

# ГРАФЕНОВЫЕ НАНОЛЕНТЫ С ЗИГЗАГООБРАЗНО МОДИФИЦИРОВАННЫМИ КРАЯМИ

Чернова М. А.

Чернова Мария Александровна – студент,  
кафедра теоретической физики и волновых процессов,  
Волгоградский государственный университет, г. Волгоград

**Аннотация:** в настоящее время всё чаще прибегают к углубленному изучению нанобъектов. Управление шириной запрещенной зоны графеновых нанолент является одной из важнейших задач, которые требуются для изготовления эффективных детекторов и преобразователей излучения в различных диапазонах частот. В статье представлено рассмотрение графеновых нанолент, определена ширина зигзагообразной модификации края лент. Произведено вычисление вектора кристаллической решетки самого графена, определены типы границ, получаемые при разрезе графенового листа.

**Ключевые слова:** графеновые наноленты, зигзагообразная модификация края ленты, графен, плечи ЗМКЛ, кристаллическая решетка графена, нанометровой ширины.

Графеновые наноленты представляют собой квазиодномерные углеродные структуры, получаемые в конечном результате от «разрезания» графенового листа на некоторые полосы нанометровой ширины [3]. Различные структурные модификации графеновых нанолент служат причиной достаточно широкого диапазона их термоэлектрических свойств [1].

Рассмотрены графеновые наноленты, которые имеют периодическую зигзагообразную деформацию того или иного края. Периодическая зигзагообразная модификация определенного края ленты (далее ЗМКЛ) дает определенную пару дополнительных параметра для управления шириной запрещенной зоны подобных структур — два плеча ЗМКЛ [2]. Используя метод сильной связи для  $\pi$ -электронов исследована зависимость ширины запрещенной зоны  $E_g$  от данных параметров. Отличительной чертой этих структур есть определение следующих элементов: двух плеч (ими являются  $L_1$  и  $L_2$ ), которые представляют собой прямолинейные участки и вершинный угла  $\phi$ , находящийся между ними. В подобных структурах один из краев может быть получен с помощью перемещения другого края на некий вектор  $W$ . Его модуль определяет «ширину» ЗМКЛ. Из этого следует, что любая ЗМКЛ может быть описана набором векторов  $L_1$ ,  $L_2$ ,  $W$ . Так как каждый из них есть вектор кристаллической решетки графена, они могут быть определены через вектора  $a_1$ ,  $a_2$  его элементарной ячейки [4]. Произвольный вектор  $V$  кристаллической решетки графена можно записать в виде следующей формулы:

$$V = na_1 + ma_2$$

На ряду всех разных направлений вектора  $V$  есть и такие, вдоль которых при разрезании графенового листа будут получаться границы разного типа. Например: «кресло» ( $A$  сокращенно от английского слова - armchair) или «зигзаг» ( $Z$  сокращенно от английского слова — zigzag).

Если же рассматривая векторы  $L_1$ ,  $L_2$ ,  $W$  сделать опору лишь на их направления  $Z$  и  $A$ , то тогда для каждого из данных векторов можно ввести элементарный индекс. Следовательно, получаем, что величина вектора будет выражаться через некий целочисленный индекс. Для одного заданного набора, состоящий из простых векторов  $l_1$ ,  $l_2$ ,  $w$  можно получить бесконечное множество наборов индексов ( $l_1$ ,  $l_2$ ,  $w$ ). Каждый из данных индексов может соответствовать только определенному набору векторов  $L_1$ ,  $L_2$ ,  $W$ . Из этого следует вывод, что набор элементарных векторов  $l_1$ ,  $l_2$ ,  $w$  задает тип лент. Когда одновременно набор целочисленных индексов определяет конкретную ленту в рамках заданного типа. Структуры в основном характеризуются разными наборами элементарных векторов. Отличительной чертой данных структур служат лишь различные типы края плеча и значения, которые принимает вершинный угла  $\phi$ . Его в некоторых случаях можно определить как угол между векторами  $l_1$  и  $l_2$ .

## Список литературы

1. Лебедев Н. Г., Судорогин С. А. Дифференциальная термоЭДС двухслойных графеновых нанолент с адсорбированными атомами водорода / Вестник Волгоградского государственного университета, Серия 1. Математика. Физика, 2015. № 6 (31). С. 83-92.
2. Батраков К. Г., Сороко В. А., Чернозатонский Л. А. Графеновые наноленты с зигзагообразно модифицированными краями: структура и электронные свойства / Физика твердого тела, 2014. Том 56. Вып. 10. С. 2066-2068.
3. Мавринский А. В. Термоэлектродвижущая сила углеродных нанотрубок / А. В. Мавринский, Е. М. Байтингер // Физика и техника полупроводников, 2009. Т. 43. № 4. С. 501–506.
4. Пак А. В. Модель множественной адсорбции атомов водорода на поверхности углеродных нанотрубок / А. В. Пак, Н. Г. Лебедев // Химическая физика, 2012. Т. 31. № 3. С. 82–87.