

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

**Новая гибридная графен/графановая структура как новый компонент для  
приборов радиоэлектроники**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента(ки) 4 курса 422 группы  
направления (специальности) 03.03.03 Радиофизика  
код и наименование направления (специальности)

физического факультета  
наименование факультета, института, колледжа

Панова Наталья Андреевна  
фамилия, имя, отчество

Научный руководитель  
к.ф.- м.н., Шунаев В.В. \_\_\_\_\_  
должность, учёная степень, звание подпись, дата инициалы, фамилия

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

## Содержание

Введение.....	3
1. Атомистическое моделирование слоистых графен-графеновых наноструктур.....	18
2. Расчет электронных свойств .....	24
2.1. Зонная структура и DOS-спектр графена.....	24
2.2. Зонная структура и DOS-спектр графана.....	25
2.3. Зонная структура и DOS-спектр гибридной графен/графановой структуры.....	26
Заключение.....	28
Список литературы.....	29



## Введение

Графен впервые обнаружили в 2004[1] году Андрей Гейм и Константин Новоселов. Однослойный графен представляет собой двумерный слой атомов углерода, расставленных в углах гексагональной кристаллической решетки. Уникальные структурные, механические и электрические свойства графена, а также высокая подвижность носителей делает его одним из самых перспективных объектов современного материаловедения. В частности, хотя графен является двумерной системой, он оказался мягче шелка и прочнее стали. Кроме того, графен проводит тепло лучше, чем медь, а электричество – лучше, чем кремний. Слой графена является прозрачным для видимого излучения и достаточно упругим, в то же время не пропускает через себя ни одной молекулы. Графен обладает уникальными свойствами с огромным потенциалом применений, таких как химические сенсоры, наноэлектронные устройства, системы хранения водорода или полимерных нанокомпонентов и многое другое.

Не менее уникальным материалом является графан, полученный в результате присоединения атомов водорода к атомам углерода графитовой структуры. Данный материал также обладает кристаллической структурой и сохраняет исходную кристаллическую решетку, однако с другим, заметно меньшим шагом решетки нежели у графена.

Уникальные электронные свойства продемонстрировала гибридная система, состоящая из графеновых и графановых наноструктур, которая привлекла большой интерес в нано- и радиоэлектронике. На основе графен/графановых структур созданы модели тонких, гибких, но долговечных дисплеев, солнечных батарей, волноводов.

Целью данной работы является изучение энергетических параметров, а также электронных свойств новой гибридной углеродной структуры на основе слоев графена и графана.

В данной работе были поставлены и решены следующие задачи:

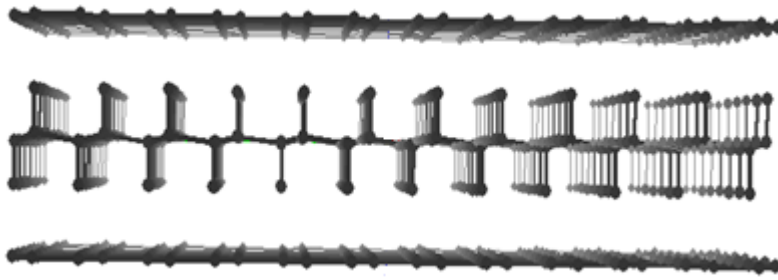
- Провести критический обзор о применении графен/графановых структур в радиоэлектронике
- Построить атомистические модели новой слоистой графен/графановой наноструктуры с различными типами упаковок
- Оптимизация построенных моделей, расчет энтальпии реакции
- Расчет электронных свойств

## **1. Атомистическое моделирование слоистых графен/графановых наноструктур**

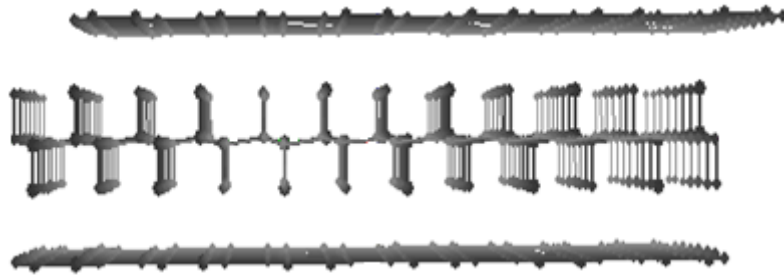
На данном этапе проводилось построение атомистической модели графан-графановых наноструктур и нахождение равновесной конфигурации структур при различных типах упаковки слоев.

слоистый графен может встречаться в нескольких структурных конфигурациях, отличающимися различными типами упаковки слоев (Рис.1). Поэтому в данной работе осуществлялось построение нескольких атомистических моделей слоистых графан-графановых наноструктур. В частности в работе был рассмотрен трехслойный композит, у которого первый и третий слои являются графеновыми, а между ними расположен слой графана. В работе рассматривалось три типа упаковки слоистого композитного материала графен/графан: тип ААА, при котором все три слоя расположены строго друг над другом (Рис. 1.а); тип ААВ, при котором верхний слой смещен относительно двух других слоев (Рис. 1.б); тип АВА, при котором второй слой смещен относительно первого и третьего (Рис. 1.в).

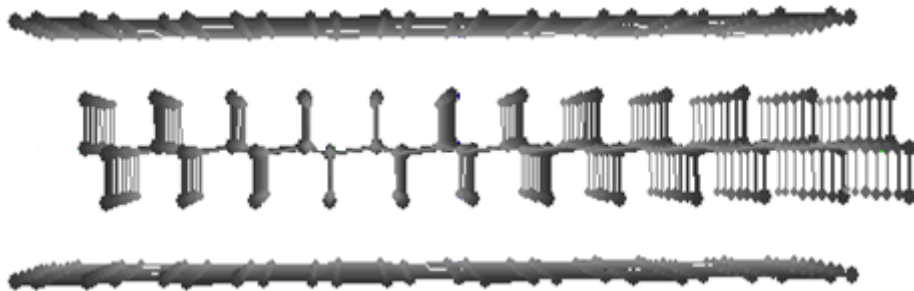
Построение атомистических моделей графан/графановых листов с различным типом упаковки осуществлялось с помощью программного пакета RING [13]. Полученные атомные структуры слоистых композитов представлены на рис. 1. Протяженность графеновых и графановых листов в направлении  $x$  составляет  $22,72\text{\AA}$ , в направлении  $y$  -  $14,76\text{\AA}$ .



а.



б.

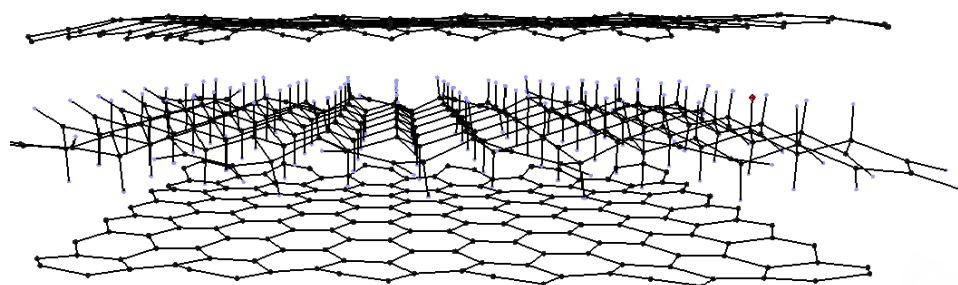


в.

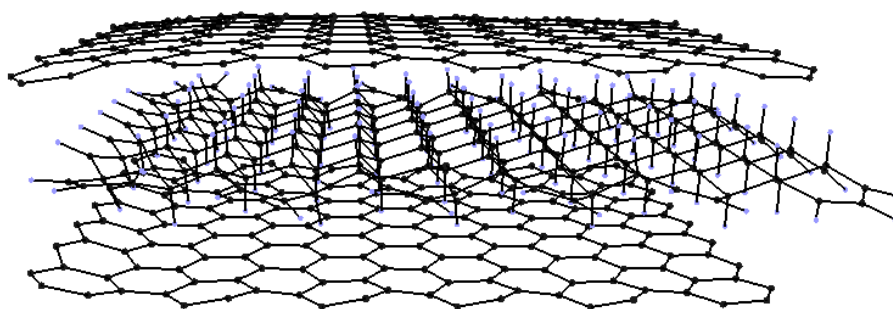
Рис. 1. Слоистый композитный материал графен/графан с различными типами упаковок: а) тип упаковки ААА; б) тип упаковки ААВ; в) тип упаковки АВА.

Следующим шагом данного исследования стало проведение оптимизации полученных структур путем минимизации полной энергии объектов по координатам их атомов (Рис.2). Расчет полной энергии исследуемых структур проводился в программном комплексе Kvizar [14] с помощью метода AIREBO, используемого для моделирования графеновых наноструктур, путем добавления слагаемых, учитывающих энергию двугранных углов .

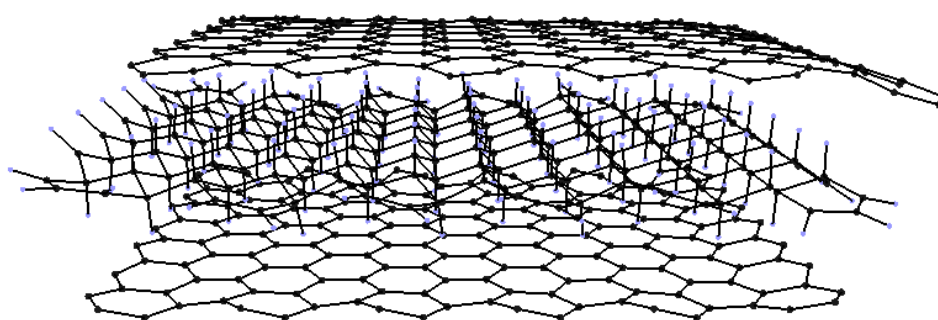
В результате минимизации полной энергии были определены равновесные конфигурации исследуемых объектов. Атомная структура объектов после оптимизации представлена на рис. 2. Из показанных рисунков, видно, что края графеновых и графановых слоев изгибаются на встречу друг другу, как бы обворачивая графановый слой, находящийся между ними. При этом центральная область всех трех листов практически не изменилась.



а.



б.



в.

Рис. 2. Атомная структура объектов после оптимизации при различных типах упаковки: а) тип ААА; б) тип АВА; в) тип ААВ.



## **2. Расчет электронных свойств**

На данном этапе рассчитывались зонная структура и DOS-спектр, с помощью которых оценивались электронные свойства структур, а так же было проведено сравнение свойств графена, графана и новой гибридной графен/графановой структуры.

### **2.1 Зонная структура и DOS-спектр графена**

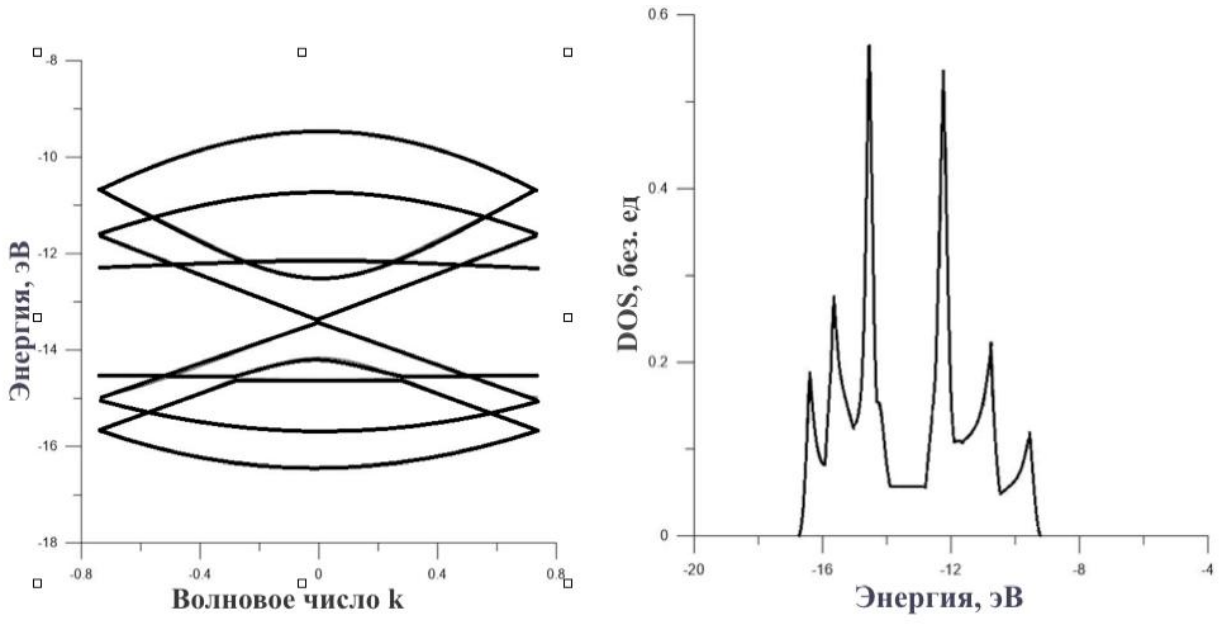
На рис. 3 представлены зонная структура и DOS-спектр графеновой структуры. Из графиков видно, что у графина отсутствует запрещенная зона, а значит данная структура обладает металлическим типом проводимости.

### **2.2 Зонная структура и DOS-спектр графана**

Из рис. 4 видно, что у графановой структуры достаточно большая запрещенная зона, а значит данный материал является диэлектриком, в отличие от графеновой структуры.

### **2.3 Зонная структура и DOS-спектр гибридной графен/графановой структуры**

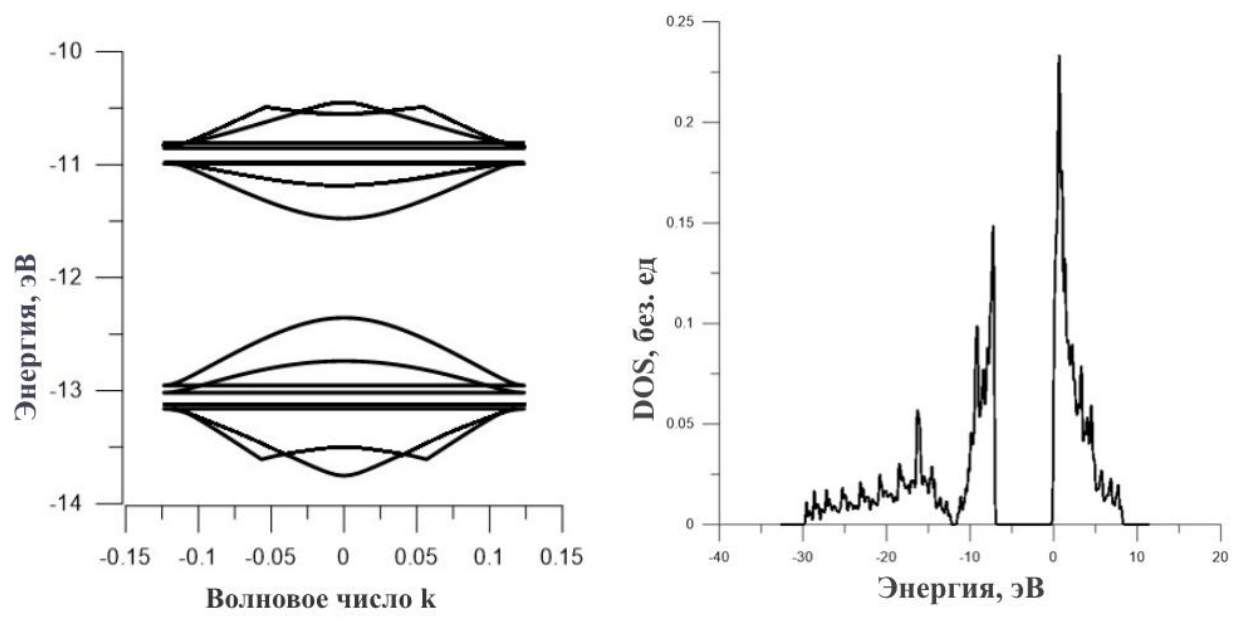
Как видно из рис. 5 гибридная структура демонстрирует металлический тип проводимости, а значит два слоя графена оказывают на электронные свойства большее влияние, чем обладающий запрещенной зоной графан. При этом уровень Ферми полученной структуры равен  $-4.36$  эВ. Это значение значительно ниже, чем у графена ( $-5.26$  эВ), что свидетельствует о снижении работы выхода гибридной структуры в сравнении с графеновой. Таким образом, рассмотренная графен-графановая структура сохраняет проводимость графена, но при этом обладает меньшей работой выхода, что позволяет считать ее перспективным элементом для приборов радиоэлектроники.



а.

б.

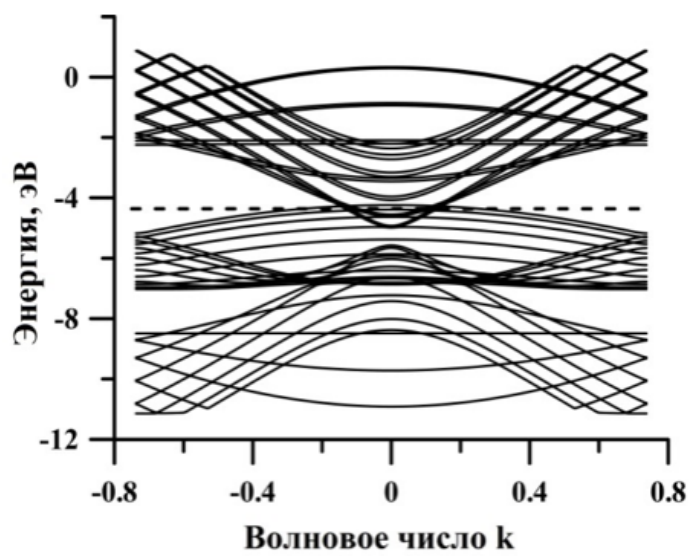
Рис. 3. Электронные свойства графеновой структуры а) зонная структура; б) DOS-спектр



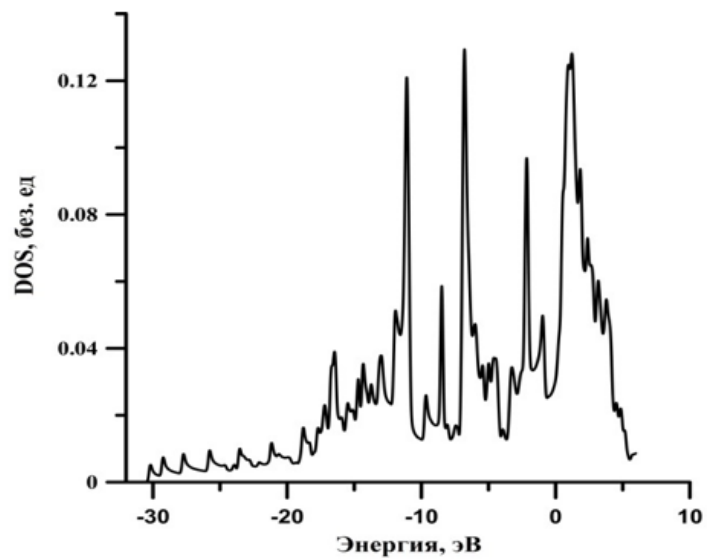
а.

б.

Рис. 4. Электронные свойства графеновой структуры а) зонная структура; б) DOS-спектр



а.



б.

Рис. 5. Электронные свойства графеновой структуры а) зонная структура; б) DOS-спектр.

Далее представлена таблица 1 уровней Ферми. Как видно из данных таблицы, структура, соответствующая типу ААА, будет обладать наименьшей энергией и энтальпией реакции образования, а значит будет являться наиболее энергетически устойчивой и выгодной с точки зрения синтеза. Отметим, что отрицательной энтальпией реакции обладает каждая из рассмотренных структур, а значит, все они могут существовать на практике.

Тип структуры	Значение энергии, эВ
графен	-5.28867
графан	-3.54799
ААА	-4.43027
ААВ	-4.45371
АВА	-4.48120

Таблица 1. Значения уровней Ферми.

## **Заключение**

Проведенное исследование показало, что гибридная структура демонстрирует металлический тип проводимости, а значит два слоя графена оказывают на электронные свойства большее влияние, чем обладающий запрещенной зоной графан. При этом уровень Ферми полученной структуры равен -4.36 эВ. Таким образом, рассмотренная графен/графановая структура с типом упаковки ААА обладает наименьшей энтальпией реакции образования, а значит будет являться наиболее энергетически устойчивой, что позволяет считать ее перспективным элементом для приборов радиоэлектроники.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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, Control of graphene's properties by reversible hydrogenation: evidence for graphane, *Science* 323 (2009) 610-613.
2. <http://medlec.org/lek3-25894.html>
3. Support in China by NSFC (21273118) and 111 Project (B12015), and in USA
4. ssu-filippov
5. Bigthink
6. <http://www.russianelectronics.ru/leader-r/review/doc/59336/>
7. Feng L. et al. Solid-State Reversible Quadratic Nonlinear Optical Molecular Switch with an Exceptionally Large Contrast / Feng L. et al. // *Advanced Materials*. — 2013.
8. *J. Appl. Phys.* **109**, 014306 (2011); <http://dx.doi.org/10.1063/1.3528213>
9. [http://android-tip.com/soveti\\_i\\_poleznoe/218-grafen-sleduyuschiy-shag-v-razvitii-mobilnyh-displeev.html](http://android-tip.com/soveti_i_poleznoe/218-grafen-sleduyuschiy-shag-v-razvitii-mobilnyh-displeev.html)
10. ВО, Технологии. <https://topwar.ru/63899-grafen-zaschitit-ot-pul-luchshe-stali.html>