

УДК 534-16

## Фононные свойства нанолент графана

Г.С. Иванченко, А.В. Тен\*

Волгоградский государственный университет, пр-т Университетский, 100,  
Волгоград, 400062, Россия

\*E-mail: ten.anastasia@volsu.ru

**Аннотация.** В данной работе проводится расчет фононного спектра нанолент графана в рамках формализма Гамильтона. Геометрическая модель графана представлена в виде графеновой плоскости с присоединенными к ней атомами водорода. Элементарная ячейка графана содержит два атома углерода и два атома водорода. Анализ полученных результатов показывает, что для любого типа и ширины нанолент графана существует щель между акустическими и оптическими колебательными модами в отличие от графена, что может служить индикатором для идентификации данной структуры. Также для исследуемого материала была рассчитана температура Дебая.

**Ключевые слова:** графен, графан, нанолента, элементарная ячейка, фононный спектр, дисперсионное уравнение

## Phonon properties of hydrogenated carbon nanofilms

G.S. Ivanchenko, A.V. Ten\*

Volgograd State University, 100, Universitetskii pr., Volgograd, 400062, Russia

\*E-mail: ten.anastasia@volsu.ru

**Abstract.** In this work, the phonon format of graphane nanoribbons is calculated in the Hamiltonian formulaism. The geometric model is presented in the form of a graphene plane with hydrogen atoms attached to it. The unit cell of graphane contains two carbon atoms and two hydrogen atoms. Analysis of the obtained phonon spectra shows that, for any type and width of graphane nanoribbons, there is a gap between acoustic and optical vibrational modes, in contrast to graphene, which can serve as an indicator for a given structure. Also, for the material under study, the value of the Debye temperature was calculated.

**Keywords:** graphene, graphane, nanoribbon, unit cell, vibrational spectrum, dispersion equation

## 1. Структура и свойства графана

Графан – монослой графита с присоединенным к нему водородом [1] (рисунок 1). Экспериментально графан был получен в 2009 году [2]. Графен в подвешенном состоянии помещался в ток «холодной» водородной плазмы.

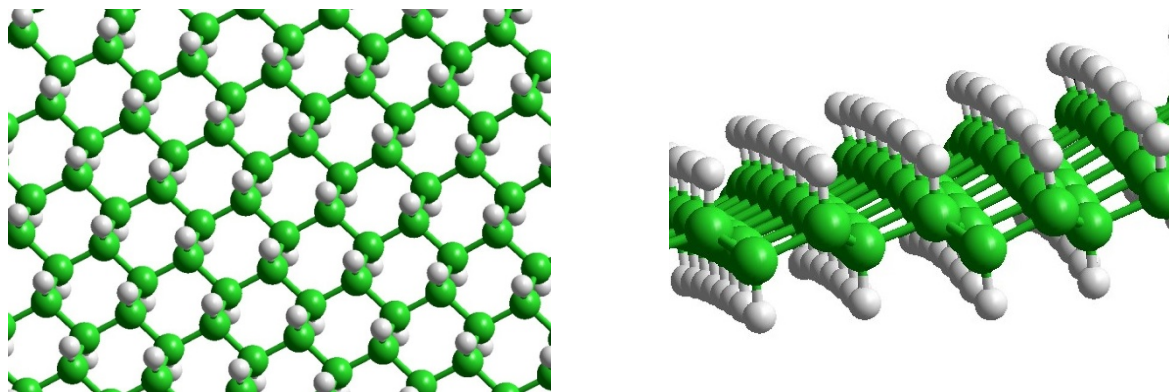


Рисунок 1. Структура графана.

## 2. Постановка задачи

Расчет фононного спектра графана проводился на основе совмещения классического и квантового подходов [3]. В основе рассмотрения лежит Гамильтонов подход, но параметры модельного гамильтониана получены с помощью квантово-химических расчетов [4,5].

Элементарная ячейка графана содержит четыре атома (два атома углерода, два атома водорода). Буквами А, В обозначены атомы углерода подрешеток графена, а буквами С, D атомы водорода находящиеся над и под графеновым слоем соответственно.

Запишем Гамильтониан системы в гармоническом приближении, при этом учтем взаимодействие каждого из атомов только с ближайшими соседями [6]:

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{1}{2m_1} \sum_{i,j} (p_{i,j}^A)^2 + p_{i,j}^B)^2 + \frac{1}{2m_2} \sum_{i,j} (p_{i,j}^C)^2 + p_{i,j}^D)^2 + \\
 & + \frac{k_1}{4} \sum_{i,j} \left[ 2(r_{i,j}^A - r_{i,j}^B)^2 + (r_{i,j}^A - r_{i,j-1}^B)^2 + (r_{i,j}^A - r_{i+1,j-1}^B)^2 + (r_{i,j}^B - r_{i,j+1}^A)^2 + (r_{i,j}^B - r_{i-1,j+1}^A)^2 \right] + \\
 & + \frac{k_2}{2} \sum_{i,j} \left[ (r_{i,j}^A - r_{i,j}^C)^2 + (r_{i,j}^B - r_{i,j}^D)^2 \right]
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь  $m_1, m_2$  – массы атомов углерода и водорода соответственно;  $k_1=930$  Н/м – константа связи С-С;  $k_2=558$  Н/м – константа связи С-Н;  $r_{i,j}$  – радиус-вектора атомов;  $p_{i,j}$  – импульсы атомов.

Используя Гамильтониан системы, можно записать уравнения движения атомов. Представляя радиус-вектора гармоническими волнами, распространяющимися вдоль листа графана, можно получить однородную систему линейных алгебраических уравнений относительно амплитуд колебаний.

$$\begin{cases} (\omega^2 - 3\omega_0^2 + \omega_1^2)A + \omega_0^2 \left( e^{-\frac{1}{2}ik_x a - \frac{\sqrt{3}}{2}ik_y a} + e^{-\frac{1}{2}ik_x a + \frac{\sqrt{3}}{2}ik_y a} + e^{ik_x a} \right) B - \omega_1^2 e^{ik_z b} C = 0 \\ \omega_0^2 \left( e^{\frac{1}{2}ik_x a + \frac{\sqrt{3}}{2}ik_y a} + e^{\frac{1}{2}ik_x a - \frac{\sqrt{3}}{2}ik_y a} + e^{-ik_x a} \right) A + (\omega^2 - 3\omega_0^2 + \omega_1^2)B - \omega_1^2 e^{-ik_z b} D = 0 \\ -\omega_2^2 e^{-ik_z b} A + (\omega^2 + \omega_2^2)C = 0 \\ -\omega_2^2 e^{ik_z b} B + (\omega^2 + \omega_2^2)D = 0 \end{cases} \quad (2)$$

где  $a=1,36$  Å – длина С-С связи;  $b=1,15$  Å – длина С-Н связи.

Эта система будет иметь нетривиальные решения в том случае, если определитель основной матрицы системы равен нулю. Таким образом, получаем дисперсионное уравнение для фононного спектра графана. Данное уравнение является уравнением четвертой степени с действительными коэффициентами относительно квадрата частоты:

$$\alpha_1(\omega^2)^4 + \alpha_2(\omega^2)^3 + \alpha_3(\omega^2)^2 + \alpha_4(\omega^2) + \alpha_5 = 0 \quad (3)$$

где:

$$\alpha_1 = 1; \alpha_2 = 2(\omega_1^2 + \omega_2^2 - 3\omega_0^2); \alpha_3 = 4\omega_0^4 \mu - 6(\omega_1^2 + 2\omega_2^2)\omega_0^2 + (\omega_1^2 + \omega_2^2)^2;$$

$$\alpha_4 = 2\omega_0^2 \omega_2^2 \{4\omega_0^2 \mu + 3(\omega_1^2 + \omega_2^2)\}; \alpha_5 = 4\omega_0^4 \omega_2^4 \mu;$$

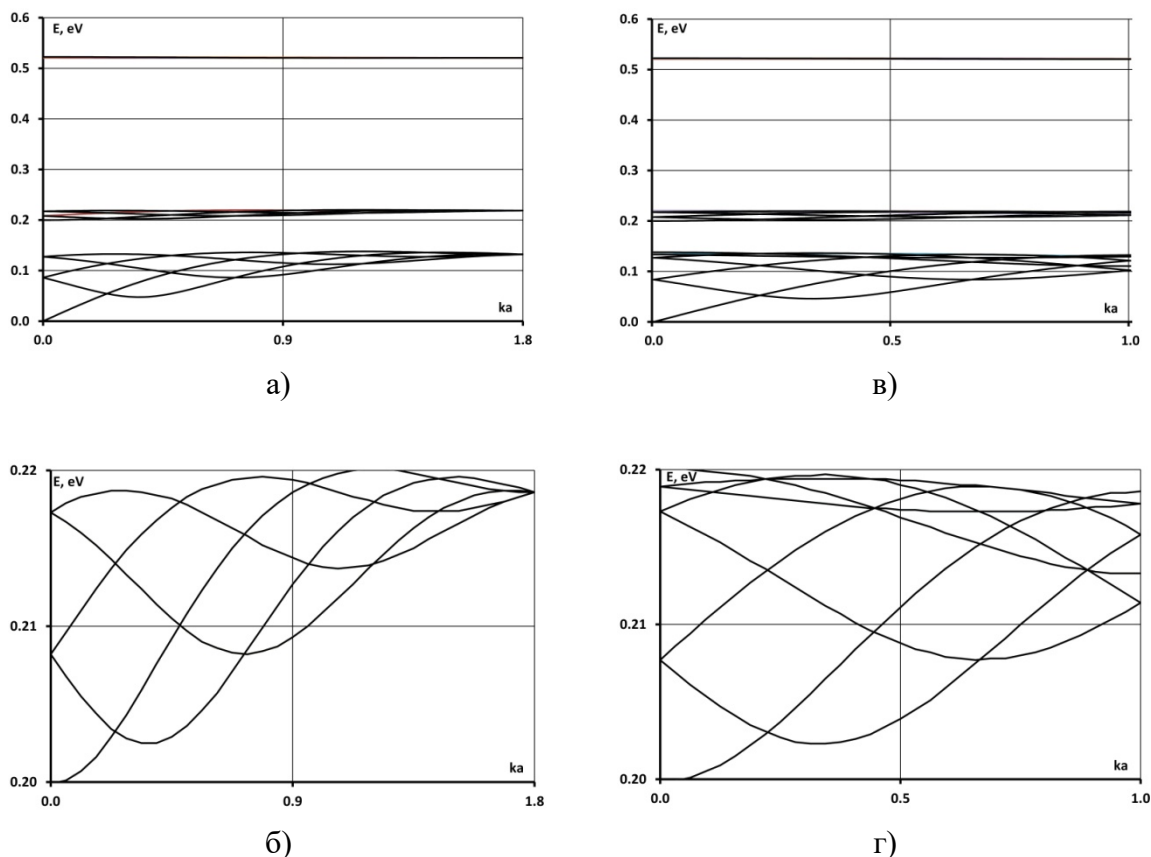
$$\mu = 2 - \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \left\{ \cos\frac{3}{2}k_x a + \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \right\}$$

Решение для таких уравнений можно получить аналитически. Для решения необходимо учитывать размер пленки, в связи с чем, на волновое число будут накладываться граничные условия.

## 2.1. Получение дисперсионных кривых

При решении дисперсионного уравнения использовались граничные условия для двух типов нанолент: «arm-chair» и «zig-zag». Также в работе проводилось варьирование ширины лент.

Результаты расчетов для различных типов лент представлены на рисунке 2.



**Рисунок 2.** Фононный спектр ленты графана: а) «zig-zag» типа (полный спектр); б) «zig-zag» типа (нижние оптические моды); в) «arm-chair» типа (полный спектр); г) «arm-chair» типа (нижние оптические моды).

Из графиков видно, что в результате добавления атомов водорода появляются новые дисперсионные кривые в области более высоких энергий, практически не зависящих от модуля волнового вектора. Вырождение этих дисперсионных кривых связано с тем, что в модели не учитывалось взаимодействие соседних атомов водорода. В спектре нанолент графана любого типа и ширины присутствует щель между акустическими и оптическими колебательными модами.

Фононные спектры также позволяют определить температуру Дебая: температуру, при которой задействуются все колебательные моды [7]:

$$T_D = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B} = 6052 \text{ K} \quad (4)$$

Для сравнения необходимо заметить, что величина  $T_D$  родственного материала, составленного из атомов углерода, – алмаза, равна 2230 К, а графена 1612 К. Для большинства твердых тел она лежит в пределах 100 ÷ 400 К. Аномальное значение температуры Дебая для алмаза объясняется высокой энергией химических связей – 7.5 эВ. Оцененное в работе значение  $T_D$  графана оказывается высоким по той же причине.

### 3. Выводы

В результате проведенного исследования были получены фононные спектры для лент графана различного типа и ширины. Показано, что в результате добавления атомов водорода появляются новые дисперсионные кривые (в сравнении с графеном) в области более высоких энергий, практически не зависящих от модуля волнового вектора. В спектре нанолент графана любого типа и ширины присутствует щель между акустическими и оптическими колебательными модами в отличие от графена. Особенности колебательного спектра графана могут служить индикатором для идентификации данной структуры. Также для исследуемого материала была рассчитана температура Дебая.

### Список литературы

1. Elias, D.C. Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation / D.C. Elias, K.S. Novoselov, A.K. Geim [and al.]. // Science. – 2009. – V. 323. – P. 610-613.
2. Chernozatonskii, L.A. Two-dimensional semiconducting nanostructures based on single graphene sheets with lines of adsorbed hydrogen atoms / L.A. Chernozatonskii, P.B. Sorokin, J.W. Brüning // Applied Physics Letters. – 2007. – V. 91. – No. 18. – P. 183103 (1-3).
3. Савинский, С.С. Дискретная и континуальная модели для расчета фононных спектров углеродных нанотрубок / С. С. Савинский, В. А. Петровский // Физика твердого тела. – 2002. – Т. 44. – Вып. 9. – С. 1721-1726.
4. Шамина, Е. Н. Влияние адсорбции атомов и молекул кислорода на электронное строение графеновой наноленты / Е. Н. Шамина, Н. Г. Лебедев // Математическая физика и компьютерное моделирование. – 2017. – Т. 20. – № 4. – С. 95-102.

5. Лебедев, Н. Г. Квантово-химическое исследование электронного строения почковых углеродных нанотрубок / Н. Г. Лебедев // Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 1: Математика. Физика. – 2014. – Т. 25. – №6. – С. 53-59.
6. Иванченко, Г. С. Фононный спектр двухслойных углеродных нанотрубок / Г. С. Иванченко, Н. Г. Лебедев // Физика твердого тела. – 2006. – Т. 48. – Вып. 12. – С. 2223 – 2227.
7. Винтайкин, Б. Е. Физика твердого тела: Учебное пособие / Б.Е. Винтайкин. – М.: МГТУ им. Баумана, 2008. – 360 с.