

ДОКЛАД · ОТКРЫТЫЙ ДОСТУП

Роль примеси кислорода на электронные Свойства монослойного графена: зависимость плотности от Функциональное исследование

Для цитирования этой статьи: Muh. Юсрул Ханна и др., 2018 J. Phys.: Conf. Ser. 1011 012071

Соответствующий контент.

- Эффективное поглощение монослоем
графен в микрорезонаторе
Цзыю Лю
- Колебания магнитосопротивления при заряде
точка нейтральности в монослое графена из-за
к потенциальным колебаниям
Рюта Яги, Сейя Фукада, Хироаки
Кобара et al.
- Влияние сильного магнитного поля на
взаимодействие дислокации с примесью кислорода в
Si_l
И. Йоненага и К. Такахаси

Просмотрите статью онлайн для получения обновлений и улучшений.

Роль примеси кислорода на электронные свойства монослоистого графена: исследование функционала плотности

М.Юсрул Ханна¹, Иман Сантосо¹, Минздрав. Adhib Ulil Absor^{1,a}

¹ Физический факультет Университета Гаджа Мада, Булаксумур, Джокьякарта 55281, Индонезия

Аннотация. Окисления при изготовлении двумерной системы на основе углерода (графена) избежать невозможно, так что это повлияет на электронные свойства системы. В этом в ходе исследования мы исследуем влияние примеси кислорода на электронные свойства монослоистого графена с использованием расчетов по теории функционала плотности. Расчеты были выполнены с использованием модели суперячеек (3×3) и были подтверждены с помощью (1×1) суперячеек расчетов. Мы находим, что при увеличении концентрации кислорода с 6%, 11%, 17%, 33% до 50% ширина запрещенной зоны увеличилась с 0,1 до 2,48 эВ. Анализ с использованием частичной плотности состояний, спроектированных на атомы, подтвердил, что сильные гибридизации между орбиталами $O-P_y$ и $C-P_z$ ответственны за увеличение запрещенной зоны кислорода очень чувствительны к изменениям электронных свойств монослоя графен.

1. ВВЕДЕНИЕ

За последний год технологическое развитие продвинулось очень далеко с точки зрения поиска новых материалов, таких как материалы на основе углерода, известные как графен. Графен состоит из двумерного углерода атомы расположены в гексагональном кристалле толщиной в один атом [1,2]. Монослоистый графен обладает экстраординарными свойствами, такими как высокая подвижность электронов в условиях окружающей среды около $20 \text{ м}^2 / \text{Vs}$ [3], невероятная механическая прочность при пределе прочности при растяжении до 130 ГПа [4] и теплопроводность выше 2000 W/mK-1 [5]. В первичном графене появляется линейная дисперсия вокруг Уровень Ферми, известный как конус Дирака [2]. Более того, скорость Ферми достигает $v_f \approx 1.0 \times 10^8 \text{ м/с}$ в зависимости от импульса Ферми, что подтверждается анализом данных колебаний Шубникова-де Хааса (SdHO) о магнитосопротивлениях [6].

Из-за нулевой запрещенной зоны в первичном графене важно вызвать открытие запрещенной зоны, которая ожидается, что это будет полезно для электронного устройства. Существует множество методов обеспечения открытой запрещенной зоны в монослоистом графене одним из них является использование атомной ковалентной функционализации, такой как водород [7], цвет [8] и кислород [9,10] или молекула [11] либо выше, либо ниже поверхности графена. Однако, использование кислорода для функционализации графена более перспективно. С другой стороны, ожидается, что введение кислорода вызовет нарушение симметрии электронных свойств [9].

В настоящей работе мы использовали расчеты по теории функционала плотности из первых принципов (DFT), чтобы прояснить электронные свойства графена с кислородной функционализацией.

автор-корреспондент :adhib@ugm.ac.id



Содержимое этой работы может быть использовано на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0. Любое дальнейшее распространение при публикации этой работы должны быть указаны автор (ы) и название работы, цитируемость в журнале и DOI. Опубликовано по лицензии IOP Publishing Ltd.1...

2. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

Мы выполнили первичный расчет электронной структуры монослоя графена на основе теории функционала плотности (DFT) в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) [12] с использованием Кода OpenMx[13]. Используются псевдопотенциалы с сохранением нормы [14], и волновая функция расширяется линейной комбинацией псевдоатомных орбиталей (LCPO), сгенерированных с использованием ограничения схема[15,16]. Орбитали задаются через $C6 \cdot 0-s^2 p^2 d^1$ и $O7 \cdot 0-s^2 p^2 d^1$, что означает, что радиусы отсечения составляют 6,0 и 7,0 бора для атомов С и О соответственно в схеме конфайнмента [15,16]. Для атомов С dan О две примитивные орбитали расширяют s- и p-орбитали, а одна примитивная орбиталь расширяет d-орбиталь.

Монослойный графен моделируется как периодическая пластина с большим вакуумным слоем (25 Å), чтобы избежать взаимодействия между соседними слоями. Мы использовали суперячейки размером 3×3 , состоящие из 18 атомов С. Мы ввели атомы кислорода, концентрации которых варьируются для 0 % -50% Сетки с $12 \times 12 \times 1$ k-точками и используется отсечка энергии 250 Ry. Геометрия была полностью расслаблена до тех пор, пока сила, действующая на каждый атом, была меньше 2 МэВ / Å. Мы находим, что оптимизированная постоянная решетки первичного графена составляет 2,47 Å, что хорошо согласуется с недавно рассчитанными данными[10].

Мы рассчитали энергию адсорбции, определенную следующим образом [10]:

$$E_{ads} = E_{tot}(\text{graphene+O}) - E_G - NE_O \quad (1)$$

Где E_{tot} - общая энергия графена с различной концентрацией кислорода, E_G - энергия первозданного графена, N - количество атомов О и E_O - энергия изолированного атома О.

3. РЕЗУЛЬТАТ И ОБСУЖДЕНИЕ

Сначала мы исследуем структурную и энергетическую стабильность функционализации графен-кислород. В таблице 1 показан рассчитанный результат структурной оптимизации и энергии адсорбции. В первичном графене, мы находим, что $d_c-c = 1.42\text{f}$ что согласуется с предыдущим результатом [10]. Кроме того, функционализация кислорода в графене приведет к увеличению общей энергии.

Таблица 1. Краткое описание структурной оптимизации. d_{c-c} (Å) обозначает расстояние между двумя С связанными атомами. d_{c-O} (Å) обозначает расстояние между атомами С и О, которые связаны. E_{abs} (эВ/О) - энергия адсорбции кислорода для наиболее стабильной конфигурации, и E_{tot} (eV) - это общая энергия системы.

O/C (%)	0%	6%	11%	17%
$>d_{c-c} <$ (Å)	1.42	1.42	1.39	1.37
$>d_{c-O} <$ (Å)		1.42	1.45	1.45
$>E_{ab} <$ (eV/O)	-2.19		-2.02	-1.94
$>E_{tot} <$ (eV)	280154.91	330982.95	374156.35	-41815

Затем мы исследуем влияние кислородной функционализации на электронные свойства графена. Как показано в таблице 2, открываясь запрещенная зона видна при введении атомов кислорода, что хорошо согласуется с предыдущими результатами [10].

Таблица 2. Суммарная энергия запрещенных зон графена при различной концентрации кислорода.

O /C (%)	0%
E_g (eV)	

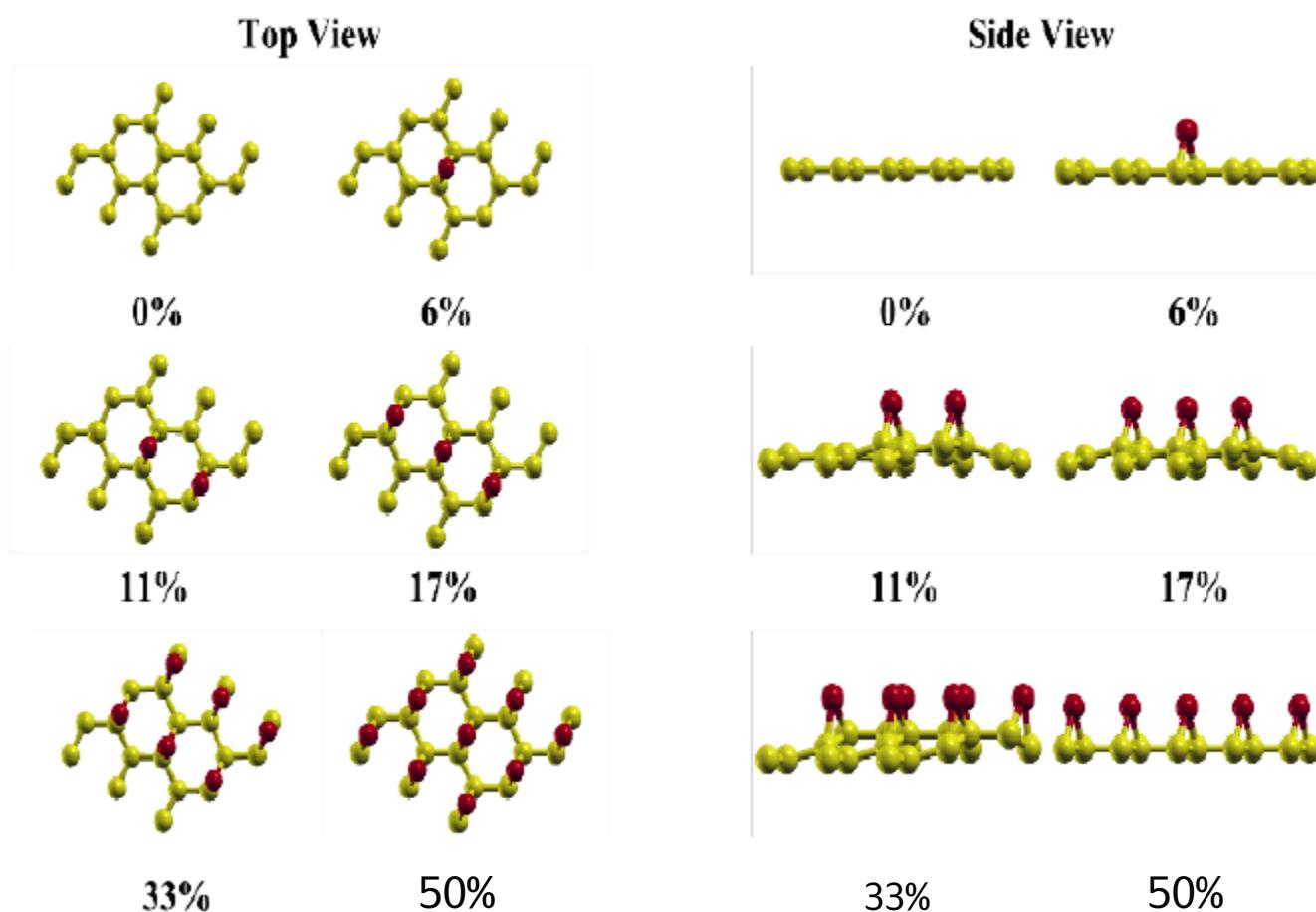


Рисунок 1. Результат оптимизации структуры для монослойных графеновых систем с 3×3 суперячейки с различной концентрацией кислорода (O/C) составляют 0%, 6%, 11%, 17%, 33% и 50%.

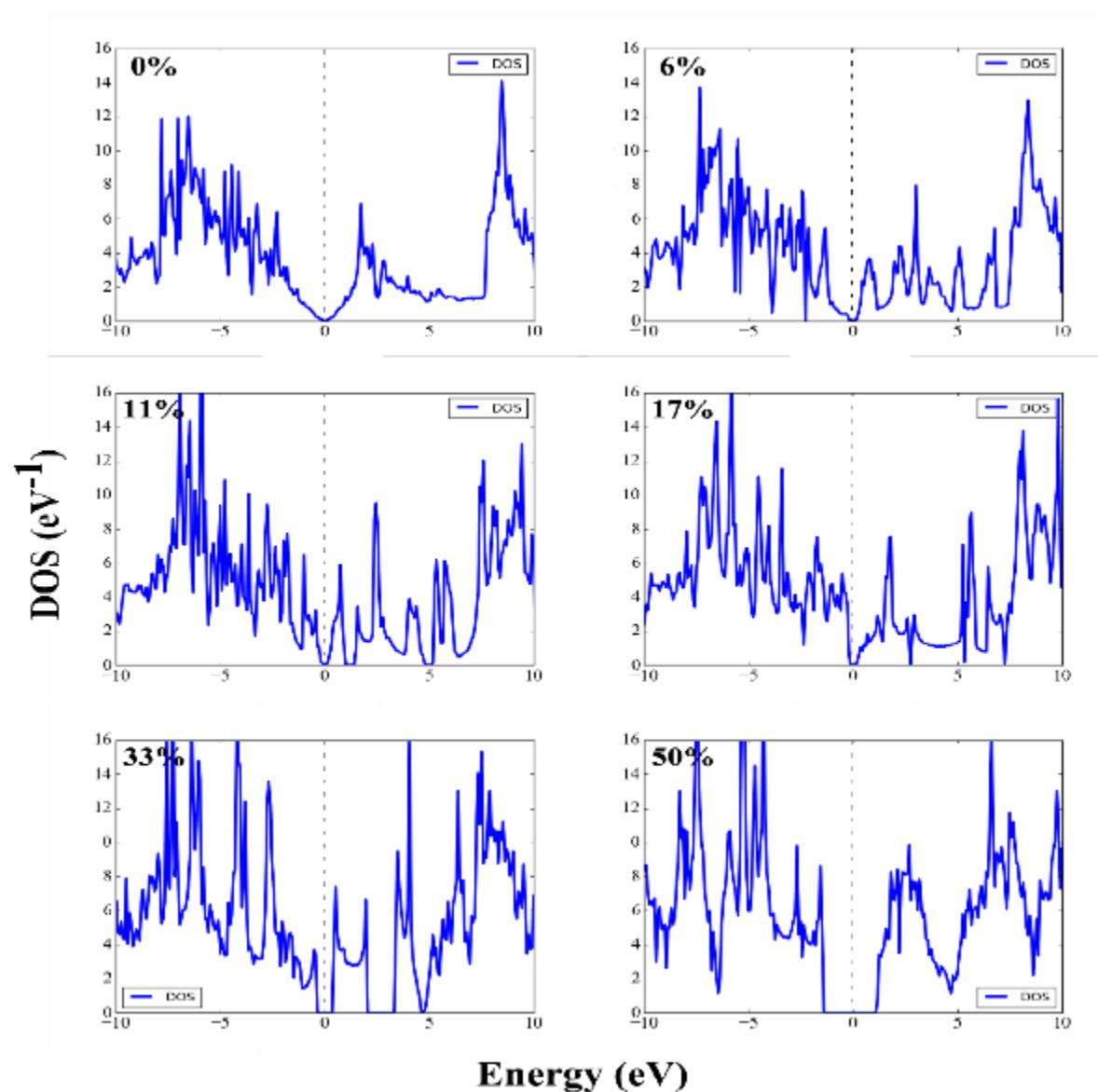


Рисунок 2. Плотность состояний (DOS) монослоя графена с различной концентрацией кислорода

Чтобы прояснить причину открытия запрещенной зоны, мы рассмотрим частичную плотность состояний (PDOS) спроектировали атомные орбитали, как показано на рисунке 3.

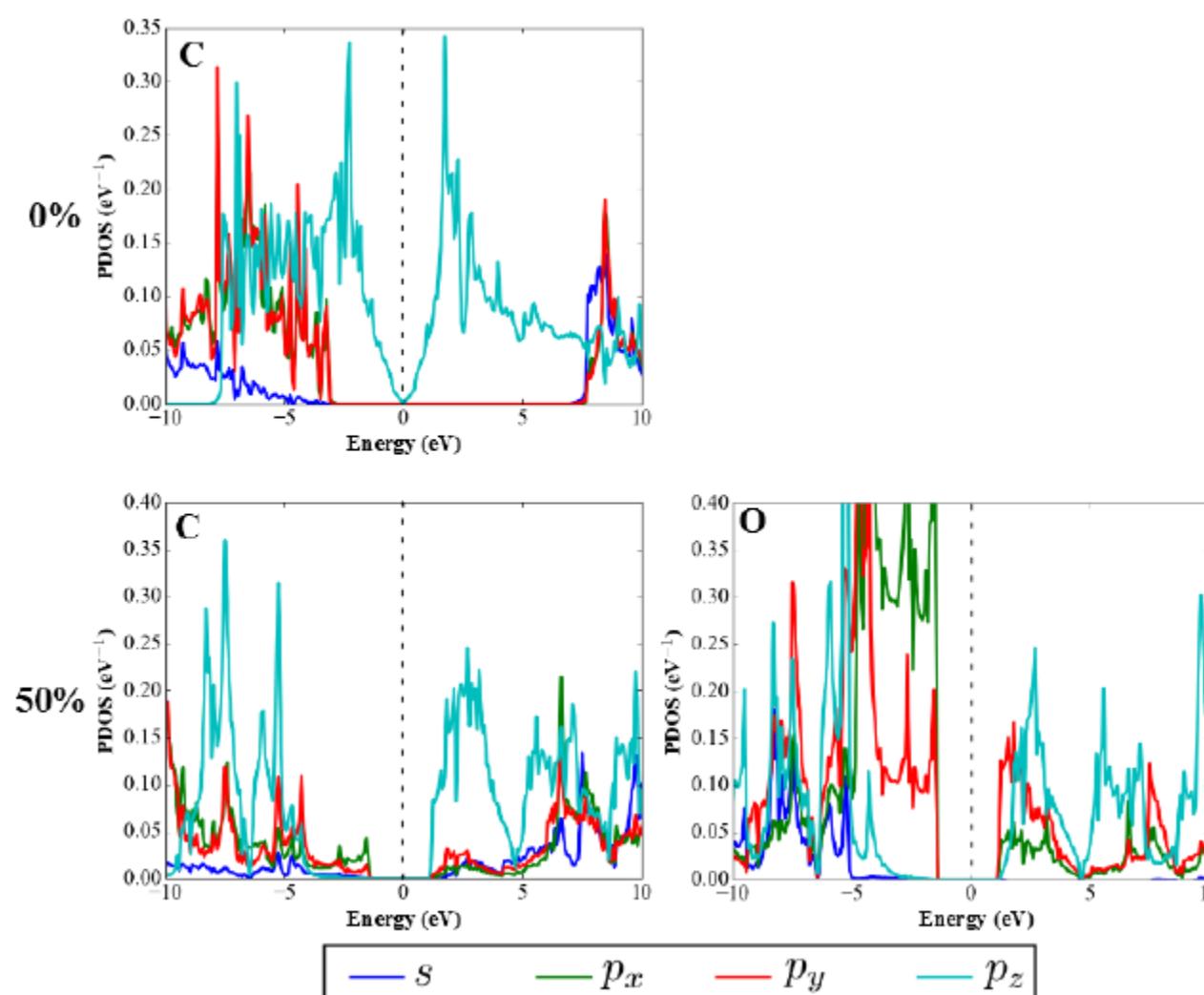


Рисунок 3. PDOS для атомов С и О с концентрацией кислорода 0% и 50%.

На рисунке 3 показаны PDOS монослоистого графена с концентрацией кислорода 0%, p_z орбиталь атом С доминирует над энергией зоны в области вокруг уровня Ферми. Принимая систему с при 50% концентрации мы обнаруживаем, что сильная гибридизация между С – p и О – p орбиталами играет важную роль в открытии запрещенной зоны. Здесь максимум валентной зоны (VBM) определяется вкладом орбиталей $O-p_z$ и $O-p_y$, в то время как минимум зоны проводимости (CBM) преимущественно за счет $C-p_z$ и $O-p_y$, таким образом, уровень энергии в валентной зоне и проводимости смещается от уровня Ферми и вызывает запрещенную зону в системах.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение, мы успешно рассчитали структурные электронные свойства кислорода функционализация графена с использованием первичного расчета DFT. Мы обнаружили, что улучшение ширина запрещенной зоны видна при увеличении концентрации кислорода. Анализ с использованием частичной плотности состояния, спроектированные на атомы, подтвердили, что сильные гибридизации между $O-P_y$ и $C-P_Z$ орбиталами ответственны за увеличение запрещенной зоны.

Благодарность

Эта Работа была поддержана грантом на фундаментальные исследования (2017), финансируемым Министерством исследований технологий и высшее образование Республики Индонезия. Вычисления в этом исследовании были выполнены с использованием высокопроизводительного компьютера (Лаборатория физики материалов и приборостроения) в Университет Гаджа Мада.

- [1] Уоллес П.Р., 1947, Зонная теория графита, физика. Откр. 71 622
- [2] Нето А.Х., Гинея Ф., Перес Н.М.Р., Новоселов К.С. и Гейм А.К. 2009 Электронные свойства графена Rev. Mod. Физика. 81 109
- [3] Морозов С.В., Новоселов К.С., Кацнельсон М.И., Шедин Ф., Элиас Д.К., Ящак Ю.А. и Гейм А.К. 2008 Гигантская внутренняя подвижность носителей в графене и его двухслойной физике. Rev. Lett. 100 16602
- [4] Ли Си, Вэй Икс, Кисар Дж. В. и Хон Дж. 2008 Измерение упругих свойств и собственной прочности наука о прочности монослоя графена (80-.). 321 385-8
- [5] Баландин А.А., Гхощ С., Бао В., Кализо И., Тевельдебран Д., Мяо Ф. и Лай К.Н. 2008 Превосходная теплопроводность однослоистого графенового наноматериала Lett. 8 902-7
- [6] Чжан И, Смолл Дж.П., Амори М. Е. С и Ким П. 2005 Модуляция электрического поля гальваномагнитные свойства мезоскопического графита Phys. Rev. Lett. 94 176803
- [7] Путц С., Гмитра М. и Фабиан Дж. 2014 Оптическая проводимость гидрогенизированного графена из первых принципов физики. Rev. B 89 35437
- [8] Юань С., Реснер М., Шульц А., Велинг Т.О. и Кацнельсон М.И. 2015 Электронные структуры и оптические свойства частично и полностью фторированного графена Phys. Rev. Lett. 114 47403
- [9] Сантосо I, Сингх Р.С., Гогой П.К., Асмарта Т.К., Вэй Д., Чен В., Ви А.Т.С., Переира В.М. и Русиди А 2014 Настраиваемое оптическое поглощение и взаимодействия в графене с помощью кислородной плазмы Phys. Rev. B 89 75134
- [10] Насехния Ф., Лима С.М., Сейфи М. и Мехран Э. Исследование первых принципов оптического отклика в 2016 году из оксидов графена: от восстановленного оксида графена до полностью окисленной поверхности Вычисл. Матер. Наука. 114 112-20
- [11] Велинг Т.О., Новоселов К.С., Морозов С.В., Вдовин Е.Е., Кацнельсон М.И., Гейм А.К. и Лихтенштейн А.И. 2008 Молекулярное легирование графена нанометром Lett. 8 173-7
- [12] Пердью Дж.П., Берк К. и Эрнзерхоф М. 1996 Обобщенное градиентное приближение, упрощенное Преподобный Латыш. 77 3865
- [13] Одзаки Т., Кино Х., Ю Дж., Хан М. Дж., Кобаяси Н., Охфути М., Иссии Ф., Охваки Т., Венг Х. и Теракура К. <http://www.openmx-square.org/>
- [14] Трулье Н. и Мартинс Дж.Л. 1991 Эффективные псевдопотенциалы для расчетов на плоской волне Phys. Rev. B 43 1993
- [15] Озаки Т. 2003 Вариационно оптимизированные атомные орбитали для крупномасштабных электронных структур Phys. Rev. B 67 155108
- [16] Одзаки Т. и Кино Х. 2004 Численные атомные базисные орбитали от H до Kr Phys. Rev. B 69 195113