

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕДЛЕННО ДВИЖУЩИХСЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ИОНОВ С ГРАФЕНОМ НА ПОДЛОЖКЕ

Иванов А.В.

ФГБОУ ВПО «ЧГПУ им. И.Я. Яковлева», кафедра Общей и Теоретической Физики,
Российская Федерация, 428000, г. Чебоксары, ул. К. Маркса д. 38, 8-919-659-52-50,
alexputen@rambler.ru

С тех пор как был выделен стабильный графен, его особые свойства электронной проводимости привлекли большой интерес. Большой вклад в проводимость графена идет от рассеяния электронов на заряженных примесях, которые широко распространены в графене.

В данной работе мы анализируем динамическое экранирование внешних зарядов, движущихся рядом с графеном на подложке. Мы заинтересованы в относительно медленных ионах, движущихся в диапазоне скоростей от боровской скорости до тепловых скоростей. Мы рассмотрим эффекты динамической поляризации на ионах, движущихся параллельно одному слою графена на подложке. В частности, мы рассчитаем силу торможения и силу, создаваемую зеркальным изображением заряда, которые описывают, соответственно, скорость диссипации кинетической энергии ионов при одночастичном и коллективном электронных возбуждениях в графене, а также эффекты изображения потенциала V , который притягивает ионы к графену.

Графен в экспериментах обычно лежит на подложке, которая может оказывать довольно сильное влияние на его динамическую поляризацию. Мы ограничимся здесь изучением эффектов изолирующей подложки, например, SiO_2 имеющей диэлектрическую проницаемость $\epsilon = 3,9$. M. Ishigami с соавторами обнаружили [1], что расстояние h между графеном и подложкой составляет порядка расстояния между слоями графена в графите или даже больше, но лишь в работе [2] учитывались эффекты конечной h . Наша главная цель продемонстрировать, насколько сильны эффекты конечной h в динамической поляризации движущихся ионов, что предполагает необходимость включения размера зазора в явном виде в моделирование явления экранирования графена. В работе [2] динамический отклик графена и подложки описывается с помощью квазиклассического уравнения Власова для электронов графена. Роль разрыва между графеном и подложкой будет подробно рассмотрена в качестве внешнего параметра.

Моделирование проводилось методом молекулярной динамики с использованием потенциала ReaxFF из свободного пакета для классической молекулярной динамики LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).

Литература.

1. Ishigami M., Chen J. H., Cullen W. G., Fuhrer M. S., Williams E. D Atomic Structure of Graphene on SiO_2 // Nano Lett., 7, 2007, 1643.
2. Radović I., Hadžievski Lj. Polarization of supported graphene by slowly moving charges // PHYSICAL REVIEW, B 77, 2008, 075428.