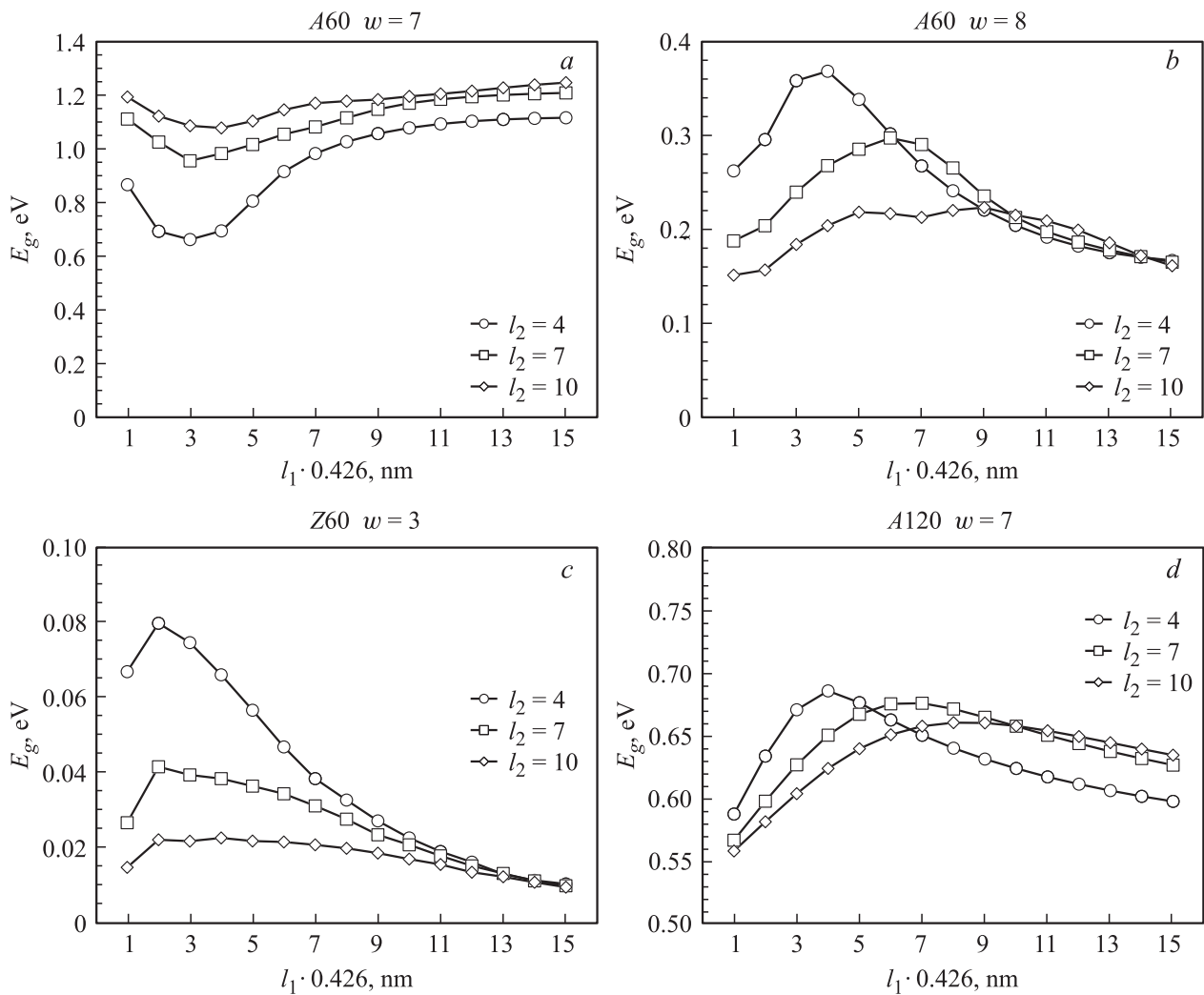


Рис. 7. Зависимость ширины запрещенной зоны E_g от длины плеча ЗМКЛ l_1 для лент A60 ($w = 7, 8$), Z60 ($w = 3$), A120 ($w = 7$).

графике для лент A120 практически не уменьшается при увеличении длины плеча (рис. 7, *d*), что имеет место в случае других ЗМКЛ. При одинаковой ширине для лент A120 с равной длиной плеч ширина запрещенной зоны больше, чем для лент с разной длиной плеч.

Несмотря на то что для лент Z120, как и для лент A60, наблюдаются осцилляции ширины запрещенной зоны в зависимости от w (см. рис. 6), мы должны отметить, что в рамках этого типа ЗМКЛ серии $3n$, $3n + 1$, $3n + 2$ выделяются лишь условно. Дело в том, что если для лент A60 серию можно определить как последовательность минимумов, максимумов и промежуточных значений в осцилляциях ширины запрещенной зоны, то в случае лент Z120 этого сделать нельзя. На рис. 6, *a, b* видно, что серия, которая являлась серией минимальных значений при одних длинах плеч, может стать промежуточной при других. Это же поведение заметно на рис. 8. Изменение ширины запрещенной зоны, вызванное вариацией индекса плеча l_1 , для лент с большим индексом „ширины“ может быть как больше

(рис. 8, $l_2 = 4$), так и меньше (рис. 8, $l_2 = 7$), чем для лент с меньшим индексом. В результате максимумы на рис. 8, *a, c* для $l_2 = 4$ меньше соответствующих максимумов E_g на рис. 8, *b, d*. Сами скачки значений E_g могут составлять 0.3 eV, что по порядку величины сравнимо со скачками, вызванными вариациями „ширины“ ЗМКЛ, однако это скорее исключение, характерное лишь для лент Z120. В отличие от серии $3n + 2$ (рис. 8, *b, d*) для серии $3n + 1$ (рис. 8, *a, c*) характерно не только уменьшение абсолютного значения максимума E_g , но и более сильное его смещение в сторону больших l_1 при увеличении длины плеча ЗМКЛ l_2 .

Представленные значения ширины запрещенной зоны ЗМКЛ соответствуют излучательным электронным переходам, лежащим в инфракрасной области частот ($E_g < 1$ eV). Таким образом, можно говорить о том, что область применения материалов, в составе которых будут присутствовать ЗМКЛ, может быть область функциональных наноматериалов для инфракрасной области, которые смогут найти применение при изготовлении

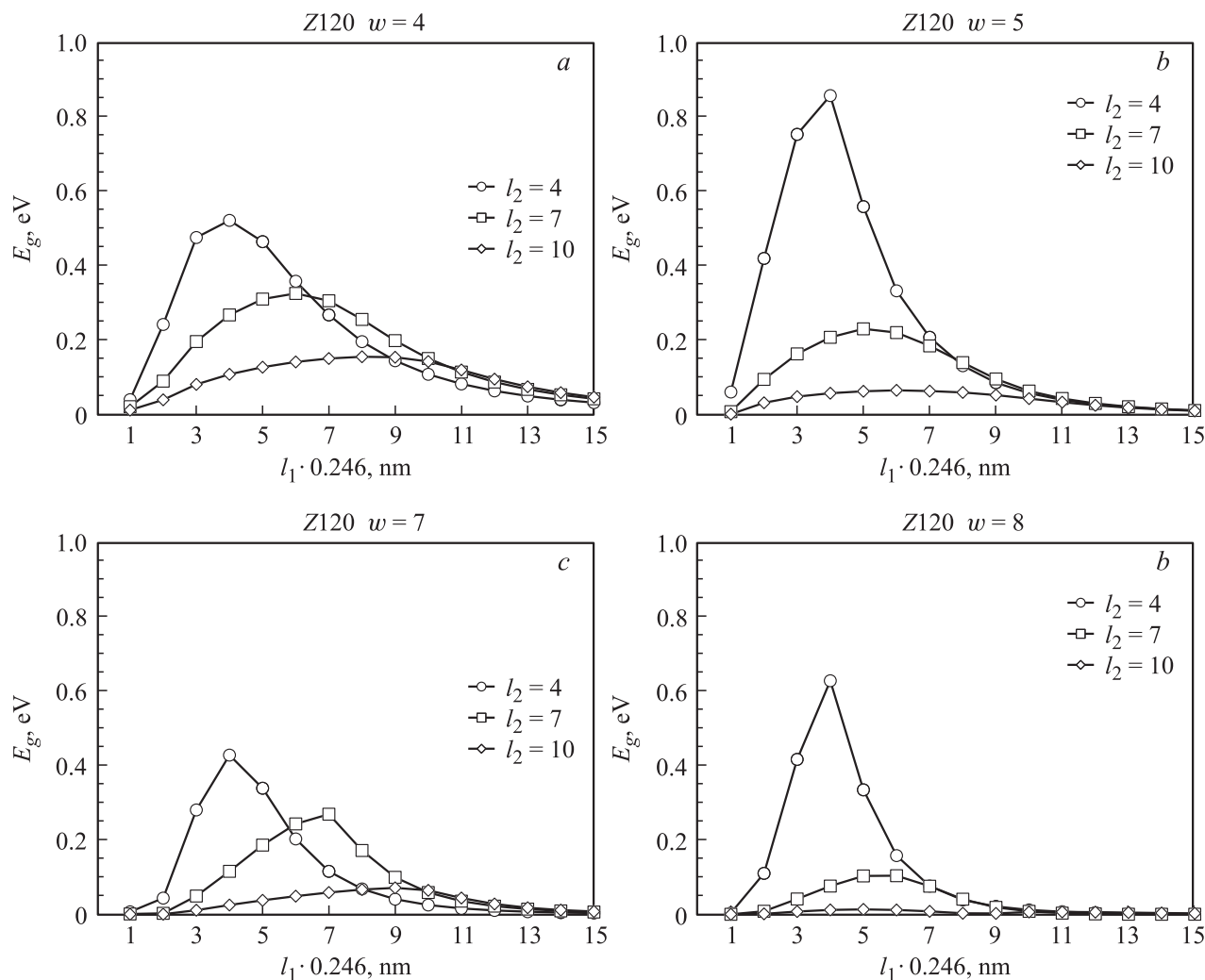


Рис. 8. Зависимость ширины запрещенной зоны E_g от длины плеча ЗМК l_1 для лент Z120 с различными их „ширинами“ ($w = 4, 5, 7, 8$).

детектирующих или излучающих устройств, защитных экранирующих покрытий и т.д.

6. Заключение

Для управления шириной запрещенной зоны графеновых нанолент мы предложили использовать периодическую зигзагообразную модификацию ее края. Для этих целей можно менять два новых параметра ЗМКЛ — два плеча ЗМК. В данной работе был рассмотрен класс графеновых нанолент, асимметричных относительно ее оси за счет ЗМКЛ. Для этих структур предложена классификация и способ описания их геометрии, который обнаруживает родство с описанием УНТ. Важно подчеркнуть, что такое описание учитывает и асимметрию, связанную с разной длиной плеч ЗМКЛ, что может быть распространено на другие классы графеновых структур, например графеновые нановиглеры, для которых уже существуют и стремительно развиваются методы син-

теза [13,38]. Вполне вероятно, что эти методы могут быть использованы и для синтеза графеновых нанолент с ЗМКЛ. Используя разработанную классификацию и способ описания структур, мы исследовали зависимость ширины запрещенной зоны от ширины ленты и плеча ЗМК в рамках метода сильной связи для π -электронов, учитывая при этом возможные деформации углеродных связей. Как было показано, ширина запрещенной зоны убывает экспоненциально с ростом ширины лент Z60. В зависимости ширины запрещенной зоны от ширины лент Z120, A60 наблюдаются осцилляции. В настоящей работе показано, что изменение плеча ЗМКЛ предоставляет возможность „плавной подстройки“ ширины запрещенной зоны структуры, что может оказаться полезным в оптических нанорезонаторах инфракрасного диапазона частот. Интересно, что даже для структур одного типа влияние плеча ЗМК на ширину запрещенной зоны ЗМКЛ может носить различный характер, что имеет место для случая различных серий лент A60. Результаты данного исследования закладывают основу для изучения

электромагнитных и транспортных свойств объектов данного типа. Кроме этого, они могут найти применение в области наноэлектроники на основе графена при создании активных элементов, а также в качестве их соединений.

Список литературы

- [1] P.B. Sorokin, L.A. Chernozatonskii. *Uspekhi Fiz. Nauk* **183**, 113 (2013).
- [2] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, K. Kusakabe. *J. Phys. Soc. J* **65**, 1920 (1996).
- [3] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. *Science* **306**, 666 (2004).
- [4] V. Barone, O. Hod, G.E. Scuseria. *Nano Lett.* **6**, 2748 (2006).
- [5] M. Ezawa. *Phys. Rev. B* **73**, 045 432 (2006).
- [6] D.A. Areshkin, D. Gunlycke, C.T. White. *Nano Lett.* **7**, 204 (2007).
- [7] C.T. White, J. Li, D. Gunlycke, J.W. Mintmire. *Nano Lett.* **7**, 825 (2007).
- [8] D. Gunlycke, C. White. *Phys. Rev. B* **77**, 115 116 (2008).
- [9] K.A. Ritter, J.W. Lyding. *Nat. Mater.* **8**, 235 (2009).
- [10] M. Han, B. Ozyilmaz, Y. Zhang, P. Kim. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 206 805 (2007).
- [11] M. Koch, F. Ample, C. Joachim, L. Grill. *Nat. Nanotechnol.* **7**, 713 (2012).
- [12] L. Jiao, L. Zhang, X. Wang, G. Diankov, H. Dai. *Nature* **458**, 877 (2009).
- [13] J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar, M. Bieri, T. Braun, S. Blankenburg, M. Muoth, A. P. Seitsonen, M. Saleh, X. Feng, K. Mullen, R. Fasel. *Nature* **466**, 470 (2010).
- [14] W. Li, R. Tao. *J. Phys. Soc. Jpn* **81**, 024 704 (2012).
- [15] W.J. Yu, X. Duan. *Sci. Rep.* **3**, 1248 (2013).
- [16] S. Bhattacharya, S. Mahapatra. *Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures* **44**, 1127 (2012).
- [17] X. Zhong, R. Pandey, S.P. Karna. *Carbon, N.Y.* **50**, 784 (2012).
- [18] Y.C. Huang, C.P. Chang, M.F. Lin. *J. Appl. Phys.* **104**, 103 314 (2008).
- [19] M. Topsakal, V.M.K. Bagci, S. Ciraci. *Phys. Rev. B* **81**, 205 437 (2010).
- [20] W. Jaskolski, A. Ayuela, M. Pelc, H. Santos, L. Chico. *Phys. Rev. B* **83**, 235 424 (2011).
- [21] Z.F. Wang, Q.W. Shi, Q. Li, X. Wang, J.G. Hou, H. Zheng, Y. Yao, J. Chen. *Appl. Phys. Lett.* **91**, 053 109 (2007).
- [22] H. Sevincli, M. Topsakal, S. Ciraci. *Phys. Rev. B* **78**, 245 402 (2008).
- [23] M. Topsakal, H. Sevincli, S. Ciraci. *Appl. Phys. Lett.* **92**, 173 118 (2008).
- [24] S. Ihnatsenka, I. Zozoulenko, G. Kirczenow. *Phys. Rev. B* **80**, 155 415 (2009).
- [25] L.A. Chernozatonskii, P.B. Sorokin, J.W. Brünig. *Appl. Phys. Lett.* **91**, 183 103 (2007).
- [26] A.K. Singh, B.I. Yakobson. *Nano Lett.* **9**, 1540 (2009).
- [27] L.A. Chernozatonskii, P.B. Sorokin. *J. Phys. Chem. C* **114**, 3225 (2010).
- [28] E. Costa Girão, L. Liang, E. Cruz-Silva, A.G.S. Filho, V. Meunier. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 135 501 (2011).
- [29] E.C. Girão, E. Cruz-Silva, V. Meunier. *ACS Nano* **6**, 6483 (2012).
- [30] R. Saito, G. Dresselhaus, M. Dresselhaus. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press, London (1998). P. 276.
- [31] B. Partoens, F. Peeters. *Phys. Rev. B* **74**, 075 404 (2006).
- [32] R.M. Ribeiro, V.M. Pereira, N.M.R. Peres, P.R. Briddon, A.H. Castro Neto. *New J. Phys.* **11**, 115 002 (2009).
- [33] R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus, M. Dresselhaus. *Phys. Rev. B* **46**, 1804 (1992).
- [34] S. Plimpton. *J. Comput. Phys.* **117**, 1 (1995).
- [35] S.J. Stuart, A.B. Tutein, J.A. Harrison. *J. Chem. Phys.* **112**, 6472 (2000).
- [36] Y.-W. Son, M.L. Cohen, S.G. Louie. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 216 803 (2006).
- [37] A. Akhmerov, C. Beenakker. *Phys. Rev. B* **77**, 085 423 (2008).
- [38] T.H. Vo, M. Shekhirev, D.A. Kunkel, M.D. Morton, E. Berglund, L. Kong, P.M. Wilson, P.A. Dowben, A. Enders, A. Sinitskii. *Nat. Commun.* **5**, 1 (2014).