

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

**Электродинамические параметры плоских и криволинейных  
графеновых нанолент типа zigzag**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ  
студента 2 курса 242 группы  
направления 03.04.03 «Радиофизика»  
физического факультета

Васина Егора Александровича

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор

\_\_\_\_\_ О.Е. Глухова

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

\_\_\_\_\_ О.Е. Глухова

Саратов 2017

## ВВЕДЕНИЕ

Настоящая квалификационная работа посвящена исследованию электродинамических свойств графеновых нанолент. В настоящее время графен является одним из перспективных материалов элементной базы современной нанoeлектроники. Известно, что этот углеродный материал обладает уникальными электрофизическими свойствами, в том числе высокой электро- и теплопроводностью, значительной эластичностью и жесткостью. Благодаря перечисленным выше свойствам графен находит свое применение во многих областях науки и техники.

Структурно графеновая нанолента представляет собой моноатомный слой, образованный из гексагонов, в вершинах которых находятся атомы углерода. В зависимости от формы протяженного края ленты различают zigzag и armchair графеновые наноленты. Различия в топологии графеновых нанолент определяют различные свойства этих углеродных нанообъектов. Известно, что графеновые наноленты являются перспективным материалом для создания оптических сенсоров. Несмотря на уже созданные сенсоры, влияние кривизны на их характеристики изучено не полностью. В связи с этим актуальным является изучение закономерности электродинамических свойств, в зависимости от кривизны наноленты.

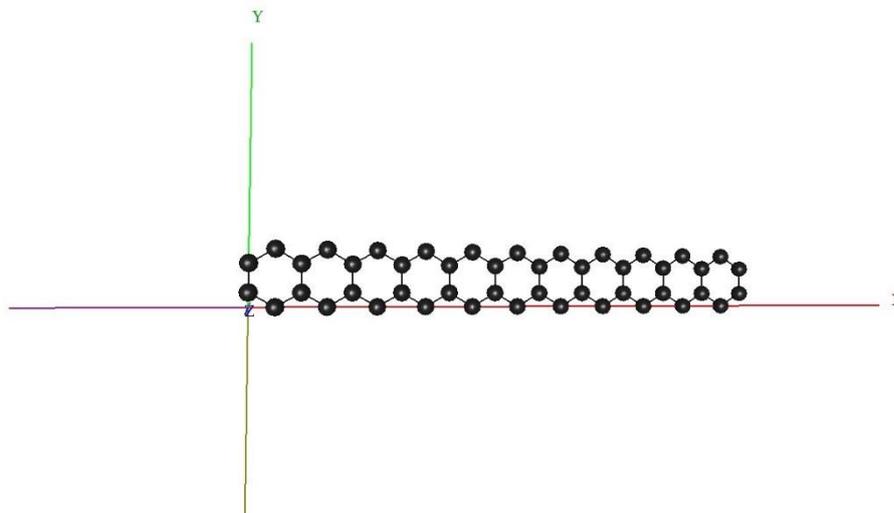
Целью квалификационной работы является выявление закономерностей поглощения, отражения и пропускания плоскими и криволинейными графеновыми нанолентами типа armchair электромагнитных волн видимого-ИК диапазонов.

Для достижения цели будут решены следующие задачи:

- построение моделей атомной сетки графеновых нанолент
- расчет оптической проводимости нанолент плоских и криволинейных для случаев разной ширины наноленты

- расчет электродинамических параметров взаимодействия с электромагнитными волнами (коэффициентов поглощения, отражения и прохождения)

## 2. Результаты моделирования для плоской графеновой ленты



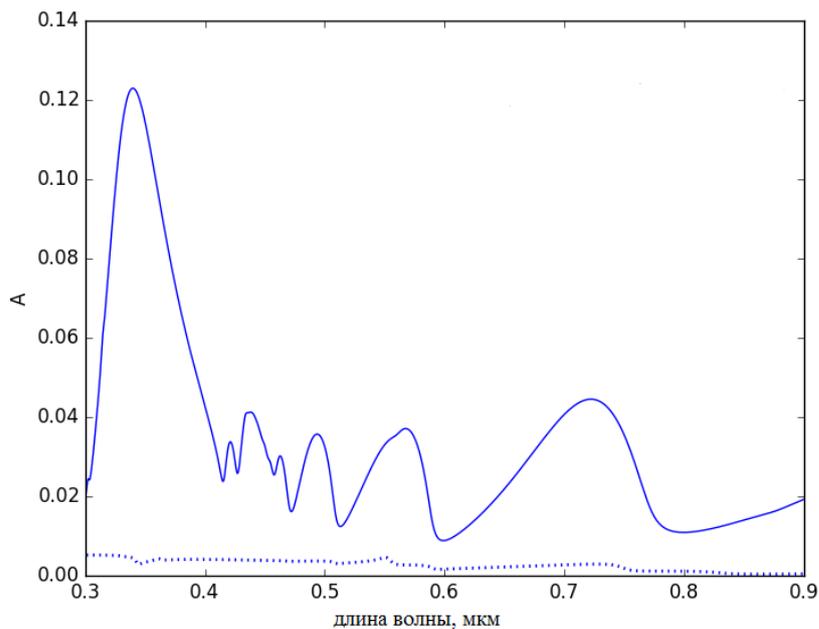
Плоская графеновая нанолента

В ходе дипломной работы были рассмотрены два случая графеновых нанолент. В первом случае рассматривалась плоская графеновая нанолента, а во втором- криволинейная (гофрированная нанолента). Изменяя ширину ленты (от 1 до 10 Нм), нами исследовались изменения электродинамических параметров.

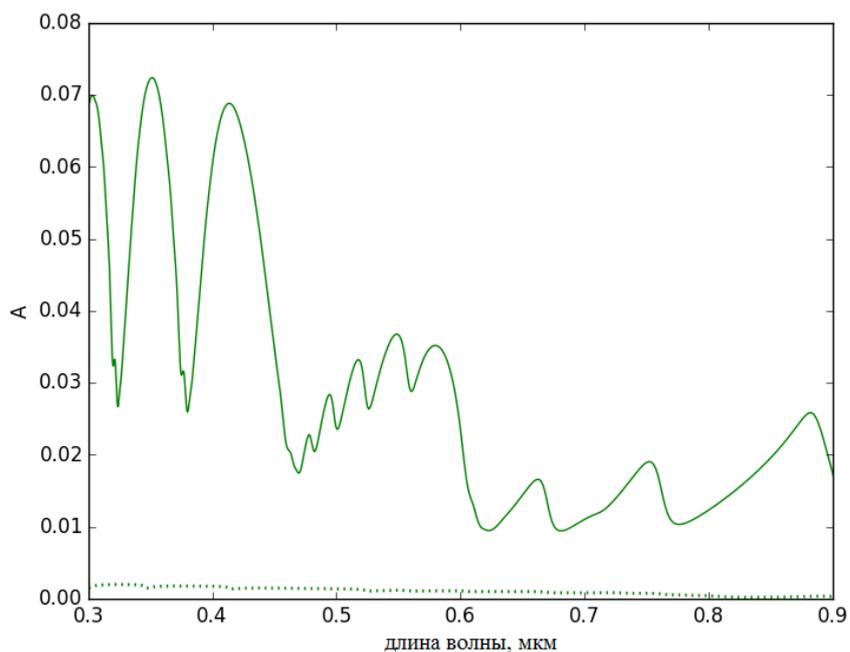
В ходе дипломной работы были рассмотрены два случая графеновых нанолент. В первом случае рассматривалась плоская графеновая нанолента, а во втором- криволинейная (гофрированная нанолента).

Для изучения оптических свойств (коэффициентов прохождения, поглощения и отражения) нами были использованы программы «MIZAR» и «KVAZAR». В программном комплексе «KVAZAR» нами строилась структура наноленты.

Изображенные графики: р-поляризация – сплошная кривая, s-поляризация – пунктирная кривая.

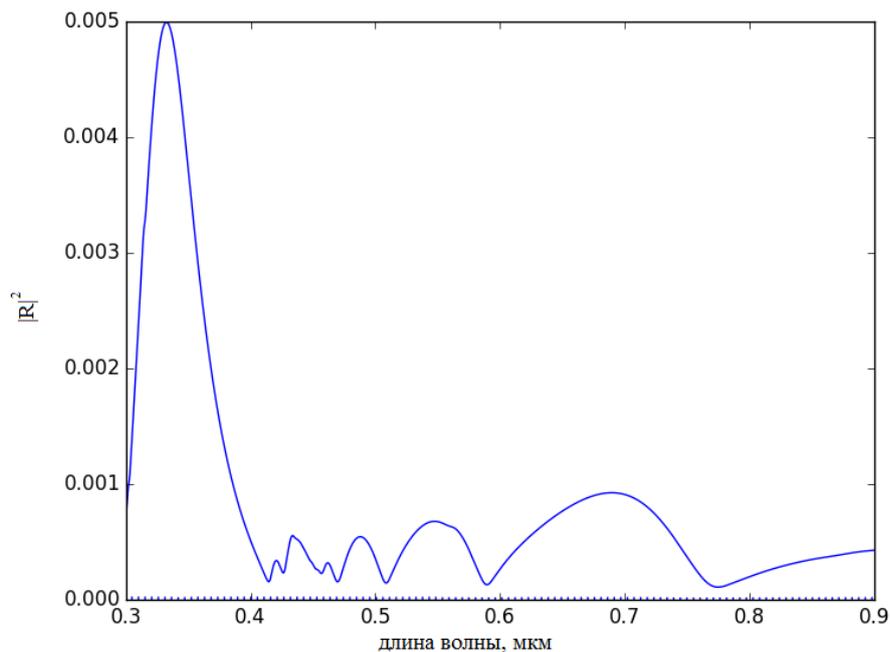


Коэффициент поглощения для наноленты шириной 2.4 Нм

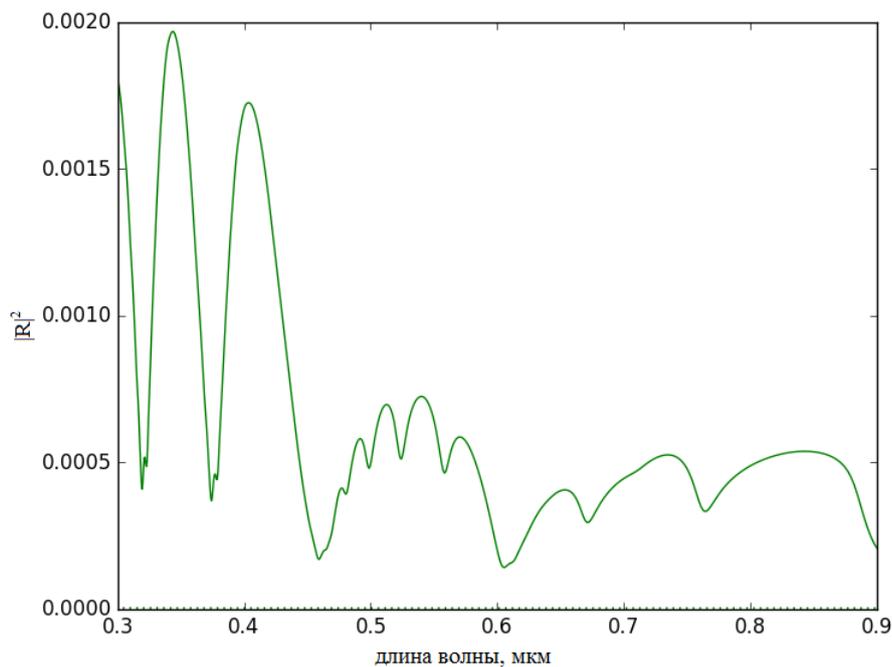


Коэффициент поглощения для наноленты шириной 5.8 Нм

Сравнив результаты полученные выше, можно сделать вывод: коэффициент поглощения зависит от поляризации. При р-поляризации он значительно выше чем при s-поляризации, также при уменьшении ширины наноленты, коэффициент поглощения будет расти.

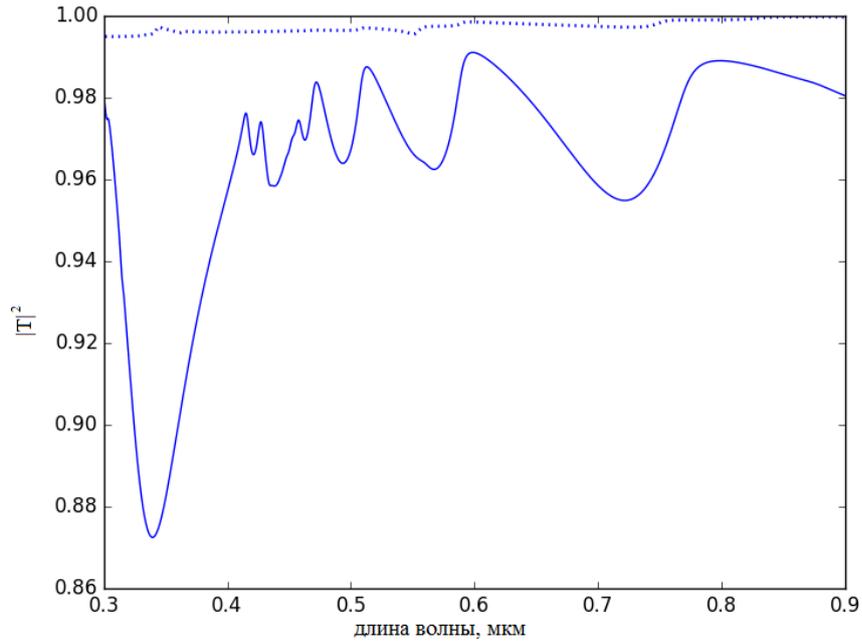


Коэффициент отражение для наноленты шириной 2.4 Нм

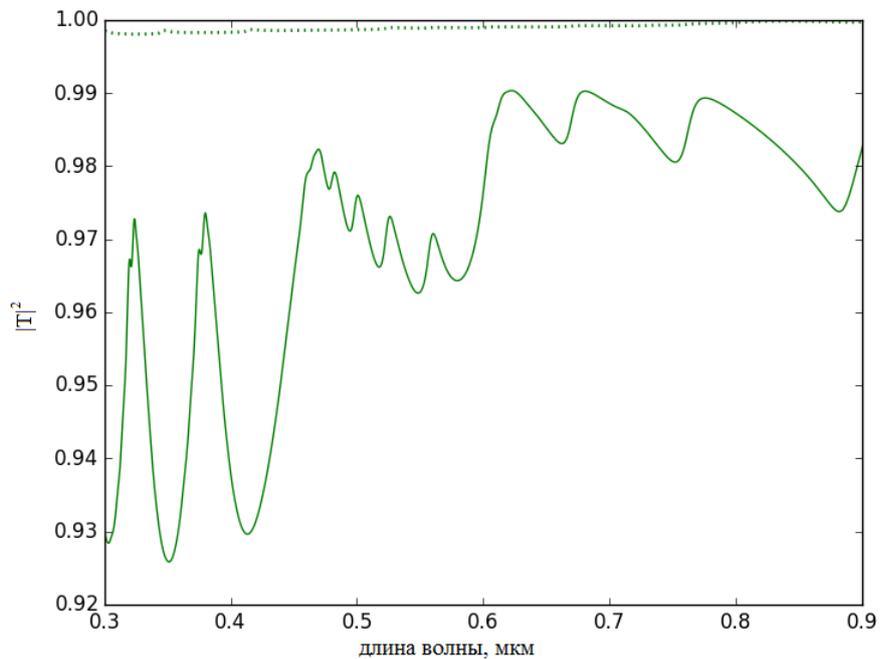


Коэффициент отражение для наноленты шириной 5.8 Нм

Из графиков изображенных на рисунках следует, что коэффициент отражения при s-поляризации, пренебрежимо мал в сравнении с р-поляризацией. Также коэффициент отражения увеличивается при сокращении ширины наноленты.



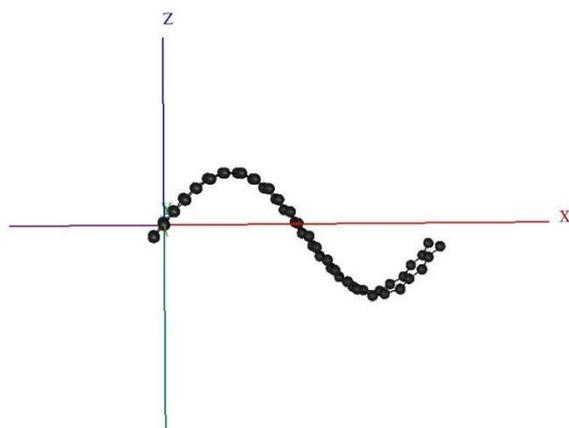
Коэффициент прохождения для наноленты шириной 2.4 Нм



Коэффициент прохождения для наноленты шириной 5.8 Нм

Как видно из приведенных выше графиков, коэффициент прохождения также возрастает при уменьшении ширины наноленты, но возрастает не значительно. Существенное значение имеет поляризация. При s-поляризации коэффициент прохождения больше, и стремится к единице.

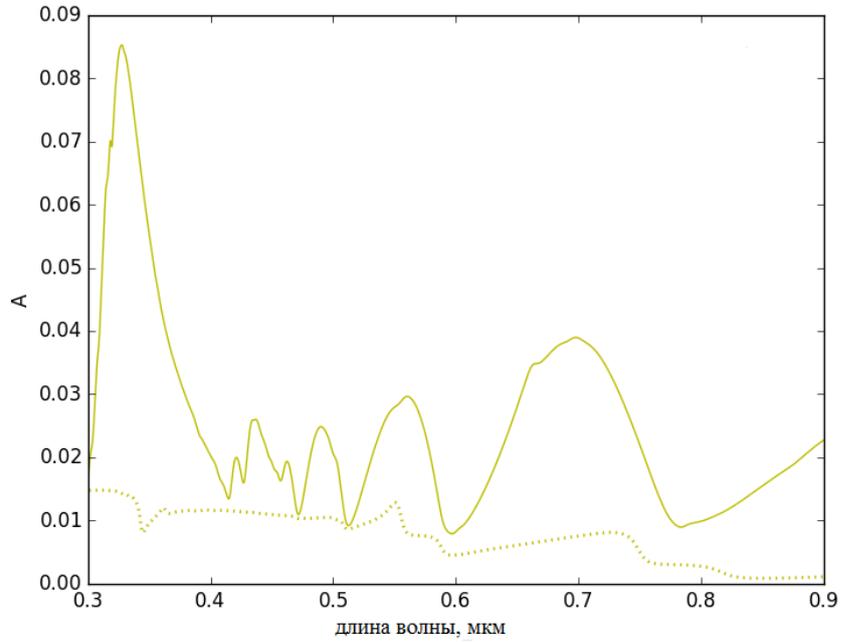
### 3. Результаты моделирования для графеновой наноленты с изгибом.



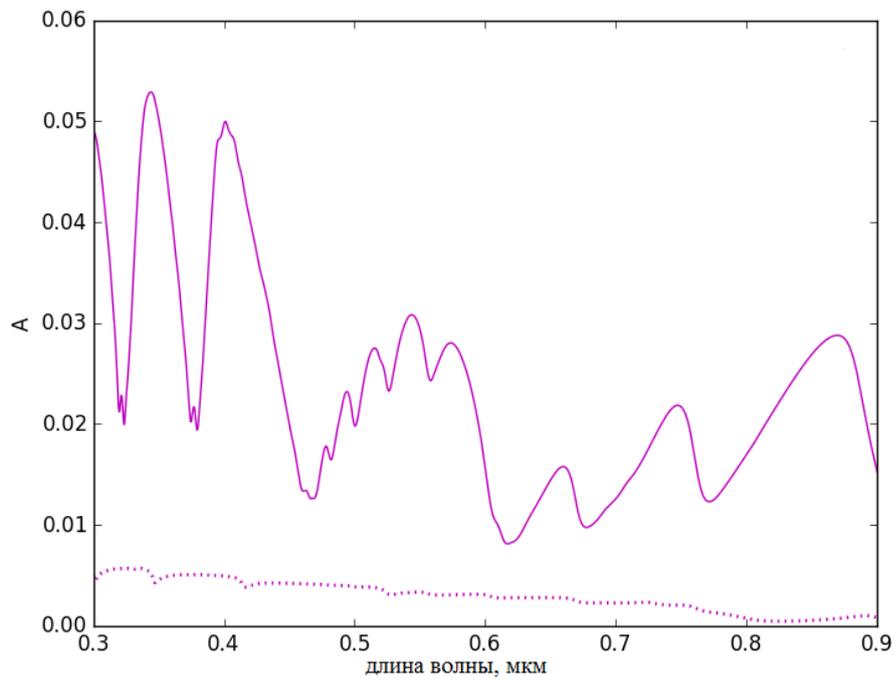
Криволинейная (гофрированная) нанолента

Изменяя ширину гофрированной наноленты, в том же диапазоне от 1 до 10 Нм, нужно было проследить изменение коэффициентов поглощения, отражения, прохождения.

Изображенные графики: р-поляризация – сплошная кривая, s-поляризация – пунктирная кривая.

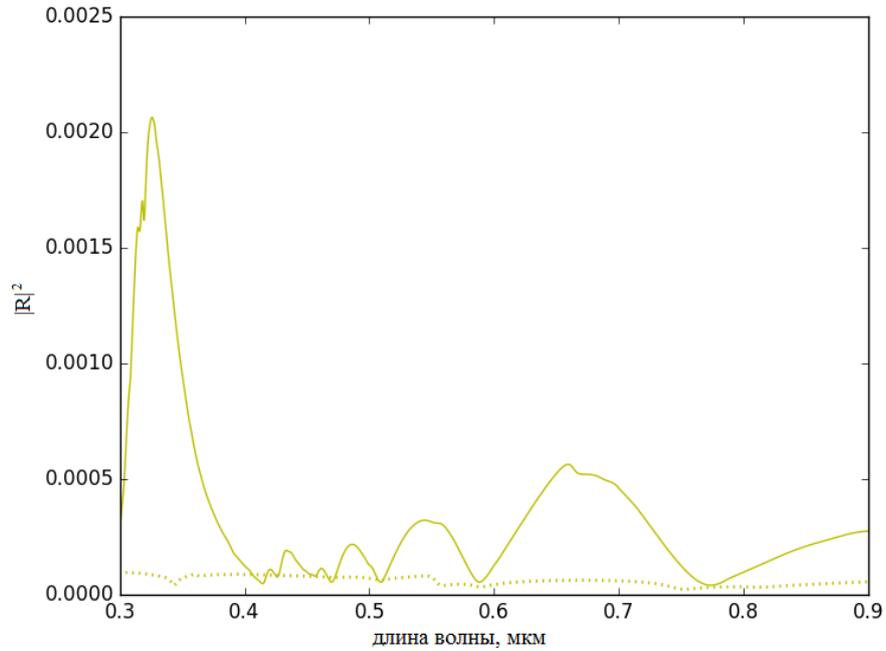


Коэффициент поглощения для наноленты шириной 2.4 Нм

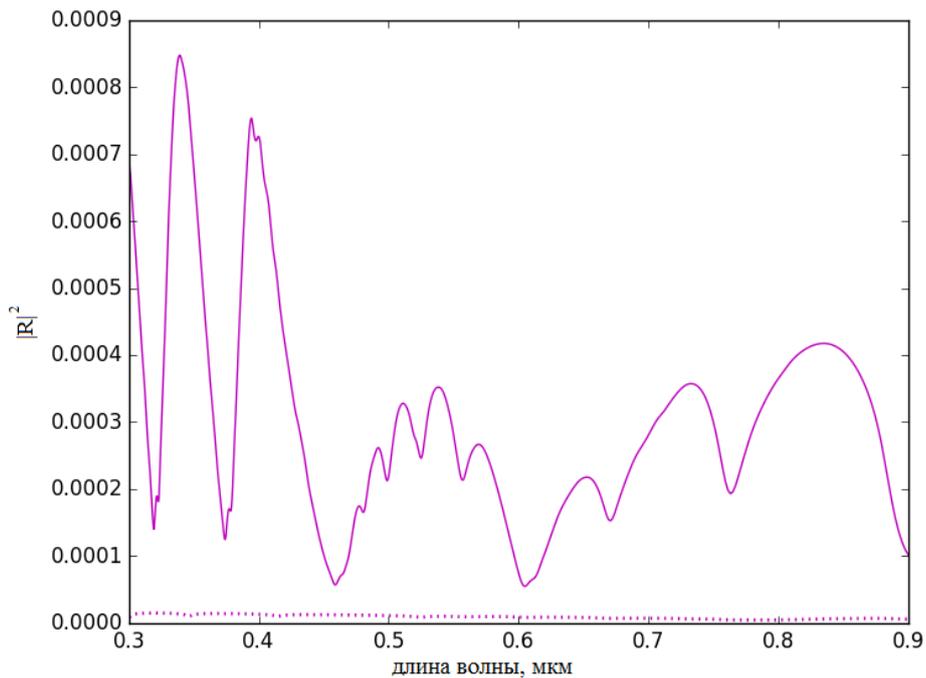


Коэффициент поглощения для наноленты шириной 5.8 Нм

Из графиков приведенных выше следует вывод. Коэффициент поглощения выше для р-поляризованной волны, а также растет при уменьшении ширины наноленты.

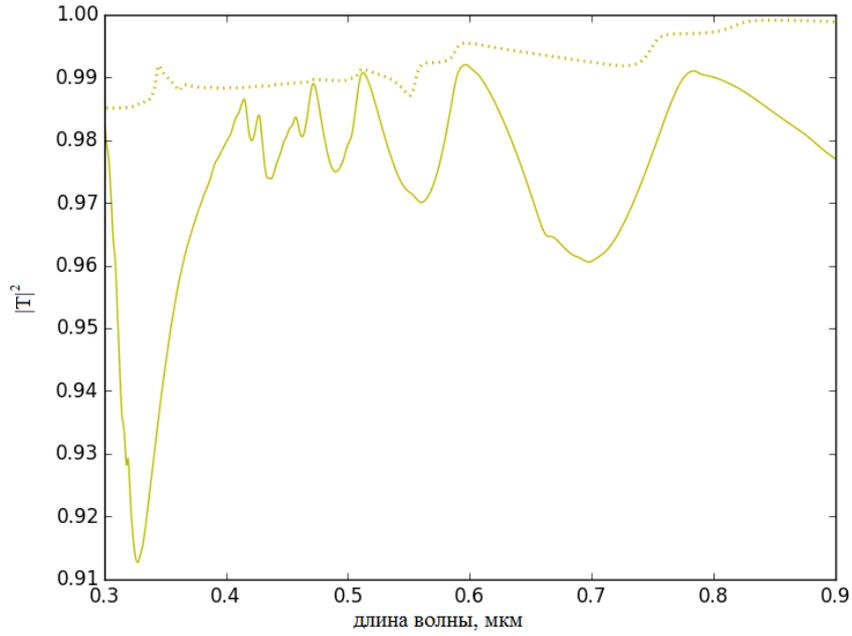


Коэффициент отражения для наноленты шириной 2.4 Нм

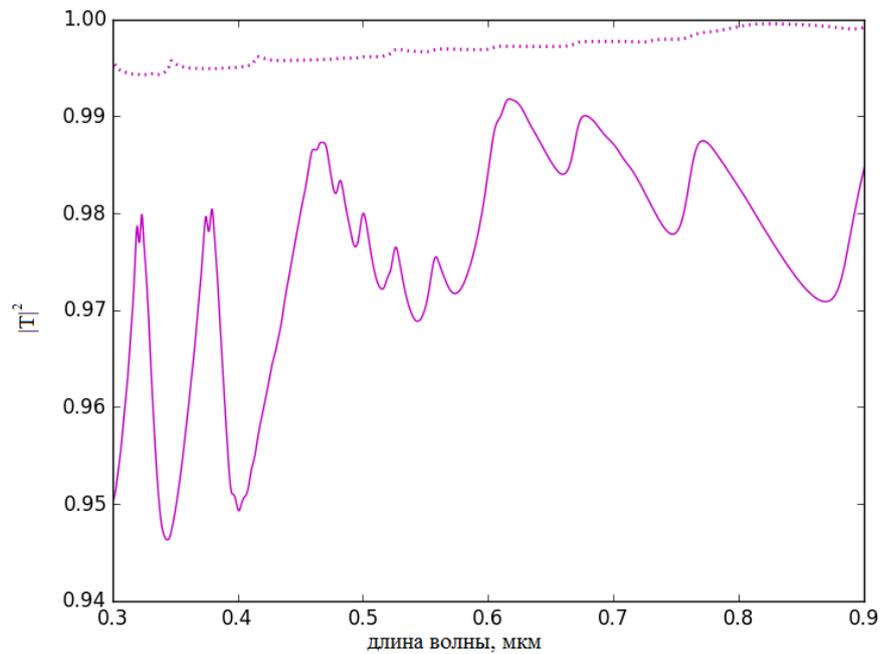


Коэффициент отражения для наноленты шириной 5.8 Нм

Как видно на графиках, коэффициент отражения при р-поляризации на порядок больше, чем при s-поляризации. С уменьшением ширины наноленты, коэффициент отражения будет расти.

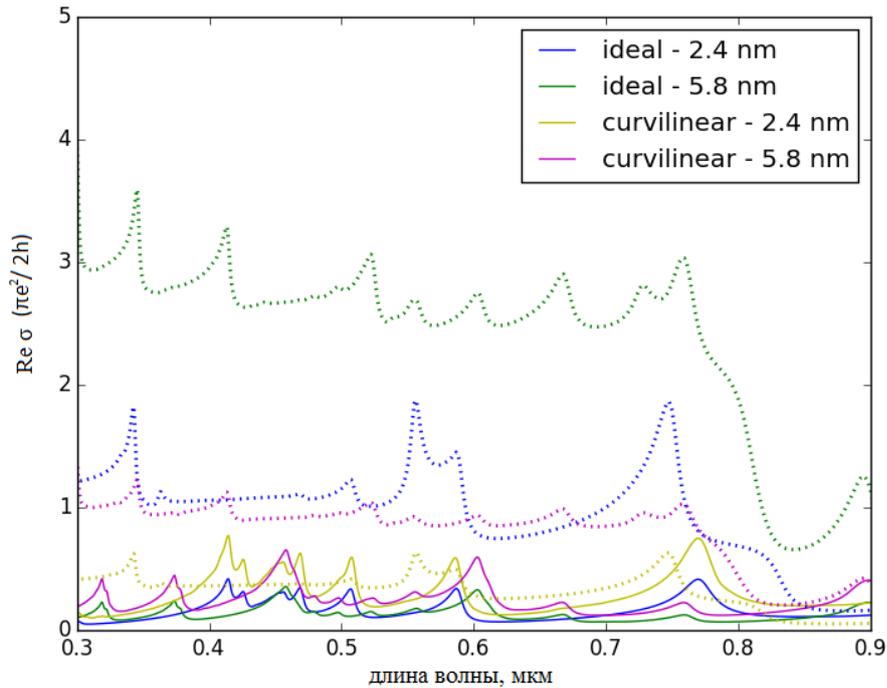


Коэффициент прохождения для наноленты шириной 2.4 Нм



Коэффициент прохождения для наноленты шириной 5.8 Нм

Из приведенных выше графиков следует, что коэффициент прохождения для р-поляризованной волны меньше, чем для s-поляризованной волны. Также при уменьшении ширины наноленты коэффициент прохождения возрастает, но не значительно.



Оптическая проводимость (действительная часть), сплошные кривые -направление x, пунктирные – y.

Из рисунка видно, что действительная часть оптической проводимости немного больше для гофрированной наноленты чем для плоской, по направлению оси x. С увеличением ширины наноленты наблюдается небольшое уменьшение значения действительной части оптической проводимости как для плоской, так и для криволинейной наноленты. Разница в значениях оптической проводимости для плоской и гофрированной нанолент немного сокращается при изменении ширины наноленты.

По направлению оси y значение оптической проводимости (действительной части) на порядок больше для плоской наоленты, чем для гофрированной. С увеличением ширины наноленты, наблюдается постепенной уменьшение значений оптической проводимости, как для плоских нанолент, так и для криволинейных. Разница в значениях оптической проводимости для плоской и криволинейной нанолент уменьшается с увеличением ширины наноленты.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе изучения электродинамических свойств графеновых нанолент zigzag получено следующее:

- Минимальное поглощение наблюдается для s-поляризованных волн независимо от ширины и кривизны наноленты. S-поляризованные волны поглощаются не более 2%. Поглощение p-поляризованных волн зависит от ширины и топологии наноленты. Максимальное поглощение 12.2% наблюдается для узких лент (2.7 и 2.8 Нм) в диапазоне 0.33-0.36 мкм.
- Минимальное отражение также наблюдается для s-поляризованных волн независимо от ширины и кривизны наноленты. S-поляризованные волны отражаются не более 0.01%. Отражение p-поляризованных волн зависит от ширины и топологии наноленты. Максимальное отражение 0.05% наблюдается для узких лент (2.7 и 2.8 Нм) в диапазоне 0.33-0.36 мкм
- Минимальное прохождение наблюдается для p-поляризованных волн независимо от ширины и кривизны наноленты. Прохождение s-поляризованных волн составляет не менее 98.3%. Прохождение p-поляризованных волн зависит от ширины и топологии наноленты. Минимальное прохождение 87.2% наблюдается для узких лент (2.7 и 2.8 Нм) в диапазоне 0.33-0.37 мкм.
- Минимальная оптическая проводимость (действительная часть) наблюдается перпендикулярно C-C связям (по направлению x), не зависимо от ширины и кривизны наноленты. По направлению x для действительной части оптической проводимости находится большое количество пиков, самые интенсивные пики наблюдаются для криволинейных нанолент и составляют 0.8 и 0.7 на длинах волн 0.42 и 0.77 мкм. По направлению y пики наблюдаются для плоских нанолент, максимальное значение действительной части оптической проводимости находится для плоских нанолент и составляет 3.6 для ленты шириной 5.8 Нм, и 1.8 для ленты шириной 2.4 Нм, на длинах волн 0.34 и 0.57 мкм соответственно.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Вайнштейн Л.А. Электромагнитные волны. М.: АСТ, 1988. 440 с.
2. V.V. Mitrofanov, M.M. Slepchenkov, G.Zhang, O.E. Glukhova Hybrid carbon nanotube-graphene monolayer films: Regularities of structure, electronic and optical properties // Carbon 2017. Vol. 115. P. 803–810.
3. Lebedev A.A., Lebedev S.P., Novikov S.N., Davydov V.Yu., Smirnov A.N., Litvin D.P., Makarov Yu.N., Levitskii V.S., Supersensitive graphene-based gas sensor // Technical Physics, 2016, V. 61, N. 3, P. 453-457.
4. Falkovsky L.A. Optical properties of graphene and IV–VI semiconductors // Physics-Uspekhi, 2008, V. 51, N. 9, P. 887-898.
5. Sorokin P.B., Chernozatonskii L.A., Graphene-based semiconductor nanostructures // Physics-Uspekhi, 2013, V. 56, N. 2, P. 105-122.
6. R. Pincak, J. Smotlacha, V.A. Osipov Electronic states of zigzag graphene nanoribbons with edges reconstructed with topological defects // Physica B: Condensed Matter 2015. Vol. 475. P. 61–65.
7. D. Singh, S.K. Gupta, Y. Sonvane, I. Lukačević Antimonene: a monolayer material for ultraviolet optical nanodevices // Journal of Materials Chemistry 2016, V.4 (26), 6386-6390.
8. M. Fox, Optical Properties of Solids, Oxford University Press, New York, 2001, vol. 3.
9. A. M. Silva, M. S. Pires, and V. N. Freire Graphene Nanoflakes: Thermal Stability, Infrared Signatures, and Potential Applications in the Field of Spintronics and Optical Nanodevices // J. Phys. Chem. 2010, V.114 (41), pp 17472–17485.
10. A. N. Grigorenko, M. Polini and K. S. Novoselov Graphene plasmonics // Nature Photonics, 2012, V.6, 749–758.
11. Pai-Yen Chen, Haiyu Huang, Deji Akinwande, and Andrea Alu A Graphene-Based Plasmonic Platform for Reconfigurable Terahertz Nanodevices // ACS Photonics, 2014, V.1 (8), pp 647–654.

12. Kehan Yu, Pengxiang Wang, Ganhua Lu, Ke-Hung Chen, Zheng Bo, and Junhong Chen Patterning Vertically Oriented Graphene Sheets for Nanodevice Applications // *J. Phys. Chem. Lett.*, 2011, V.2 (6), pp 537–542.
13. Stephanie J. Heerema and Cees Dekker Graphene nanodevices for DNA sequencing // *Nature Nanotechnology*, 2016, V.11, pp 127–136.
14. Leonardo Vicarelli,\* Stephanie J. Heerema, Cees Dekker, and Henny W. Zandbergen Controlling Defects in Graphene for Optimizing the Electrical Properties of Graphene Nanodevices // *ACS Nano*, 2015, 9 (4), pp 3428–3435.
15. S. Masubuchi, M. Ono, K. Yoshida, K. Hirakawa, and T. Machida Fabrication of graphene nanoribbon by local anodic oxidation lithography using atomic force microscope // *Appl. Phys. Lett.* 2009, V.94.
16. Katsunori Wakabayashi, Yositake Takane, Masayuki Yamamoto and Manfred Sigrist Electronic transport properties of graphene nanoribbons // *New Journal of Physics*, 2009, V.11.
17. Savin A.V. Korznikova E.A. Dmitriev S.V. Simulation of Folded and Scrolled Packings of Carbon Nanoribbons // *Phys. Solid State*, 2015, V.57:11, pp 2348–2355.
18. Baimova J.A. Korznikova E.A. Lobzenko I.P. Dmitriev S.V. Discrete Breathers in Carbon and Hydrocarbon Nanostructures // *Rev. Adv. Mater. Sci.*, 2015, V.42:1, pp 68–82.