

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

Углеродные нанотрубки в гибкой и прозрачной электронике

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

Студентки 2 курса 242 группы
направления 03.04.03 Радиофизика
физического факультета
Корсуновой Олеси Андреевны

Научный руководитель:

Заведующий кафедрой

Профессор д.ф.-м.н. _____ О. Е. Глухова

Заведующий кафедрой

Профессор д.ф.-м.н. _____ О. Е. Глухова

Саратов 2018

ВВЕДЕНИЕ

Современные разработки наноразмерных электронных устройств невозможно представить без углеродных наноструктур, в частности, различных модификаций графена, и углеродных нанотрубок. Значимые достижения в области изучения и синтеза, углеродных нанообъектов получают международное признание. Изучение мира углеродных нанообъектов является важной вехой и в развитии отечественной науки. Появление такого направления науки, как углеродная наноэлектроника, связано с именами Ю.В. Гуляева и Н.И. Сеницына, обнаруживших высокие эмиссионные свойства углеродных нанотрубок.

Графен уже давно называют самым удивительным материалом современности. Он может изменить путь развития электроники. Графен – самый тонкий, самый прочный и самый проводящий материал в мире – был открыт в 2004 году выходцами из России Константином Новоселовым и Андреем Геймом, за что они получили Нобелевскую премию по физике. Графен способен заменить кремний, который массово используется в производстве микросхем.

Проектирование новых функциональных устройств на основе графена, в частности, транзисторов [1], элементов памяти [2], ультратонких дисплеев [3], гибкой и прозрачной электроники требует знаний его электронной структуры и ее закономерностей. Известно, что эффективным способом изменения электронных свойств графена является модификация его атомной структуры, например, деформацией различного рода или присоединением атомов другого типа.

Гибкая электроника — это общий класс электронных устройств, у которых есть одна характерная черта: их можно гнуть, сгибать, сворачивать и так далее. Как правило, сделать это без специальной подготовки нельзя: стекло треснет, микросхемы перестанут работать, полупроводники потеряют связи. Однако в свете развития науки и техники, а также Интернета вещей и носимой

электроники, интерес к гибкой электронике растет, и компании разрабатывают, например, гибкие дисплеи и гибкие микросхемы. В области нанотехнологий такая электроника будет необходимой. [4]

. Обычные полупроводники требуют сложных процессов изготовления на много миллиардных литейных заводах. Исследователи надеются печатать гибкую электронику на пластмассовой пленке тем же способом, печатаются тексты на бумаге.[5]

Ожидается, что тенденция к переходу на гибкую электронику будет ежегодно возрастать на несколько десятков процентов в следующее десятилетие.

Ученые и разработчики на самом деле надеются, что рост популярности гибких электронных устройств будет представлять резкий скачок, как только технологии гибких дисплеев перейдут из стадии разработки в стадию производства и начнут становиться коммерческими продуктами, быстро изменяя способ взаимодействия пользователей и их портативных устройств.[6]

К 2023 году рынок гибких экранов уже составит более чем 240 миллионов долларов, что будет составлять более трети портативной электронной продукции, в которой сейчас используются разного рода дисплеи, предсказывают специалисты.[7]

Легкая, гибкая электроника заменит массивные телефоны, электронные книги, планшеты и другие подобные устройства. [7]

Магистерская работа посвящена изучению углеродных нанотрубок в гибкой и прозрачной электронике, а также электропроводности плёнок.

В данной дипломной работе рассматриваются структуры и электронные свойства гибкой и прозрачной электроники. Также здесь рассмотрены области применения этих материалов и их основные особенности. Основная цель дипломной работы заключается в изучении электрофизических свойств пленок из углеродных нанотрубок методами математического моделирования. Для достижения цели решались следующие задачи:

- 1). Краткий обзор гибкой и прозрачной электроники;

2) Построение атомистической модели пленки из углеродных нанотрубок (УНТ).

3) Поиск равновесной конфигурации пленки из УНТ путем минимизации полной энергии атомной пленочной структуры по координатам всех её атомов

4) Оптимизация структуры путем поиска минимума полной энергии структуры (параметры оптимизации – координаты атомов). Расчет энергии проводится в программе DFTB.

5) Расчет динамической электропроводности, коэффициентов пропускания и поглощения электромагнитной волны в программном комплексе MIZAR

6) Расчёт электрических характеристик как функция пропускания и электрического сопротивления с помощью формулы Ландауэра Бюттекера.

7) Расчёт оптических свойств с помощью формулы Кубо-Грина в программном комплексе MIZAR

Краткий обзор методов исследования

Метод, основанный на теории функционала плотности (Density Functional Theory – DFT), является альтернативным методу Хартри-Фока. В рамках этого метода для описания электронной системы многоэлектронную волновую функцию заменяют электронной плотностью. Метод сильной связи (Tight Binding – TB), относящийся к классу полуэмпирических методов, предполагает формирование многочастичного гамильтониана в базисе валентных электронных орбиталей с использованием параметризованных матричных элементов и последующую диагонализацию гамильтониана. Таким образом, в рамках данного метода можно решить проблему учета электронной корреляции. Параметризация гамильтониана проводится таким образом, чтобы наилучшим образом воспроизвести экспериментальные характеристики соединений, выбранных для калибровки параметров.

Проведенный критический обзор методов компьютерного моделирования наноструктур позволил установить, что для реализации, поставленной в диссертационной работе цели будут использоваться следующие методы:

1. Метод сильной связи в приближении теории функционала плотности;
2. Метод сильной связи;

Выбор используемых методов исследования обусловлен спецификой решаемых в работе научных задач и особенностями атомного строения объектов исследования.

Объекты исследования

Были построены атомистические модели пленки из углеродных нанотрубок из 4х слоёв (УНТ), каждый слой представлен отдельно на рисунках.

Использовались углеродные нанотрубки типа armchair с хиральностью 12x12

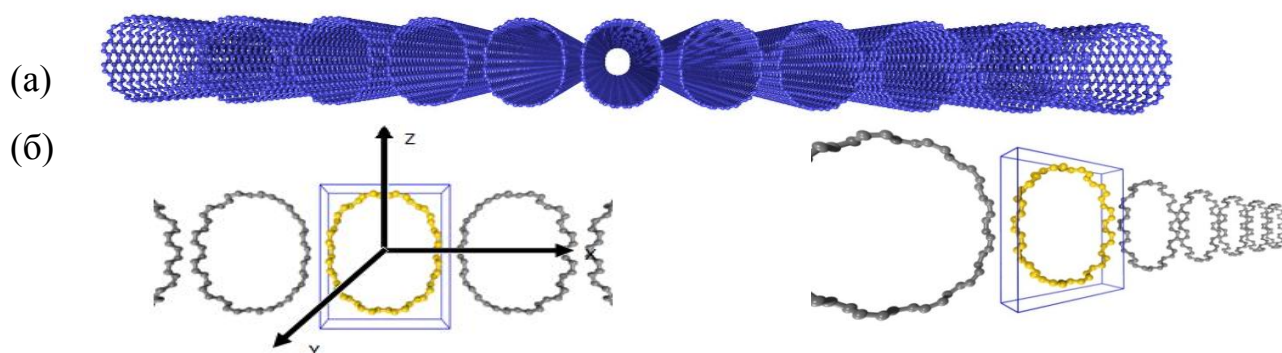


Рисунок 1 .а) слой плёнки из одной нанотрубки, б) элементарная ячейка для слоя из одной УНТ

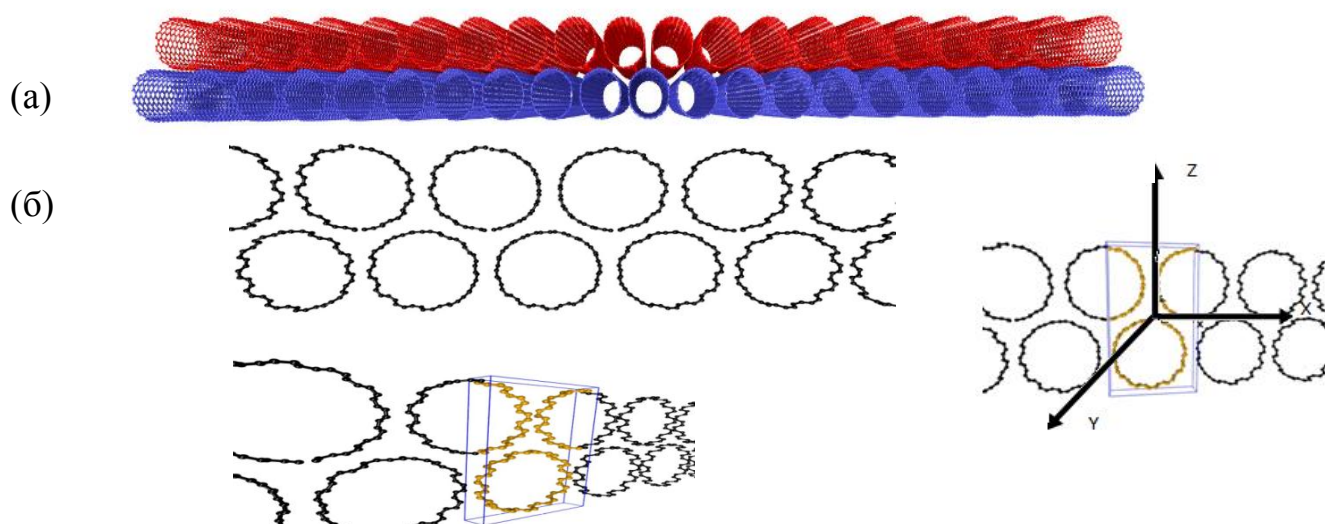


Рисунок 2 .а) слой плёнки из двух нанотрубок, б) элементарная ячейка для слоя из двух УНТ

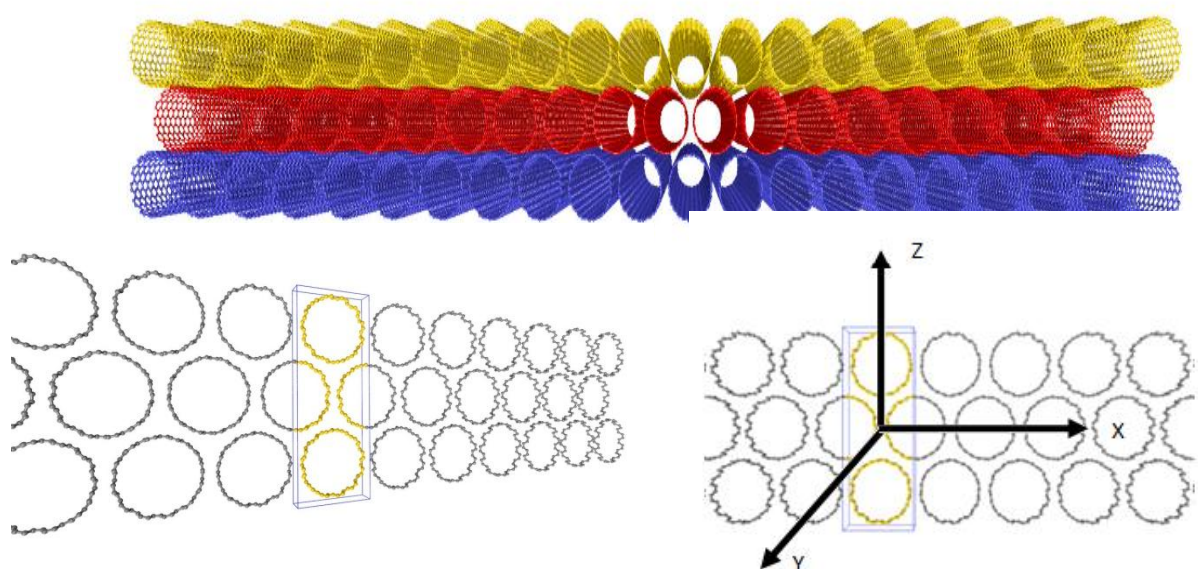


Рисунок 3 .а) слой плёнки из трёх нанотрубок, б) элементарная ячейка для слоя из трёх УНТ

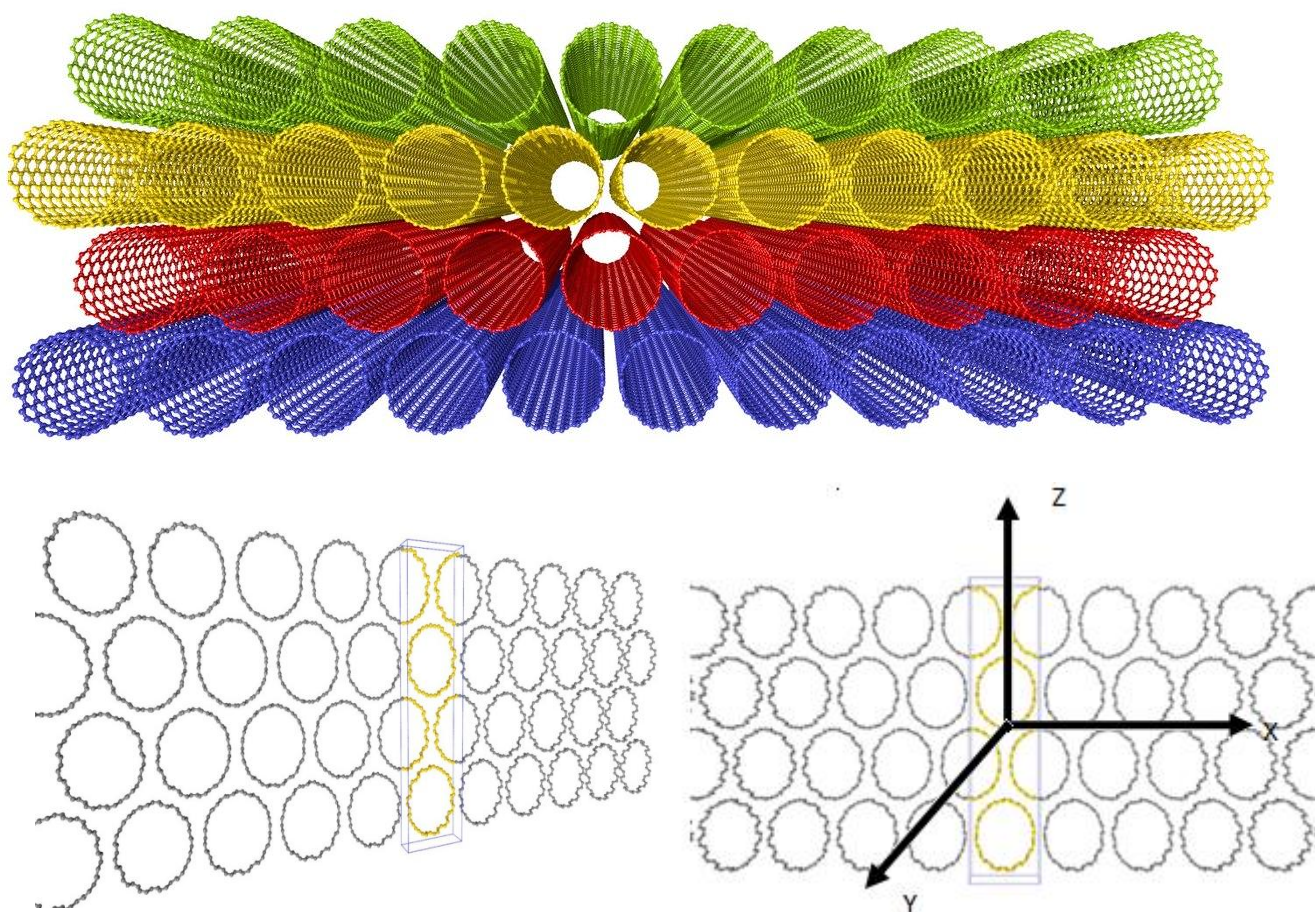


Рисунок 4 .а) слой плёнки из четырёх нанотрубок, б) элементарная ячейка для слоя из черырёх УН

Результаты расчёта тензора динамической проводимости

В работе были рассчитанные действительная и мнимая части элемента тензора динамической проводимости по оси ХХ.и по оси YY результаты представлены на рисунках 12,13 для диапазона длин волн ультра фиолет – видимый -инфокрасный .Наиболее видимый спектр проводимости является для направления ХХ вдоль оси УНТ, так как в этом направлении профиль спектра определяется именно трубками. Спектор динамической проводимости плёнок из углеродных нанотрубок рассчитывался с помощью формулы Кубо-Гринвуда.

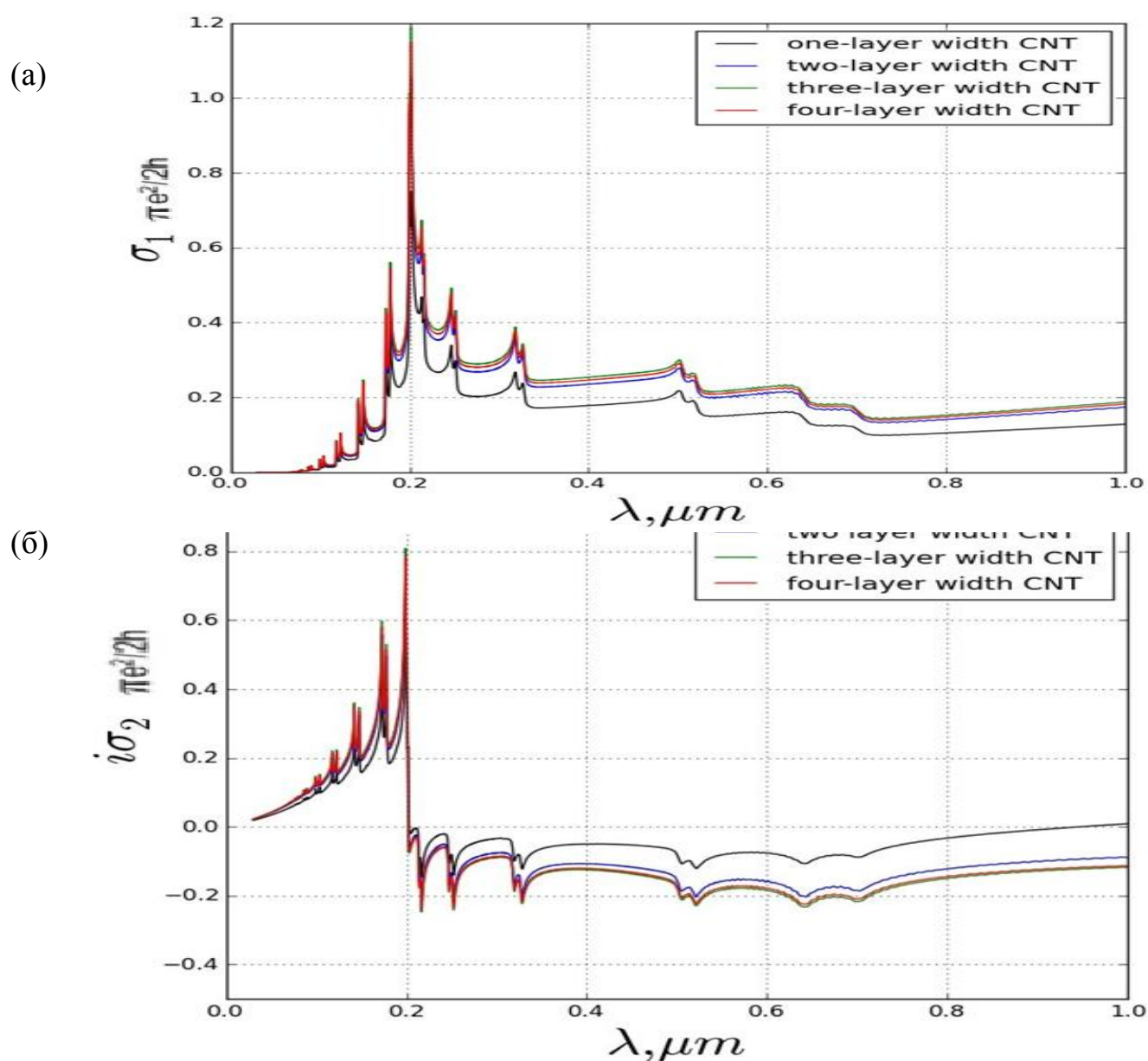
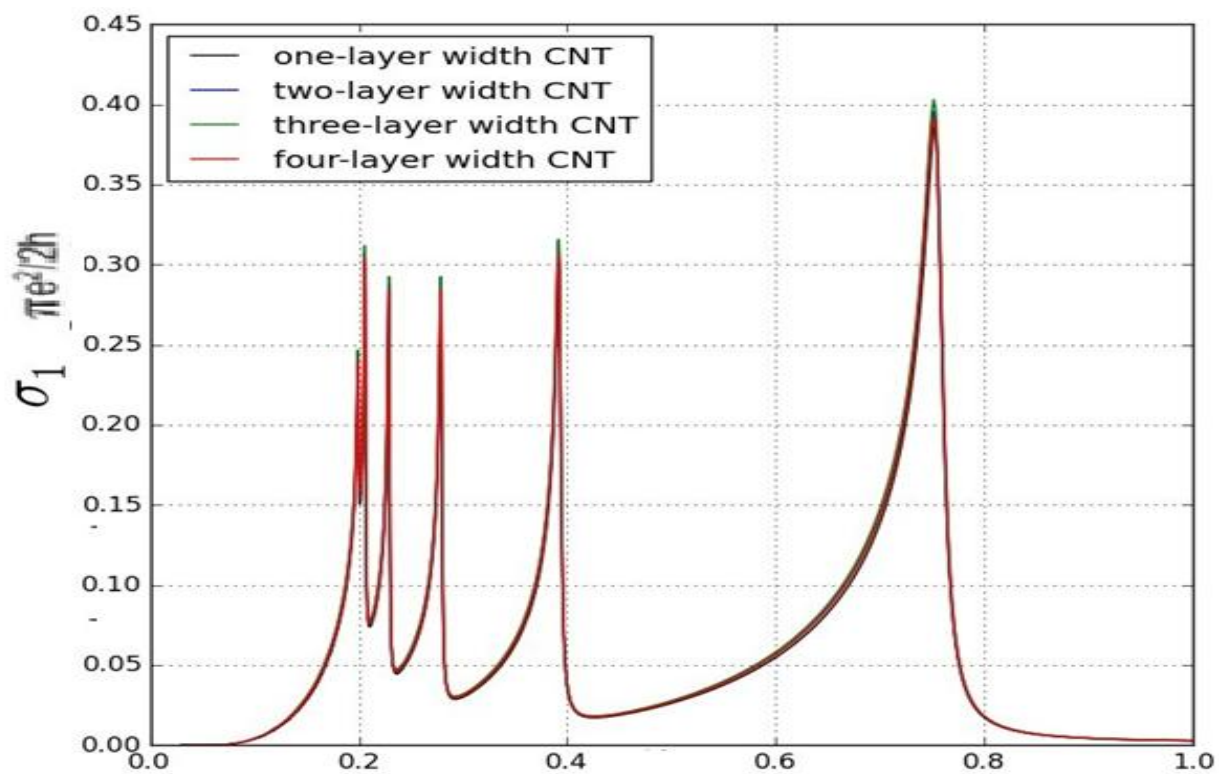


Рисунок 5 динамическая проводимость по оси ХХ а) действительная часть, б) мнимая часть

(a)



(б)

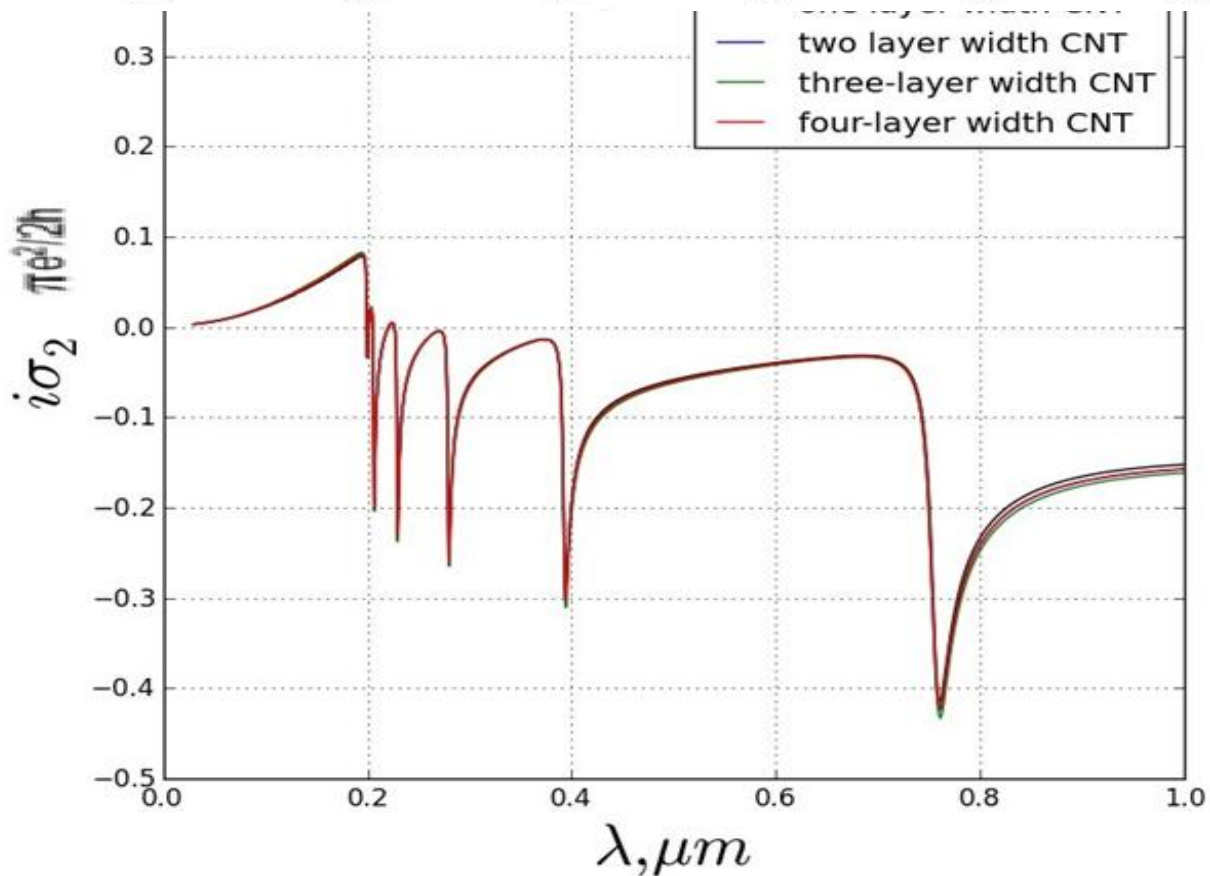


Рисунок 6 динамическая проводимость по оси YY а) действительная часть, б) мнимая часть

Результаты расчёта коэффициентов отражения, пропускания и поглощения электромагнитной волны

Для изучения оптических свойств (коэффициентов прохождения, поглощения и отражения) были использованы программы «MIZAR» и «KVAZAR».

Соотношения для коэффициентов отражения R и пропускания T в случае р-поляризации (или E-wave) записываются в виде:

$$R = \frac{-\sigma_{xx} z_0}{2 + \sigma_{xx} z_0}, \quad (1)$$

$$R = \frac{2}{2 + \sigma_{xx} z_0}, \quad (2)$$

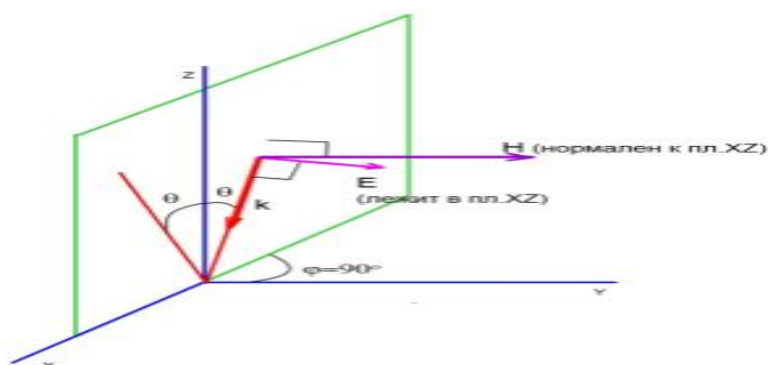


Рисунок 7 конфигурация падающей E- волны.

Соотношения для коэффициентов отражения R и пропускания T в случае s-поляризации (или H-wave) записываются в виде

$$R = \frac{-\sigma_{yy} z_0}{2 + \sigma_{xx} z_0}, \quad (3)$$

$$R = \frac{2}{2 + \sigma_{yy} z_0}, \quad (4)$$

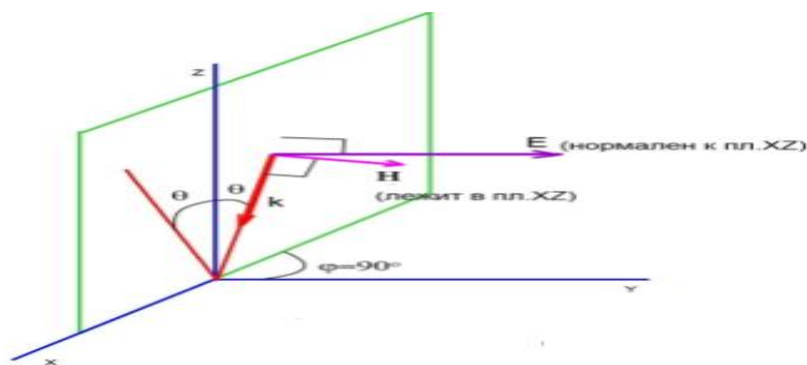


Рисунок 8 конфигурация падающей H- волны

где - Z_0 волновое сопротивление в свободном пространстве, определяемое для р-поляризованной волны как $Z_0 = E_x/H_y = \eta \cos \theta$, для s-поляризованной волны - $Z_0 = -E_y/H_x = \eta / \cos \theta$, θ – угол падения, $\eta = 120\pi$ Ом - входное сопротивление вакуума. С учетом выражений для коэффициентов отражения и пропускания коэффициент поглощения определяется следующей формулой:

$$A_{p(s)} = 1 - R_{p(s)} - T_{p(s)} \quad (5)$$

Результаты расчетов коэффициентов прозрачности и поглощения представлены на рисунках 16 и 17

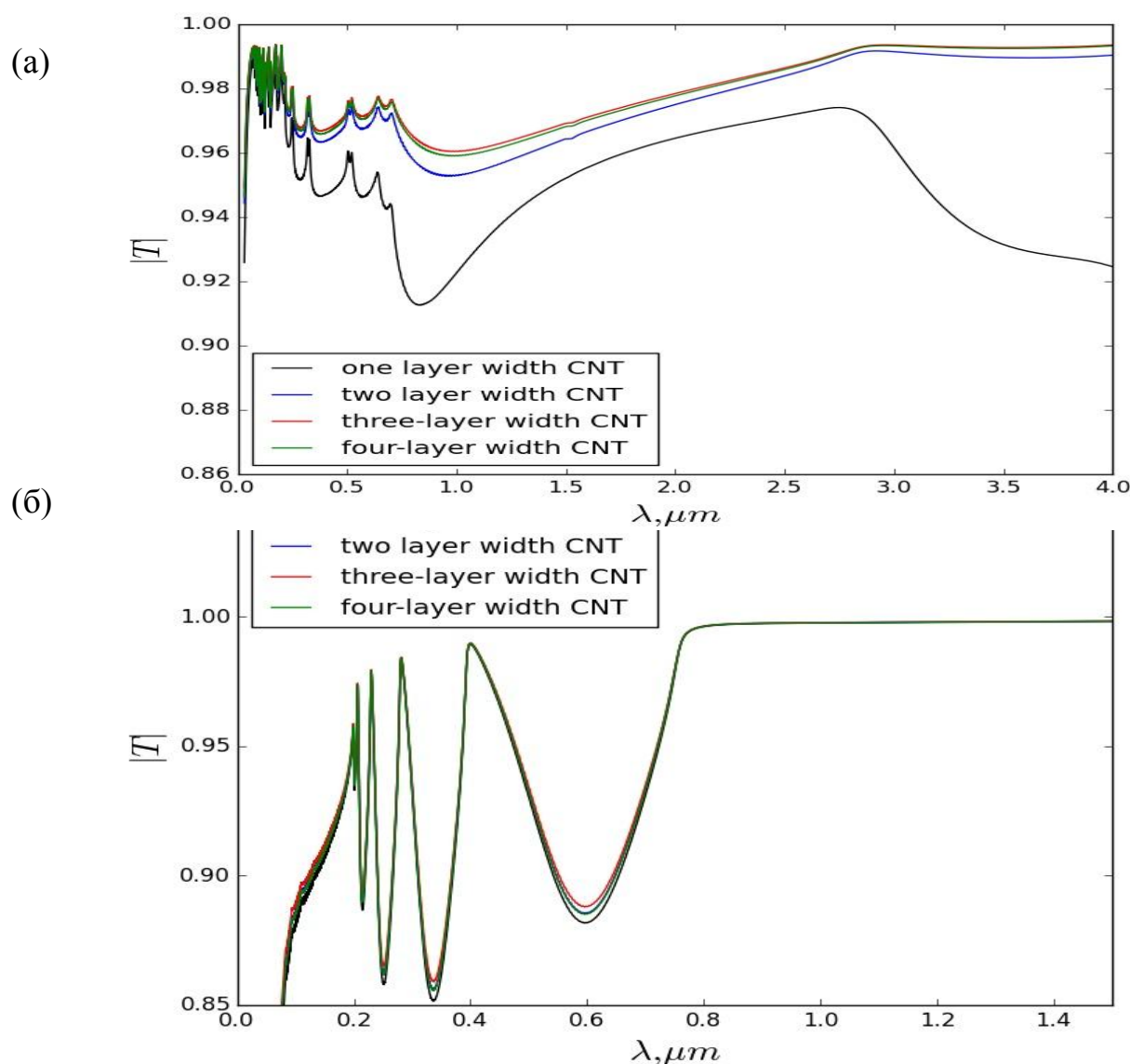


Рисунок 9 Коэффициент прозрачности плёнок а) р- поляризация (НТ-волна), б) s- поляризация (ТЕ-волна)

Сравнив результаты полученные выше, можно сделать вывод: коэффициент прозрачности зависит от поляризации. При р-поляризации он

значительно выше чем при s-поляризации, также при увеличении ширины плёнки, коэффициент прозрачности будет расти.

Полученные результаты позволяют рекомендовать плёнки из УНТ в качестве перспективного материала для прозрачной электроники в области УФ-видимого-ИК-диапазона.

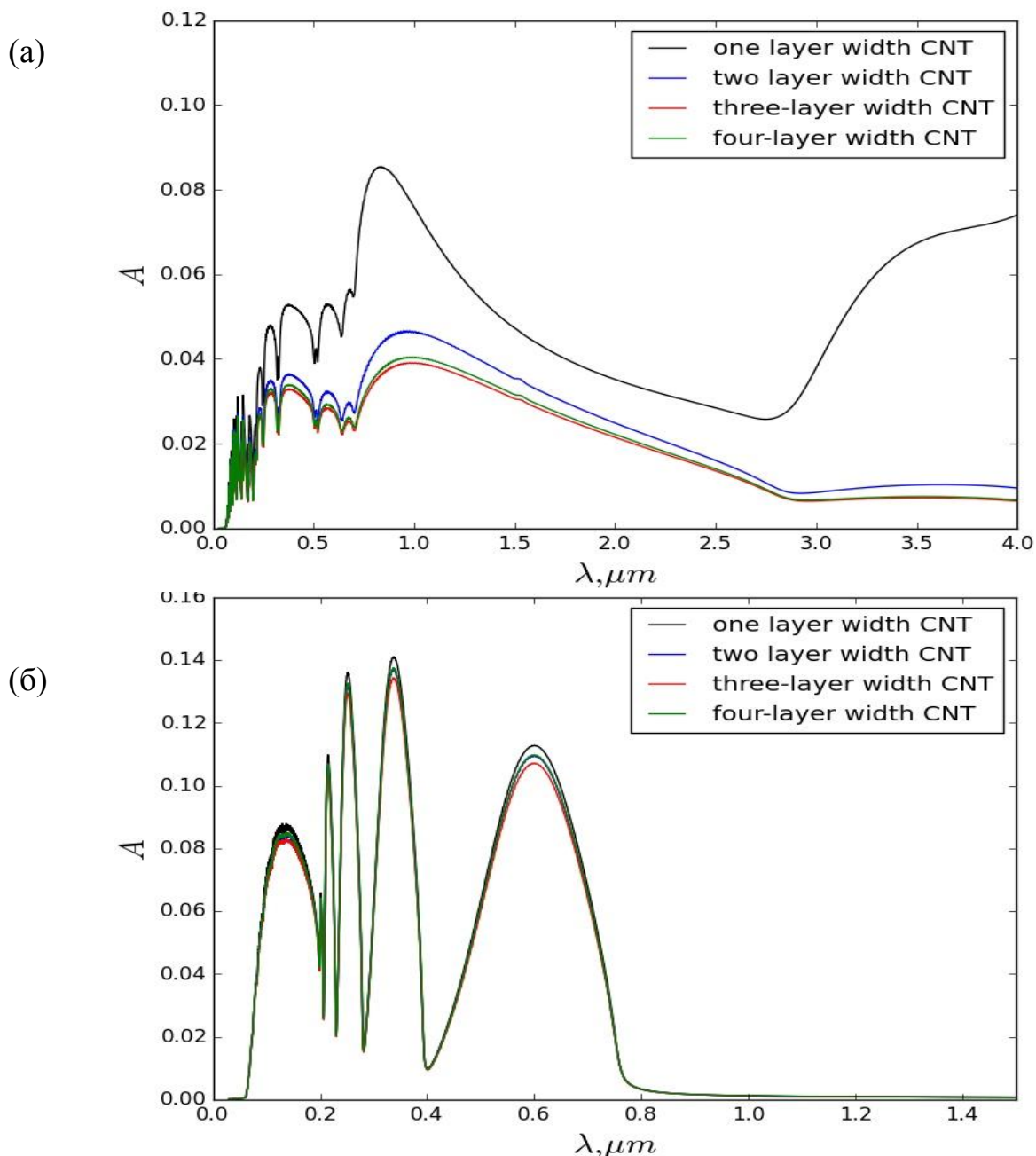


Рисунок 10 Коэффициент поглощения а) р- поляризация (НТ-волна), б) s- поляризация (ТЕ-волна)

Как видно из приведённых выше графиков коэффициент поглощения зависит от поляризации. При s-поляризации он значительно выше чем при р-

поляризации, также при уменьшении ширины плёнки, коэффициент поглощения будет расти.

Результаты расчётов сопротивления плёнок

Электрические свойства плёнок характеризовались электрической проводимостью и сопротивлением. Оценка электрической проводимости проводилась в рамках формализма-Ландауэра-Буттикера по величине функции пропускания $T(E)$.

$$G = \frac{e^2}{h} \int T(E) F_T(E) dE, \quad (6)$$

$$F_T(E) = \frac{1}{4k_B T} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{E - \mu}{2k_B T} \right) \quad (7)$$

Для выявления закономерностей протекания тока в плёнках из УНТ определялись поверхностное и объёмное удельное сопротивления в зависимости от толщины пленки с учетом её топологии. Поверхностное сопротивление рассчитывалось как обратная величина электрической проводимости. Для расчета удельного сопротивления были взяты размеры пленки 12x12 мм.

Результаты расчётов представлены на рисунке 8

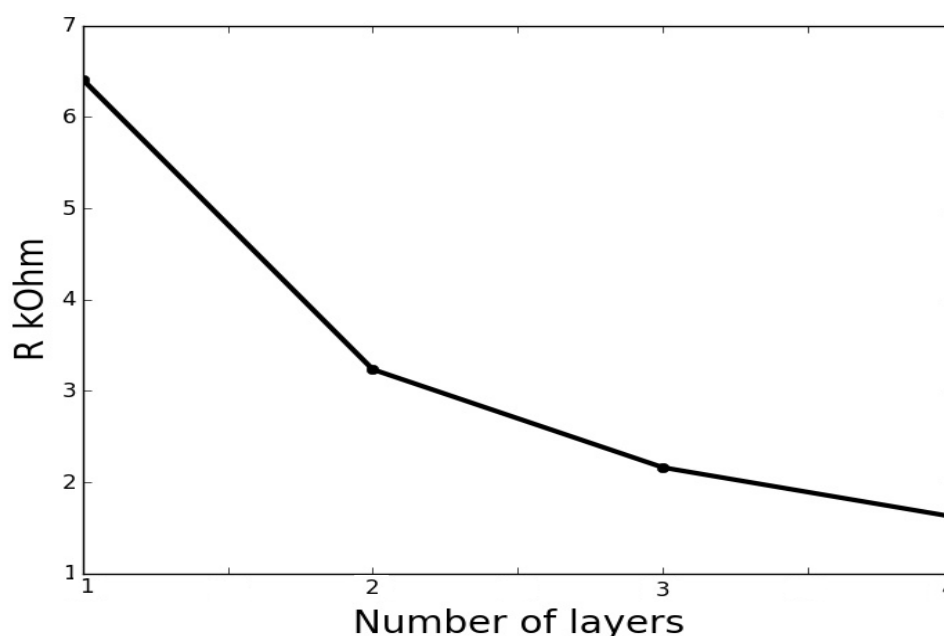


Рисунок 8 Зависимость сопротивления от толщины слоя

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методы компьютерного моделирования являются эффективным инструментом исследования физических свойств и новых физических явлений в сложных молекулярных системах, кластерных образований и твердых телах на атомном уровне. Благодаря широким возможностям современной вычислительной техники и наличию большого количества так называемых ИТ-решений, способных в разы повысить производительность расчетов, стало возможным проводить исследования динамики макромолекулярных комплексов

Использование методов компьютерного моделирования особенно актуально на этапе проектирования электронных приборов и устройств. В частности, в ряде случаев оно позволяет существенно сократить число проводимых натурных экспериментов, целью которых является установление функциональных режимов работы устройства и выбор оптимальной конфигурации используемого в качестве элементной базы материала. Одним из примеров эффективного использования методов и подходов компьютерного моделирования для определения функционального режима работы устройства, а также снижения материальных и временных затрат в процессе его изготовления является разработка автокатодов на основе углеродных наноструктур.

Не менее значимый вклад компьютерное моделирование вносит в развитие современного материаловедения. С помощью развитого физико-математического аппарата компьютерного моделирования можно прогнозировать появление новых композитных материалов, обладающих уникальными свойствами и имеющих широкие перспективы для применения в электронике.

Проведённый, обзор методов компьютерного моделирования наноструктур позволил установить, что для реализации, поставленной в магистерской работе цели будут использоваться следующие методы:

1. Метод, основанный на теории функционала плотности (Density Functional TightBinding – DFTB) ,

2. Метод неравновесных функции Грина-Келдыша.

В данной работе было рассмотрено влияние краевых дефектов на электронную проводимость графеновых нанолент типа armchair и zigzag.

На основе этих моделей графеновых нанолент, были рассчитаны функции пропускания в программном комплексе MIZAR:

1. Для наноленты типа armchair с шириной 1.1 нм, нанолента имеет полупроводниковый тип проводимости, так как имеет запрещенную зону. При наличии периодического дефекта изменение ширины запрещенной зоны не значительны.

2. Для наноленты типа zigzag с шириной 1.5 нм, при появлении дефектов изменяется тип проводимости с металлического на полупроводниковый.

3. Функции пропускания для нанолент микрометровой длины содержащих неперидические краевые дефекты имеют острые пики, связанные с большим количеством локализованных электронных состояний на которых происходит рассеивание электронов, что приводит к значительному ухудшению электронной проводимости нанолент данной длины, содержащих нерегулярные дефекты.