

Предварително теоретично изследване върху рамановия спектър на 3-слоен графен с ваканции

Добромир А. Калчевски¹, Стефан К. Колев¹, Димитър В. Трифонов¹, Валентин Н. Попов² и Теодор И. Миленов¹

¹ "Акад. Е. Джаков" Институт по Електроника, Българска Академия на Науките, бул. Цариградско Шосе 72

² Физически Факултет, Софийски Университет, бул. Дж. Баучър 5

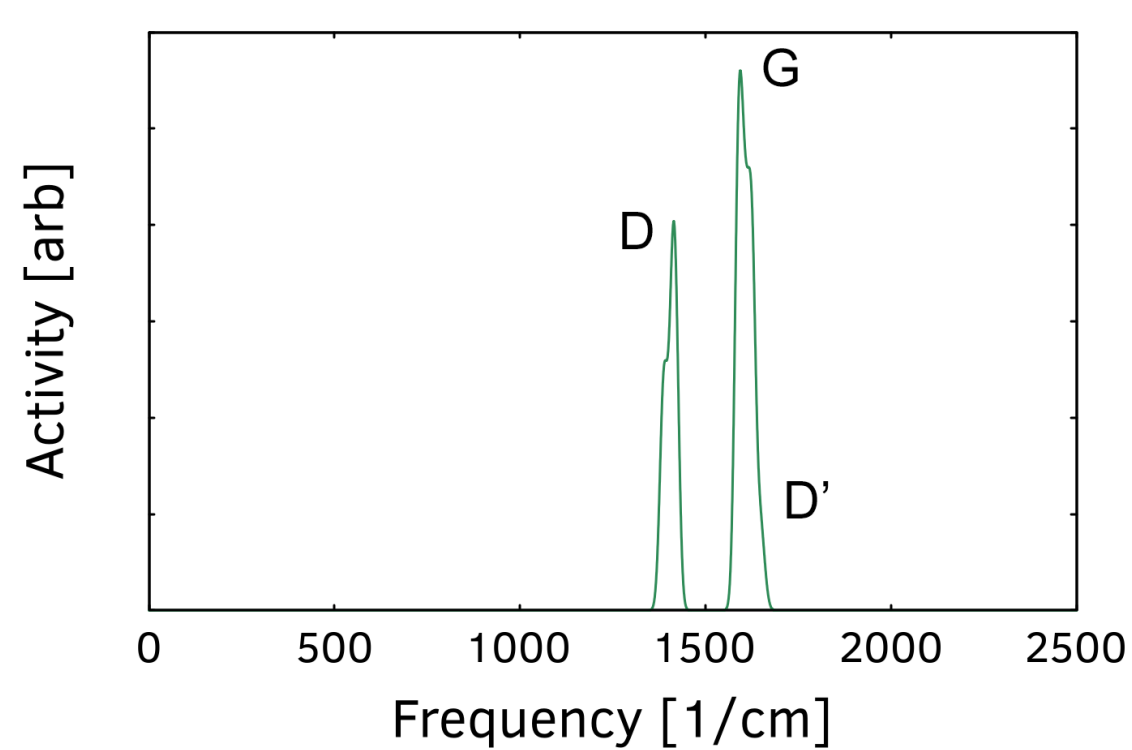
Въведение

Това са резултати от теоретичен модел на рамановия спектър на три-слоен графен с sp^2 дефекти. Най-горният слой е перфектен. Средният и долният са с ваканции. Най-характерните раманови режими на вибрация са определени чрез присъщите им атомни отмествания. Определена е връзката между структура и спектрални черти.

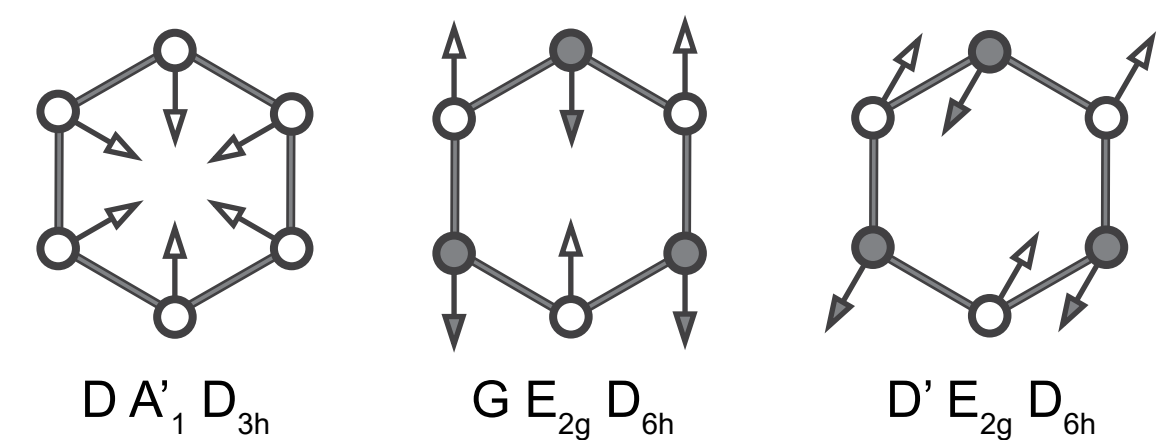
Методи

Използваният програмен пакет е CP2K. Нивото на Ab initio теория е DFT. Приложен е функционалът PBE. Неговият тип е GGA. Използваният базисен набор е DZVP-MOLOPT-SR-GTH. Дисперсните взаимодействия са моделирани на ниво DFT+D3. Структурният модел включва периодични условия с хексагонална симетрия.

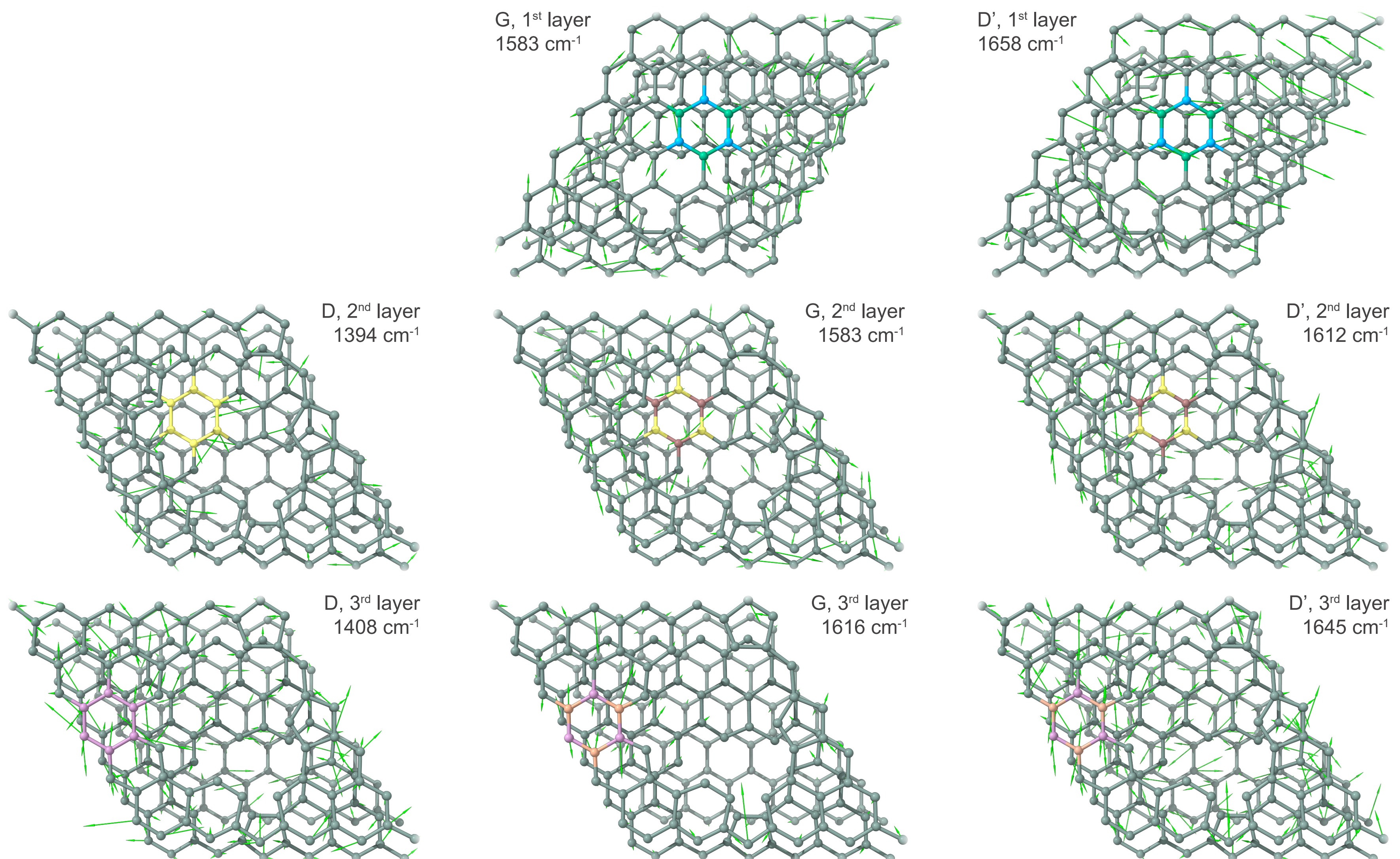
Резултати



Характерни вибрации в рамановия спектър



Вектори на отместване, фонони и симетрия на трептене



Вектори на отместване в моделираните вибрации

Заклучения

Ниска симетрия и допълнителни фонони причиняват отклонения във векторите на отместване в слоевете с sp^2 дефекти. D модът липсва в първият слой, поради отсъствие на дефекти. В третият слой единствено атоми на фрагмента с най-голям брой кондензирани ядра трептят с отмествания, присъщи на изследваните фонони. G пикът е раздвоен защото неговата честота е различна в различните слоеве. Допълнителна причина D-модът да е разделен е неговата двойно-резонансна природа. D и G режимите увеличават своята честота с концентрацията на дефекти, докато при D' липсва зависимост.

