

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

**Влияние краевых дефектов на электронную проводимость графеновых  
нанолент микрометровой длины**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

Студентки 2 курса 242 группы  
направления 03.04.03 Радиофизика  
физического факультета  
Муталиевой Гульжайнары Рахметулаевны

Научный руководитель:

Ассистент кафедры \_\_\_\_\_ Г. В. Савостьянов

Заведующий кафедрой

Профессор д.ф.-м.н. \_\_\_\_\_ О. Е. Глухова

Саратов 2018

## ВВЕДЕНИЕ

Совсем недавно появилась новая область в науке и технике, которую назвали нанотехнологией. Перспективы данной дисциплины очень обширны. Можно даже сказать, они грандиозны. Частица, именуемая «нано», является величиной, равной одной миллиардной доле от какого-либо значения. Такие размеры можно сравнить только с размерами атомов и молекул. Например, нанометром называют одну миллиардную долю метра.

Нанотехнологиями называют те области, которые манипулируют веществом на уровне молекул и атомов. В результате этого данную область науки еще называют и молекулярной технологией. Что же послужило толчком к ее развитию? В современном мире нанотехнологии появились благодаря лекции Ричарда Фейнмана. В которой, он доказал, что не существует никаких препятствий для создания вещей непосредственно из атомов.

В современном мире нанотехнологии являются не только отдельной областью знаний, а также представляют с собой обширную сферу исследований, которые непосредственно связаны со многими фундаментальными науками. В их число входят физика, химия и биология. Исходя из мнений многих ученых, именно данные науки получают наиболее мощный толчок к развитию на фоне грядущей нанотехнической революции.

В России нанотехнологии развиваются посредством целевой Федеральной программы, которая включает в себя не только большие финансовые затраты, а также и проведение большого объема научно-исследовательских и конструкторских работ. Для реализации некоторых задач необходимо объединять усилия всевозможных различных научно-технологических комплексов на уровне национальных и транснациональных корпораций.

Нанотехнологии позволили ученым изготовить углеродную пластину более твердую, чем алмаз, толщина которой составляет всего один атом. И состоит она из графена. Он является самым тонким и прочным материалом во

всей вселенной, и пропускает электричество намного лучше кремний в компьютерных чипах. Данное открытие является настоящим революционным событием, благодаря которому возможно многое изменить в нашей жизни. Такой материал обладает такими уникальными физическими свойствами, что в корне меняет все представление человека о природе вещей и веществ.

В данной дипломной работе рассматриваются структуры и электронные свойства графена и графеновых нанолент. Также здесь рассмотрены области применения этих материалов и их основные особенности. Основной целью дипломной работы является изучение влияния краевых дефектов на электронную проводимость графеновых нанолент микрометровой длины. Для чего осуществлялись следующие задачи:

1. Краткий обзор топологических особенностей графеновых нанолент;
2. Ознакомление с программным комплексом Kvizar;
3. Ознакомление с работой в визуализаторе Kview для создания атомистической модели;
4. Оптимизация атомистической модели по координатам с целью нахождения минимальной энергии методом DFTB;
5. Расчет функции пропускания для идеальной наноленты, для единичного и периодически повторяющегося дефекта в программном комплексе MIZAR;
6. Расчет функции пропускания графеновых нанолент микрометровой длины в программном комплексе MIZAR при различном процентном соотношении дефектов и в случае отсутствия дефектов.

В данной работе детально и хронологически разобраны все важные компоненты для изучения данной темы, чтобы информация, изложенная в этой работе, была максимально понятна всем, кого заинтересует данная тема исследования. Во время написания дипломной работы был проделан колоссальный труд в изучении всех возможных источников, как российской, так и зарубежной литературы. Здесь собраны материалы из книг, журналов, статей, а также из интернета. Весь материал был тщательно разобран и изучен для более точного понимания и последовательности в тексте.

## **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**

В данной работе мы рассматривали графеновые наноленты типа armchair (1.1 нм) и zigzag (1.5 нм). На рисунках 1 и 2 представлены модели исследуемых нанолент.

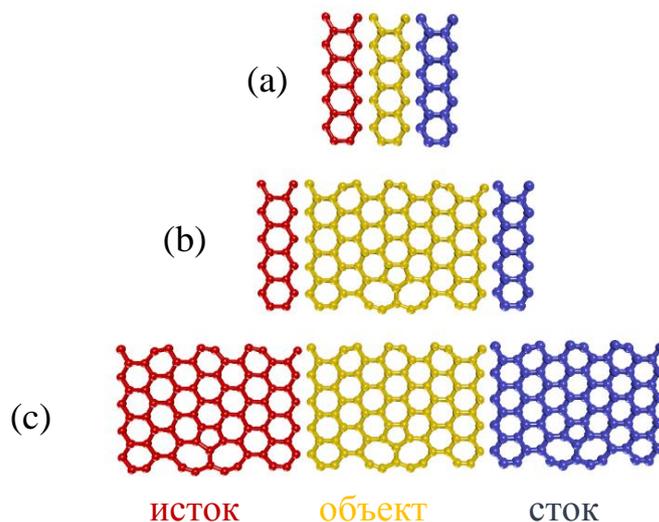


Рисунок 1- Нанолента типа armchair (1.1 нм). Где (a) это идеальная нанолента, (b) лента с единичным дефектом и (c) лента с периодически повторяющимся дефектом

На рисунке 1 представлена нанолента типа armchair с шириной 1.1 нм, где (a) идеальная нанолента, (b) лента с единичным дефектом и (c) периодически повторяющимся дефектом. Желтым цветом во всех трех случаях обозначен объект, красным цветом исток, а синим цветом представлен сток.

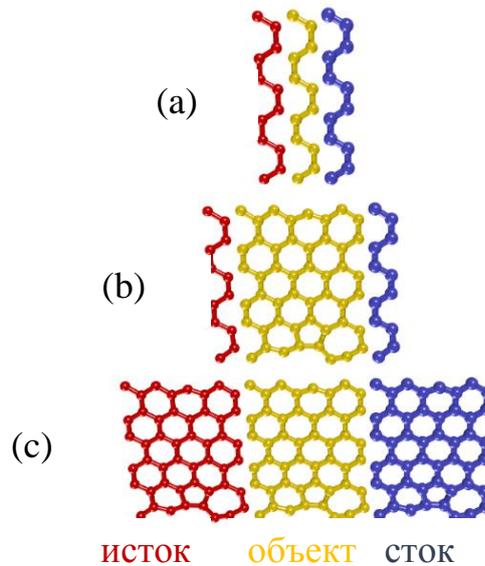


Рисунок2 - Нанолента типа zigzag (1.5 нм). Где(а) идеальная нанолента, (b) лента с единичным дефектом и (с)лента с периодически повторяющимся дефектом

На рисунке 2 представлена нанолента типа zigzag с шириной 1.5 нм. Где (а) это идеальная нанолента, (b) имеет единичный дефект, а (с) периодически повторяющийся дефект. Все три случая обозначены разными цветами, где желтым цветом обозначен объект, красным цветом исток, а синим цветом представлен сток.

### Результаты исследования

На основе выше представленных моделей графеновых нанолент типа armchair (1.1 нм) и zigzag (1.5 нм), была рассчитана функция пропускания в программном комплексе MIZAR для идеальной наноленты, а также для наноленты с единичным и периодически повторяющимся дефектом, данные представлены на рисунках 5 и 6.

На рисунках 3, 4 схематично показаны наноленты типа armchair и zigzag микрометровой длины содержащие дефекты, которые располагаются

случайным образом. Причем при расчетах расстояние между дефектными участками варьируется случайным образом.

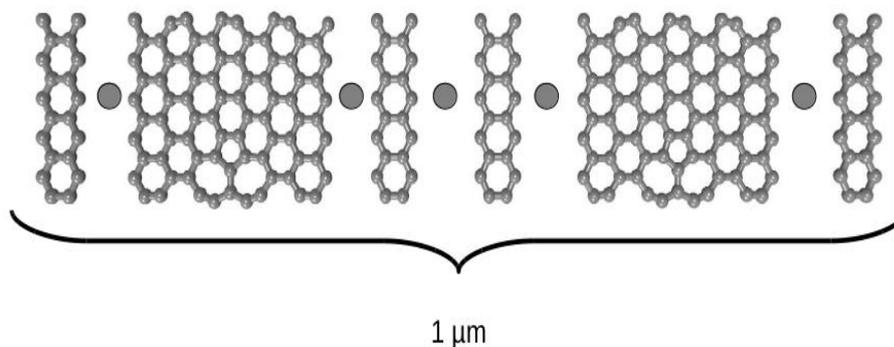


Рисунок 3 – Наноленты типа armchair (с шириной 1.1 нм) микрометровой длины содержащие дефекты, которые располагаются, случайны образом

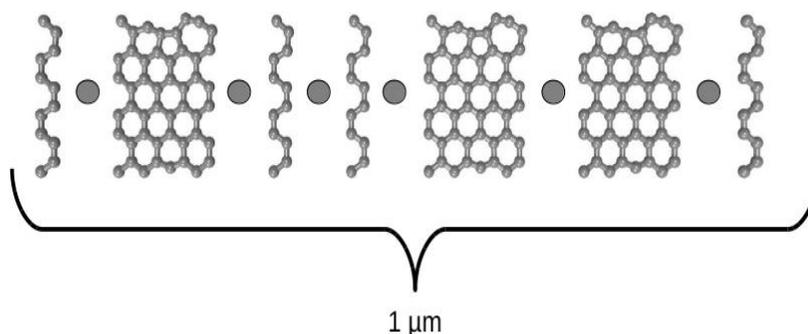


Рисунок4 – Наноленты типа zigzag (с шириной 1.5 нм) микрометровой длины содержащие дефекты, которые располагаются, случайны образом

На рисунке 5 представлена функция пропускания для идеальной наноленты типа armchair (красная линия), функция пропускания для единичного дефекта (зеленная линия). И функция пропускания наноленты armchair для периодически повторяющегося дефекта (синяя линия).

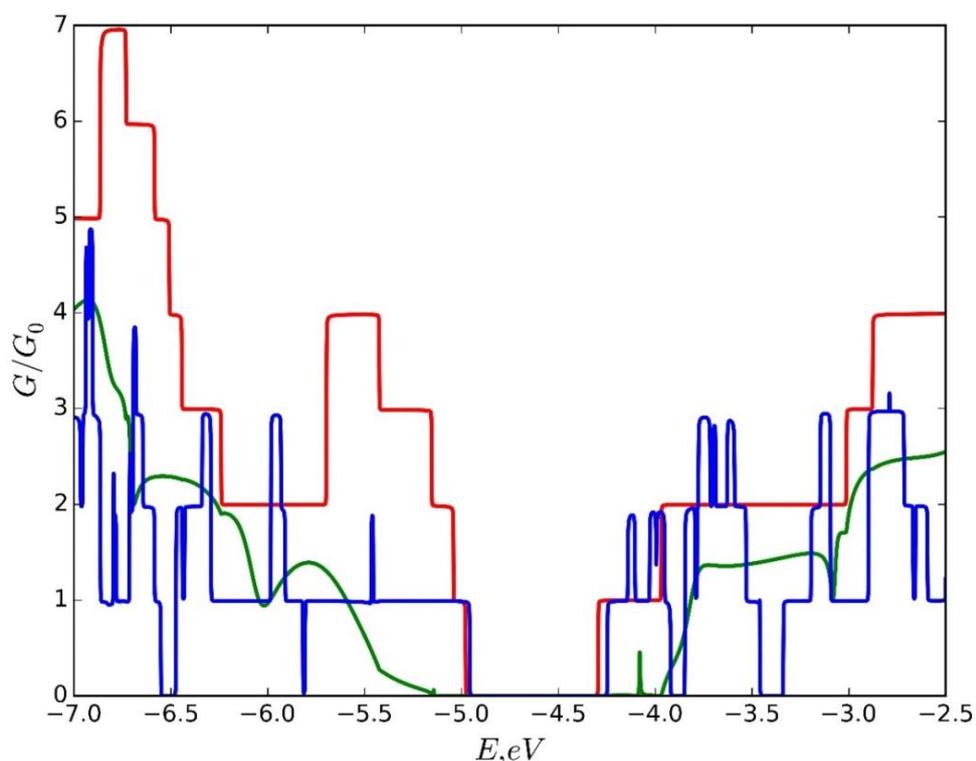


Рисунок 5 - Функции пропускания графеновых нанолент типа armchair (1.1 нм). Красная линия это идеальная нанолента, синяя линия это периодически повторяющийся дефект, а зеленая линия показывает единичный дефект.

Как можно увидеть из рисунка 5, нанолента имеет полупроводниковый тип проводимости, так как имеет запрещенную зону. При наличии периодического дефекта изменение ширины запрещенной зоны незначительно для ленты типа armchair.

На рисунке 6 представлены полученные данные функции пропускания для графеновой наноленты типа zigzag. Где функция пропускания для идеальной наноленты типа zigzag (красная линия), для наноленты с единичным дефектом (зеленая линия). И функция пропускания наноленты типа zigzag с периодически повторяющимся дефектом (синяя линия).

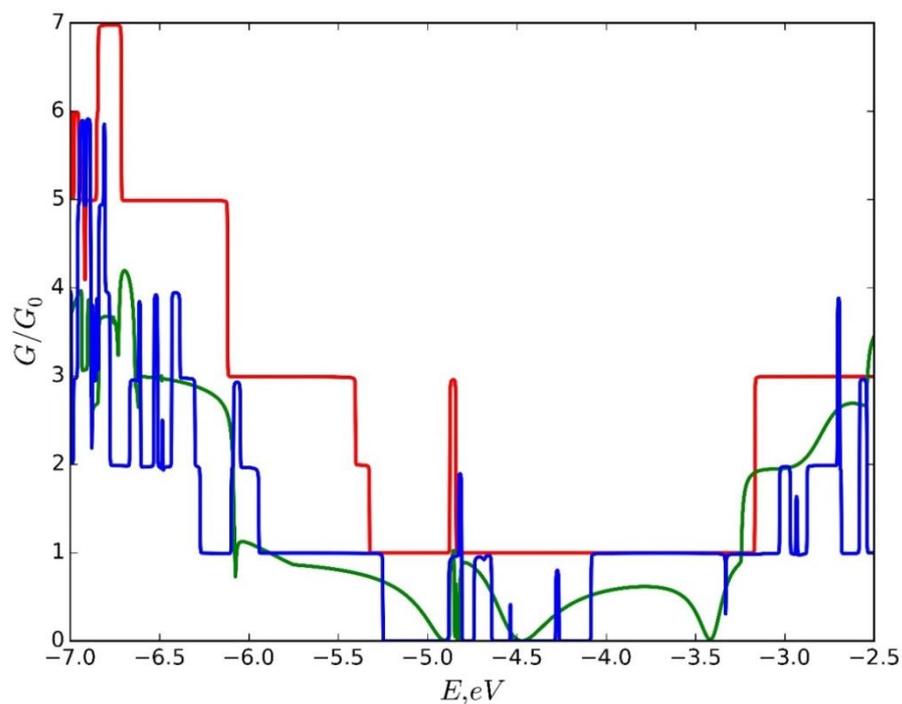


Рисунок 6 - Функции пропускания графеновых нанолент типа zigzag (1.5 нм). Красная линия это идеальная нанолента, синяя линия это периодически повторяющийся дефект, а зеленая линия показывает единичный дефект.

Как можно убедиться из рисунка 6, для ленты типа zigzag при появлении дефектов происходит изменение типа проводимости, в случае периодического дефекта появляется запрещенная зона.

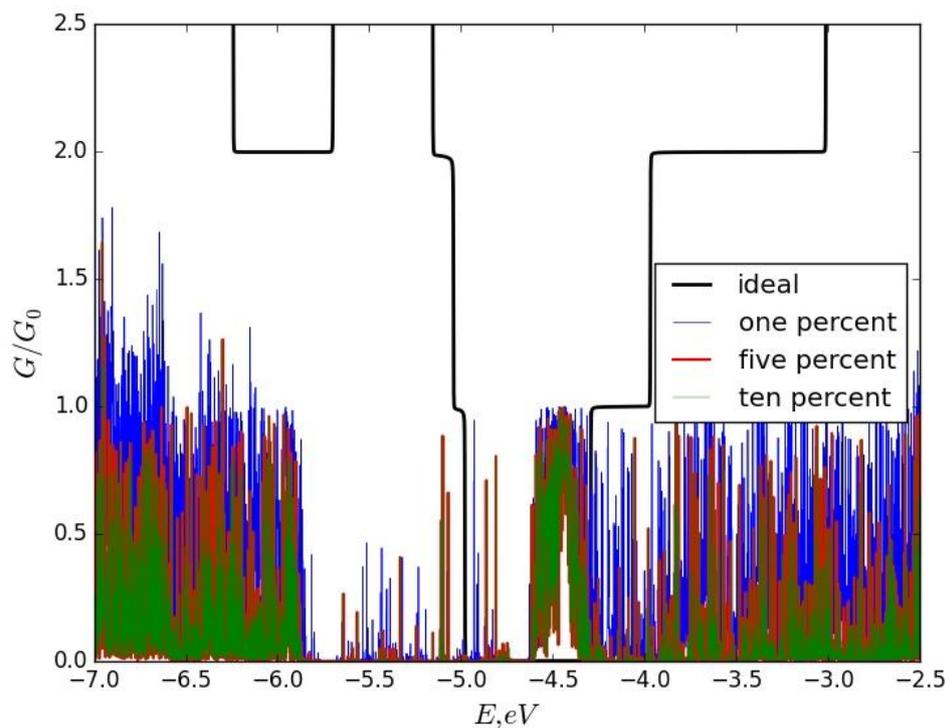


Рисунок 7 - Функции пропускания при различном процентном соотношении дефектов для ленты типа armchair с шириной 1.1 нм. Где синий цвет это 1%, красный цвет 5%, а зеленый цвет 10%.

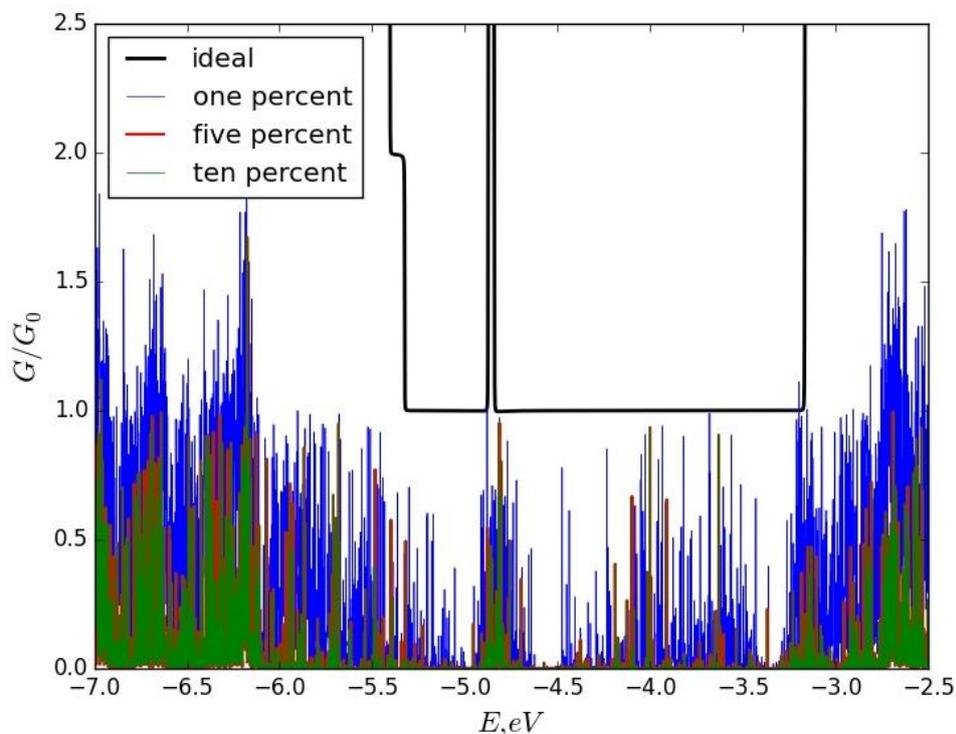


Рисунок 8 - Функции пропускания при различном процентном соотношении дефектов для ленты типа zigzag с шириной 1.5 нм. Где синий цвет это 1%, красный цвет 5%, а зеленый цвет 10%.

Для более детального рассмотрения функции пропускания графеновых нанолент типа armchair и zigzag, были рассчитаны функции пропускания наноленты при различном процентном соотношении дефектов. При этом дефекты располагались случайным образом по всей длине наноленты.

Как можно убедиться из рисунка 7 и 8, для графеновой наноленты двух типов острые пики связаны с большим количеством локальных электронных состояний, на которых происходит рассеивание электронов, вследствие чего значительно ухудшается проводимость.

## 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 натуральных 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.