

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

Щербакова Антона Сергеевича

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор \_\_\_\_\_ О.Е. Глухова

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор \_\_\_\_\_ О.Е. Глухова

Саратов 2017

Настоящая квалификационная работа посвящена исследованию электродинамических свойств графеновых нанолент. В настоящее время графен является одним из перспективных материалов элементной базы современной наноэлектроники. 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 нанобъектов. 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 поставленной в работе цели были 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)

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 электродинамических свойств нанолент (коэффициентов прохождения, поглощения и отражения) нами были использованы программы «MIZAR» и «KVAZAR». В программном комплексе «KVAZAR» нами строилась структура наноленты. Все дальнейшие расчеты производились в программе «MIZAR» по формуле Кубо-Гринвуда.

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{im\omega V} \left[ \sum_l f_l \delta_{xx} - \sum_{l'} \frac{f_l - f_{l'}}{\hbar m} \frac{\langle l | P_x | l' \rangle \langle l' | P_x | l \rangle}{\omega_l - \omega_{l'} + \omega + i\gamma} \right],$$

где  $e$  - заряд свободного электрона,  $m$  - эффективная масса электрона,  $\omega$  - частота электромагнитного поля,  $\gamma$  - мнимая часть электромагнитного поля,  $V$  - элементарный объем,  $P$  - матрица моментов,  $l$  и  $l'$  соответствующие индексы подзон валентной зоны и зоны проводимости,  $\omega_l$  и  $\omega_{l'}$  частоты соответствуют энергиям подзон,  $f$  - распределение Ферми - Дирака,  $\delta$  - символ Кронекера,  $\hbar$  - постоянная Планка.

Изменяя ширину ленты (от 1 до 10 нм) исследовалась зависимость электродинамических параметров. Для нанолент разной ширины, было проведено сравнение оптических свойств (коэффициентов поглощения, отражения, прохождения, а также оптической проводимости) плоской и гофрированной графеновой наноленты.

Ниже на рис.23 представлен график для коэффициента поглощения, на котором р-поляризованные волны изображены сплошными линиями, s-поляризованные – пунктирными,

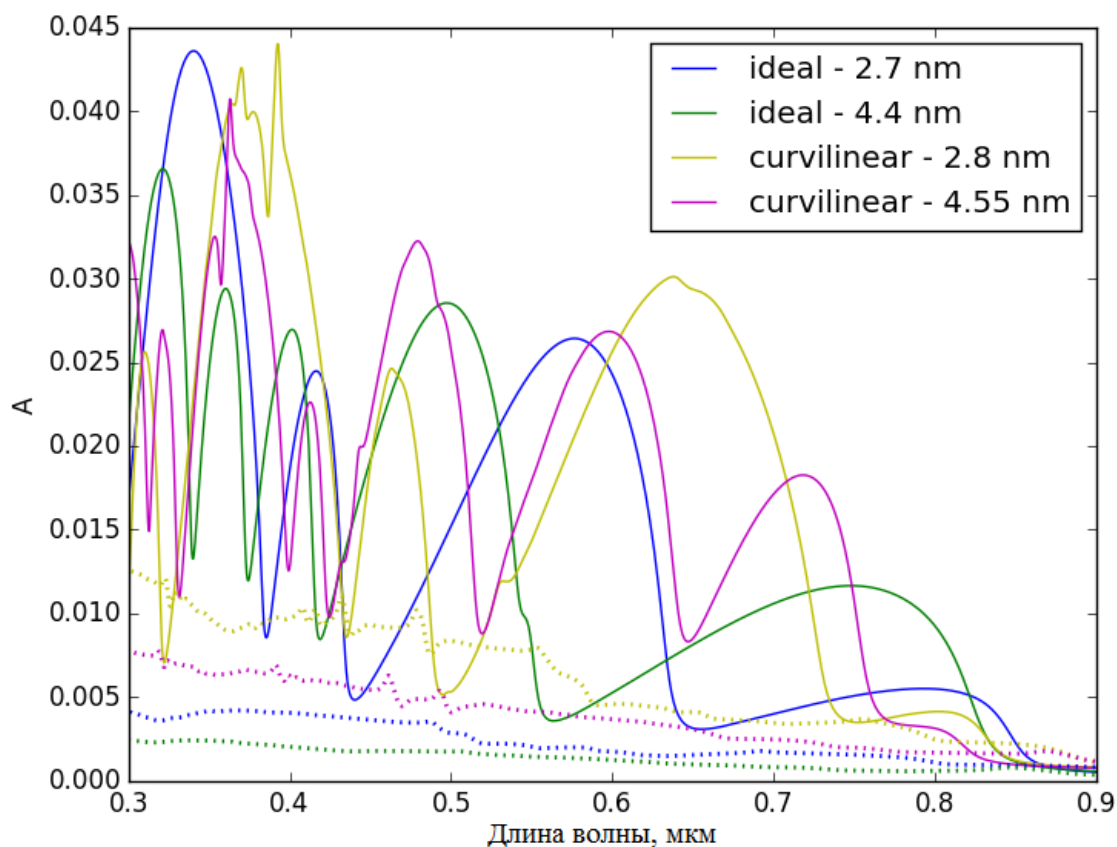


Рис.23 Коэффициент поглощения для лент разной ширины и кривизны (р-поляризованная волна – сплошная кривая, s-поляризованная волна – пунктирная кривая)

из которого видно, что для криволинейной наноленты значение коэффициента поглощения больше, чем для плоской на примерно одинаковой ширине нанолент как для р-поляризованной, так и для s-поляризованной волны. Также наблюдается смещение для р-поляризации по длинам волн на 0.06 мкм для лент шириной 2.7 и 2.8 нм и на 0.04 мкм для лент шириной 4.4 и 4.55 нм. Разница в значениях сокращается для s-поляризованной волны и увеличивается для р-поляризованной с увеличением ширины наноленты.

На рис.24 изображены графики коэффициента отражения. В аналогии с графиками коэффициента поглощения сплошными линиями изображены р-поляризованные волны, пунктирными - s-поляризованные.

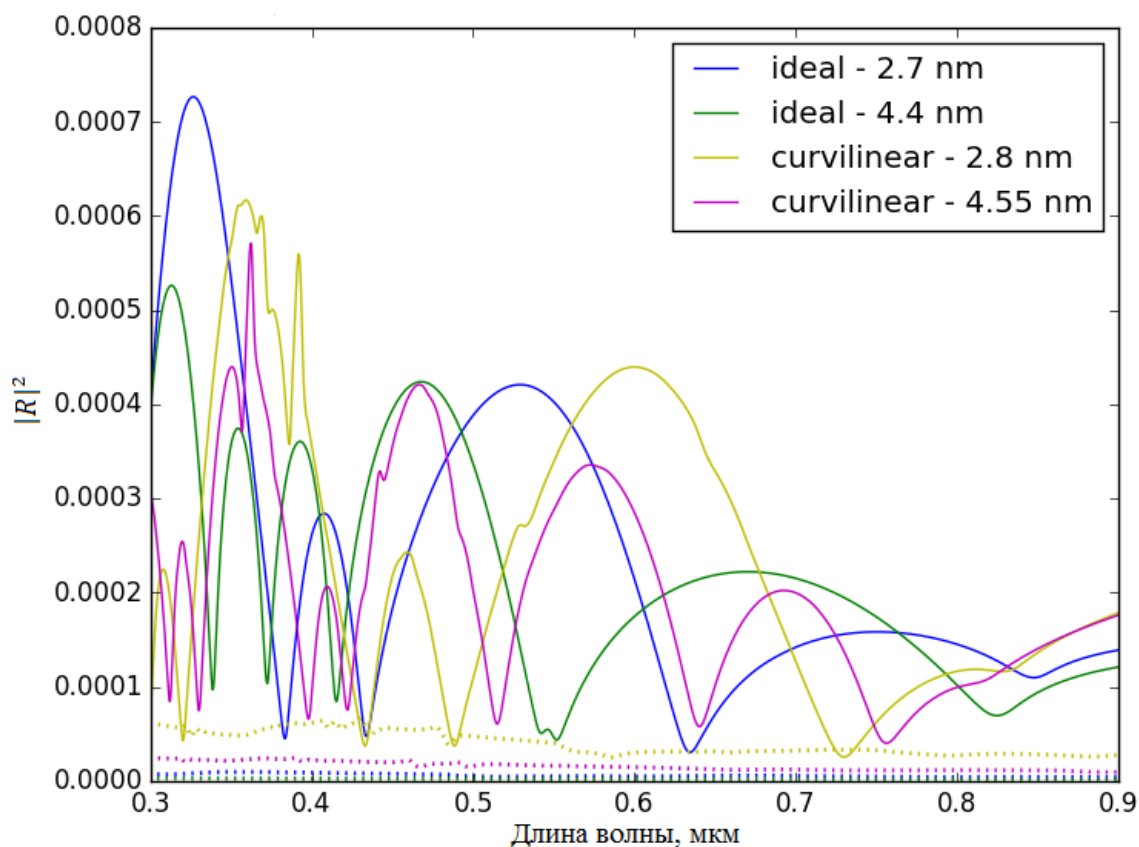


Рис.24 Коэффициент отражения для лент разной ширины и кривизны (р-поляризованная волна – сплошная кривая, s-поляризованная волна – пунктирная кривая)

Из рис.24 видно, что значения коэффициента отражения больше для плоской, чем для гофрированной наноленты при р-поляризации, и меньше при s-поляризации для примерно одинаковых по ширине нанолент. Также для р-поляризованной волны наблюдается смещение по длинам волн на 0.03 мкм для более узких лент и на 0.05 мкм для более широких. С увеличением ширины нанолент разница в значениях коэффициента отражения сокращается как для р-поляризованной, так и для s-поляризованной волны.

На рис.24 изображены графики коэффициента прохождения для нанолент разной кривизны и ширины. Также как и на рис.22-23 сплошными изображены р-поляризованные волны, пунктирными - s-поляризованные.

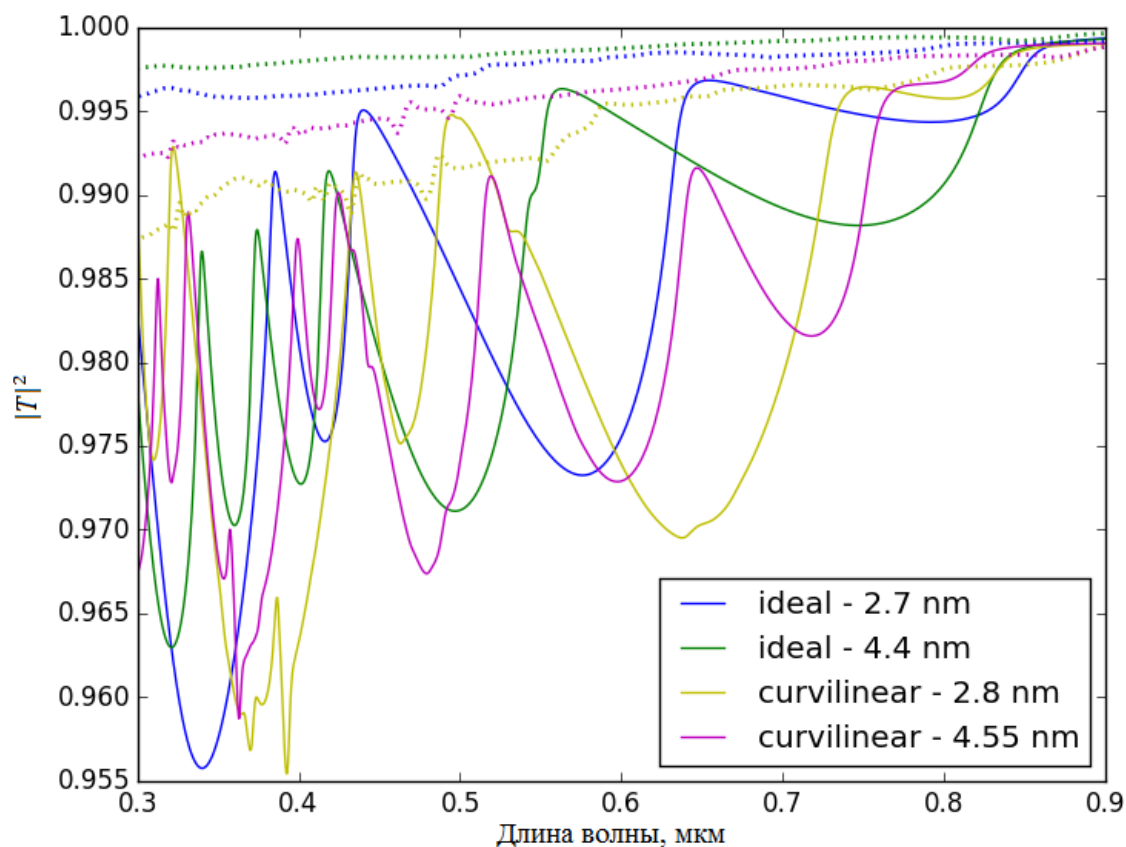


Рис.25 Коэффициент прохождения для лент разной ширины и кривизны (р-поляризованная волна – сплошная кривая, s-поляризованная волна – пунктирная кривая)

Для s-поляризованной волны значение коэффициента прохождения значительно больше для плоской наноленты, чем для криволинейной на примерно одинаковой ширине ленты. Также наблюдается смещение по длинам волн для р-поляризации на 0.06 мкм для более узкой наноленты и на 0.08 мкм для более широкой. Разница между значениями коэффициента уменьшается при увеличении ширины наноленты для s-поляризованной волны. Для р-поляризованной волны разница между значениями коэффициента отражения практически отсутствует для плоской и гофрированной лентами примерно одинаковой ширины, и практически не изменяется при увеличении ширины наноленты.

Далее рассмотрим графики оптической проводимости (рис.26-27) в зависимости от кривизны наноленты по направлениям осей  $x$  и  $y$ . Где сплошные кривые -направление  $x$ , пунктирные –  $y$ .

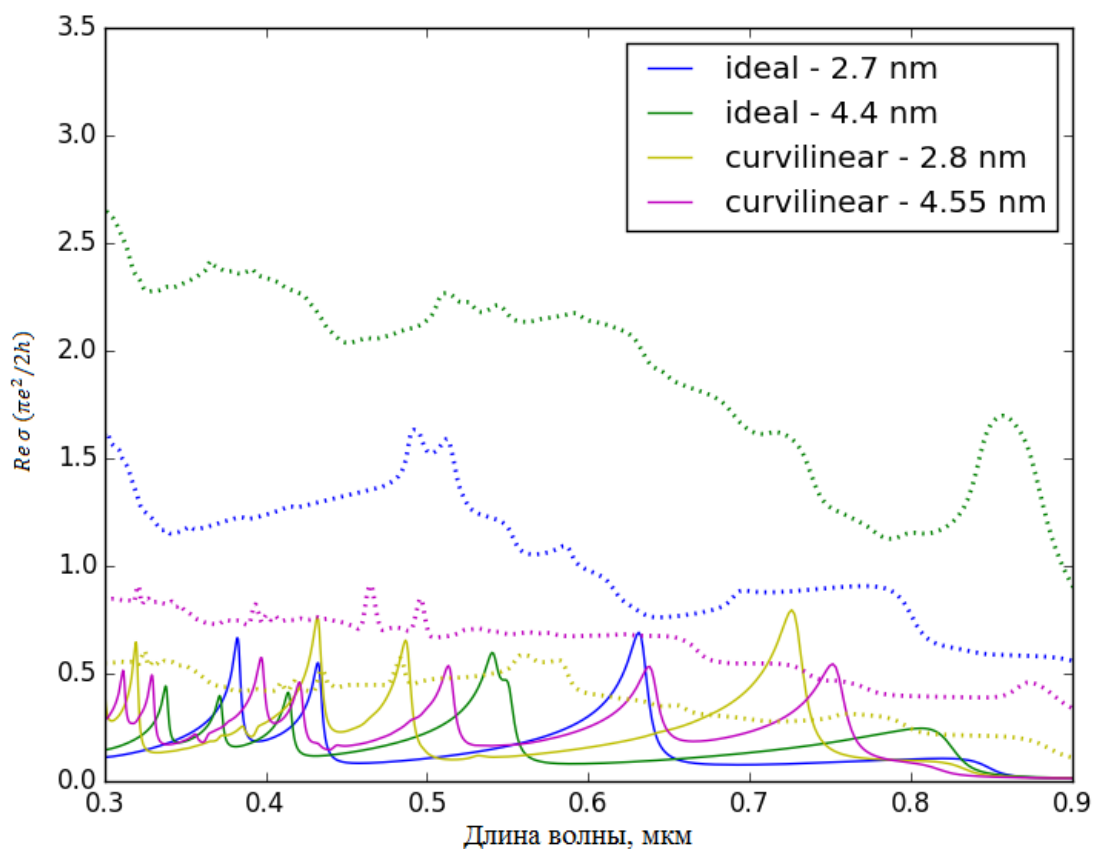


Рис.26 Оптическая проводимость (действительная часть), сплошные кривые -направление  $x$ , пунктирные –  $y$ .

Из рис.26 видно, что действительная часть оптической проводимости значительно больше для плоской наноленты чем для криволинейной по направлению оси  $y$ . Также наблюдается смещение по длинам волн по направлению оси  $x$  на 0.05 мкм. С увеличением ширины наноленты наблюдается увеличение значений оптической проводимости (действительной части) по направлению оси  $y$  как для плоской, так и для гофрированной наноленты. Разница в значениях оптической проводимости (действительной части) для плоской и криволинейной нанолент (примерно одинаковой ширины) увеличивается с увеличением ширины наноленты.

По направлению оси  $x$  значения оптической проводимости (действительной части) немного больше для криволинейной наноленты. С увеличением ширины наноленты наблюдается уменьшение значения действительной части оптической проводимости как для плоской, так и для криволинейной наноленты. Разница в значениях оптической проводимости (действительной части) для плоской и криволинейной нанолент (примерно одинаковой ширины) немного сокращается при изменении ширины наноленты.

По результатам работы были получены следующие выводы для графеновых нанолент *armchair* разной ширины и кривизны было выявлено следующее:

- Минимальное поглощение наблюдается для  $s$ -поляризованных волн независимо от ширины и кривизны наноленты.  $S$ -поляризованные волны поглощаются не более 1.3%. Поглощение  $p$ -поляризованных волн зависит от ширины и топологии наноленты. Максимальное поглощение 4.4% наблюдается для узких лент (2.7 и 2.8 нм) в диапазоне 0.34-0.39 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 наблюдается для узких лент, и составляет 0.072% для ленты шириной 2.7 нм и 0.061% для ленты шириной 2.8 нм в диапазоне 0.33-0.37 мкм.
- Минимальное прохождение наблюдается для  $p$ -поляризованных волн независимо от ширины и кривизны наноленты. Прохождение  $s$ -поляризованных волн составляет не менее 98.8%. Прохождение  $p$ -поляризованных волн зависит от ширины и топологии наноленты. Минимальное прохождение 95.5% наблюдается для узких лент (2.7 и 2.8 нм) в диапазоне 0.34-0.39 мкм.
- Минимальная оптическая проводимость (действительная часть) наблюдается вдоль  $C$ - $C$  связей (по направлению  $x$ ), не зависимо от



ширины и кривизны наноленты. По направлению  $x$  для действительной части оптической проводимости наблюдается большое количество пиков, самые интенсивные пики наблюдаются для узких нанолент и составляют 0.7 для ленты шириной 2.7 нм и 0.9 для ленты шириной 2.8 нм, на длинах волн 0.63 и 0.72 мкм соответственно. Перпендикулярно  $C$ - $C$  связей (направление  $y$ ) столь ярко выраженных пиков не наблюдается, максимальное значение действительной части оптической проводимости наблюдается для плоских нанолент (для более широких нанолент значение оптической проводимости больше чем для узких независимо от кривизны) и составляет 2.6 для ленты шириной 4.4 нм, и 1.6 для ленты шириной 2.7 нм.

## Список литературы

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.