

Введение.

Развитие полупроводниковых технологий в конце 20 - начале 21-го века, приводит к открытиям новых материалов, постоянному поиску новых технологий для получения наибольшей производительности, надёжности, наименьшей стоимости производства приборов для современной микроэлектроники. Органическая электроника, в этом разрезе, представляет собой перспективное направление, особенно после того, как в 2004 году произошло открытие аллотропной модификации графита - графена, российскими учёными А.К. Геймом и К.С. Новосёловым, что доказало возможность существования стабильного двухмерного кристалла[1]

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.

Графен имеет двумерную структуру толщиной в один атом, поверхность которой регулярным образом выложена правильными шестиугольниками. Благодаря этому он может применяться при создании нанотранзисторов, плоских сверхтонких дисплеев, спиновых фильтров, суперконденсаторов, элементов памяти, сенсоров [2-5], но, чтобы использовать графен в качестве элементной базы электронных наноустройств необходимо управлять электронными свойствами, что является актуальной задачей углеродной наноэлектроники.

Графен – безщелевой полупроводник, поэтому чтобы получить необходимую запрещенную зону его расщепляют на тонкие полоски – наноленты.

Графеновые наноленты — это квазиодномерные углеродные структуры, которые можно получить если «разрезать» графеновый лист на узкие полосы нанометровой ширины. Ширина таких полос обычно составляет порядка 10-100 нм. Графеновая нанолента(ГНЛ), как и однослойная углеродная нанотрубка, за счет квантовых размерных эффектов, которые возникают за счет ее малой нанометровой ширины и расположения атомов на границах может иметь запрещенную зону достаточных размеров для использования графеновых нанолент в полупроводниковой электронике, например, использоваться при создании транзистора на основе графена.

Цель данной работы – изучение свойств графеновых нанолент, определение влияния дефектов на проводимость нанолент типа «armchair»

Для этого необходимо решить следующие задачи:

- Классифицировать и провести обзор методов получения графеновых нанолент.
- Изучить области применения графеновых нанолент.
- Рассчитать функцию пропускания для графеновой наноленты при различных дефектах.

В качестве инструментов исследования, использовались программные комплексы, разработанные на кафедре радиотехники и электродинамики – KVAZAR, MIZAR, а также программный пакет Dftb+.

ВКР состоит из введения, 4-х разделов, заключения и списка литературы, содержащего 31 ссылку. Общий объем ВКР составляет 32 стр.

Названия разделов:

1. Классификация и синтез графеновых нанолент;
2. Области применения графеновых нанолент;
3. Методы расчета;
4. Расчет функции пропускания.

ВКР носит обзорный характер, предметом исследования являются графеновые наноленты типа armchair. Первый раздел содержит обзор графеновых нанолент и обзор методов их синтеза. Второй раздел посвящен областям применения графеновых нанолент, в третьем разделе описываются методы расчета, четвертый раздел содержит анализ результатов эксперимента.

Основное содержание работы.

В первом разделе дан краткий обзор классификации графеновых нанолент и методов их синтеза. Графеновые наноленты также делятся на «armchair» и «zigzag», но в отличие от углеродных нанотрубок, то к какому виду будет относиться лента зависит от формы краев, а не сечения. Примеры нанолент показаны на рис.1. Они имеют всего лишь один индекс который пропорционален ширине наноленты. В случае ленты типа zigzag он равняется числу атомов, в случае типа armchair — числу диаметров C_2 , укладываемых на поперечном срезе ленты.

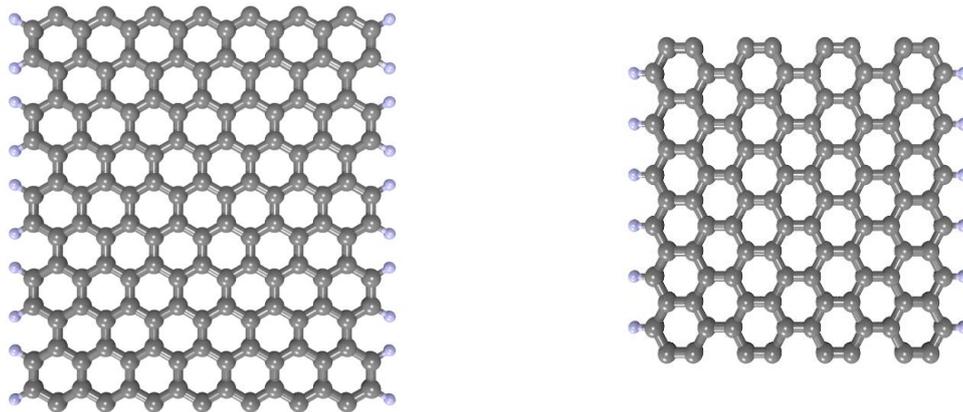


Рис.1. Примеры однослойных ГНЛ: слева – ГНЛ типа armchair, справа- ГНЛ типа zigzag

Во второй части первого раздела описываются методы синтеза графеновых нанолент. Существует множество методов изготовления графеновых нанолент в данной работе представлены описания методов: получения графеновых нанолент из углеродных нанотрубок, сономеханического метода, синтеза графеновых нанолент методом CVD, синтеза методом анизотропного травления.

Углеродные нанотрубки могут служить отличным сырьем для производства графеновых нанолент, как однослойных, так и многослойных. Преобразование углеродной нанотрубки в графеновую наноленту достигается с помощью метода, основанного на жидкостном травлении [6,7]. В тоже время был предложен метод сухой распаковки углеродных нанотрубок [8].

Сонмеханический метод основан на механическом отшелушивании графита в растворах специально подготовленных полимеров [9]. Данный способ так же часто носит название метода «соникирования».

Метод химического осаждения паров (CVD) широко используется для синтеза углеродных наноструктур. Так, начиная с 1970-х годов, этот метод эффективно применяется для получения углеродных нитей, составляющих

основу композитного материала с исключительными механическими характеристиками. Метод CVD является одним из наиболее распространённых методов при получении графеновых нанолент в макроскопических количествах [10]. В основе данного метода лежит возможность термokatалитического разложения газообразных углеводородов на поверхности некоторых металлов с образованием различных наноуглеродных структур.

В синтезе методом анизотропного травления производится травление графеновой плоскости термически активированными металлическими частицами, например, такими как, железо или никель. Данный метод позволяет производить травление вдоль определённой кристаллографической оси [11,12]. Этот метод может использоваться для синтеза образцов со сверхсглаженными краями, что важно при изучении спин - связанных свойств графеновых нанолент.

Во втором разделе представлены методы применения графеновых нанолент в области нанoeлектроники и биологии.

Графеновые наноленты используют для реализации логических схем. Для этого формируются полевые транзисторы с лентами шириной меньше 10-30 нм. Известно, что чем меньше ширина полоски, тем больше ширина запрещенной зоны, следовательно, соотношение тока в таких транзисторах возрастает вплоть до 10^4 - 10^7 раз. Благодаря таким транзисторам, можно построить сверхбыстрые логические схемы с минимальным потреблением энергии.

Кроме того, графеновые наноленты могут использоваться в датчиках, как высокочувствительные электрохимические элементы по отношению к допамину (дофамину) [13] и гидрозину [14] Для реализации чувствительного сенсора используют графеновые наноленты (ГНЛ), которые получают из природного графита с помощью химического осаждения жидкой фазы

методом отшелушивания [15]. Перед 20 использованием необходимое количество суспензии диспергируют в 100 мл изопропанола в течение 2 часов с использованием ультразвуковой ванны и сушат в термостате для дальнейшего использования.

Электрические свойства графена можно использовать для секвенирования ДНК путем мониторинга тока через узкие графеновые наноструктуры, содержащие нанопоры через которые транслоцируются молекулы ДНК. Графен является полупроводником без зазоров, но если структурировать его в наноленты, ее свойства изменяются в зависимости от типа краев. Теоретические исследования показывают, что нанолента типа *armchair* будет полупроводником и представляет собой очень перспективную платформу для секвенирования ДНК.

В третьем разделе описываются методы, использованные при расчетах.

В четвертом разделе проводится расчет функции пропускания. Описывается функция пропускания. Представлен алгоритм расчета и конечные результаты расчетов.

Величина

$$T(E) = Tr(\Gamma_{source} G_{channel}(E) \Gamma_{drain} G_{channel}^+(E))$$

называется функцией (коэффициентом) пропускания,

где $G_{channel}(E) = (E^+ S_{channel} - H_{channel} - \sum_i \Sigma_i(E))^{-1}$ - функция Грина;

$\Sigma_i(E)$ – собственно-энергетическая функция для каждого контакта;

$T(E)$ определяет скорость, с которой электроны перемещаются от истока к стоку.

Алгоритм расчета функции пропускания:

1.Создание новой модели проводящего канала, которая будет заключена между электродами.

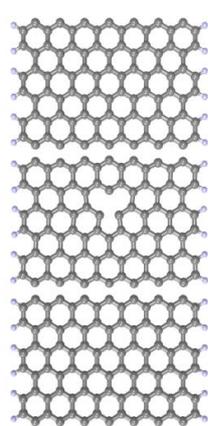
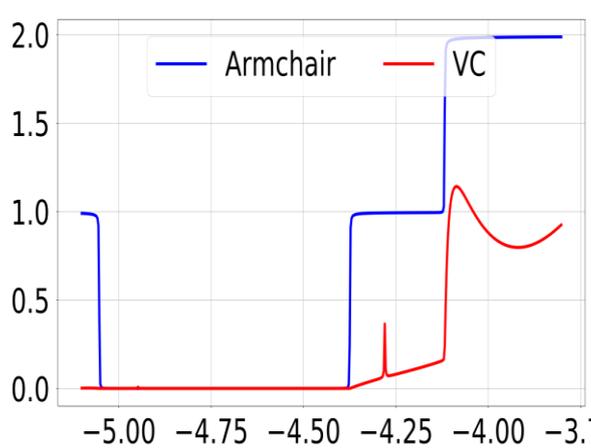
2.Нахождение оптимальной конфигурации с применением граничных периодических условий

3.Расчет функции пропускания.

Алгоритм повторяется для каждой структуры.

Расчет функции пропускания:

На рисунках 2-11 представлены структуры и графики расчета функции пропускания.

	
<p>Рис.2. Графеновая нанолента типа armchair с одиночной вакансией</p>	<p>Рис.3. Функция пропускания ленты с одиночной вакансией</p>

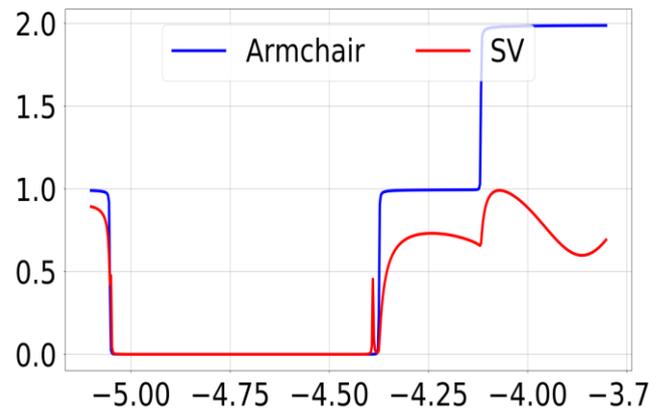
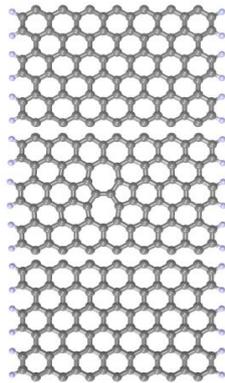


Рис.4. Нанолента с дефектом Стоуна-Уэлса

Рис.5. Функция пропускания ленты с дефектом Стоуна-Уэлса

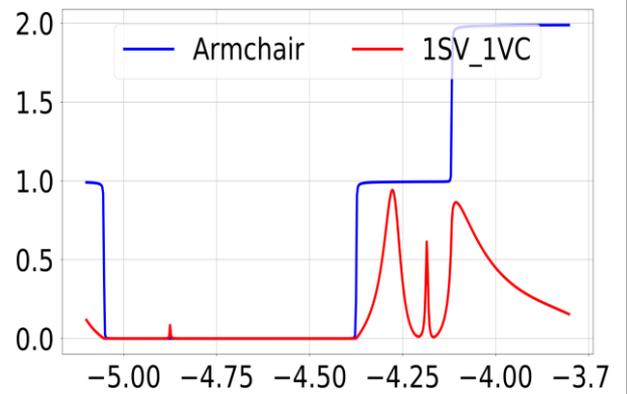
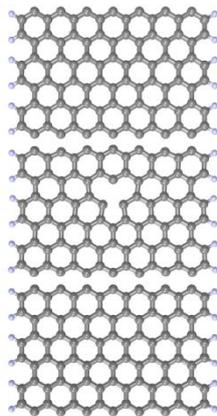


Рис.6. 1 дефект Стоуна – Уэлса и одна вакансия

Рис.7. Функция пропускания ленты с одиночной вакансией и дефектом Стоуна-Уэлса

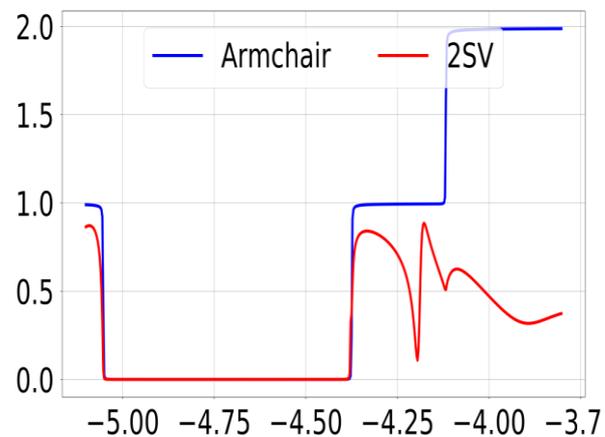
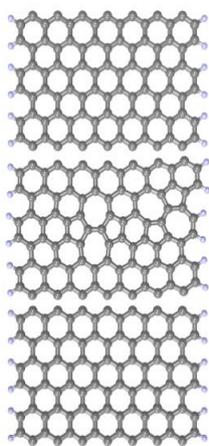


Рис.8. 2 дефекта Стоуна-Уэлса

Рис.9. Функция пропускания ленты с двумя дефектами Стоуна-Уэлса

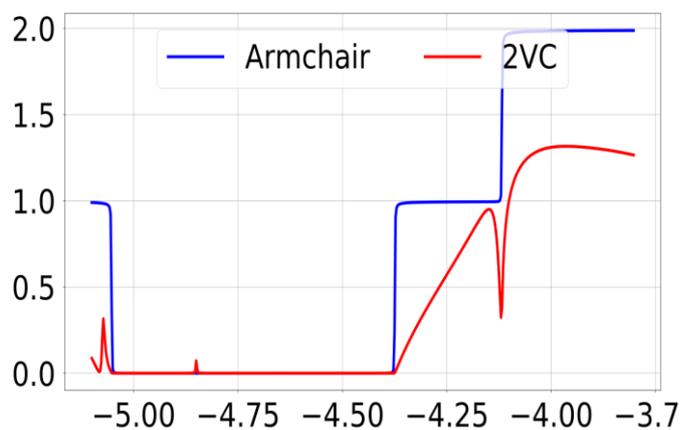
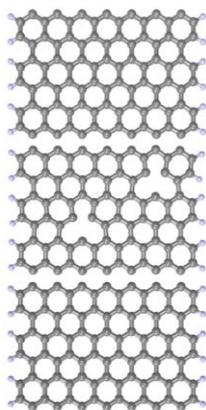


Рис.10. 2 одиночных вакансии

Рис.11. Функция пропускания ленты с двумя одиночными вакансиями

Заключение

По итогам работы были сделаны следующие выводы. Графеновые наноленты типа armchair являются не проводящими. При внесении в структуру дефектов ситуация изменяется только на некоторых промежутках, но это не влияет на проводимость лент, поскольку около уровня Ферми функция пропускания не изменяется.

Библиографические ссылки:

- [1] Novoselov, K. S. Electric field effect in atomically thin carbon films / Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. // Science. – 2004. – Vol. 306 (5696). – P.666-669.
- [2] Implementation of graphene as hole transport electrode in flexible CIGS solar cells fabricated on Cu foil/ J. K. Sima [et al.] // Solar Energy. 2018. V. 162. P. 357–363.
- [3] Amin, K. R. High-Performance Sensors Based on Resistance Fluctuations of Single-Layer-Graphene Transistors/ K. R. Amin, A. Bid // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2015. V. 7. P. 19825–19830.
- [4] Heerema, S. J. Graphene nanodevices for DNA sequencing /S. J. Heerema, C. Dekker// Nature Nanotechnology. 2016. V. 11. I. 2. P. 127–136.
- [5] Highly Sensitive and Selective Sensor Chips with Graphene-Oxide Linking Layer / Y. V. Stebunov [et al.] // ACS Applied Materials & Interfaces. 2015. V. 7. I. 39 P. 21727–21734.
- [6] Z.X. Zhang, Z.Z. Sun, J. Yao, D.V. Kosynkin, J.M. Tour, Journal of the American Chemical Society 131 (2009) 13460–13463.
- [7] D.V. Kosynkin, A.L. Higginbotham, A. Sinitskii, J.R. Lomeda, A. Dimiev, B.K. Price, J.M. Tour, Nature 458 (2009) U872–U875.
- [8] L.Y. Jiao, L. Zhang, X.R. Wang, G. Diankov, H.J. Dai, Nature 458 (2009) 877–880.

- [9] X.L. Li, X.R. Wang, L. Zhang, S.W. Lee, H.J. Dai, *Science* 319 (2008) 1229–1232.
- [10] Che G et al. *Chem. Mater.* 10 260 (1998).
- [11] S.S. Datta, D.R. Strachan, S.M. Khamis, A.T.C. Johnson, *Nano Letters* 8 (2008) 1912–1915.
- [12] L.C. Campos, V.R. Manfrinato, J.D. Sanchez-Yamagishi, J. Kong, P. JarilloHerrero, *Nano Letters* 9 (2009) 2600–2604.
- [13] Padmanathan Karthick Kannan, Stanislav A Moshkalev and 67 Chandra Sekhar Rout, “Highly sensitive and selective electrochemical dopamine sensing properties of multilayer graphene nanobelts”, *Nanotechnology*, Feb., (2016)
- [14] Padmanathan Karthick Kannan, Stanislav A. Moshkalev and Chandra Sekhar Rout, “Electrochemical Sensing of Hydrazine using Multilayer Graphene Nanobelts”, *RSC Advances*, 19 Jan (2016)
- [15] Wang Y, Wan Y and Zhang D 2010 Reduced graphene sheets modified glassy carbon electrode for electrocatalytic oxidation of hydrazine in alkaline media *Electrochem. Commun.* 12 187–90

