

Министерство образования и науки Российской Федерации  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.  
ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики  
наименование кафедры

**Прогнозирование электронных свойств молекулярного комплекса  
графен/фуллеренC60**

АВТОРЕФЕРАТ ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ  
БАКАЛАВРА

студента (ки) 4 курса 422 группы

направления (специальности) 03.03.03 Радиофизика  
код и наименование направления (специальности)

физического факультета  
наименование факультета, института, колледжа

Аралбаева Тимура Коргулыевича  
фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

к.ф.-м. н., доцент Слепченков М.М.      \_\_\_\_\_      \_\_\_\_\_  
должность, ученая степень, звание      подпись, дата      инициалы, фамилия

Зав.кафедрой

д.ф.-м. н., проф. Глухова О.Е.      \_\_\_\_\_      \_\_\_\_\_  
должность, ученая степень, звание      подпись, дата      инициалы, фамилия

Саратов 2017

На данный момент одной из актуальных задач индустрии наносистем, является создание и поиск нового композитного материала, который будет иметь крайне широкую область применения в самых, что ни на есть различных отраслях, начиная от медицины и заканчивая электроникой. Как раз одним из таких материалов и является молекулярный комплекс на основе листа графена и молекулы  $C_{60}$ , молекулярный комплекс, который мы и будем рассматривать в данной работе. В ходе экспериментов, уже сейчас были получены первые образцы данного гибридного материала, что само собой открывает предпосылки для исследования его свойств и поиска возможного применения. И, несмотря на то, что исследование и изучение поведения молекулярного комплекса графен/фуллерен  $C_{60}$  находится на начальном этапе своего пути, уже сейчас, можно говорить о действительно удивительных свойствах данного композитного материала. Композит, способный менять свои электронно-энергетические характеристики в зависимости от геометрии, интересен, прежде всего, за счет термодинамической устойчивости, прочности и высокой проводимости. Также, в пользу применения систем графен/фуллерен  $C_{60}$  в качестве элементной базы современной наноэлектроники говорят, прежде всего, уже хорошо апробированные технологии синтеза этого материала [1], одной из которых является технология осаждения фуллеренов на графене с помощью метода распыления [2]. Большое внимание исследователей уделяется изучению электронной структуры системы графен/фуллерен  $C_{60}$  [3], а также электронному трансферу между атомами  $C_{60}$  и атомами графена в процессе взаимодействия двух объектов [4]. Не менее перспективным научным направлением, связанным с материалом графен/фуллерен  $C_{60}$ , является изучение закономерностей позиционирования и поведения молекулы  $C_{60}$  на графене с позиции открытия новых физических эффектов. В частности, известны работы, в которых исследовались закономерности поведения фуллерена  $C_{60}$  на графене в зависимости от температуры [5]. В то же время, комплексное воздействие ряда факторов, включая топологию материала,

температуру, внешнее электрическое поле, играющих важную роль в реальном эксперименте, остается детально не рассмотренным.

На основе результатов уже проведенных работ, можно говорить о том, что для данного молекулярного комплекса открылись и продолжают открываться все новые горизонты в производстве. Принимая во внимание невысокую себестоимость и малые затраты на его создание, можно выдвинуть предположение, что в скором времени, данный материал займет достойную нишу на рынке материалов. В условиях интенсивного развития композитных материалов на графеновой основе важной задачей является Целью данной работы является изучение закономерностей влияния топологии графенового листа на электронно-энергетические характеристики нового гибридного материала на основе графена и молекулы  $C_{60}$ .

Прогнозирование электронных свойств молекулярного комплекса графен/ $C_{60}$  осуществлялось путем решения следующих задач:

- Создание различных топологических моделей комплекса графен+ $C_{60}$ , отличающихся параметрами гофрированности графена (глубина и ширина гофра);
- Расчет плотности электронных состояний исследуемых топологических моделей углеродного комплекса и определение вклада каждого из компонентов комплекса в характер распределения;
- Расчет зонной структуры топологических моделей углеродного комплекса графен/ $C_{60}$  и определение энергетической щели спектра исследуемых структур;
- Выявления закономерностей управления электронно-энергетическими характеристиками комплекса графен+ $C_{60}$  путем варьирования параметров гофрированности графена.

Объектом исследования в данной работе был молекулярный комплекс графен/ фуллерен  $C_{60}$ . На исходном этапе работы необходимо было построить серию различных топологических моделей комплекса с различной гофрированной топологией графенового листа. При этом глубина гофра

менялась от 1А до 10А. Ширина желоба варьировалась в пределах 6,5А до 31А.

Гофрированность исследуемых графеновых нанолент моделировалась путем задания координаты Z атомных структур объектов по следующей формуле

$$z = \delta_g \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda_s}\right). \quad (3.1)$$

Представленная формула позволяет имитировать поведения графенового фрагмента на подложке из диоксида кремния, наиболее часто встречающегося в реальном эксперименте. Ключевыми геометрическими параметрами, характеризующими степень гофрированности графена, являются ширина желоба и глубина гофра (рис. 1).

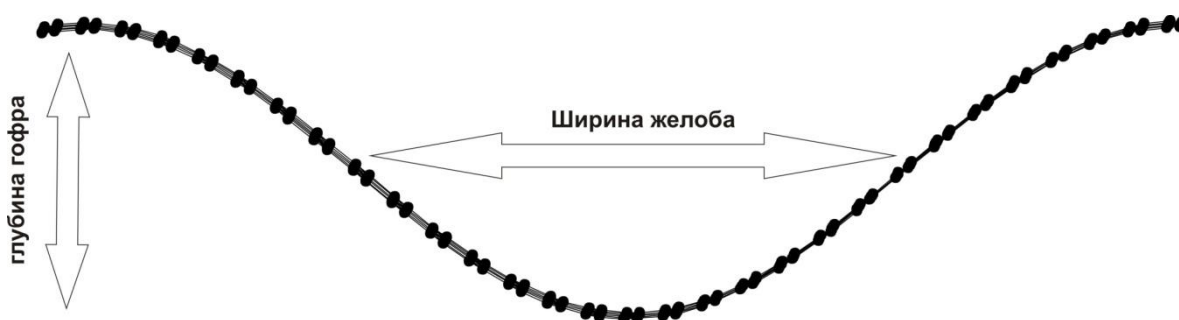


Рис. 1. Атомная структура фрагмента гофрированного графена с указанием ширины желоба и глубины гофра.

Для изучения электронной структуры комплекса графен/С60 из каждого построенного фрагмента комплекса с различной гофрированностью графена вырезалась элементарная ячейка. Трансляция структуры задавалась в двух направлениях – X и Y, то есть вдоль графена. Пример построенной элементарной ячейки комплекса графен/С60 изображены на рис. 2.

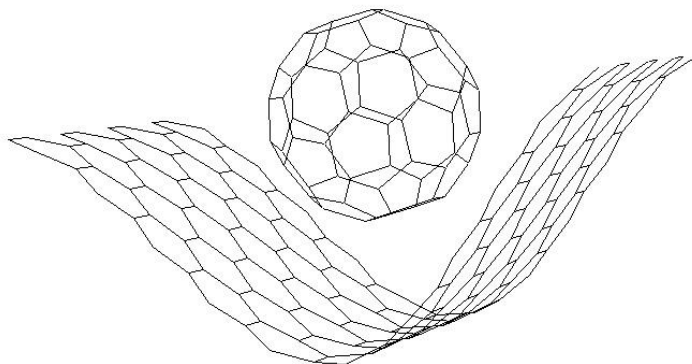


Рис. 2. Элементарная ячейка комплекса графен/С60 с плоским графеном.

Место посадки фуллерен над графеном выбиралась по результатам расчета энергетического профиля взаимодействия С60 и графена, а именно в области минимума энергии. На рис. 3 показан общий вид профиля энергии взаимодействия двух углеродных компонентов на примере результатов расчета для комплекса графен/С60 с параметрами гофрированности графена - глубина 4А, ширина 15,2А. Для расчета энергии взаимодействия использовался потенциал Леннарда-Джонса. Из графика на рис. 3 видно, что характер распределения полностью повторяет характер гофрированности графенового фрагмента.

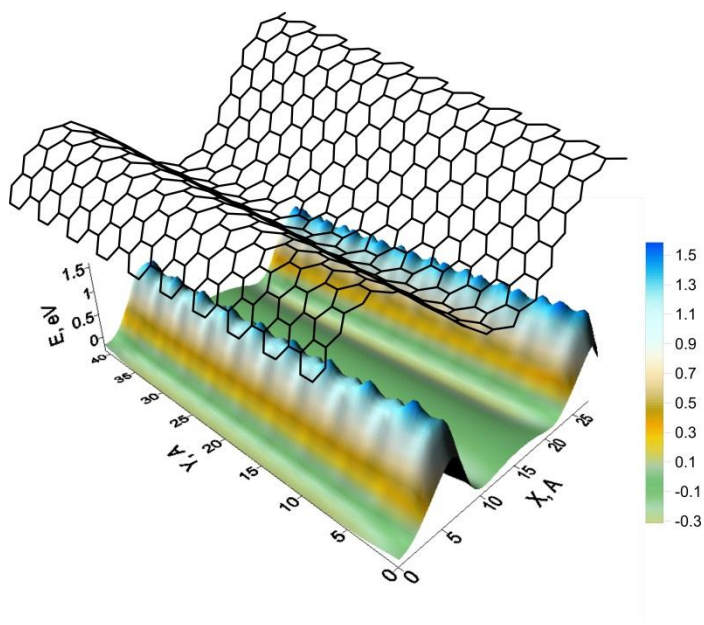


Рис. 3. Энергетический профиль взаимодействия графена и С60.

Для оценки электронных свойств комплекса графен/C60 в рамках метода сильной связи рассчитывалась зонная структура объекта. Зона Бриллюэна во всех рассматриваемых случаях представляла собой прямоугольник, поскольку трансляция осуществлялась только в двух направлениях. Обход зоны Бриллюэна осуществлялся по точкам симметрии. На рис. 4-8 показаны фрагменты зонной структуры вблизи уровня Ферми, полученные для некоторых из рассматриваемых структур комплекса графен/C60. Для демонстрации выбраны именно эти топологических модели, поскольку на их примере уже можно проследить общую закономерность в изменении свойств изучаемого объекта. Горизонтальной пунктирной линией на рисунках обозначен уровень Ферми.

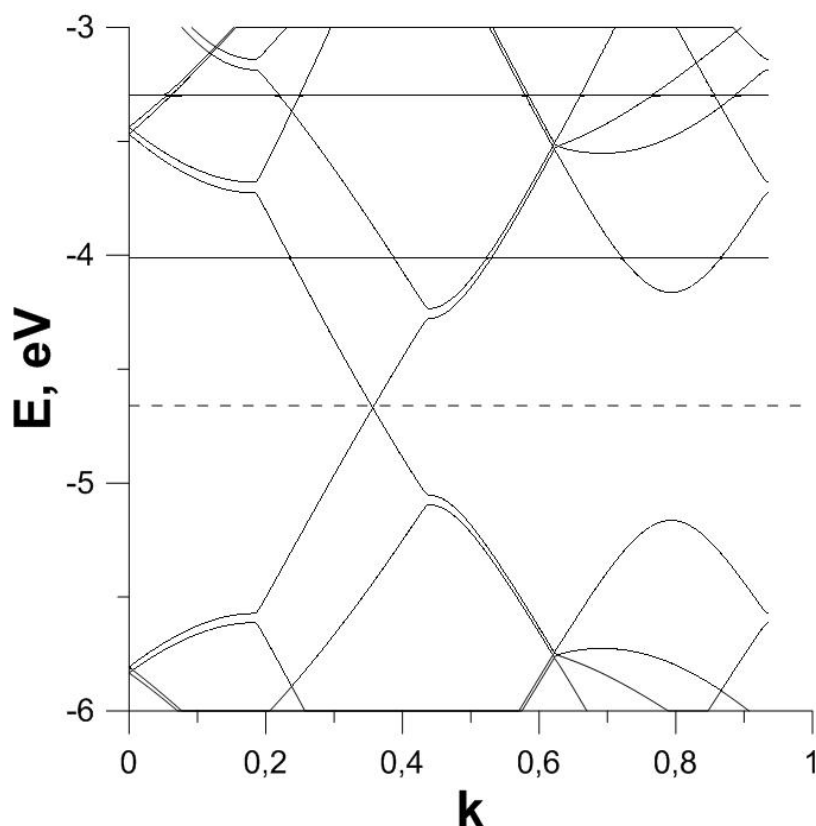


Рис. 4. Зонная структура комплекса графен/C60 с плоским листом графена.

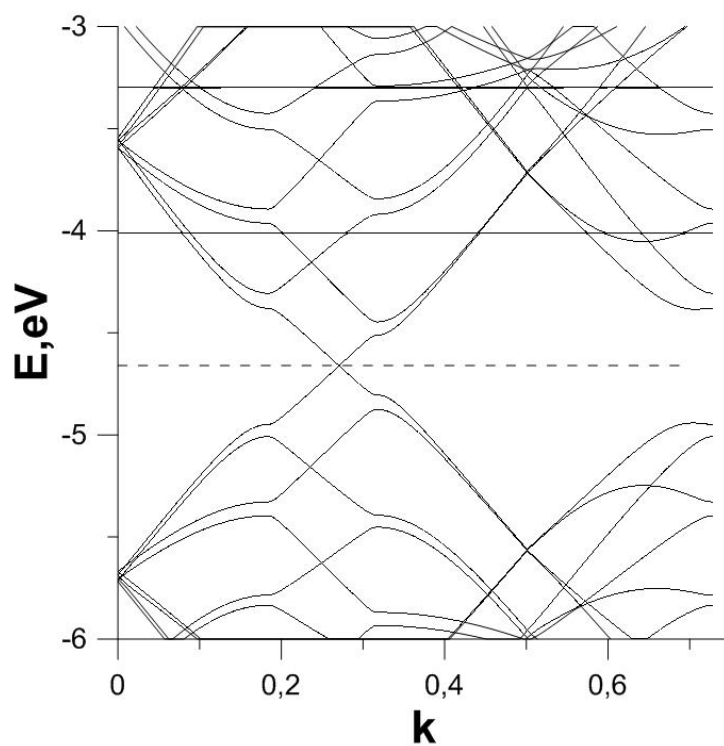


Рис. 5. Зонная структура комплекса графен/C60 с параметрами горффрированности графена глубина 5Å, ширина 17,3Å.

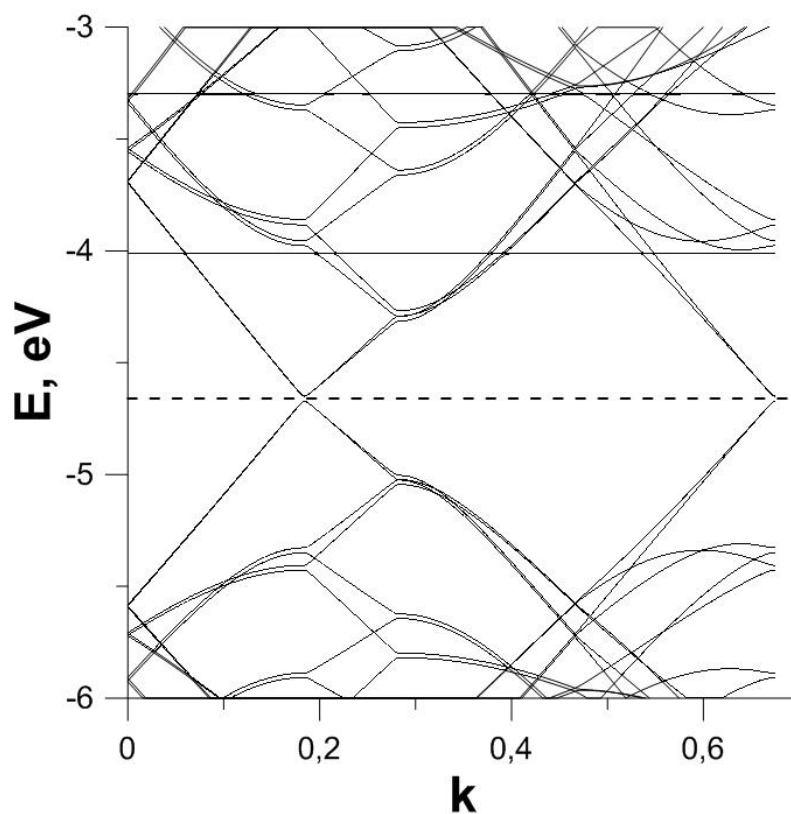


Рис. 6. Зонная структура комплекса графен/C60 с параметрами горффрированности графена - глубина 7Å, ширина 21,8Å.

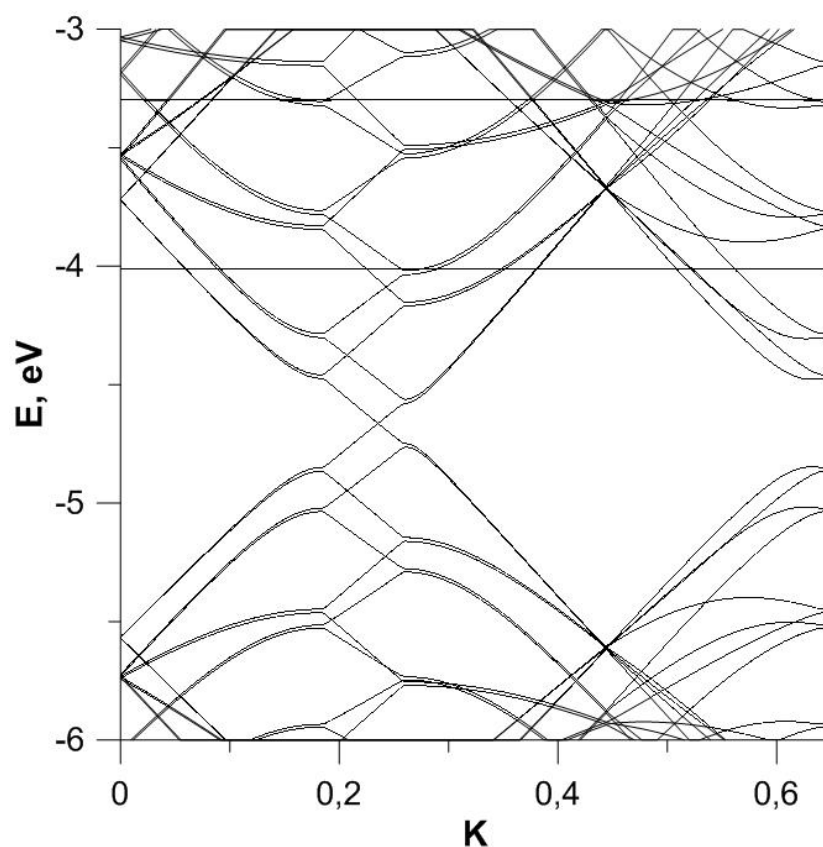


Рис. 7. Зонная структура комплекса графен/C60 с параметрами гофрированности графена - глубина 9А, ширина 26,6А.

Из представленных рисунков видно, что электронная структура комплекса графен/C60 соответствует представлениям об электронном строении металлов, а именно характеризуется отсутствием энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости. Однако, в ходе исследования были подобраны параметры гофрированности графена, начиная с которых в спектре комплекса открывается щель. Такими параметрами являются глубина гофра 7А и ширина гофра 21,8А.

Для определения вклада каждого из компонентов комплекса в структуру спектра рассчитывались распределения плотности электронных состояний (DOS). Полученные результаты для некоторых из рассматриваемых моделей представлены на рис. 8-10.



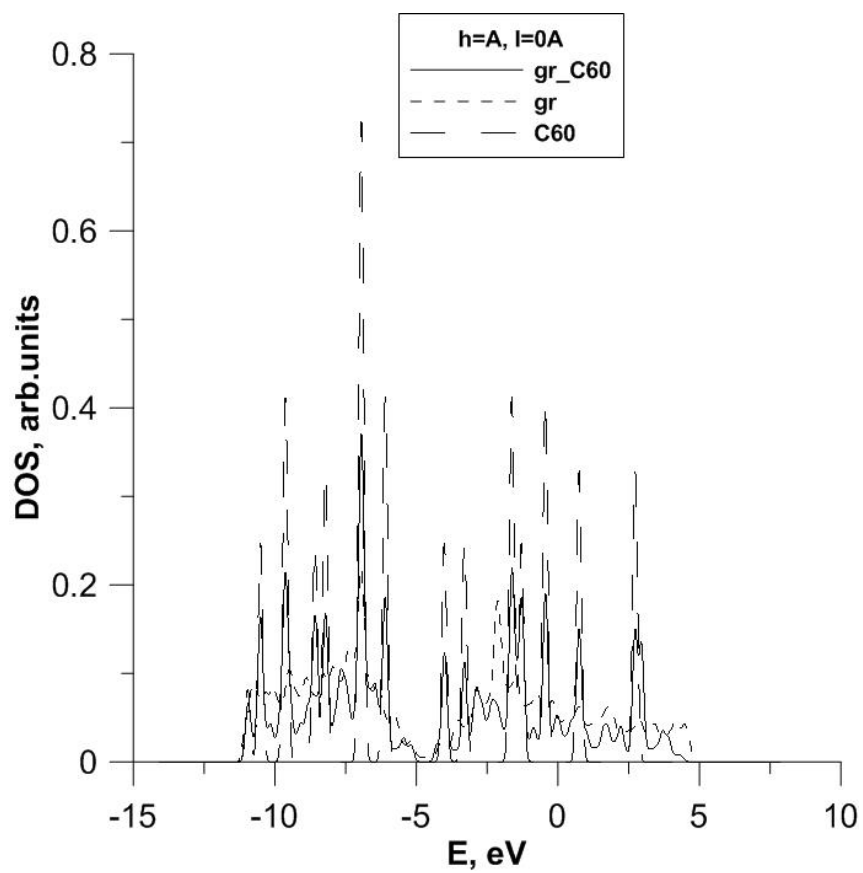


Рис. 8. Распределение DOS комплекса графен/C60 для плоского графена.

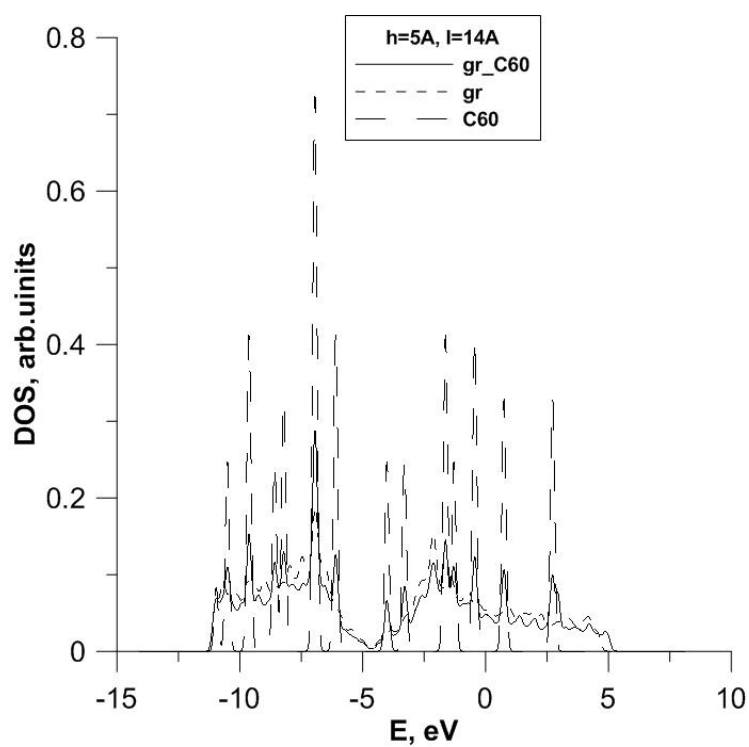


Рис. 9. Распределение DOS комплекса графен/C60 с параметрами горффрированности графена - глубина 5А, ширина 17,3А.

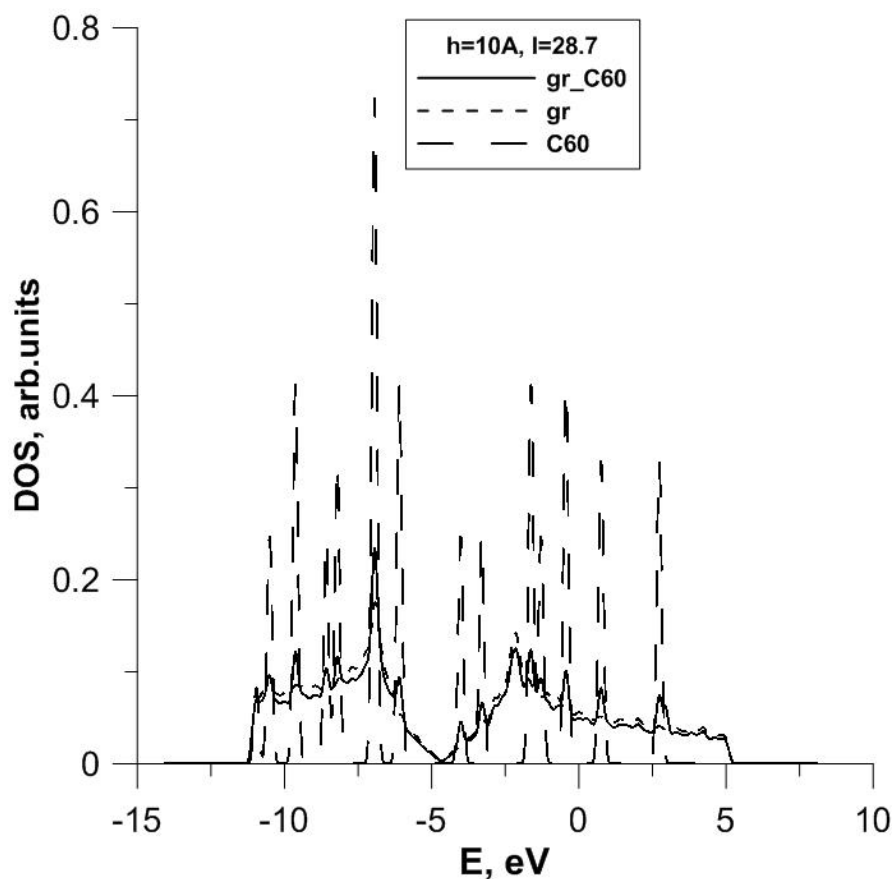


Рис. 10. Распределение DOS комплекса графен/C60 с параметрами гофрированности графена - глубина 10А, ширина 31А.

Из представленных зависимостей видно, что характер распределения плотности электронных состояний комплекса графен+C60 в целом повторяет картину, характерную для чистого графена. Вклад фуллерена C60 в электронную структуру комплекса выражается появлением многочисленных пиков как в валентной зоне, так и в зоне проводимости при тех же значениях энергии, что и в спектре фуллерена. Увеличение гофрированности графена практически не оказывает влияния на закономерности расположения электронных состояний комплекса графен/C60.

В ходе выполнения работы было установлено, что характер распределения плотности электронных состояний комплекса графен+C60 в целом повторяет картину, характерную для чистого графена. Вклад фуллерена C60 в электронную структуру комплекса выражается появлением

многочисленных пиков как в валентной зоне, так и в зоне проводимости при тех же значениях энергии, что и в спектре фуллерена;

Установлено, что по своим проводящим свойствам комплекс графен+C60 следует отнести к структурам с металлическим типом проводимости, однако существуют такие параметры гофрированности, при которых в зонной структуре объекта открывается энергетическая щель. Такими параметрами, согласно нашим расчетам являются длина гофра 16.5 Å и глубина гофра 7 Å.

Положение уровня Ферми в зонной структуре комплекса графен+C60 практически не зависит от степени гофрированности графена и составляет ~ -4.64-4.66 эВ. Следует отметить, что по сравнению с планарным графеном уровень Ферми снизился на 0.1 эВ, что говорит об улучшении эмиссионной способности комплекса.

[1] Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures 23, 477-482 (2014); Small (2013), Volume 9, Issue 14, Pages 2420–2426; Nanoscale, 2013, 5, 8359–8362, 8359.

[2] Small (2013), Volume 9, Issue 14, Pages 2420–2426.

[3] Nanotechnology 27 (2016) 365201 (6pp); ChemPhysChem 14(9), 1844-1852 (2013).

[4] ACS Nano, 2015, 9 (7), pp 7175-7185; APPLIED PHYSICS LETTERS 105, 191116 (2014).

[5] J. Phys. Chem. C 2013, 117, 6800-6806; Nanoscale Res. Lett. 2012, 7, 1-8; RSC Advances. 2015. Vol. 5. P. 86337-86346.