



« »



μ μ

μμ

«

μ

»

.

:

.
.
.
.

.

, , 2012



« »



μ μ

μμ

«

μ

»

•

μ :

.
.
.

μ :

() () ()
.....

. ,

2012

()

.....

.

. . . .

© 2012 – All rights reserved

. μ ,
 , μ
 μ μ .
 , μ μ . . . ,
 , μ μ .
 , μ μ . μ .
 . μ μ μ ,
 . μ μ

							8
1							10
1.1		Hartree					12
1.2		Hartree-Fock					13
1.3				(DFT)			15
1.3.1		Kohn-Sham					18
1.4			DFT	μ	Vienna	Ab Initio	21
	Simulation Package (VASP)						
1.5							22
2							23
2.1							23
2.2		μ					23
2.3							25
2.4		μ	(), graphane		30
3							33
3.1		–					33
3.2		:		armchair			35
3.3		:		zig-zag			42
3.4							45
3.5	μ			μ			55

3.6 61

3.7 μ μ 64

66

μ μ .
 μ .
 .
 « » « »
 μ , μ μ ,
 , μ ,
 μ .
 μ μ ,
 μ μ ,
 μ μ ,
 μ μ μ , μ
 μ μ μ .
 μ μ μ (graphene),
 μ .
 μ μ , μ
 μ μ μ μ μ
 (graphane). μ μ .
 μ μ μ .
 μ μ μ
 . μ μ
 μ . μ μ μ μ , μ
 μ .

ABSTRACT

Nanotechnology is described as the science of the future. It is a new approach to understanding the properties of matter at the nanoscale. At this level different and often amazing properties of matter are revealed.

There are many references to revolutionary potential of nanotechnology which can provide smaller, lighter, faster and more efficient materials. These materials and those systems of nanotechnology can solve many problems of nowadays and open new opportunities for wealth creation and employment. Moreover, it is expected that nanotechnology will significantly contribute in addressing global environmental challenges, by making possible the implementation of products and processes tailored to specific uses, saving resources and reducing waste and emissions.

In this paper we study graphene, a rapidly rising star on the horizon of nanomaterials. This strictly two-dimensional material has been expanding the horizons of new physics and its applications. Specifically, we study here, with *ab initio* calculations, the reaction of nanoribbon graphene with hydrogen and its conversion to graphane. At the beginning, we examine whether the reaction is exothermic. Then, we find the most stable configuration. We study the possible change of the energy gap in the reaction of nanoribbon graphene with hydrogen and the implications of electronic properties. Additional calculations are performed for the effect on the electronic properties of nanoribbon, due to mechanical deformation. Finally, we investigate the magnetization of the material, in other words, we examine the magnetic properties of nanoribbon.

Schrödinger

$$H\Psi(\{\vec{R}_I; \vec{r}_i\}) = E\Psi(\{\vec{R}_I; \vec{r}_i\}) \quad (1.1)$$

H

$$-\sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla^2_{\vec{R}_I} - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2_{\vec{r}_i} \quad (1.2)$$

. (1.2)

« »

Coulomb μ

$$\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.3)$$

$$-\frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}|} \quad (1.4)$$

μ

$$V_{ion}(\vec{r}) = -\sum_I \frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}|} \quad (1.5)$$

(Madelung)

$$\frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad (1.6)$$

$$H = -\sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla^2_{\vec{R}_I} - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2_{\vec{r}_i} - \sum_{iI} \frac{Z_I e^2}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{ij, i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{IJ, I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad (1.7)$$

$\left(\frac{M}{m_e} \approx 10^4 - 10^6 \right)$.

 « μ » .

Born-Oppenheimer.

(μ)

 (μ)

 (μ)

$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2_{\vec{r}_i} + \sum_i V_{ion}(\vec{r}_i) + \frac{e^2}{2} \sum_{ij, i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.8)$$

$[1]$.

1. $\mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu$
 2. $\mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu$
- $(s = 1/2).$ μ
Pauli,
 μ
- $\mu \mu \quad , \quad \mu \quad \mu \quad \mu \quad \mu \quad .$

1.1 Hartree [1]

$$\Psi^H(\{\vec{r}_i\}) = \xi_1(\vec{r}_1)\xi_2(\vec{r}_2)\dots\xi_N(\vec{r}_N) \tag{1.9}$$

$$E^H = \langle \Psi^H | H | \Psi^H \rangle = \sum_i \langle \xi_i | \left[\frac{-\hbar^2 \nabla_{\vec{r}_i}^2}{2m_e} + V_{ion}(\vec{r}_i) \right] \xi_i \rangle + \frac{e^2}{2} \sum_{ij, j \neq i} \langle \xi_i \xi_j | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \xi_i \xi_j \rangle \tag{1.10}$$

$$S = E^H - \sum_i v_i (\langle \xi_i | \xi_i \rangle - 1) \tag{1.11}$$

$$\mathbf{u} \left[E^H - \sum_i v_i (\langle \xi_i | \xi_i \rangle - 1) \right] = 0 \tag{1.12}$$

Lagrange μ
 $\langle \xi_i | \xi_i \rangle - 1 = 0$ μ

$$\begin{aligned}
& \langle u\{\xi_i | -\frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2}{2m_e} + V_{ion}(\vec{r}) \} \xi_i \rangle + e^2 \sum_{j \neq i} \langle u\{\xi_i, \xi_j | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j}| } \xi_i \xi_j \rangle - v_i \langle u\{\xi_i | \xi_i \rangle = \\
& = \langle u\{\xi_i | \left[-\frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2}{2m_e} + V_{ion}(\vec{r}) + e^2 \sum_{j \neq i} \langle \xi_j | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j}| } \xi_j \rangle - v_i \right] \xi_i \rangle = 0
\end{aligned} \tag{1.13}$$

$$\begin{aligned}
& \langle u\{\xi_i | \\
& : \\
& \left[-\frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2}{2m_e} + V_{ion}(\vec{r}) + e^2 \sum_{j \neq i} \langle \xi_j | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j}| } \xi_j \rangle \right] \xi_i(\vec{r}) = v_i \xi_i(\vec{r}) \tag{1.14}
\end{aligned}$$

Hartree $|\xi_i\rangle$.

$\xi_i(\vec{r}_i)$.

1.2 Hartree-Fock [1]

Pauli. μ , μ , μ , μ , μ , μ .

Hartree-Fock [2]. $\mu\mu$, μ

Slater μ , μ , μ .

$$\Psi^{HF}(\{\vec{r}_i\}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \xi_1(\vec{r}_1, s_1) & \xi_1(\vec{r}_2, s_2) & \dots & \xi_1(\vec{r}_N, s_N) \\ \xi_2(\vec{r}_1, s_1) & \xi_2(\vec{r}_2, s_2) & & \xi_2(\vec{r}_N, s_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \xi_N(\vec{r}_1, s) & \xi_N(\vec{r}_2, s_2) & \dots & \xi_N(\vec{r}_N, s_N) \end{vmatrix} \tag{1.15}$$

μ $|\xi_i\rangle$

μ Hartree.

H Hartree-Fock :

$$\begin{aligned}
E^{HF} &= \langle \Psi^{HF} | H | \Psi^{HF} \rangle = \\
&= \sum_i \langle \xi_i | \left[\frac{-\hbar^2 \nabla_{\vec{r}_i}^2}{2m_e} + V_{ion}(\vec{r}) \right] \xi_i \rangle + \frac{e^2}{2} \sum_{ij, i \neq j} \langle \xi_i \xi_j | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \xi_i \xi_j \rangle - \frac{e^2}{2} \sum_{ij, i \neq j} \langle \xi_i \xi_j | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \xi_j \xi_i \rangle
\end{aligned} \tag{1.16}$$

$$V_i^H = \frac{e^2}{2} \sum_{ij, i \neq j} \langle \xi_i \xi_j | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \xi_i \xi_j \rangle \tag{1.17}$$

$$\begin{array}{c}
\mu \quad \quad \quad \mu \\
\quad \quad \quad \mu \quad \quad \quad \cdot \\
\quad \quad \quad \mu \quad \quad \quad \mu \\
:
\end{array}$$

$$\left[\frac{-\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2}{2m_e} + V_{ion}(\vec{r}) + V_i^H(\vec{r}) \right] \xi_i(\vec{r}) - e^2 \sum_{j \neq i} \langle \xi_j | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \xi_i \rangle \xi_j(\vec{r}) = v_i \xi_i(\vec{r}) \tag{1.18}$$

, Hartree-Fock.

$$\begin{array}{c}
\mu \quad , \quad \mu \quad \quad \mu \quad \mu \quad \mu \\
:
\end{array}$$

$$\dots_i(\vec{r}) = |\xi_i(\vec{r})|^2 \tag{1.19}$$

$$\dots(\vec{r}) = \sum_i \dots_i(\vec{r}) \tag{1.20}$$

$$, \quad V_i^H$$

$$V_i^H(\vec{r}) = e^2 \sum_{j \neq i} \int \frac{\dots_j(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' = e^2 \int \frac{\dots(\vec{r}') - \dots_i(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \tag{1.21}$$

$$\left[\frac{-\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2}{2m_e} + V_{ion}(\vec{r}) + V_i^H(\vec{r}) + V_i^X(\vec{r}) \right] \xi_i(\vec{r}) = v_i \xi_i(\vec{r}) \tag{1.22}$$

$$V_i^X(\vec{r}) = -e^2 \int \frac{\dots_i^X(\vec{r}, \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \quad \mu \quad \dots_i^X(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{j \neq i} \frac{\xi_i(\vec{r}') \xi_i^*(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) \xi_j^*(\vec{r}')}{\xi_i(\vec{r}) \xi_i^*(\vec{r})} \tag{1.23}$$

$$V_i^{HF} = e^2 \int \frac{\dots(\vec{r}') - \dots_i^{HF}(\vec{r}, \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \quad , \quad \dots_i^{HF}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_j \frac{\xi_i(\vec{r}') \xi_i^*(\vec{r}) \xi_j(\vec{r}) \xi_j^*(\vec{r}')}{\xi_i(\vec{r}) \xi_i^*(\vec{r})} \tag{1.24}$$

1.3 (DFT)

Hohenberg, Kohn [3].
 (Density Functional Theory) DFT 1965-1966

Schrodinger $n(\vec{r})$, $\Psi(\{\vec{r}_i\})$.

$$n(\vec{r}) = N \int \dots \int \Psi^*(\vec{r}, \dots, \vec{r}_N) \Psi(\vec{r}, \dots, \vec{r}_N) d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \quad (1.25)$$

$$N = \int n d\vec{r}$$

DFT

Hohenberg-Kohn

DFT Kohn – Hohenberg 1964.

$$n(\vec{r}) \ll V(\vec{r})$$

_____ :

$$\begin{aligned}
 & \int d\vec{r} \left[\Psi^* \left(H_0 + V(\vec{r}) \right) \Psi - E \Psi^* \Psi \right] \\
 & - \int d\vec{r} \left[\Psi'^* \left(H_0 + V'(\vec{r}) \right) \Psi' - E' \Psi'^* \Psi' \right] \\
 & + \int d\vec{r} \left[\Psi^* \left(V'(\vec{r}) - V(\vec{r}) \right) \Psi' \right]
 \end{aligned}$$

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \quad (1.26)$$

$$E' = \langle \Psi' | H' | \Psi' \rangle \quad (1.27)$$

$$\begin{aligned}
 & \langle \Psi' | H | \Psi' \rangle \leq E \quad (\text{variational principle}) \\
 & \langle \Psi' | H | \Psi' \rangle \leq E
 \end{aligned} \quad (1.28)$$

$$\begin{aligned}
 & \Psi' = \sum_i c_i \phi_i(\vec{r}) \quad (\text{trial function}), \\
 & H = H_0 + V(\vec{r}) \quad H' = H_0 + V'(\vec{r})
 \end{aligned}$$

$$\langle \Psi' | H_0 + V(\vec{r}) | \Psi' \rangle \leq E \quad (1.29)$$

$$\langle \Psi' | H_0 + V(\vec{r}) + V'(\vec{r}) - V'(\vec{r}) | \Psi' \rangle \leq E \quad (1.30)$$

$$\langle \Psi' | H' + V(\vec{r}) - V'(\vec{r}) | \Psi' \rangle \leq E \quad (1.31)$$

$$\langle \Psi' | H' | \Psi' \rangle + \langle \Psi' | V(\vec{r}) - V'(\vec{r}) | \Psi' \rangle \leq E \quad (1.32)$$

$$\begin{aligned}
 & E + \langle \Psi' | V'(\vec{r}) - V(\vec{r}) | \Psi' \rangle \leq E' \\
 & \langle \Psi' | V'(\vec{r}) - V(\vec{r}) | \Psi' \rangle \leq E' - E
 \end{aligned} \quad (1.33)$$

μ μ :

$$E' + E + \int n'(\vec{r})[V(\vec{r}) - V'(\vec{r})]d\vec{r} + \int n(\vec{r})[V'(\vec{r}) - V(\vec{r})]d\vec{r} = E' + E \quad (1.34)$$

$$\begin{aligned} & \int n(\vec{r}) V(\vec{r}) d\vec{r} - \int n'(\vec{r}) V(\vec{r}) d\vec{r} + \int n'(\vec{r}) V'(\vec{r}) d\vec{r} - \int n(\vec{r}) V'(\vec{r}) d\vec{r} \\ &= \int n(\vec{r}) V(\vec{r}) d\vec{r} - \int n(\vec{r}) V'(\vec{r}) d\vec{r} + \int n'(\vec{r}) V'(\vec{r}) d\vec{r} - \int n'(\vec{r}) V(\vec{r}) d\vec{r} \\ &= \int n(\vec{r}) [V(\vec{r}) - V'(\vec{r})] d\vec{r} + \int n'(\vec{r}) [V'(\vec{r}) - V(\vec{r})] d\vec{r} \\ &= \int [n(\vec{r}) - n'(\vec{r})] [V(\vec{r}) - V'(\vec{r})] d\vec{r} \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$F[n(\vec{r})] = \langle \Psi | \hat{T} + \hat{W} | \Psi \rangle \quad (1.35)$$

$$[n(\vec{r})] = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{T} + \hat{W} + \hat{V} | \Psi \rangle = F[n(\vec{r})] + \int V(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.36)$$

$$E[n'(\vec{r})] = \langle \Psi' | \hat{H} | \Psi' \rangle = F[n'(\vec{r})] + \int V(\vec{r}) n'(\vec{r}) d\vec{r} > \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E[n(\vec{r})] \quad (1.37)$$

$n(\vec{r})$, $n'(\vec{r})$, $[n(\vec{r})]$, $F[n(\vec{r})]$, $F[n(\vec{r})]$.

Hohenberg Kohn

1.3.1. Kohn-Sham

$n(\vec{r})$, $F[n(\vec{r})]$

Kohn Sham, 1965
 Hohenberg Kohn,
 Schrodinger.

$n(\vec{r})$, $n(\vec{r})$

μ μ μ μ . μ , μ ,

$$F[n(\vec{r})] = T^S[n(\vec{r})] + \frac{e^2}{2} \iint \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' + E^{xc}[n(\vec{r})] \quad (1.38)$$

μ , μ , μ .

$$T^S[n(\vec{r})] = \sum_i \langle \xi_i | -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}}^2 | \xi_i \rangle \quad (1.39)$$

Coulomb
 μ « » , μ μ « » $n(\vec{r})$.

μ μ μ μ
 Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}}^2 + V^{eff}(\vec{r}, n(\vec{r})) \right] \xi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \xi_i(\vec{r}) \quad (1.40)$$

μ V^{eff} Lagrange μ :

$$V^{eff}(\vec{r}, n(\vec{r})) = V(\vec{r}) + e^2 \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + \frac{\mu E^{xc}[n(\vec{r})]}{\mu n(\vec{r})} \quad (1.41)$$

Sham μ μ μ μ μ Kohn-Sham. μ μ μ
 Kohn-Sham μ μ μ

μ μ $E^{xc}[n(\vec{r})]$.
 μ μ μ Coulomb,

« Hartree-Fock μ μ « : » μ

$$E^X = -\frac{3}{4} \frac{e^2}{f} k_F N \quad (1.42)$$

k_F μ μ Fermi
 μ μ $N = \int n d\vec{r}$.
 μ μ μ μ

$$E^X[n] = -\frac{3}{4} \frac{e^2}{f} \int k_F n d\vec{r} = -\frac{3}{4} e^2 \left(\frac{3}{f}\right)^{1/3} \int [n]^{1/3} n d\vec{r} \quad (1.43)$$

μ
 μ :

$$E^X[n(\vec{r})] = \int v^X[n(\vec{r})] n(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.44)$$

$$v^X[n(\vec{r})] = -\frac{3}{4} e^2 \left(\frac{3}{f}\right)^{1/3} [n(\vec{r})]^{1/3} \quad (1.45)$$

μ μ $\frac{vE^{XC}[n]}{un}$
 μ μ μ « »
 μ .

Pauli,

μ μ Coulomb,
 μ .

« »
 $E^{XC}[n(\vec{r})]$

μ . Slater

« » μ

« - »

$$E^{XC}[n(\vec{r})] = \int (v^X[n(\vec{r})] + v^{cor}[n(\vec{r})]) n(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.46)$$

$$v^{cor}[n(\vec{r})] = \left(\frac{3}{2} r - 1\right) v^X \quad (1.47)$$



Εικόνα 1.1 : Η υποδομή HellasGrid αποτελείται από έξι κόμβους, οι οποίοι βρίσκονται στην Αθήνα, στη Θεσσαλονίκη, στην Πάτρα και στο Ηράκλειο.

1.5.

μ , Hartree-Fock DFT
 Fock Hartree-
 $E^{xc}[n(\vec{r})]$. DFT μ , μ DFT μ ,
 μ μ μ « μ »
 μ ,
 .

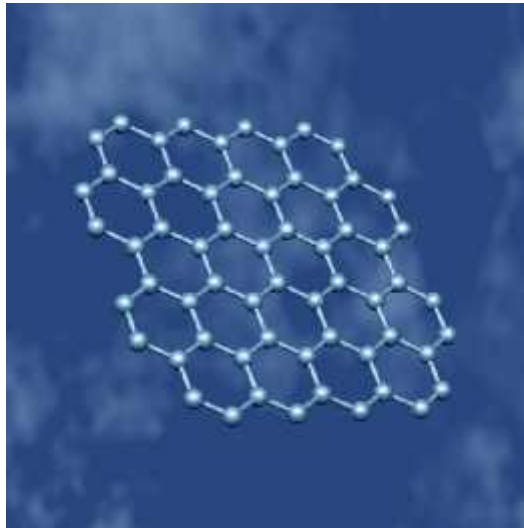
2. : μ μ , μ , μ .
3. μ (μ): , μ , μ .
4. : μ .
5. (μ): μ μ .
6. : μ . μ .
7. : .
8. : μ μ , (H.W. Kroto, 1985) μ μ , μ μ .
9. : μ μ μ 2004. μ μ μ μ .

μ μ μ .
 μ , [6].
 μ 2010 μ ,
 , Andre Geim -
 Konstantin Novoselov μ
 μ . μ
 , μ μ μ
 μ , μ
 μ - μ
 μ , μ
 μ 1962
 μ . ,
 μ .



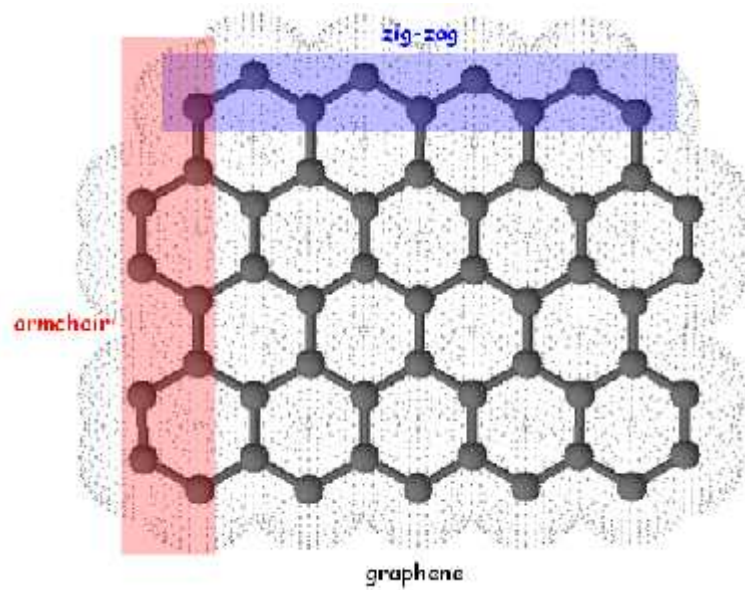
Εικόνα 2.1 : Στους Andrei Geim και Konstantin Novoselov το βραβείο Nobel Φυσικής το 2010 για την έρευνά τους σχετικά με το γραφένιο.

2004 μ Manchester
 Chernogolovka
 μ



Εικόνα 2.2 : Γραφένιο

μ μ
 « μ μ » . , μ μ
 μ . , μ
 μμ , μ zig-zag
 (GNRZ) armchair (GNRA).
 μ « μ » μ - μ
 μ , μ
 μ « » .



Εικόνα 2.3 : Οι χαρακτηριστικές διευθύνσεις συμμετρίας για το γραφένιο

(graphane) [9].

[7]. 2009,

200

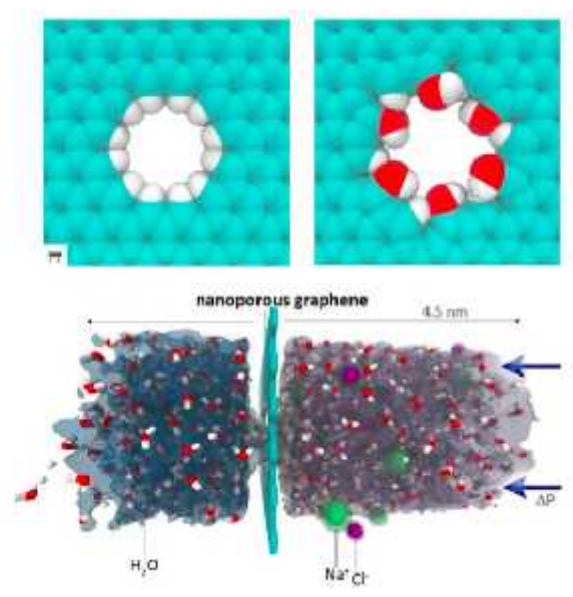
,

130 GPa, 2.8 GPa

carbon nanotubes 11-63 GPa [29].

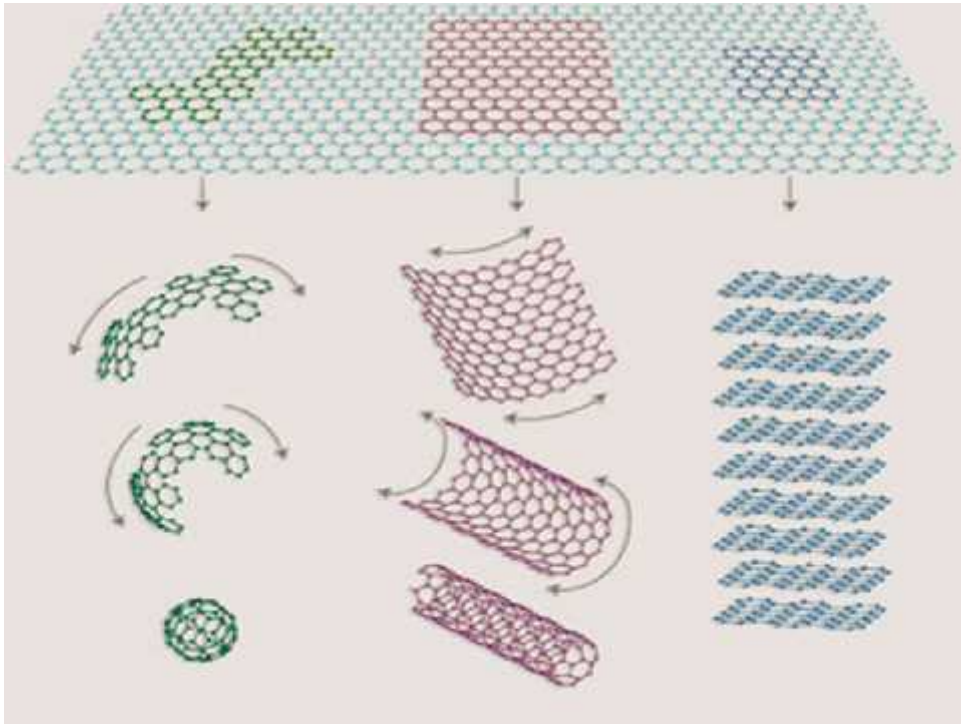
[8].

[30].



Εικόνα 2.4 : Ώθηση του αλμυρού νερού μέσω ενός φύλλου γραφενίου

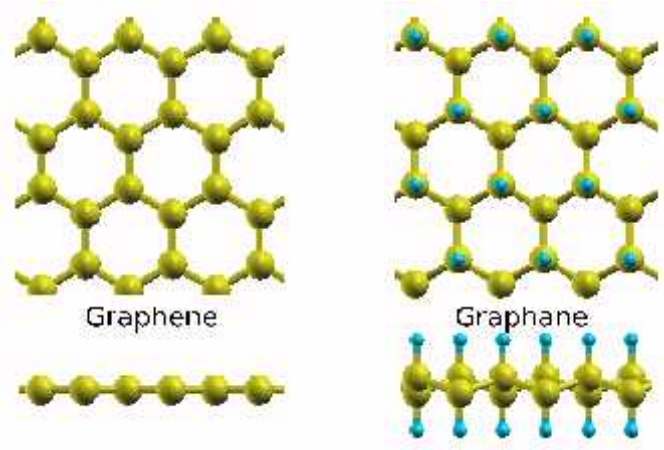
[31].



Εικόνα 2.5 : Γραφένιο

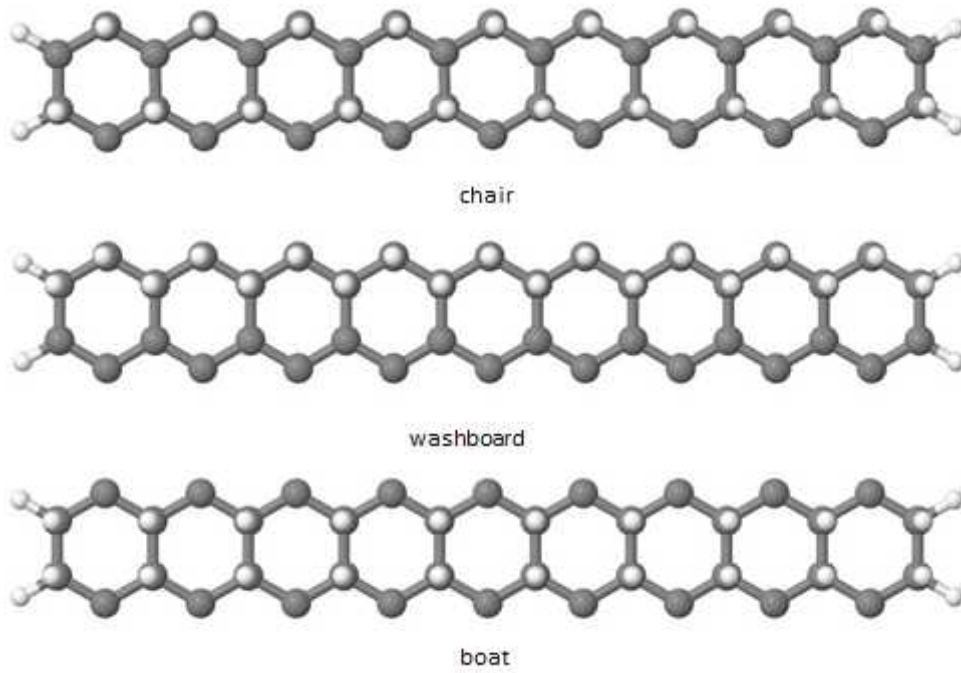
2.4 μ (), graphane

μ DFT
 μ graphane,
 μ $(CH)_n$ μ sp^3 μ Sofo et al,
 μ [8,24]. μ sp^3 μ ,
 μ μ , μ $3,5 \text{ eV}$ [9]. μ μ
 μ μ , μ μ μ μ
 μ μ .



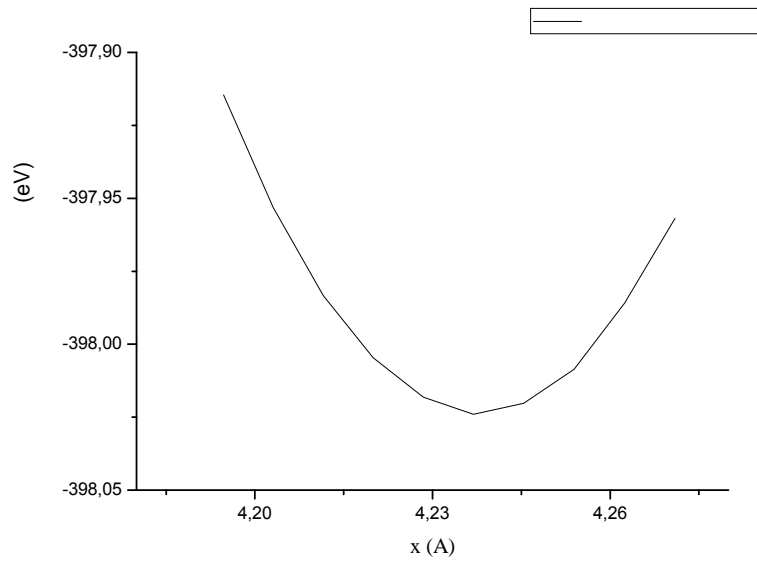
Εικόνα 2.6 : Υδρογονοποίηση του γραφενίου

chair (C-graphane) boat (B-graphane) [9].
washboard (W-graphane) [33].
chair
graphane, « — » boat
« — » washboard graphane
μμ μ μ
(CH), μ μ zig-zag μ μ
armchair μ , μ .



Εικόνα 2.7 : Τρεις διαφορετικές διατάξεις για GNRA. Έχουμε πλήρη υδρογονοποίηση των νανολωρίδων, δεν φαίνονται τα άτομα υδρογόνου που είναι στην πίσω πλευρά των νανολωρίδων.

μ μ , μ μ .

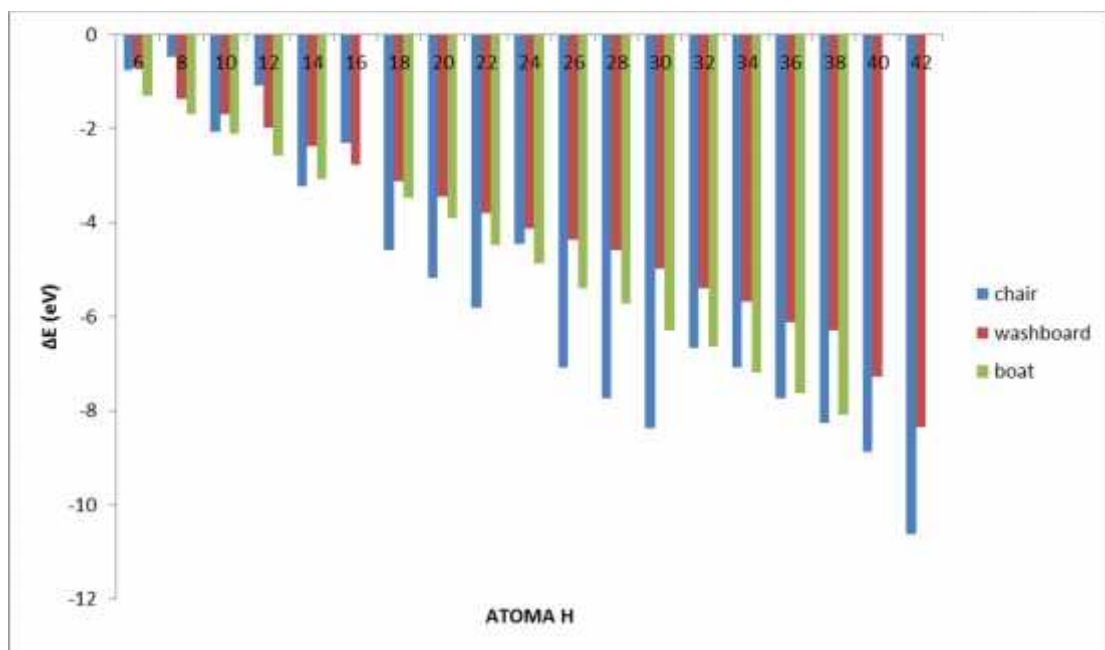


Εικόνα 3.2 : Σχέση ενέργειας με τη σταθερά πλέγματος της νανολωρίδας. Εύρεση της ελάχιστης ενέργειας περίπου ίση με -398 eV .

3.2 : armchair

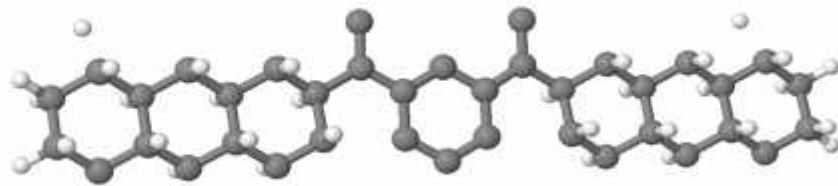
μ , μ μ μ
 μ μ μ μ (GNRZ, GNRA).
 μ μ
 :
 $= - [\mu (H-GNR) - E (H atom) - E (GNR)]$
 $\mu (H-GNR)$, $E (H atom)$
 μ μ μ E
 (GNR)
 μ μ μ . < 0 ,
 $[10,27]$.
 μ μ μ μ μ .
 GNRA μ , μ μ , μ

μ μ μ
 μ μ μ : chair, boat, washboard.
 μ μ μ
 μ μ μ
 3.3. μ μ μ
 μ μ μ [9],
 chair μ chair μ
 boat μ washboard
 μ μ μ
 μ μ μ



Εικόνα 3.3 : Έλεγχος της ευστάθειας για τις τρεις διαφορετικές διατάξεις στην περίπτωση armchair νανολωρίδας. Σε χαμηλή συγκέντρωση ατομικού υδρογόνου δεν φαίνεται ξεκάθαρα ποια είναι η πιο ευσταθής διάταξη, αυξάνοντας όμως την συγκέντρωση από 18 άτομα υδρογόνου και πάνω παρατηρείται η chair ως η πιο ευσταθής από τις τρεις.

μ cut μ 300 eV μ μ
 chair μ k-points (161). μ μ
 μ 22.1 Å.



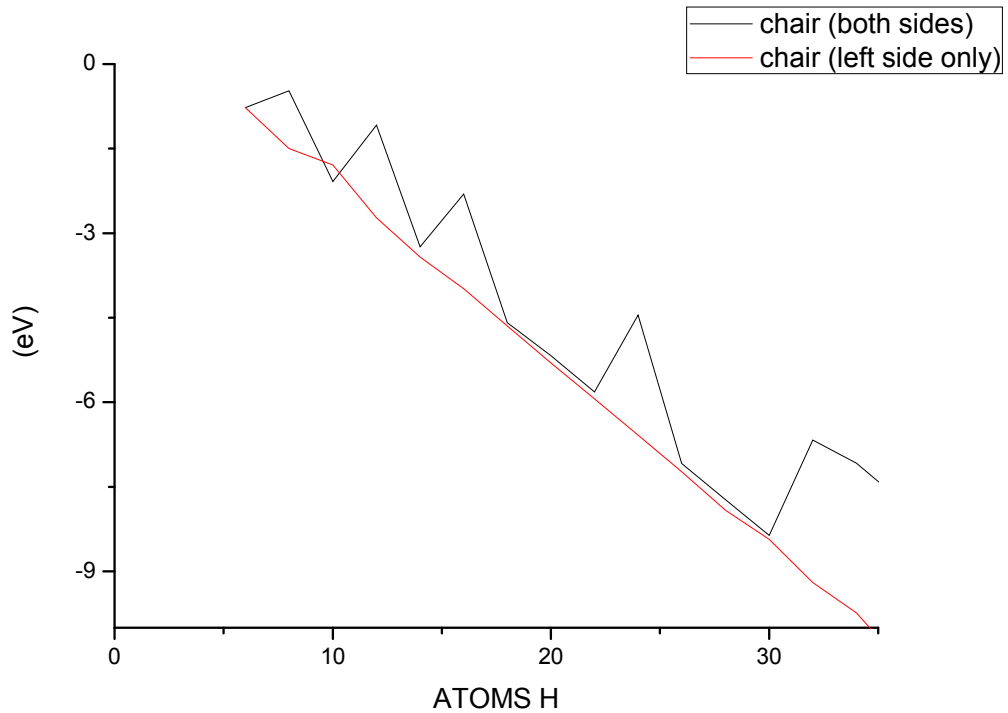
(a)



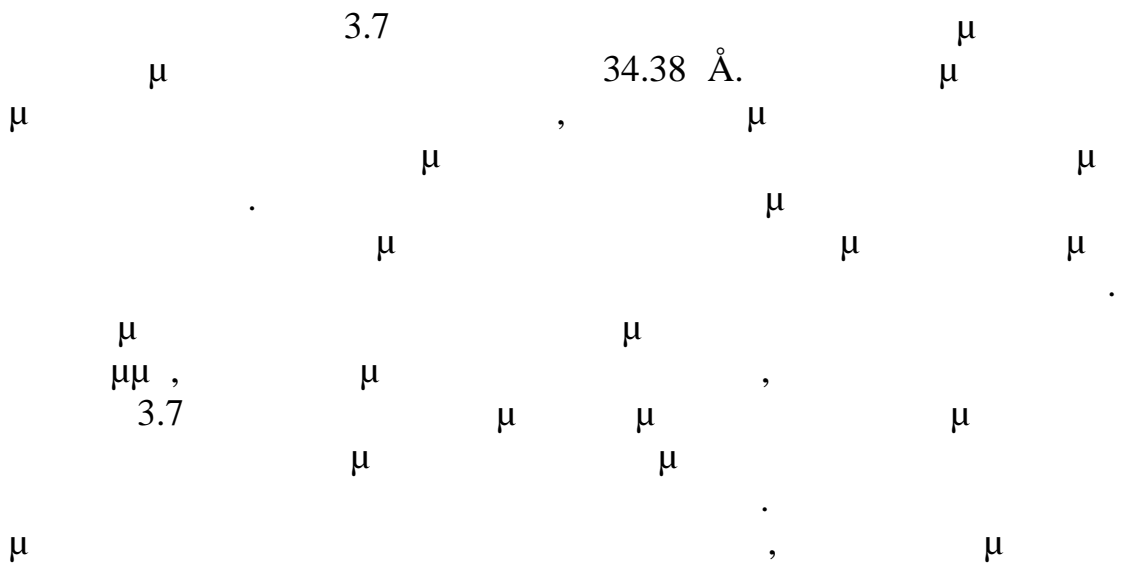
(b)

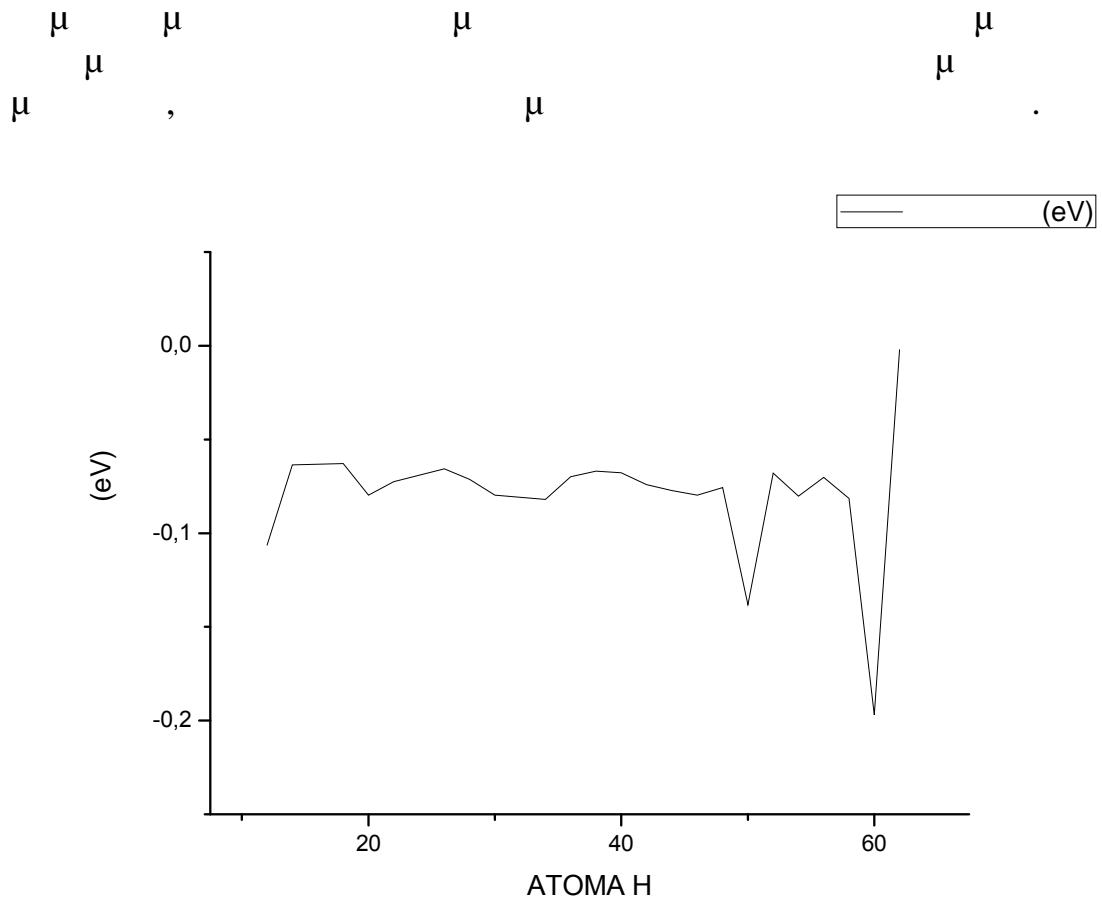
Δημι

Εικόνα 3.5 : (a) Τα άτομα του υδρογόνου είναι ισοκατανεμημένα στα δύο άκρα της νανολωρίδας, (b) τα άτομα του υδρογόνου βρίσκονται συγκεντρωμένα στο αριστερό άκρο της νανολωρίδας.

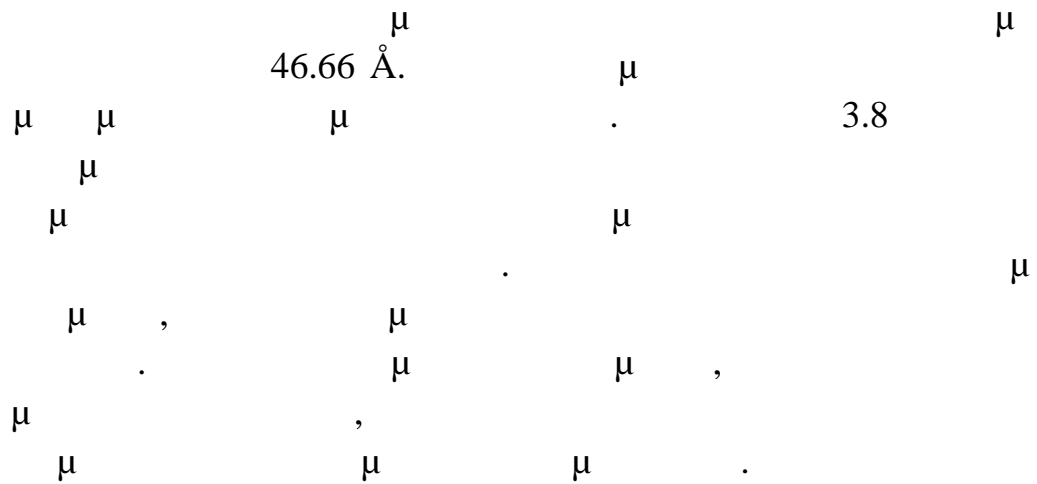


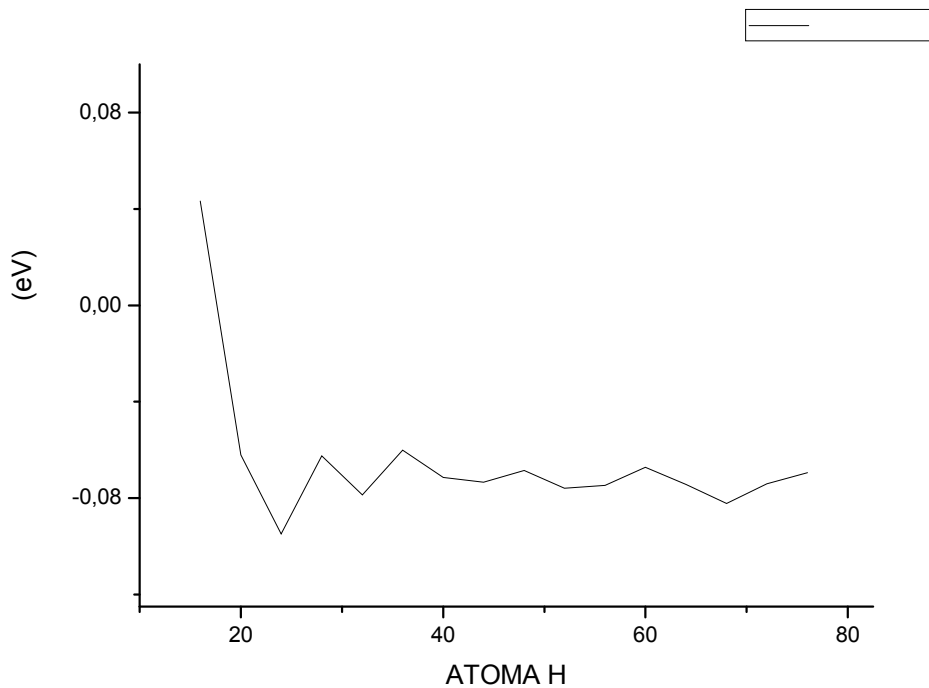
Εικόνα 3.6 : Σχέση της ενέργειας απορρόφησης με τον τρόπο που τοποθετείται στη νανολωρίδα το ατομικό υδρογόνο για νανολωρίδα πλάτους 22.1 Å. Η μαύρη καμπύλη αντιστοιχεί σε τοποθέτηση των ατόμων του υδρογόνου και στα δύο άκρα της νανολωρίδας, ενώ η κόκκινη λωρίδα αντιστοιχεί σε άτομα του υδρογόνου μόνο στο αριστερό άκρο με μόνο δύο άτομα υδρογόνου στο δεξιό άκρο. Είναι πολύ κοντά οι τιμές που συγκρίνονται, αλλά τείνει να είναι πιο ευσταθής η διάταξη με τα υδρογόνα να «προχωρούν» μόνο από το αριστερό άκρο.





Εικόνα 3.7 : Ενέργεια απορρόφησης ως συνάρτηση του τρόπου που τοποθετείται στη νανολωρίδα το ατομικό υδρογόνο για νανολωρίδα πλάτους 34.38 Å. Και σε αυτή την περίπτωση τείνει να είναι πιο ευσταθής η διάταξη με τα υδρογόνα να «προχωρούν» μόνο από το αριστερό άκρο.

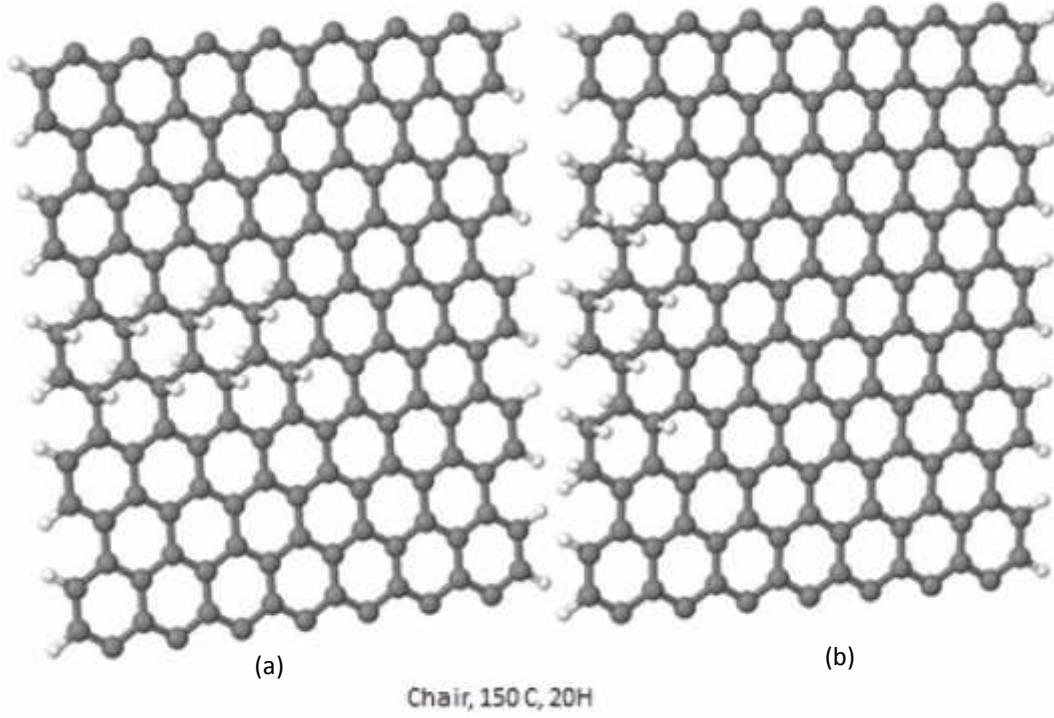




Εικόνα 3.8 : Σχέση της ενέργειας απορρόφησης με τον τρόπο που τοποθετείται στη νανολωρίδα το ατομικό υδρογόνο για νανολωρίδα πλάτους 46.66 Å. Και σε αυτή την περίπτωση τείνει να είναι πιο ευσταθής η διάταξη με τα υδρογόνα να «προχωρούν» μόνο από το αριστερό άκρο.

μ , μ μ DFT
 μ μ chair « μ » μ
 μμ , μ μ
 , μ , μ μ
 μ . μ
 μ μ μ 150 μ
 μ (3.9) , μ
 , μ μ
 2 μμ - μμ .
 41 μ

μ « » $\mu\mu -$
 $\mu\mu ,$ μ

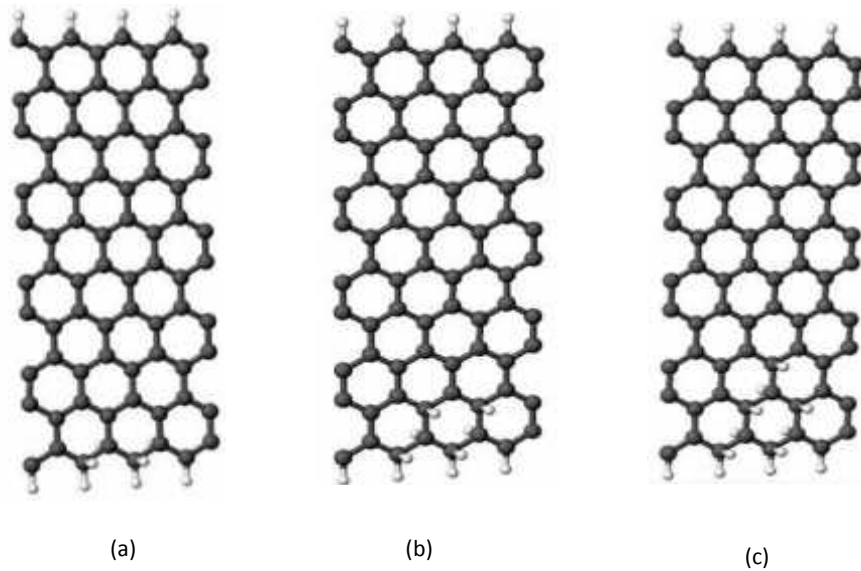


Εικόνα 3.9 : Η ενέργεια μεταβάλλεται σε σχέση με την διαφορετική διάταξη των ατόμων του υδρογόνου στην ίδια κυψελίδα. Πιο ευσταθής είναι η (b) περίπτωση.

3.3 : zig-zag

μ , μ
 μ , μ zig-zag
 μ . μ μ
 μ DFT . μ

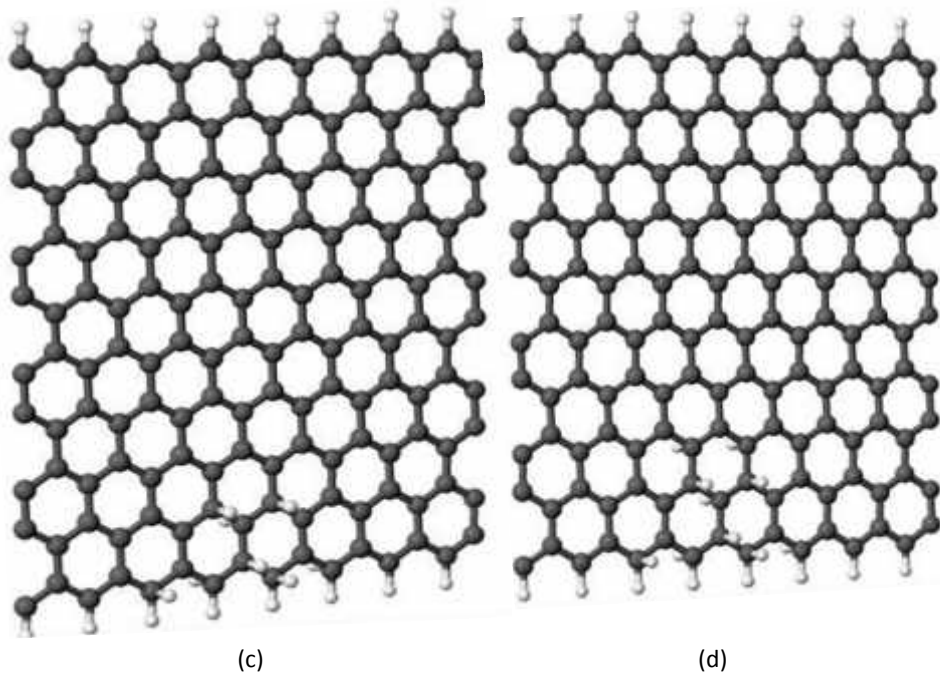
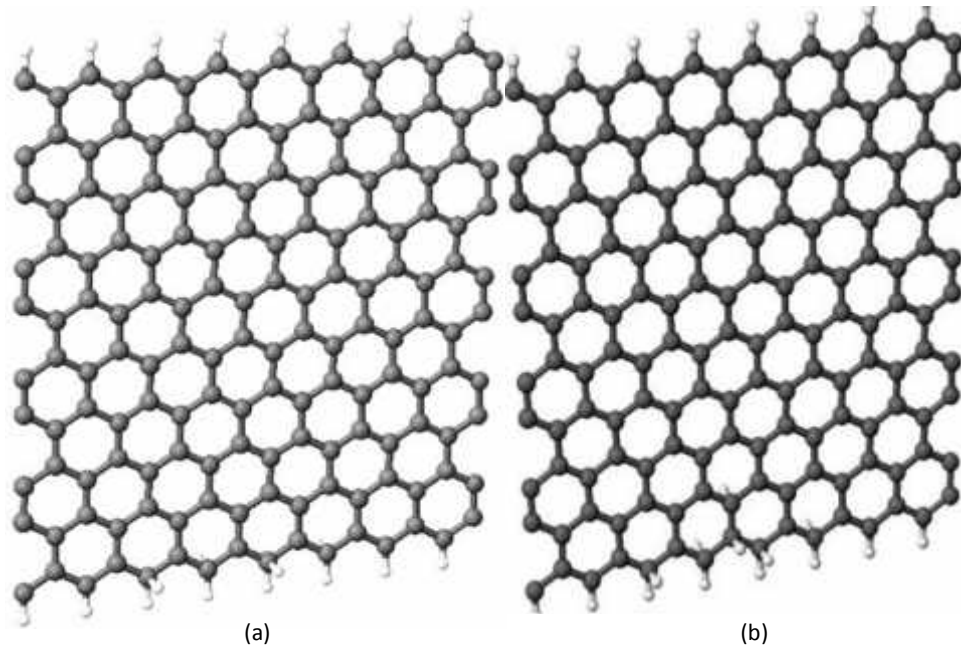
μ : 40μ 4μ
 μ 19.85 \AA
 μ , μ .
 μ μ $\mu\mu$.
 μ μ μ (3.10) .



Εικόνα 3.10 : Τοποθέτηση του ατομικού υδρογόνου σε zig-zag νανολωρίδα, δείχνοντας την συμπεριφορά του υδρογόνου να εισέρχεται προς το κέντρο της νανολωρίδας σχηματίζοντας «τρίγωνο», (c).

μ μ ,
 μ μ (μ μ)
 3.11c), μ μ μ
 μ μ μ

(3.11d).

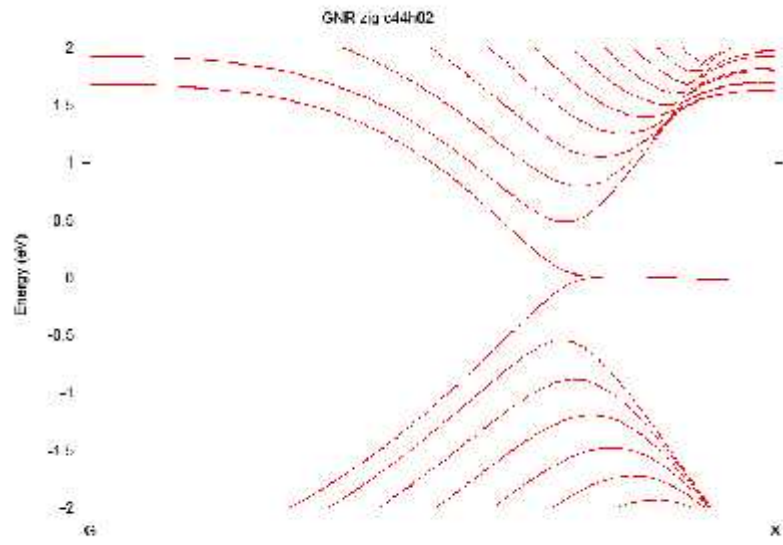


Εικόνα 3.11 : Αντίδραση του γραφενίου zig-zag διάταξης με το ατομικό υδρογόνο. Το υδρογόνο εισέρχεται προς το κέντρο της νανολωρίδας σχηματίζοντας «τρίγωνο».

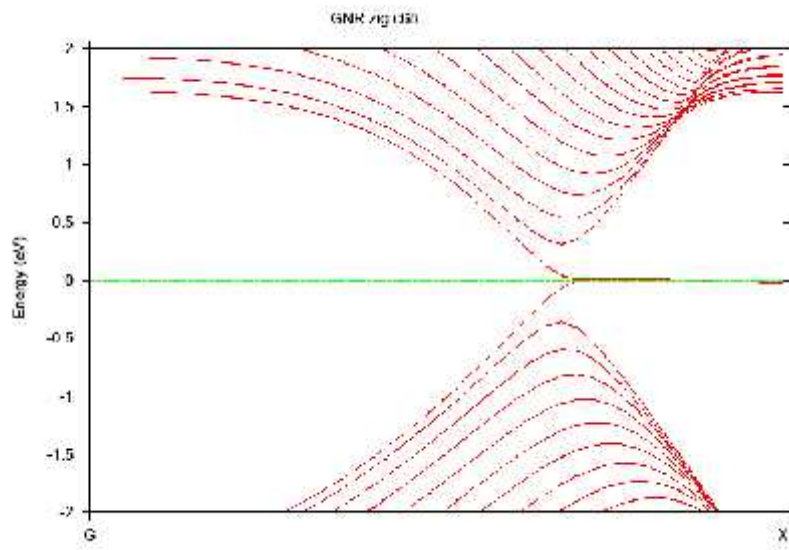
$\mu \mu$

$\mu\mu \cdot 124.13 \text{ \AA}$

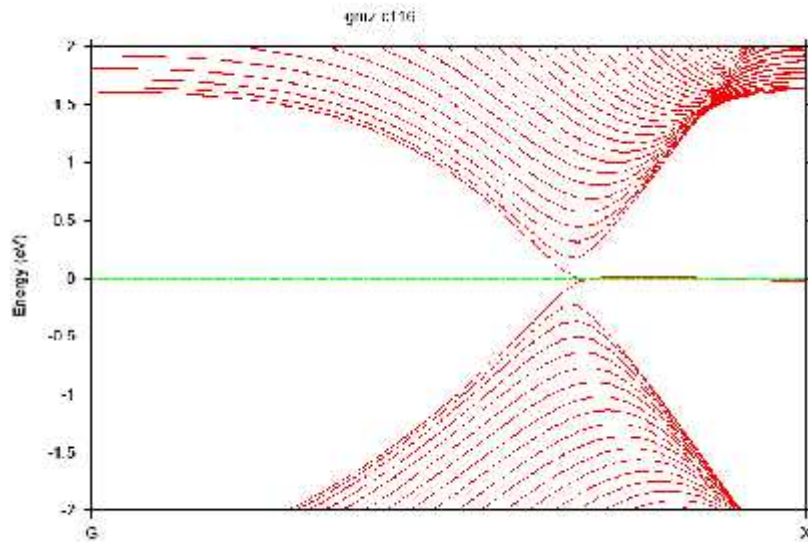
3.12



(a)



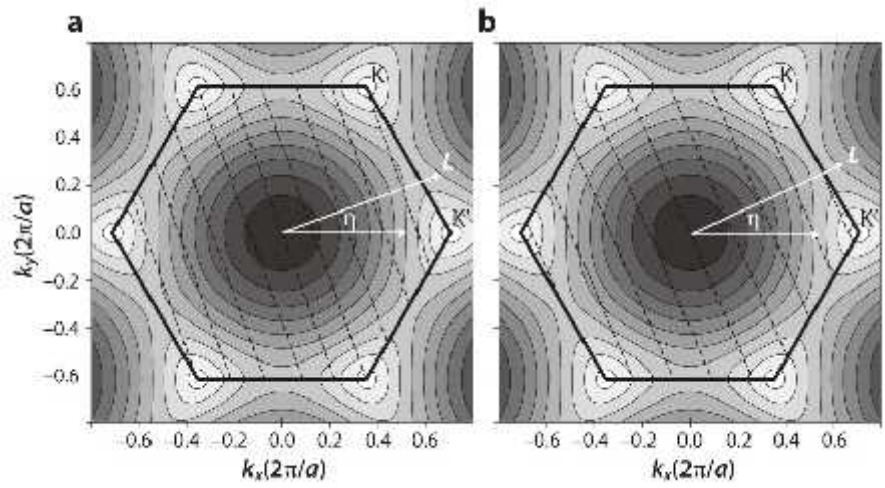
(b)



(c)

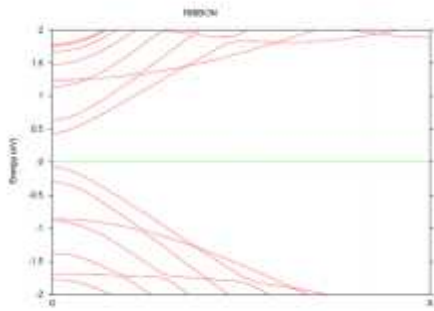
Εικόνα 3.12 : Διαγράμματα ενεργειακών ζωνών για zig-zag διάταξη με 44 άτομα άνθρακα (a), 68 άτομα άνθρακα (b) και τέλος για 116 άτομα άνθρακα (c). Όσο αυξάνονται τα άτομα του άνθρακα που απαρτίζουν τη νανολωρίδα πληθαίνουν οι ενεργειακές ζώνες και δημιουργείται κωνική δομή στο σημείο Dirac, το οποίο πειραματικά υπολογίζεται περίπου στο 0.4 .

μ μ μ : μ μ ,
 Dirac» μ μ 0.4, μ « μ
 4 μ μ
 Brillouin. μ Dirac μ
 μ $k-$.

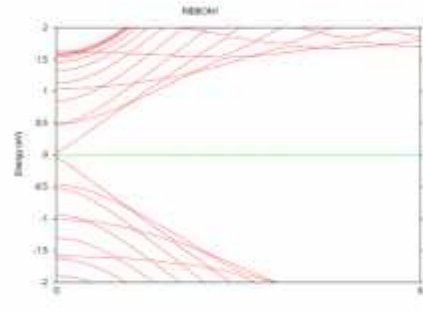


Εικόνα 3.13 : Πρώτη Ζώνη Brillouin για το γραφένιο

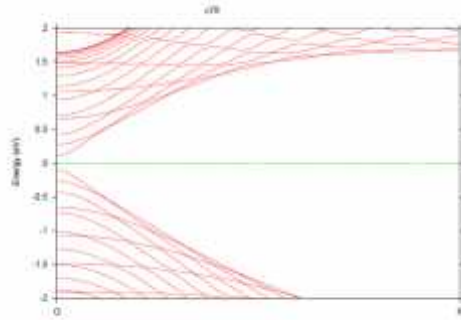
« Dirac» μ
 μ
 μ μ
 μ « Dirac» μ
 μ μ
 μ μ Dirac,
 μ [23].



(a) 38C, 4H, 22.1 Å



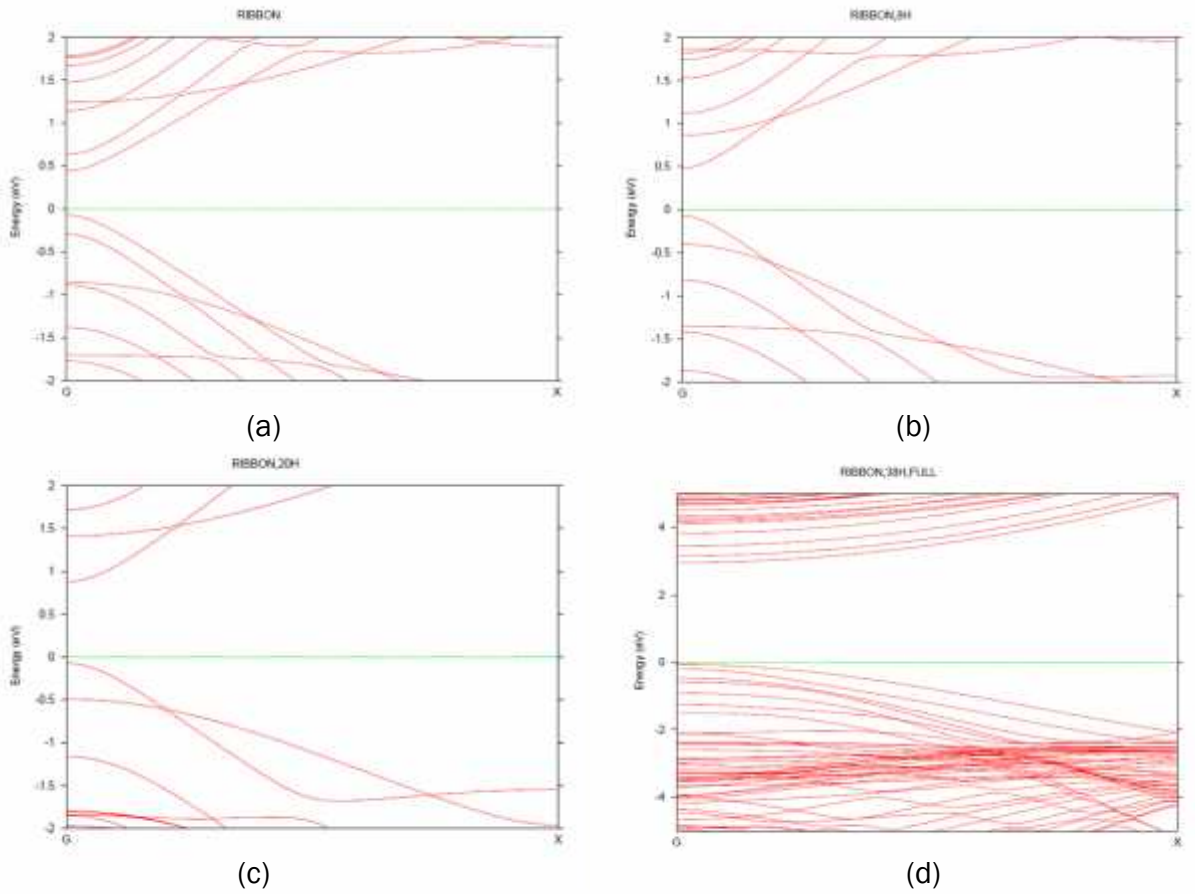
(b) 58C, 4H, 34.38 Å



(c) 78C, 4H, 46.66 Å

Εικόνα 3.15 : Μελέτη ενεργειακών ζωνών καθώς το μέγεθος της νανολωρίδας αυξάνεται. Παρατηρείται αύξηση των ενεργειακών ζωνών καθώς αυξάνεται ο αριθμός των ατόμων του άνθρακα, αλλά μείωση του ενεργειακού χάσματος.

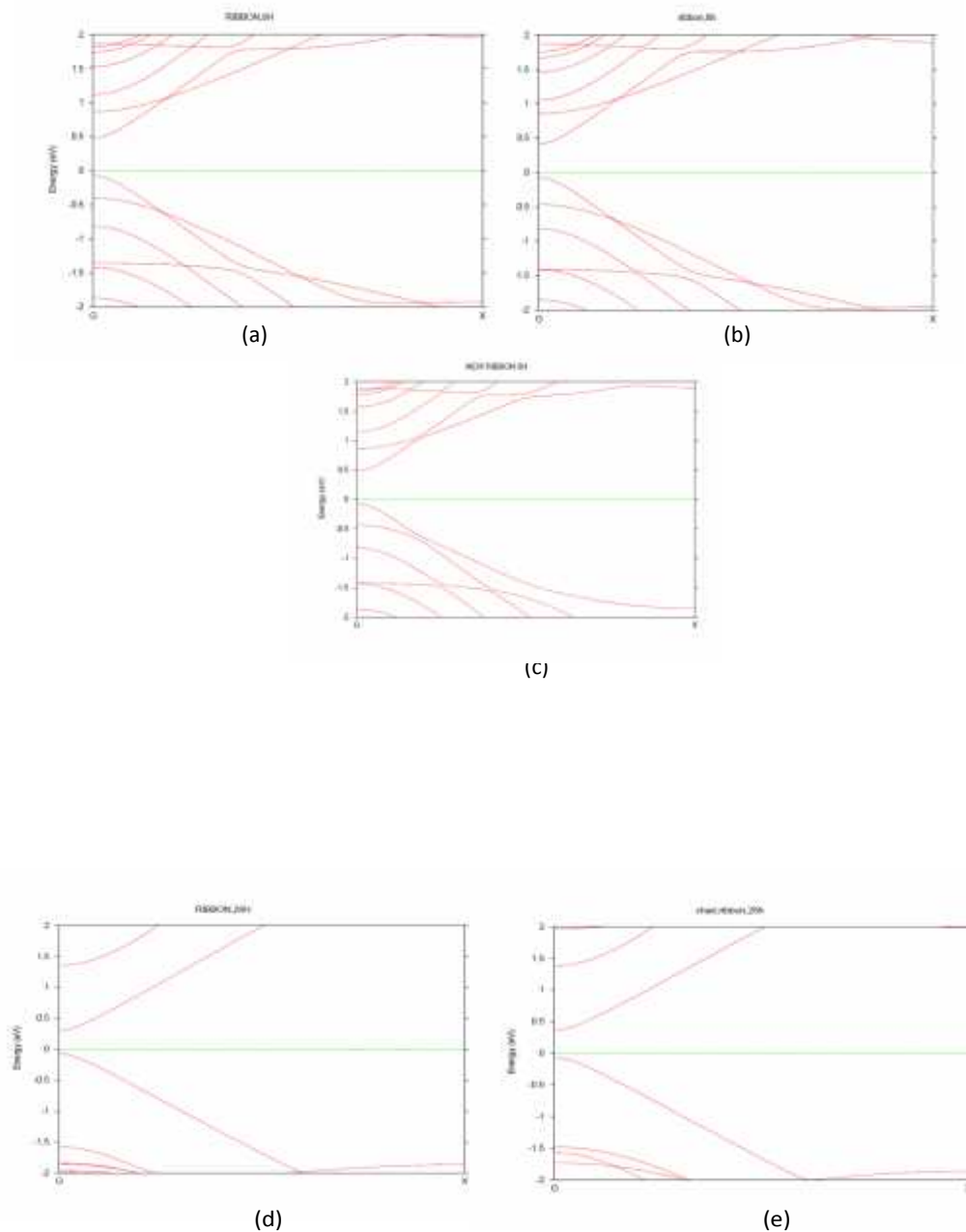
μ μ μ , μ μ μ ,
 μ μ
 , μ
 . μ μ $\mu\mu$
 , $\mu - \mu$
 μ .
 μ μ μ μ
 μ 2.7 eV 2.5 eV [13,24,28].
 $\mu\mu$,
 μ μ μ
 (3.16) . μ μ
 μ μ μ μ μ
 μ μ .



Εικόνα 3.16 : Οι ενεργειακές ζώνες κατά την υδρογονοποίηση του γραφενίου μέχρι την μετατροπή του σε γραφάνιο (d), όπου το ενεργειακό χάσμα αποκτά την μέγιστη τιμή του.

μ , μ μ
 μ
 μ , μ μ μ
 μ $\mu\mu$ μ
 (μ 3.17) . μ μ μ μ μ
 μ , « μ » μ , μ μ , μ
 μ 3.17(a) μ μ
 μ , 3.17(b) μ 3.17(c) 8 μ

). ,
 ,
 .
 . 3.17(d) 3.17(e).
 : .
 .
 .
 .
 .
 .
 .



Εικόνα 3.17 : Μεταβολή του ενεργειακού χάσματος ανάλογα με την συγκεντρωση του υδρογόνου. Σύγκριση των περιπτώσεων όπου τα άτομα του υδρογόνου είναι ισοκατανομημένα στα δύο άκρα (a), (d) ή δύο άτομα του υδρογόνου να είναι στο δεξιό άκρο της νανολωρίδας και τα υπόλοιπα στο αριστερό (b), (e) ή όλα τα άτομα του υδρογόνου να είναι συγκεντρωμένα στο αριστερό άκρο (c). Παρατηρείται ότι το σύστημα δεν αντιλαμβάνεται την επιμέρους κατανομή του υδρογονοποιημένου γραφενίου, οπότε δεν μεταβάλλεται το ενεργειακό χάσμα, άρα δεν έχουμε αλλαγή στις ηλεκτρονικές ιδιότητες του υλικού μας.

3.5 μ μ

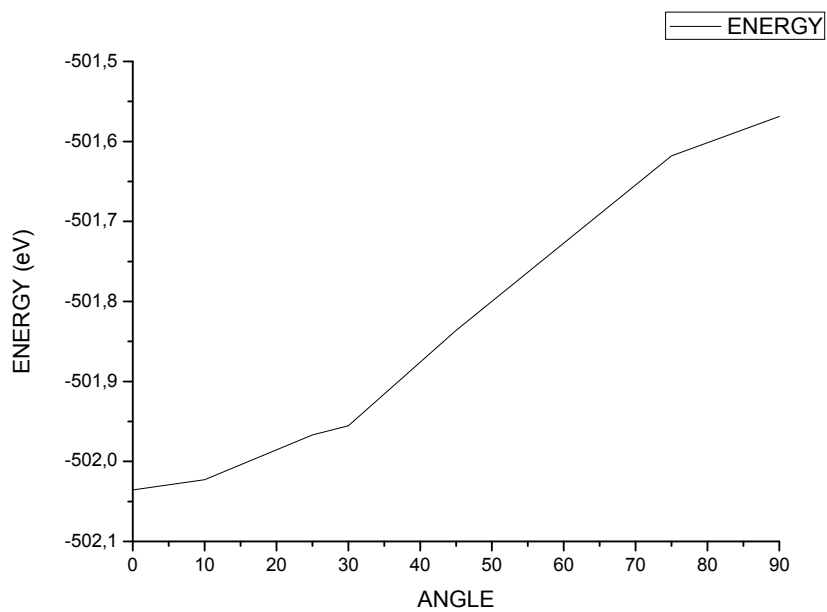
, μ μ

μ μ μ μ μ μ
μ μ μ μ μ μ
μ μ μ μ μ μ
μ μ μ μ μ μ
μ μ μ μ μ μ
μ μ μ μ μ μ

(3.19 armchair, 22.1 Å μ 38 μ) μ .
3.18
45 .



Εικόνα 3.18 : Μεταβολή της γωνίας που σχηματίζει το δεξι άκρο της νανολωρίδας με το επίπεδο.

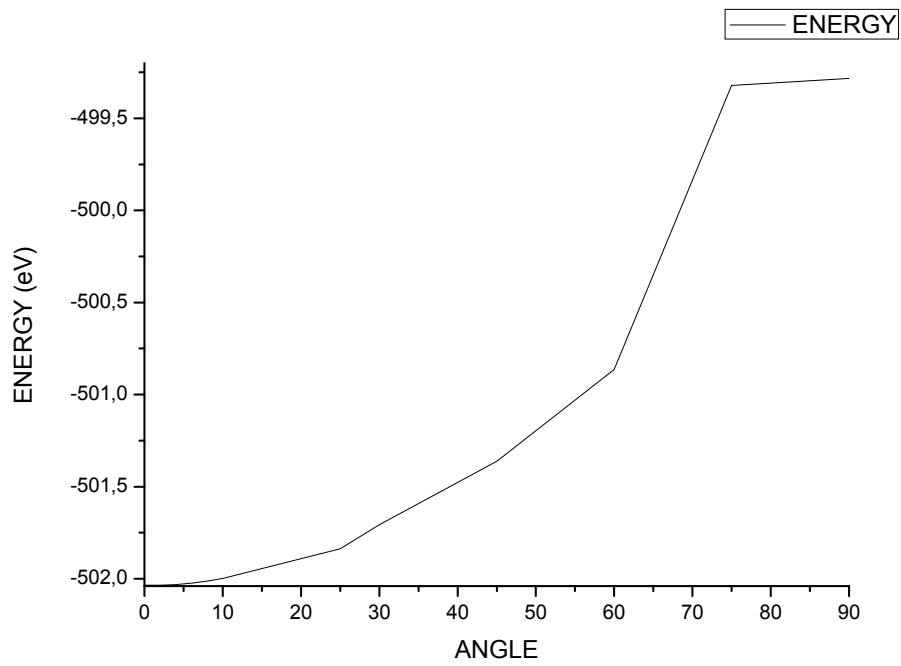


Εικόνα 3.19 : Συνολική ενέργεια της νανολωρίδας σε σχέση με την μεταβολή της γωνίας που δημιουργεί το δεξί άκρο με το επίπεδο.

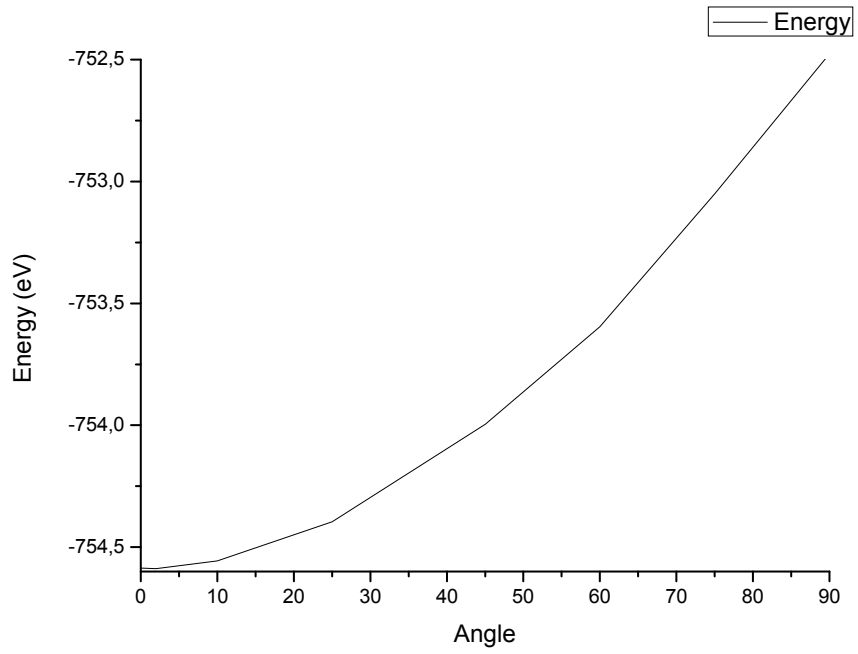
μ
μ μ , μ
· μ μ 45 ·
· μ μ ·



Εικόνα 3.20 : GNRA με τα δύο άκρα υπό γωνία 45° με το επίπεδο.



Εικόνα 3.21 : Συνολική ενέργεια της νανολωρίδας σε σχέση με την μεταβολή της γωνίας που δημιουργούν και τα δύο άκρα με το επίπεδο.

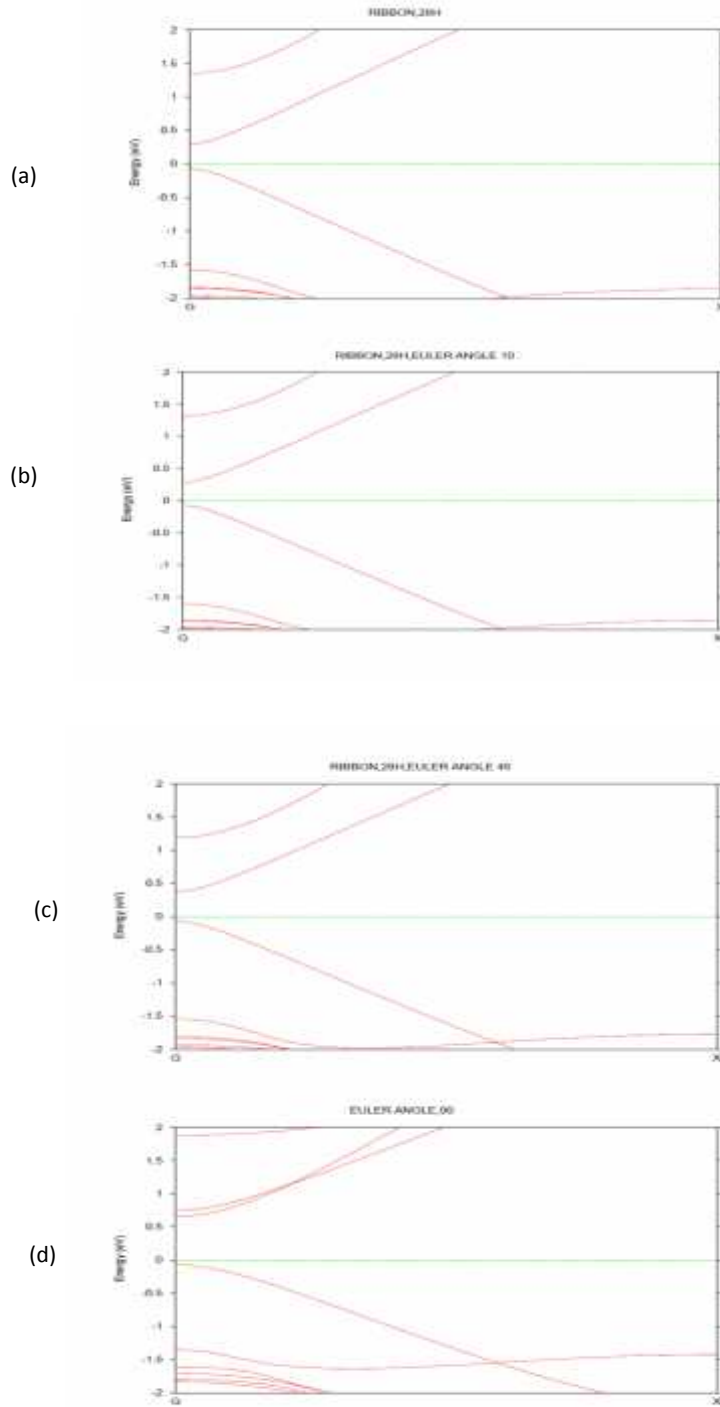


Εικόνα 3.24 : Σχέση για την ενέργεια της νανολωρίδας καθώς ανασηκώνουμε συμμετρικά τα άκρα της κατά διάφορες γωνίες ως προς το επίπεδο.

μ μ ,
 μ μ ,
 μ μ μ μ μ ,
 μ .
.

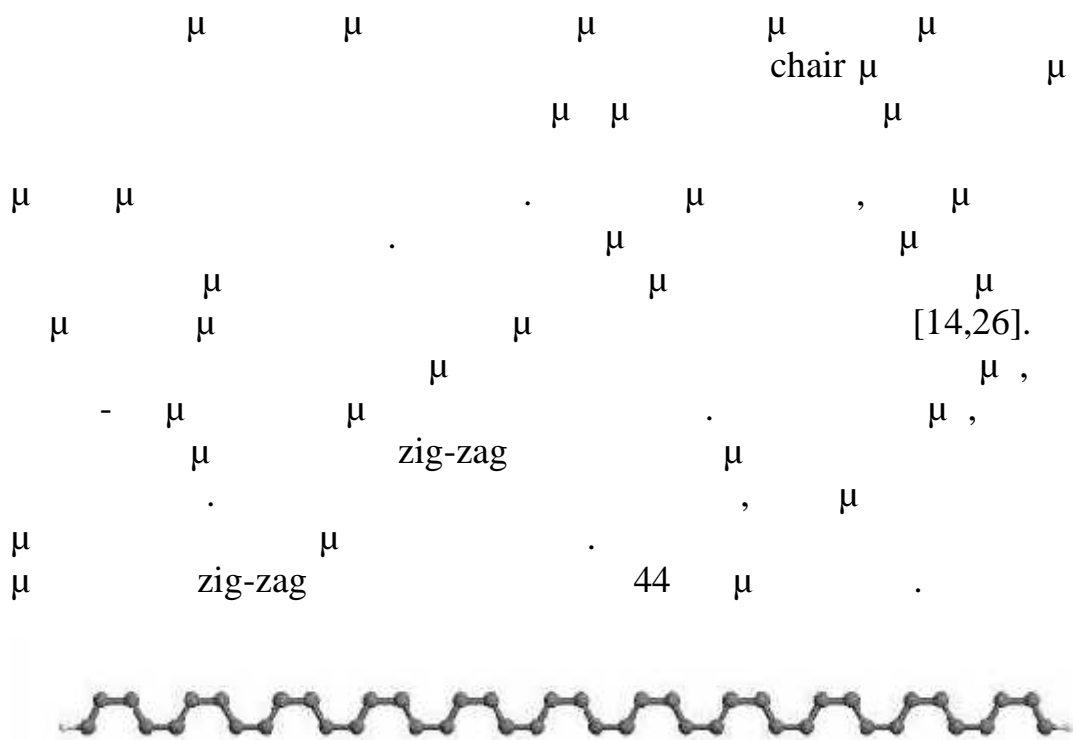
μ μ μ μ μ μ μ μ μ μ
, μ μ $\mu\mu$ μ μ
(3.22), μ μ μ
.

μ μ μ μ μ μ μ μ μ μ
 μ μ μ μ μ μ μ . μ μ
 μ μ μ μ μ .

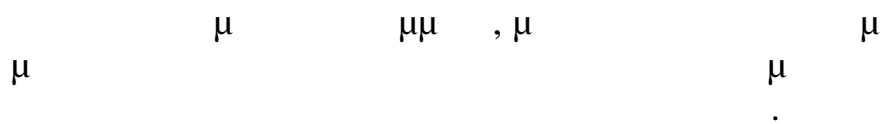


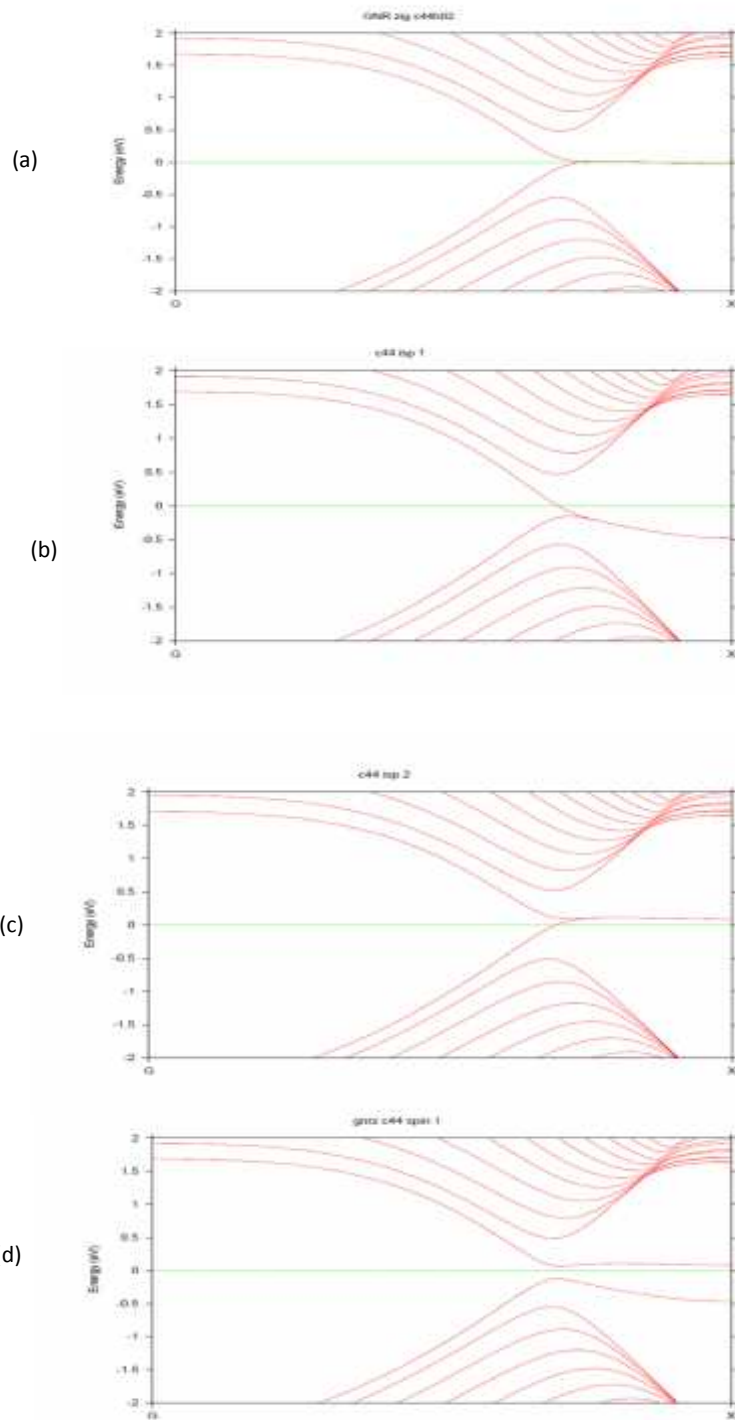
Εικόνα 3.25 : Διάγραμμα ενεργειακών ζωνών για τη μικρότερη νανολωρίδα που εξετάσαμε παραπάνω, ανασηκώνοντας τα άκρα της κατά διάφορες γωνίες. Παρατηρείται ότι η μηχανική παραμόρφωση δεν μεταβάλλει τις ηλεκτρονικές ιδιότητες του συστήματος. (a) τα άκρα της νανολωρίδας είναι επίπεδα, (b) τα άκρα ανασηκώνονται κατά 10° , (c) κατά 45° και τέλος (d) τα δύο άκρα σχηματίζουν γωνία 90° με το επίπεδο

3.6



Εικόνα 3.26 : GNRZ, με 44 άτομα άνθρακα και 2 άτομα υδρογόνου.





Εικόνα 3.27 : Αλλάζοντας το σπιν προσανατολισμό στα άκρα της νανολωρίδας, παρατηρούμε μεταβολή στις ηλεκτρονικές ιδιότητες του υλικού, δηλαδή στις περιπτώσεις (b) και (c) είναι σιδηρομαγνητικό το υλικό, ενώ στην περίπτωση (d) έχουμε αντιπαράλληλο προσανατολισμό στα άκρα της νανολωρίδας και το υλικό είναι αντισιδηρομαγνητικό και παρουσιάζει ενεργειακό χάσμα.

μ , μ (μ 3.27 (d)),
 μ , μ . 3.27 (b) (c)
 μ , μ μ
 μ .
 μ μ μ μ μ
 μ [15,18,20,22,25].

μ μ μ , armchair.
 μ 300 eV μ
 μ .
 μ μ μ μ , μ
 μ .
 μ μ μ 22,1 Å μ 38 μ
 μ 4 μ . μ μ
 μ μ μ , μ
 μ ,
 [14, 32] .

3.7 $\mu \quad \mu$

$\mu \quad \mu \quad \mu$
 μ
 μ .
 μ .
zig-zag (GNRZ), μ , armchair (GNRA)
 μ
 μ
armchair (GNRA) .
 μ μ
(chair, washboard, boat). μ μ
 μ chair
GNRA, μ μ μ
 μ μ
 , . zigzag (GNRZ), μ
 μ μ .
 μ μ μ μ μ
 , μ μ μ μ
 $\mu\mu$. μ μ
 $\mu\mu$ μ μ μ
 μ ,
 μ μ Dirac μ μ
 μ μ .
 μ GNRA, μ
 μ μ μ μ μ μ
 . μ μ μ ,
 μ μ μ μ .
 μ , μ GNRA μ μ μ
GNRZ. μ
 μ μ μ μ . ,
 μ μ ,
 μ . μ μ μ μ

μ
 .
 μ . μ μ μ μ μ . zig-zag
 GNRA GNRZ μ
 μ
 μ , μ μ , μ
 μ μ μ . , μ
 μ μ . , armchair
 μ μ μ μ μ μ μ
 μ .

- [1]. Atomic and Electronic Structure of Solids, E. Kaxiras, (Cambridge University Press, 2003).
- [2]. N.W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics (Saunders College Publishing, Philadelphia, 1976).
- [3]. Lecture VII, Physical Review, 136, B864.
- [4]. Martijn Marsman, "History of VASP".
- [5]. μ , μ (μ) . μ ,
- [6]. A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nature Materials 6, 183-191 (2007).
- [7]. Frank, G. soukleri, J. arthenios, . apagelis, . Riaz, R. Jalil, . S. ovoselov and C. Galiotis, CS ano 4, 3.131-3.138 (2010).
- [8]. Castro Neto, A. H., F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S Novoselov and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. 81, 109, 2009
- [9]. Sofo, J. O., Chaudhari, A. S., Barber, G. D., Physical Review B 75, 153401 _2007_.
- [10]. H. J. Xiang, E. J. Kan, Su-Huai Wei, X. G. Gong, and M.- H. Whangbo, Physical Review B 82, 165425 _2010_
- [11]. C. Kittel: Introduction to solid state physics, 5th edition
- [12]. Young-Woo Son, Marvin L. Cohen, and Steven G. Louie, PRL 97, 216803 (2006)
- [13]. Z. M. Ao and F. M. Peeters, J. Phys. Chem. C 2010, 114, 14503–14509
- [14]. Wei L. Wang, Sheng Meng, and Efthimios Kaxiras, Nano Letters, 2008, Vol. 8, No. 1, 241-245.
- [15]. A. D. Hernández-Nieves, B. Partoens, and F. M. Peeters, PHYSICAL REVIEW B 82, 165412 _2010_.

- [16]. D. C. Elias, R. R. Nair, T. M. G. Mohiuddin, S. V. Morozov, P. Blake, M. P. Halsall, A. C. Ferrari, D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, K. S. Novoselov, *SCIENCE*, VOL 323, 30 JANUARY 2009
- [17]. Manu Jaiswal, Candy Haley Yi Xuan Lim, Qiaoliang Bao, Chee Tat Toh, Kian Ping Loh, and Barbaros Ozyilmaz, *ACS NANO*, VOL. 5, NO. 2, 888–896, 2011.
- [18]. Joo-Hyoung Lee and Jeffrey C. Grossman. *Applied Physics Letters* 97, 133102 _2010_
- [19]. Yafei Li, Zhen Zhou, Panwen Shen, and Zhongfang Chen, *J. Phys. Chem. C* 2009, 113, 15043–15045.
- [20]. Y. H. Lu and Y. P. Feng, *J. Phys. Chem. C* 2009, 113, 20841–20844
- [21]. Hongjun Xiang, Erjun Kan, Su-Huai Wei, Myung-Hwan Whangbo, and Jinlong Yang, *Nano Letters* 2009, Vol. 9, No. 12, 4025-4030.
- [22]. Tobias Wassmann, Ari P. Seitsonen, A. Marco Saitta, Michele Lazzeri, and Francesco Mauri, *Jacs Articles*, 132, 3440–3451, 2010 .
- [23]. Yu Wang, Xiangfan Xu, Jiong Lu, Ming Lin, Qiaoliang Bao, Barbaros Ozyilmaz, and Kian Ping Loh, *ACS NANO*, VOL. 4, NO. 10, 2010.
- [24]. Richard Balog, Bjarke Jørgensen, Louis Nilsson, Mie Andersen, Emile Rienks, Marco Bianchi, Mattia Fanetti, Erik Lægsgaard, Alessandro Baraldi, Silvano Lizzit, Zeljko Sljivancanin, Flemming Besenbacher, Bjørk Hammer, Thomas G. Pedersen, Philip Hofmann and Liv Hornekær, *Nature Materials, Letters*, Vol. 9, 2010.
- [25]. Abhishek K. Singh and Boris I. Yakobson, *Nano Letters*, 2009, Vol. 9, No. 4, 1540-1543.
- [26]. Manuel J. Schmidt and Daniel Loss, *Physical Review B* 82, 085422 _2010_.
- [27]. Duminda K. Samarakoon and Xiao-Qian Wang, VOL. 3, NO. 12, 4017–4022, 2009.

[28]. H. Şahin, C. Ataca, and S. Ciraci, Physical Review B 81, 205417 (2010)

[29]. Regis Y N Gengler, Konstantinos Spyrou and Petra Rudolf - A roadmap to high quality chemically prepared graphene

[30]. News release, University at Buffalo, Release Date: May 17, 2012

[31]. David Cohen-Tanugi and Jeffrey C. Grossman. Nano Lett. 2012, 12 (7), pp 3602-3608

[32]. Oleg V. Yazyev, Wei L. Wang, Sheng Meng, and Efthimios Kaxiras, Nano Letters 2008, Vol. 8, No. 2, 766

[33]. Artyukhov, V. I. and L. A. Chernozatonskii, J. Phys. Chem. A114, 5389, 2010.

