

МАТЕРІАЛИ ДЛЯ СЕНСОРІВ

SENSOR MATERIALS

PACS 73.63.Rt, 78.40.-q, 78.70.Dm, УДК 538.9

DOI 10.18524/1815-7459.2018.3.140397

ФОТОННІ ТА ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ ЛАТЕРАЛЬНИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВІ ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНОГО ГРАФЕНА ПІД ДІЄЮ СТАТИЧНОГО ТИСКУ

Р. М. Балабай, О. А. Коновал, А. Г. Соломенко

Криворізький державний педагогічний університет, пр. Гагаріна, 54, Кривий Ріг, 50086,
Україна; тел.: (0564)71-57-31, e-mail: balabai@i.ua, konovaloa@gmail.com,
solomenko.anastasiiia@gmail.com

ФОТОННІ ТА ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ ЛАТЕРАЛЬНИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВІ ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНОГО ГРАФЕНА ПІД ДІЄЮ СТАТИЧНОГО ТИСКУ

Р. М. Балабай, О. А. Коновал, А. Г. Соломенко

Анотація. Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів отримані просторові розподіли густини валентних електронів, розподіли електронних станів у валентній зоні та зонах провідності, діелектричні матриці та макроскопічні відносні проникності латеральних гетероструктур на основі функціоналізованого графена як фотонного кристалу під дією статичного тиску.

Ключові слова: латеральна гетероструктура, функціоналізований графен, функціонал електронної густини, псевдопотенціал із перших принципів, електронна заборонена зона, спектр поглинання, статичний тиск

PHOTONIC AND ELECTRONIC PROPERTIES OF LATERAL HETEROSTRUCTURES BASED ON FUNCTIONALIZED GRAPHENE UNDER ACTION OF STATIC PRESSURE

R. Balabai, O. Konoval, A. Solomenko

Abstract. Within the framework of the methods of the electron density functional and the ab initio pseudopotential, the spatial distributions of the valence electron density, the distribution of electron states by energies in the valence and conduction bands, dielectric matrices and the macroscopic relative permeability of lateral heterostructures based on functionalized graphene as a photonic crystal depending on the action of static pressure were obtained.

Keywords: lateral heterostructure, functionalized graphene, the electron density functional, ab initio pseudopotential, electronic band gap, absorption spectrum, static pressure

ФОТОННЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ЛАТЕРАЛЬНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ГРАФЕНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ СТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ

Р. М. Балабай, А. А. Коновал, А. Г. Соломенко

Аннотация. Методами функционала электронной плотности и псевдопотенциала из первых принципов получены пространственные распределения плотности валентных электронов, распределения электронных состояний в валентной зоне и зонах проводимости, диэлектрические матрицы и макроскопические относительные проницаемости латеральных гетероструктур на основе функционализированного графена как фотонного кристалла под действием статического давления.

Ключевые слова: латеральная гетероструктура, функционализированный графен, функционал электронной плотности, псевдопотенциал из первых принципов, электронная запрещенная зона, спектр поглощения, статическое давление

1. ВСТУП

Графен широко використовується як активний, так і неактивний матеріал для датчиків тиску. У проектуванні п'єзоелектричного датчика графен може бути використаний як електродний матеріал для підтримки п'єзоелектричних матеріалів, а також добавок до п'єзоелектричних полімерів, для посилення п'єзоелектричності. Здатність різко змінювати опір робить графен ідеальним активним матеріалом у багатьох конструкціях датчика п'єзореzystивного типу. Графен

може також використовуватися як активний, так і неактивний матеріал в ємнісних датчиках тиску, які мають високу електропровідність, чутливість та велику площу поверхні [1]. Автори роботи [2] повідомляють про нелінійність прогину і велику амплітудну вібрацію графенових листів. Їх відхилення та основна частота є достатньо великими, тому вони перспективні у застосуванні для сенсорів високої чутливості та резонаторів. Порівняно з датчиками на основі кремнію [3], які мають типові лінійні розміри порядку сотні мікрон, розміри графен-сенсора досягають

кілька мікрон. Через їх меншу площу і меншу товщину нормалізація чутливості на порядок більша ніж для звичайних п'єзорезистивних датчиків тиску на основі Si. Їх прозорість, гнучкість та п'єзорезистентність є вагомими перевагами у використанні. Основною проблемою при проектуванні прозорих датчиків тиску, як свідчать автори [4], є ідеальне поєднання високої оптичної прозорості та чутливості високого тиску. Урахування цих вимог, зазвичай, досягається компромісом між прозорістю та використанням візерункової діелектричної поверхні, що підвищує чутливість до тиску, але зменшує прозорість. У роботі [5] розглядаються дві можливі конфігурації розміщення нітриду бора і графену для створення датчиків тиску атомного масштабу. Автори [6] повідомляють про сенсорний елемент тиску на основі гетероструктури нітрид бора/графен/нітрид бора. Шари нітриду бора використовувались для захисту графенового шару від окислення та забруднення. Автори [7] пропонують композитний датчик тиску сендвіч-типу на основі карбонової нанотрубки та графену. У статті [8] розглядається інтегрований на мікрофлюїдну еластичну трубку лист графена, який, завдяки зміні свого електричного опору, забезпечує вимірювання тиску. Повідомляється також [9] про створення датчика тиску і температури на основі інтерферометра Фабрі-П'єро, у складі якого є графенова плівка. Чутливість подібного сенсора становить 501,4 нм/кПа. У роботі [10] автори демонструють доцільність використання графена як стиснуто-плівкового датчика тиску, що складається з мембрани, яка покриває газову порожнину. Основною відмінністю від звичайних датчиків тиску є наявність відкритого каналу викиду, який підтримує середній тиск всередині порожнини, рівний тиску навколишнього середовища. Подібний датчик працює шляхом стискування газу в порожнині, що знаходиться під тиском навколишнього середовища. Автори [11] дослідили модель сенсорного емнісного датчика тиску, що складається з графен-полімерної гетероструктурної плівки, ламінованої на поверхню діоксиду кремнію кремнієвої пластини. Конструкція дозволяє

гнучкій графен-полімерній плівці частково нависати над підкладкою, при цьому тиск на мембрану призводить до відхилення, яке відновлюється навіть після перевищення робочого діапазону тиску на мембрану в 10 разів. Автори [12] повідомляють про високочутливий, надтонкий та прозорий датчик тиску на основі гофрованого графена, який має надвисоку експлуатаційну чутливість ($6,92 \text{ кПа}^{-1}$), що змінюється від характеристик, властивих ізоляторам, в неактивному стані до характеристик провідника під час стиснення. У роботі [13] демонструється гнучкий, ультрочутливий сенсор резистивного типу на основі графена. Завдяки великій відстані між графеновими шарами та унікальній V-подібній мікроструктурі, чутливість датчика тиску досягає $0,96 \text{ кПа}^{-1}$ при широкому діапазоні тиску (0-50 кПа). Датчики тиску є фундаментальними компонентами пристроїв електронної шкіри [14,15]. Автори [16] повідомляють про розроблені на основі графену тактильні сенсори та електронну шкіру, які можуть мати широке застосування в передовій робототехніці, моніторингу охорони здоров'я, штучному інтелекті, інтерфейсах людино-машин тощо.

На відміну від вже існуючих механізмів роботи датчиків тиску, пропонується нами модель являє собою принципово новий підхід у проектуванні подібних датчиків. Основним елементом є латеральна гетероструктура на основі функціоналізованого листа графена, який або розташований на твердій діелектричній підкладці у камері досліджуваного середовища, що створює вплив на одну поверхню листа графена, або вільно підвішений у камері в положенні, що створює на лист графена однакові впливи досліджуваного середовища на обидві поверхні листа. Наявні періодичні чергування ділянок чистого графена (C) та функціоналізованого графена (CH) [17], які мають різну діелектричну проникність, дають підстави розглядати таку структуру в якості фотонного кристалу (ФК) і досліджувати зміну його властивостей у залежності від тиску зовнішнього середовища. Методи розрахунку, що використовуються нами, які застосовують функціонал електронної густини, є повним універсальним

інструментом для вивчення фотонних кристалів. Для встановлення закономірностей зв'язку фотонних та електронних властивостей латеральних гетероструктур на основі функціоналізованого графена по відношенню до статичного тиску зовнішнього середовища, використовуючи авторський код [18], були отримані просторові розподіли густини валентних електронів, розподіли електронних станів у зонах валентній та провідності, діелектричні матриці та макроскопічні відносні проникності.

2. МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Традиційно, аналіз фотонних властивостей ФК робиться чисельними методами. Існує багато чисельних моделей проходження електромагнітних хвиль у ФК, оснований на таких методах, як Plane-Wave-Expansion-Method, Finite-Difference-Time-Domain-Method або методи власних мод. Основними серед них визнані: метод Пендри, що використовує умови квазіперіодичності поля у ФК, так, що для отримання коефіцієнтів у дисперсійному рівнянні досить вирішити рівняння Максвелла чисельно (наприклад, методом кінцевих різниць) в межах однієї комірки; метод Блоха-Флоке, що призводить до нескінченної системи дисперсійних рівнянь шляхом розкладання поля по просторовим гармонікам.

Реакція твердого тіла на зовнішнє збурююче електромагнітне поле, головним чином, є реакцією електронів, тому важливо, вивчаючи ФК, разом із діелектричними властивостями отримувати інформацію про властивості електронної підсистеми. Так, використані нами розрахункові методи, що застосовують функціонал електронної густини, є повноцінним універсальним інструментом дослідження ФК. У наших обчислювальних експериментах отримані просторові розподіли густини валентних електронів, електронні енергетичні спектри та діелектрична функція, що описує лінійний відклик твердого тіла на зовнішнє електричне поле, модельних ФК. Результати були одержані за допомогою авторського програмного коду [18, 19].

Основні стани електронно-ядерної системи виявлялися за допомогою самоузгодженого рішення рівнянь Кона-Шема. Електронні змінні визначалися при фіксованих атомних остовах. Слідуючи за Коном-Шемом [20, 21], електронна густина була записувалася в термінах зайнятих ортонормованих одночастинкових хвильових функцій:

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\psi_i(\vec{r})|^2. \quad (1)$$

Точка на поверхні потенціальної енергії в наближенні Борна-Оппенгеймера визначалася мінімумом енергетичного функціоналу по відношенню до хвильових функцій:

$$E[\{\psi_i\}, \{R_j\}, \{\alpha_v\}] = \sum_i \int_{\Omega} d^3r \psi_i^*(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \psi_i(\vec{r}) + U[\{n(\vec{r})\}, \{R_j\}, \{\alpha_v\}], \quad (2)$$

де $\{R_j\}$ – координати атомних остовів, $\{\alpha_v\}$ – усі можливі зовнішні впливи на систему.

У загальноприйнятому формулюванні мінімізація енергетичного функціоналу (2) по відношенню до одночастинкових орбіталей при накладених на них додаткових умовах ортонормування приводить до одночастинкових рівнянь Кона-Шема [21]:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\partial U}{\partial n(\vec{r})} \right\} \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}). \quad (3)$$

При розв'язуванні цих рівнянь використовувався формалізм псевдопотенціалу, згідно з яким тверде тіло розглядається як сукупність валентних електронів та іонних остовів. У наближенні псевдопотенціалу оператор псевдопотенціалу V_{PS} , який описує взаємодію валентних електронів з остовом, малий, а відповідна псевдо-хвильова функція гладка. Псевдопотенціал повинен правильно представляти далекодіючу природу остова та давати змогу отримати рішення у вигляді псевдо-хвильових функцій, які співпадають з повною хвильовою функцією за межами радіуса іонного остова r_c . Крім того, бажано, щоб псевдопотенціал був переносимим, це означає, що один і той же псевдопотенціал може бути використаний при розрахунках в

різних хімічних оточеннях і давати результати обчислення з порівнянною точністю. Так, Бечелет, Хеменн і Шлітер запропонували аналітичний придатний вищезначеним умовам псевдопотенціал. Цей псевдопотенціал із перших принципів використовується нами [22, 23].

Повний кристалічний потенціал будується як сума іонних псевдопотенціалів, які не перекриваються і пов'язані з іонами (ядра й остовні електрони), розташованими на позиціях \vec{R}_S , які періодично повторюються для кристалів:

$$V_{cryst}(\vec{r}) \rightarrow V_{PS}(\vec{r}) = \sum_p \sum_S \hat{V}_S^{PS}(\vec{r} - \vec{p} - \vec{R}_S). \quad (4)$$

Для неперіодичних систем, таких як тонка плівка або кластер, проблема відсутності періодичності обходиться методом суперкомірки [24, 25]. В межах якого кластер, наприклад, періодично повторюється, але відстань між кожним кластером та його періодичним повтореннями настільки велика, що їх взаємодія нехтовна. Повсюдна періодичність кристалічної (або штучної) решітки створює періодичний потенціал і таким чином накладає таку ж періодичність на електронну густину (мається на увазі теорема Блоха). Потенціал Кона-Шема періодичної системи проявляє ту саму періодичність, що й решітка, а орбіталі Кона-Шема можуть бути записані в формі Блоха:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_i(\vec{r}, \vec{k}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_i(\vec{r}, \vec{k}), \quad (5)$$

де \vec{k} є вектором із першої зони Бриллюена. Індекс i перебігає усі можливі електронні стани. Функція $u_i(\vec{r}, \vec{k})$ має періодичність просторової решітки. Вона може бути розкладена в ряд за плоскими хвилями. Це обґрунтовує використання плоских хвиль як загальної бази, обраної нами, для розкладення періодичної частини орбіталей. Оскільки плоскі хвилі утворюють повний та ортонормований набір функцій, то використання їх для розкладення одночастинкових орбіталей має вигляд:

$$\psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_0} \sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{G}} b_j(\vec{k} + \vec{G}) \exp(i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}), \quad (6)$$

де \vec{G} є вектор оберненого простору, Ω - об'єм елементарних комірок, котрі заповнюють кристал або штучну суперрешітку у випадку неперіодичних об'єктів.

Рівняння (6) після Фур'є-перетворення має такий вигляд у оберненому просторі:

$$\sum_{\vec{G}} \left[\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2 - \varepsilon_j \right\} \delta_{\vec{G}, \vec{G}'} + V_{KS}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') \right] b_j(\vec{k} + \vec{G}) = 0, \quad (7)$$

де V_{KS} - потенціал Кона-Шема:

$$V_{KS}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') = V_{PS}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') + V_H(\vec{G}' - \vec{G}) + V_{XC}(\vec{G}' - \vec{G}). \quad (8)$$

V_{XC} є обмінно-кореляційним потенціалом, для його розрахунку ми використовували апроксимацію Сіперлі-Олде, параметризовану Педью та Зунге.

У загальному випадку вирази, що описують потенціали взаємодії, комплексні. Використання атомних базисів, що містять операцію інверсії в своїй групі точкової симетрії, призводить до того, що Фур'є-компоненти при розкладі всіх виразів є реальними.

Основною величиною в формалізмі функціоналу електронної густини є густина електронного заряду. Вона оцінюється на основі самоузгодженого рішення рівняння (7), яке повинно виконуватися в усіх точках неприводимої частини зони Бриллюена:

$$\rho(\vec{G}) = \frac{2}{N_T} \sum_k \sum_j \sum_{\alpha \in T} \sum_{\vec{G}'} b_j^*(\vec{k} + \vec{G}' + \alpha \vec{G}) b_j(\vec{k} + \vec{G}'), \quad (9)$$

де індекс j перебігає усі заняті стани, \vec{k} є вектором із першої зони Бриллюена, N_T є

число операцій α в точковій групі T атомного базису, множник 2 враховує виродженість за спіном.

Розрахункові зусилля можна скоротити, якщо використовувати метод спеціальних точок. Є різні підходи щодо вибору цих точок. Так, можна використовувати рівномірні або нерівномірні сітки Γ -точок, можна з прийнятною точністю замінити сумування за кінцевим числом спеціальних точок до однієї точки в зоні Бріллюена. Можна обмежитися лише Γ -точкою в зоні Бріллюена, особливо це стосується штучних періодичних.

Розподіл електронів по енергіям отримувався шляхом числового обчислення похідної $\lim_{\Delta E \rightarrow 0} \Delta N / \Delta E$, де ΔN – кількість дозволених станів, що припадають на проміжок енергії ΔE , із отриманого під час діагоналізації матриці Кона-Шема одночастинкового енергетичного спектра, кількість значень в якому контролюється розміром розкладу хвильової функції. Відповідно до ідеології функціонала електронної густини кількість зайнятих станів при $T = 0K$ визначалися половиною кількістю електронів у атомному базисі (у зв'язку з неврахуванням спіну електрона).

Лінійний відклик твердого тіла на збурення – електричне поле, фонони та інші – описується діелектричною матрицею. У наших обчислювальних експериментах статична діелектрична матриця кристалічної системи оцінювалася із електронної структури її основного стану (зайнятих і незайнятих станів). Діелектрична матриця $\epsilon_{\vec{G}, \vec{G}'}^{-1}(\vec{q}, \vec{\omega})$ представлялася в оберненому просторі і залежала від хвильового вектора \vec{q} та частоти коливаль електромагнітного збурюючого поля $\vec{\omega}$ (\vec{G} – вектори оберненої решітки). Недіагональні елементи матриці $\epsilon_{\vec{G}, \vec{G}'}^{-1}$ визначають локальні ефекти поля. Макроскопічна діелектрична функція визначалася [26]:

$$\epsilon_M(\vec{q} + \vec{G}) = \frac{1}{\epsilon_{00}^{-1}(\vec{q})}. \quad (10)$$

Щоб отримати елементи матриці розв'язували рівняння в оберненому просторі:

$$\epsilon_{\vec{G}, \vec{G}'}^{-1}(\vec{q}) = \delta_{\vec{G}, \vec{G}'} + \frac{4\pi e^2}{|\vec{q} + \vec{G}|^2} \chi_{\vec{G}, \vec{G}'}(\vec{q}), \quad (11)$$

де поляризованість $\chi_{\vec{G}, \vec{G}'}(\vec{q})$ визначалася як

$$\chi_{\vec{G}, \vec{G}'}(\vec{q}) = \sum_{\vec{G}''} A_{\vec{G}, \vec{G}'}^{-1}(\vec{q}) \chi_{\vec{G}, \vec{G}'}^0(\vec{q}), \quad (12)$$

$$A_{\vec{G}, \vec{G}'}(\vec{q}) = \delta_{\vec{G}, \vec{G}'} - \chi_{\vec{G}, \vec{G}'}^0(\vec{q}) \frac{4\pi e^2}{|\vec{q} + \vec{G}|^2} - \sum_{\vec{G}''} \chi_{\vec{G}, \vec{G}'}^0(\vec{q}) K_{XC}(\vec{G}'' - \vec{G}'), \quad (13)$$

$$\chi_{\vec{G}, \vec{G}'}^0(\vec{q}) = \frac{4}{\Omega} \sum_{c, v, k} \frac{\langle v, \vec{k} | e^{-i(\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} | c, \vec{k} + \vec{q} \rangle \langle c, \vec{k} + \vec{q} | e^{i(\vec{q} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} | v, \vec{k} \rangle}{\epsilon_{v, k} - \epsilon_{c, \vec{k} + \vec{q}}}, \quad (14)$$

де індекси c, v, k перебирали стани зон провідності, валентної та Бріллюена [26].

Обмінно-кореляційний внесок мав вид:

$$K_{XC}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{\partial^2 E_{XC}}{\partial \rho(\vec{r}) \partial \rho(\vec{r}')} = \frac{dV_{XC}}{d\rho} \Big|_{\rho(\vec{r})}(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (15)$$

Отримана діелектрична матриця є ермітовою і завдяки наявності центру інверсії модельного кристалу є симетричною. Її діагоналізація призводить до отримання власних значень $\epsilon_n^r(\vec{q})$ та власних функцій $V_n^r(\vec{q} + \vec{G})$:

$$\sum_{\vec{G}'} \epsilon^{-1}(\vec{q} + \vec{G}, \vec{q} + \vec{G}') V_n^r(\vec{q} + \vec{G}') = \epsilon_n^r(\vec{q}) V_n^r(\vec{q} + \vec{G}). \quad (16)$$

Вектор \vec{q} знаходиться в межах зони Бріллюена, а власні значення $\epsilon_n^r(\vec{q})$ означають «діелектричну зонну структуру». Знання власних значень та власних функцій діелектричної матриці є важливим. Вони служать для візуалізації екранування в реальному просторі, передають інформацію про електронних відгук твердого тіла та дозволяють адекватно врахувати симетрію кристалу.

Повна енергія на одну елементарну комірку має вигляд [27]:

$$E_{tot}/\Omega = \sum_{\vec{k}, \vec{G}, \vec{J}} |\psi(\vec{k} + \vec{G})|^2 \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2 + \frac{1}{2} 4\pi e^2 \sum_{\vec{G}} \frac{|\rho(\vec{G})|^2}{G^2} + \sum_{\vec{G}} \epsilon_{XC}(\vec{G}) \rho^*(\vec{G}) + \sum_{\vec{k}, \vec{G}, \vec{G}', \vec{J}, \vec{J}'} S_s(\vec{G} - \vec{G}') \Delta V_{I, s}^{NJ}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') \psi(\vec{k} + \vec{G}) \psi^*(\vec{k} + \vec{G}') + \sum_{\vec{G}, \vec{S}} S_s(\vec{G}) V_s^L(\vec{G}) \rho^*(\vec{G}) + \left\{ \sum_S \alpha_S \right\} \left[\Omega^{-1} \sum_S Z_S \right] + \Omega^{-1} \gamma_{Ewald}, \quad (17)$$

де \vec{k} має значення із першої ЗБ, \vec{G} – вектор

оберненої ґратки, $\psi_i(\vec{k} + \vec{G})$ – хвильова функція, i – позначає зайняті стани для певного \vec{k} , $\rho(\vec{G})$ є коефіцієнт з розкладу густини валентних електронів, s нумерує атоми в елементарній комірці, $S_s(\vec{G})$ є структурним фактором, V_s^L є локальний (l -незалежний) сферично симетричний псевдопотенціал, l – позначає квантове орбітальне число, $\Delta V_{l,s}^{NL}$ є нелокальна (l -залежна) добавка до V_s^L , Z_s – заряд іона, γ_{Ewald} – це енергія Маделунга точкових іонів в однорідному від’ємному фоні.

Сила, що діє на атом s є від’ємною похідною E_{tot} по базисному вектору $\vec{\tau}_s$. Вирази, що містять неявну похідну хвильової функції, дорівнюють нулю за теоремою Хелмана-Фейнмана. Тому розрахунок сил виконується за формулою [27]:

$$\vec{F}^s = \vec{F}_e^s + \vec{F}_c^s, \quad (18)$$

де складові електронної та іонної взаємодії відповідно:

$$\vec{F}_e^s = i\Omega_c \sum_{\vec{G}} \rho^*(\vec{G}) \vec{G} e^{-i\vec{G}\vec{\tau}_s} v_s(\vec{G}) - \sum_{i,\vec{G},\vec{G}'} n_i \psi_i^*(\vec{k}_i + \vec{G}') \psi_i(\vec{k}_i + \vec{G}) (\vec{G} - \vec{G}') e^{-i(\vec{G} - \vec{G}')\vec{\tau}_s} v_{s,i}(\vec{k}_i + \vec{G}, \vec{k}_i + \vec{G}'), \quad (19)$$

$$\vec{F}_c^s = 2Z_s \sum_{s' \neq s} Z_{s'} \frac{4\pi}{\Omega_c} \sum_{\vec{G}} \left(\frac{\vec{G}}{|\vec{G}|^2} \sin(\vec{G}(\vec{\tau}_s - \vec{\tau}_{s'})) e^{\frac{|\vec{G}|^2}{4\eta^2}} \right) + 2Z_s \sum_{s' \neq s} Z_{s'} \sum_{\vec{l}} \left(\frac{x \operatorname{erfc}(\eta|\vec{x}|)}{|\vec{x}|^3} + \frac{2\eta\vec{x}}{\sqrt{\pi}|\vec{x}|^2} e^{-|\vec{x}|^2} \right), \quad (20)$$

де $\vec{x} = \vec{l} + \vec{\tau}_s - \vec{\tau}_{s'}$, Ω_c – об’єм комірки на один атом, $\vec{\tau}_s$ – базисний вектор атома s у комірці, Z_s – заряд остова, \vec{l} – вектор решітки, сума по \vec{l} виключає доданок, у якому при $s \neq s'$ вектор $\vec{l} = 0$, η – параметр збіжності суми у функції Евальда erfc .

3. ОБ’ЄКТИ ТА РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Для дослідження фотонних та електронних властивостей латеральних гетеро-

структур на основі графена була розроблена модель суперрешітки, яка являє собою періодичне чергування ділянок чистого графена (С) та функціоналізованого графена (СН) (рис. 1). Примітивна комірка суперрешітки ромбічного типу мала такі параметри: $a = 9,96 \text{ \AA}$, $b = 8,82 \text{ \AA}$, $c = 5,29 \text{ \AA}$ і відтворювала при трансляції двовимірний фотонний кристал. Геометричні властивості ромбічної комірки такі, що зручно в екранних побудовах використовувати Декартову систему координат. Розмір примітивної комірки у напрямку \vec{Z} обирався так, щоб уникнути взаємодії атомних площин, що транслюються в цьому напрямку. Розміри примітивної комірки у напрямках \vec{X} та \vec{Y} обиралися такі, щоб при трансляції організувати нескінченний лист графена. Координати у площині $\vec{X}\vec{Y}$ атомів атомного базису, що відтворювали ділянки графену та графану, визначалися як середнє арифметичне відповідних структурних параметрів нескінченних листів графена та графану, а саме довжини зв’язку між атомами С. Атомний базис містив 48 атомів, з яких 32 атоми С та 16 атомів Н. Обчислення проводилося тільки для Γ -точки зони Бриллюена суперрешітки.

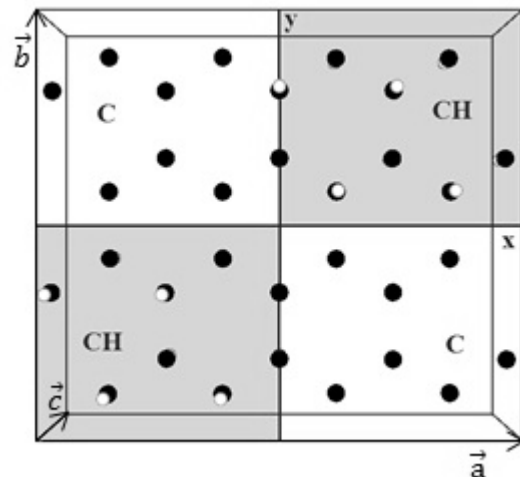


Рис. 1. Примітивна комірка суперрешітки з атомним базисом латеральної гетероструктури графен/графан - утворююча одиниця фотонного кристала.

Дослідження полягало у виявленні змін фотонних та електронних властивостей латеральної гетероструктури графен/графан під

дією статичного тиску зовнішнього середовища. Моделювання реакції атомів фотонного кристалу на дію тиску здійснювалось шляхом зміни координат атомного базису, що відбивало рівномірне стиснення ФК з обох поверхонь графен-графанового листа. Вважалося, що дія статичного тиску проявлялася тільки на положенні атомів гідрогену (H), які є у складі графану (CH), тобто на їх відстань до графенового каркасу. Для порівняння було обрано п'ять ступенів стиснення: 1) без стиснення (0%) - відстань C-H $a_{\text{CH}} = 1,12 \text{ \AA}$ (CH), 2) стиснення на 2,5%, відстань C-H зменшена на 2,5% від a_{CH} графана, 3) стиснення на 5%, 4) стиснення на 7,5%, 5) стиснення на 10%. Оцінка тиску зовнішнього середовища здійснювалась із розрахунку сил на основі формул (17-20), які діяли на атоми гідрогену зі сторони решта остовної та електронної підсистем. На підставі третього закону Ньютона очевидно вважати, що ці сили були реакцією рівною по модулю, але протилежною за напрямком на зовнішній механічний вплив статичного тиску. У результаті були отримані значення сил, що діють на кожен атом гідрогену (H) при прикладанні відповідного тиску (Табл. 1), які потім були усереднені.

Для оцінки тиску зовнішнього середовища із отриманих значень сил віднімалися значення сил, що відповідали відсутності стиснення (Табл. 2). Перерахунок одиниць виміру тиску з а.о. в $\text{H} \times \text{\AA}$ здійснювався з використанням виразу $1 \text{ H} \times \text{\AA} = 1 \text{ а.о.} \times 2,29371 \times 10^7$, що був отриманий із співвідношень одиниць вимірювання фізичних величин.

Щодо електронних властивостей ФК на основі графена, на рис. 2 зображені карти просторового розподілу густини валентних електронів ФК при різних значеннях тиску зовнішнього середовища. Видно, зміна тиску призводить до перебудови електронних «хмар» ковалентних зв'язків C-H, а саме до збільшення інтенсивності густини валентних електронів вздовж цих зв'язків.

Зміна ширини електронної забороненої зони ФК при різних значеннях тиску зовнішнього середовища приводиться на графіку рис 3, числові значення ширини електронної забороненої зони ФК при різних значеннях тиску наводяться в табл. 3. Суттєве зменшення ширини електронної забороненої зони ФК спостерігається при його стисненні під дією зовнішнього тиску більш ніж на 5%, що свідчить про посилення провідних властивостей ФК.

Таблиця 1.

Значення сил (в а.о.), що діють на кожен атом гідрогену (H), при різних значеннях тиску зовнішнього середовища.

атом H	0% стиснення	2,5% стиснення	5% стиснення	7,5% стиснення	10 % стиснення
1	1,672	1,741	1,815	1,894	1,979
2	1,647	1,719	1,794	1,876	1,963
3	1,622	1,695	1,773	1,856	1,945
4	1,673	1,743	1,816	1,895	1,98
5	1,647	1,718	1,794	1,875	1,963
6	1,673	1,742	1,816	1,895	1,98
7	1,674	1,743	1,817	1,896	1,981
8	1,622	1,695	1,773	1,856	1,945
усереднене значення	1,65	1,72	1,80	1,88	1,96

Таблиця 2.

Значення статичного тиску зовнішнього середовища в різних одиницях виміру.

№	Тиск, %	Тиск, а.о.	Тиск, Н·Å
1	0	0	0
2	2,5	0,07	$16,06 \cdot 10^5$
3	5	0,15	$34,41 \cdot 10^5$
4	7,5	0,23	$52,76 \cdot 10^5$
5	10	0,31	$71,11 \cdot 10^5$

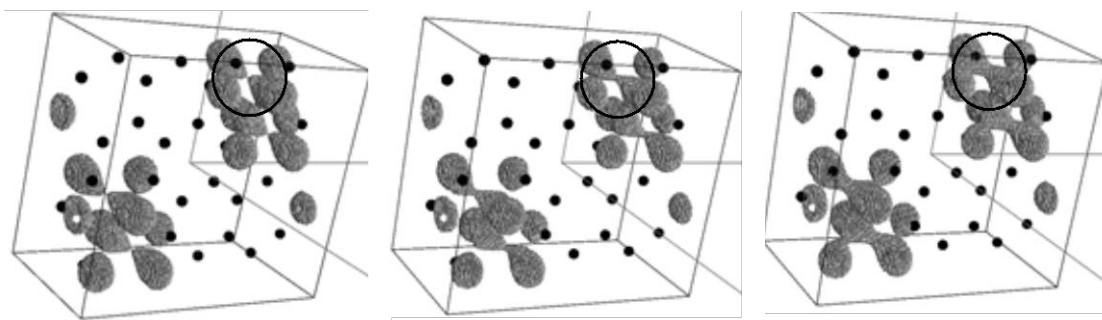


Рис. 2. Просторові розподіли густини валентних електронів ФК для ізозначень 0,6-0,5 від максимального при різних значеннях тиску: зліва - направо 0%, 5%, 10%.

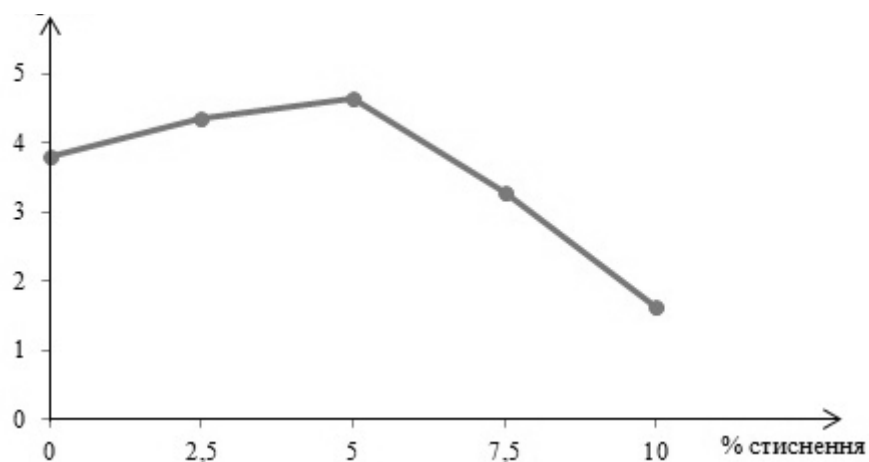


Рис. 3. Зміна ширини електронної забороненої зони при різних значеннях тиску зовнішнього середовища.

Таблиця 3.

Значення ширини електронної забороненої зони ФК при різних значеннях тиску зовнішнього середовища в різних одиницях виміру.

Стиснення, %	E_g , а.о.	E_g , eV
0	0,14	3,81
2,5	0,16	4,35
5	0,17	4,63
7,5	0,12	3,27
10	0,06	1,63

Щодо фотонних властивостей ФК, вони обговорюються у таблицях 4, 5 та рисунках 4-6. Так у таблиці 4 наведені макроскопічні діелектричні проникності ФК при різних значеннях тиску зовнішнього середовища, обчислені із діелектричної матриці, що отримана за формулами (10-16). Спостерігається анізотропія діелектричних властивостей ФК при різних напрямках вектора електричного поля збуджуючої електромагнітної хвилі (ЕМХ), що видно з таблиці 4. При направленні вектора електричного поля збуджуючої ЕМХ паралельно напрямкам вісі \vec{Y} та діагональному напрямку $[\vec{X} + \vec{Y}]$ (див. рис. 1) значення

макроскопічної діелектричної проникності близькі до одиниці, що співпадає з діелектричною проникністю вакууму і не передбачає заломлення електромагнітного променя при розповсюдженні вздовж цих напрямків ФК. Тоді як при направленні вектора електричного поля збуджуючої ЕМХ паралельно напрямку вісі \vec{X} – цей напрямок характерний тим, що він співпадає з більшою стороною прямокутника утворюючої одиниці ФК (див. рис. 1), - макроскопічна діелектрична проникність збільшується в 2,61 рази по відношенню до розповсюдження по іншим напрямкам.

Таблиця 4.

Макроскопічна діелектрична проникність ФК при різних значеннях тиску зовнішнього середовища.

Напрямки вектора електричного поля збуджуючої ЕМХ	Стиснення структури				
	0 %	2,5 %	5%	7,5 %	10%
$\vec{E} \parallel \vec{X}$	2,61	0,95	0,93	0,92	0,91
$\vec{E} \parallel \vec{Y}$	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
$\vec{E} \parallel [\vec{X} + \vec{Y}]$	0,96	0,97	0,97	0,98	1,00

Таблиця 5.

Довжини хвиль піків спектру поглинання ФК у залежності від напрямку вектора поперечної поляризації електричного поля збуджуючої ЕМХ при різних величинах стиснення ФК.

Стиснення, %	λ , нм при $\vec{E} \parallel \vec{X}$	λ , нм при $\vec{E} \parallel \vec{Y}$	λ , нм при $\vec{E} \parallel [\vec{X} + \vec{Y}]$
0	0,82	258,47	94,82
2,5	29,84	275,46	106,41
5	43,42	291,63	144,65
7,5	57,51	286,54	100,36
10	106,31	291,25	36,70

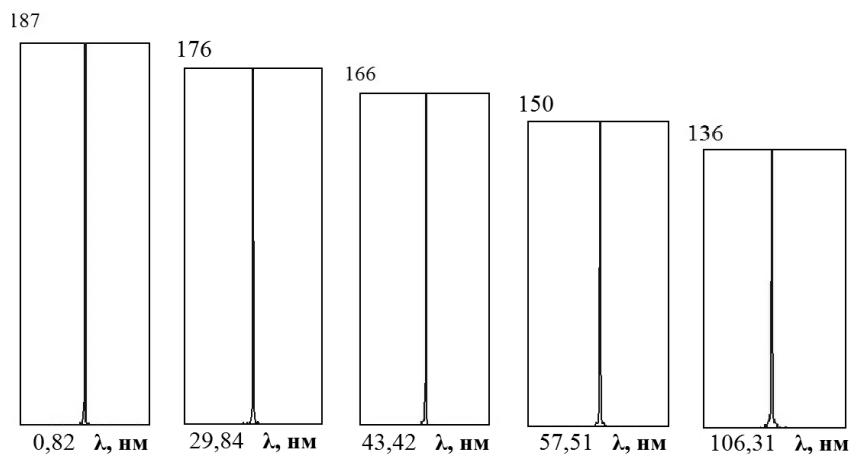


Рис. 4. Спектр поглинання ФК у напрямку збудуючої ЕМХ $\vec{E} \parallel \vec{X}$ при різних значеннях тиску зовнішнього середовища (зліва направо 0%, 2,5%, 5%, 7,5%, 10%, вертикальна вісь – інтенсивність поглинання).

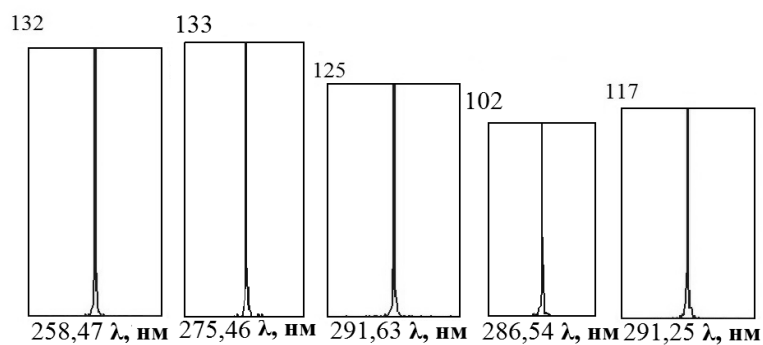


Рис. 5. Спектр поглинання ФК у напрямку збудуючої ЕМХ $\vec{E} \parallel \vec{X}$ при різних значеннях тиску зовнішнього середовища (зліва направо 0%, 2,5%, 5%, 7,5%, 10%, вертикальна вісь – інтенсивність поглинання).

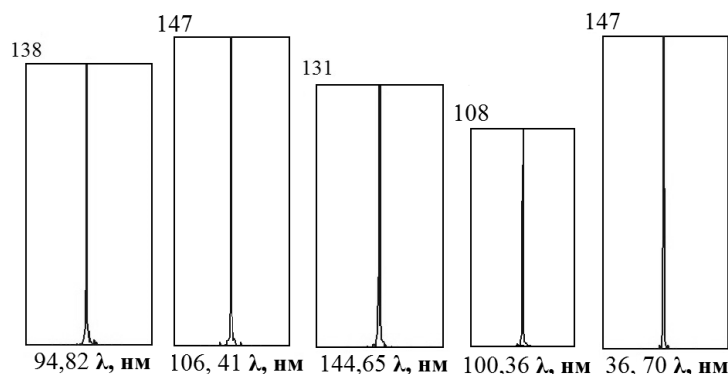


Рис. 6. Спектр поглинання ФК у напрямку збурюючої ЕМХ $\vec{E} \parallel \vec{X}$ при різних значеннях тиску зовнішнього середовища (зліва направо 0%, 2,5%, 5%, 7,5%, 10%, вертикальна вісь – інтенсивність поглинання).

Довжини хвиль електромагнітного випромінювання, що дозволені власними значеннями діелектричної матриці ФК, одержуються із розв'язку рівняння (16) при $\vec{q} \rightarrow 0$. У цій довгохвильовій границі вектор \vec{q} означає вектор поперечної поляризації електричного поля \vec{E} . На рис. 4 – рис. 6 та таблиці 5 приводяться власні значення діелектричних матриць ФК (спектр поглинання ФК) у залежності від напрямку вектора поперечної поляризації електричного поля збурюючої ЕМХ при різних значеннях тиску зовнішнього середовища. Власні значення діелектричної матриці були перераховані шляхом їх співставлення з електронним спектром у відповідні довжини хвиль. Так, у напрямку $\vec{E} \parallel \vec{X}$ за відсутності стиснення довжина хвилі піку в спектрі поглинання ФК становить 0,82 нм (ця довжина співпадає з порядком параметрів утворюючої одиниці ФК), що відповідає області м'якого рентгену. У напрямках $\vec{E} \parallel \vec{Y}$ та $\vec{E} \parallel [\vec{X} + \vec{Y}]$ при різних значеннях тиску довжини хвиль піків у спектрі поглинання ФК знаходяться в області ультрафіолетового випромінювання.

При збільшенні тиску зовнішнього середовища на ФК, піки в спектрі поглинання ФК, що відповідають напрямку вектора поперечної поляризації електричного поля збурюючої ЕМХ $\vec{E} \parallel \vec{X}$, зсуваються в бік збільшення

довжин хвиль, при цьому їх інтенсивність зменшується. Щодо реакції ФК на збільшення тиску в напрямках вектора поперечної поляризації електричного поля збурюючої ЕМХ $\vec{E} \parallel \vec{Y}$ та $\vec{E} \parallel [\vec{X} + \vec{Y}]$, то вона незначна та немонотонна, її не можна вважати детектуючою. Слід зауважити, що саме для напрямку $\vec{E} \parallel \vec{X}$ було зафіксовано значення діелектричної макроскопічної проникності, що значно відрізнялося від решта значень при інших напрямках.

Публікація заснована на дослідженні, наданому за підтримки Гранту Фонду фундаментальних досліджень (проект Ф76 / 70-2017).

4. ВИСНОВКИ

Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу з перших принципів, використовуючи авторський код, були отримані просторові розподіли густини валентних електронів, розподіли електронних станів у валентній зоні та зонах провідності, діелектричні матриці та макроскопічні відносні проникності латеральних гетероструктур на основі функціоналізованого графена як фотонного кристалу під дією статичного тиску.

Підвищення тиску посилює ковалентні С-Н зв'язки функціоналізованого графена,

що проявляється у збільшенні інтенсивності густини валентних електронів вздовж напрямків зв'язків.

Спостерігається збільшення ширини електронної забороненої зони латеральних гетероструктур на основі функціоналізованого графена як фотонного кристалу при його стисненні до 5 %. При подальшому стисненні (7,5% та 10%) ширина забороненої зони різко зменшується, що свідчить про посилення провідних властивостей гетероструктури.

Спектр поглинання гетероструктури на основі функціоналізованого графена як фотонного кристалу за відсутності стиснення для напрямку $\vec{E} \parallel \vec{X}$ вектора поперечної поляризації електричного поля збурюючої електромагнітної хвилі має пік для хвиль довжиною 0,82 нм, що відповідає області м'якого рентгену. Підвищення тиску зовнішнього середовища на поверхню гетероструктур призводить до зсуву піків їх спектрів поглинання в бік довших хвиль із зменшенням інтенсивності.

Для напрямків $\vec{E} \parallel \vec{Y}$ та $\vec{E} \parallel [\vec{X} + \vec{Y}]$ при різних значеннях тиску піки спектрів поглинання гетероструктур знаходяться в області ультрафіолетового випромінювання.

Максимальне значення діелектричної макроскопічної проникності гетероструктури на основі функціоналізованого графена як фотонного кристалу було зафіксовано для напрямку $\vec{E} \parallel \vec{X}$ вектора поперечної поляризації електричного поля збурюючої електромагнітної хвилі.

Латеральна гетероструктура на основі періодично функціоналізованого графена має властивості фотонного кристалу, котрі залежать від тиску зовнішнього середовища.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

[1]. L. Zhang et al. Recent Advances in Graphene-Based Pressure Sensors // *Nano LIFE*: 6, Nos. 3 & 4, p. 1642005 (2016).

[2]. S. Jiang et al. Nanomechanics and vibration analysis of graphene sheets via a 2D plate model // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 47, p. 045104 (2014).

[3]. H. Zulfiqar et al. Mechanical and electromechanical properties of graphene and their potential application in MEMS. // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 50, p. 05300 (2017).

[4]. H. Kim et. al. Transparent, Flexible, Conformal Capacitive Pressure Sensors with Nanoparticles // *Small*, p. 1703432 (2018).

[5]. Y. Xu et al. In-plane and tunneling pressure sensors based on graphene/hexagonal boron nitride heterostructures // *Appl. Phys. Lett.*: 99, p. 133109 (2011).

[6]. V. P. Pham et. al. Chlorine-trapped CVD bilayer graphene for resistive pressure sensor with high detection limit and high sensitivity // *2D Mater.*: 4, p. 025049 (2017).

[7]. A. Ali et al. Pressure Sensitive Sensors Based on Carbon Nanotubes, Graphene, and Its Composites // *Journal of Nanomaterials*, p. 9592610 (2018).

[8]. N. Inoue and H. Onoe. Graphene-based inline pressure sensor integrated with microfluidic elastic tube // *J. Micromech. Microeng.*: 28, p. 014001 (2018).

[9]. N. Dong et. al. Pressure and temperature sensor based on graphene diaphragm and fiber bragg gratings // *Phot. Tech. Let.*, pp. 1041-1135 (2017).

[10]. J. Robin et. al. Graphene Squeeze-Film Pressure Sensors // *alarX-iv*: 1510.06919v1(2015).

[11]. C. Berger et. al. Touch-mode capacitive pressure sensor with graphene-polymer heterostructure membranem // *2D Mater.*: 5, p. 015025 (2018).

[12]. W.Chen et. al. Structural Engineering for High Sensitivity, Ultrathin Pressure Sensors Based on Wrinkled Graphene and Anodic Aluminum Oxide Membrane // *ACS Appl. Mater.* (2017).

[13]. H. Tian et. al. A Graphene-Based Resistive Pressure Sensor with Record-High Sensitivity in a Wide Pressure Range // *Scientific Reports*, 5, p. 8603 (2015).

[14]. Q. Sun et. al. Transparent, Low-Power Pressure Sensor Matrix Based on Coplanar-Gate Graphene Transistors // *Adv. Mater.*, 26, pp. 4735–4740 (2014).

[15]. P. Cataldi et. al. Carbon Nanofiber versus Graphene-Based Stretchable Capacitive

Touch Sensors for Artificial Electronic Skin // Adv. Sci., 5, p. 1700587 (2018).

[16]. Sh. Chen et. al. Recent Developments in Graphene-Based Tactile Sensors and E-Skins // Adv. Mater. Technol., p. 1700248 (2017).

[17]. R. Balabai, A. Solomenko. Flexible 2D layered material junctions // Appl Nanosci (2018) DOI: 10.1007/s13204-018-0709-9.

[18]. Ab initio calculation, <http://sites.google.com/a/kdpu.edu.ua/calculationphysics> (2015).

[19]. R. M. Balabai et. al. Electron structure and dielectric matrix of the model photonic crystals formed by fibers: ab initio calculation // Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies: 13 (4), pp. 707-720 (2015).

[20]. P. Hohenberg, W. Kohn. Inhomogeneous electron gas // Physical review: 136 (3B), B864 (1964).

[21]. W. Kohn, L. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Physical review: 140 (4A), A1133 (1965).

[22]. D. Hamann, M. Schlüter, C. Chiang. Norm-conserving pseudopotentials // Physical Review Letters: 43 (20) p. 1494 (1979).

[23]. G. Bachelet, D. Hamann and M. Schlüter. Pseudopotentials that work: From H to Pu // Physical Review: B 26 (8), p. 4199 (1982).

[24]. J. Ihm, A. Zunger, M. Cohen. Momentum-space formalism for the total energy of solids // Journal of Physics C: Solid State Physics: 12 (21), p. 4409 (1979).

[25]. M. Payne, M. Teter, D. Allan et. al. Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients // Reviews of modern physics: 64 (4), p. 1045 (1992).

[26]. M. Hybertsen, S. Louie. Ab initio static dielectric matrices from the density-functional approach. I. Formulation and application to semiconductors and insulators // Physical Review: 35 (11), p. 5585 (1987).

[27]. J. Ihm, A. Zunger, M. L. Cohen. Momentum – space formalism for the total energy of solids // J. Phys. C. Solid State Phys.: 12, pp.4409-4422 (1979).

Стаття надійшла до редакції 11.08.2018 р.

UDC 538.9

DOI 10.18524/1815-7459.2018.3.140397

PHOTONIC AND ELECTRONIC PROPERTIES OF LATERAL HETEROSTRUCTURES BASED ON FUNCTIONALIZED GRAPHENE UNDER ACTION OF STATIC PRESSURE

R. Balabai, O. Konoval, A. Solomenko

Kryvyi Rih State Pedagogical University, 54 Gagarina Ave., Kryvyi Rih, 50086, Ukraine; Phone: (0564)71-57-31, e-mail: balabai@i.ua, konovaloa@gmail.com, solomenko.anastasiia@gmail.com

Summary

The purpose of this work is to establish the laws of the connection of photonic and electronic properties of lateral heterostructures on the basis of functionalized graphene in relation to the static pressure of the external environment.

Methods of research. The electron density functional and the *ab initio* pseudopotential.

Results of research. Within the framework of the methods of the electron density functional and the *ab initio* pseudopotential, the spatial distributions of the valence electron density, the dis-

tribution of electron states by energies in the valence and conduction bands, dielectric matrices and the macroscopic relative permeability of lateral heterostructures on the basis of functionalized graphene in relation to the static pressure were obtained.

The increase in pressure enhances the covalent C-H bond of functionalized graphene, which manifests itself in increasing the intensity of the density of valence electrons along the bonding directions.

There is an increase in the width of the electronic bandgap of lateral heterostructures when they are compressed to 5%. With further compression (7.5% and 10%) the width of the band gap is sharply reduced, which indicates an increase in the conductive properties of the heterostructures.

The absorption spectrum of heterostructures in the absence of compression for the $E \parallel X$ direction of the vector of transverse polarization of the electric field of the perturbing electromagnetic wave has a peak for waves of length 0.82 nm, which corresponds to the area of soft x-ray. The increase in the environment pressure on the heterostructure surface leads to a shift of the absorption spectrum peaks toward longer waves with decreasing intensity.

For directions $E \parallel Y$ and $E \parallel [X + Y]$ at different pressure values, the peaks of absorption spectrum of heterostructures are in the region of ultraviolet radiation.

The maximum value of the dielectric macroscopic permeability of the heterostructure based on functionalized graphene as a photonic crystal was recorded for the $E \parallel X$ direction of the vector of transverse polarization of the electric field of the perturbing electromagnetic wave.

Conclusions. Lateral heterostructures on the basis of functionalized graphene has the properties of a photonic crystal, which depend on the environment pressure.

Keywords: lateral heterostructure, functionalized graphene, the electron density functional, *ab initio* pseudopotential, electronic band gap, absorption spectrum, static pressure

УДК 538.9

DOI 10.18524/1815-7459.2018.3.140397

ФОТОННІ ТА ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ ЛАТЕРАЛЬНИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВІ ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНОГО ГРАФЕНА ПІД ДІЄЮ СТАТИЧНОГО ТИСКУ

Р. М. Балабай, О. А. Коновал, А. Г. Соломенко

Криворізький державний педагогічний університет, пр. Гагаріна, 54, Кривий Ріг, 50086,
Україна; тел.: (0564)71-57-31, e-mail: balabai@i.ua, konovaloa@gmail.com,
solomenko.anastasiia@gmail.com

Реферат

Мета роботи. Встановити закономірності зв'язку фотонних та електронних властивостей латеральних гетероструктур на основі функціоналізованого графена по відношенню до статичного тиску зовнішнього середовища.

Методи дослідження. Функціонал електронної густини та псевдопотенціал із перших принципів.

Результати дослідження. Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу з перших принципів, використовуючи авторський код, були отримані просторові розпо-

діли густини валентних електронів, розподіли електронних станів у валентній зоні та зонах провідності, діелектричні матриці та макроскопічні відносні проникності латеральних гетероструктур на основі функціоналізованого графена як фотонного кристалу під дією статичного тиску.

Підвищення тиску посилює ковалентні С-Н зв'язки функціоналізованого графена, що проявляється у збільшенні інтенсивності густини валентних електронів вздовж напрямків зв'язків.

Спостерігається збільшення ширини електронної забороненої зони латеральних гетероструктур при їх стисненні до 5 %. При подальшому стисненні (7,5% та 10%) ширина забороненої зони різко зменшується, що свідчить про посилення провідних властивостей гетероструктур.

Спектр поглинання гетероструктур на основі функціоналізованого графена як фотонного кристалу за відсутності стиснення для напрямку $\vec{E} \parallel \vec{X}$ вектора поперечної поляризації електричного поля збудованої електромагнітної хвилі має пік для хвиль довжиною 0,82 нм, що відповідає області м'якого рентгену. Підвищення тиску зовнішнього середовища на поверхню гетероструктур призводить до зсуву піків їх спектрів поглинання в бік довших хвиль із зменшенням інтенсивності.

Для напрямків $\vec{E} \parallel \vec{Y}$ та $\vec{E} \parallel [\vec{X} + \vec{Y}]$ при різних значеннях тиску піки спектрів поглинання гетероструктур знаходяться в області ультрафіолетового випромінювання.

Максимальне значення діелектричної макроскопічної проникності гетероструктури на основі функціоналізованого графена як фотонного кристалу було зафіксовано для напрямку $\vec{E} \parallel \vec{X}$ вектора поперечної поляризації електричного поля збудованої електромагнітної хвилі.

Висновки. Латеральна гетероструктура на основі періодично функціоналізованого графена має властивості фотонного кристалу, котрі залежать від тиску зовнішнього середовища.

Ключові слова: латеральна гетероструктура, функціоналізований графен, функціонал електронної густини, псевдопотенціал із перших принципів, електронна заборонена зона, спектр поглинання, статичний тиск