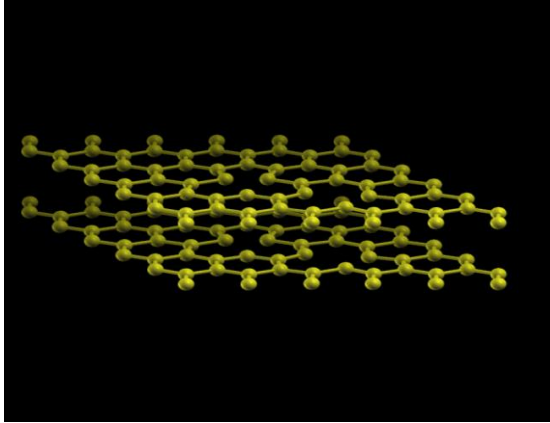
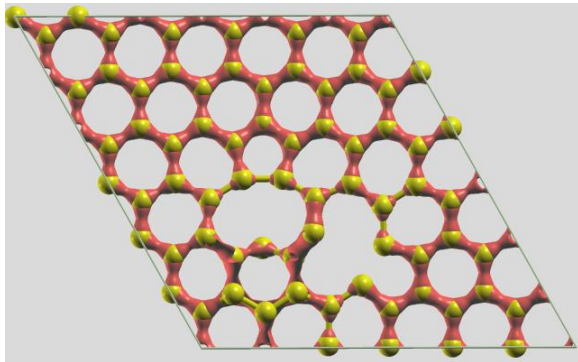


SimVacGraph - Магнетизъм на двуслоен графен с ваканции Ани Пройкова

Факултет по математика и информатика, Софийски университет



Фигура 1: Двуслоен графен AA: разстоянието между листовете е $3,3 \text{ \AA}$



Фигура 2: Изглед отгоре на изоповърхностното разпределение на електронната плътност в AA двуслоен графен с ваканции

❖ Описание

Двуслойният графен съществува в три модификации: AA, AB (или фаза на Бернал) и усукан двоен слой. Най-простата форма е двуслойният графен AA - всеки въглероден атом от втория слой е поставен точно над съответния атом от първия графенов слой. Моноатомните ваканции в двуслоен графен от AA бяха изчислително изучени, за да се следи възможността за преходи между немагнитни, антиферромагнитни и феримагнитни състояния. Значението на тези преходи е свързано с приложения на двуслойния графен и с фундаментално разбиране на нарушаването на симетрията в

крайно-размерни системи. Използвахме кода Quantum Espresso – числена реализация на теорията на функционала на електронната плътност. Във версията 5.4.0, се съдържат програми за изчисления на електронна структура и функционалните смущения на плътността, използвайки базисен набор от плоски вълни и псевдопотенциали. Екипът от Софийския университет работи по проекта в сътрудничество с високопроизводителната изчислителна лаборатория в Софийския технологичен парк, [1].

❖ Използване на инфраструктурата

HPC клъстерите NESTUM [1] и PhysOn [2] бяха използвани за симулациите. Клъстерът PhysOn се намира в лабораторията HPC на Физическия факултет на Софийския университет. Клъстерите NESTUM и PhysOn се поддържат чрез финансиране от Националната пътна карта за изследователски инфраструктури (NRR1).

Представените тук резултати са получени при паралелни изчисления на 5 възли, с по 24 ядра, проектирани с 2 бр. 64-битови 6-ядрени процесори Intel Xeon® E5-2650v4, споделена памет 94 GiB, контролер InfiniBand 56 Gbps

❖ Резултати и бъдеща работа

Спиновата плътност е неравномерно разпределена между атомите около ваканциите и най-близките съседи, допринасяйки за ненулевия магнитен момент на двуслойния графен AA. Нивото на Ферми на системата е 1.5243 eV и има процеп в близост до нивото на Ферми, който класифицира този стек като полупроводник. Намаляването на магнитния момент поради междуслойното свързване е важен резултат, който отваря възможността за различни технологични приложения.

В бъдеще ще се изследва адсорбционната способност на двуслоен графен с двойни ваканции.

1. <http://hpc-lab.sofiatech.bg/home/>
2. <http://physon.phys.uni-sofia.bg>