

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

**Закономерности электропроводящих и эмиссионных
свойств колонного графена**
НАУЧНЫЙ ДОКЛАД ОБ ОСНОВНЫХ РЕЗУЛЬТАТАХ ПОДГОТОВЛЕННОЙ
НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ (ДИССЕРТАЦИИ)
аспиранта 4 курса
направления 03.06.01 «Физика и астрономия»
физического факультета

Шмыгина Дмитрия Сергеевича

Научный руководитель

д. ф.-м. н., проф.

Глухова О. Е.

Саратов 2018

Актуальность темы

Графен (атомарный слой атомов углерода, организованных в гексагональную решетку) и углеродные нанотрубки (УНТ) (свернутые листы графена, открыты Иидзимой в 1991 г.), а также их модификации являются популярными и перспективными материалами наноэлектроники и эмиссионной электроники. На базе УНТ создаются сверхплоские и гибкие дисплеи высокого разрешения, катоды. Они нашли своё применение в биомедицинских технологиях в качестве основы углеродных каркасов для биосовместимых композитов. На основе графеновых производных — графеновых нанолент предлагаются биосенсоры для нуклеотидов ДНК, транзисторы и т.д.

Однако существуют и проблемы использования чистых УНТ в эмиссионной электронике. Одной из таких проблем является деформация и разрушение углеродных нанотрубок под действием сильных внешних электрических полей вследствие разогрева отдельного участка УНТ. Разрушение наноэмиттеров, хотя и частичное приводит к снижению яркости свечения, а также отрицательно сказывается на долговечности компонента в целом. Для решения данной проблемы осуществляется поиск новых материалов на основе УНТ и графена, которые могли бы стать одним из основных материалов элементной базы современной электроники. Ярким представителем таких материалов являются композиты УНТ/графен, названные колонным графеном. В этом материале УНТ типа «кресло» располагаются перпендикулярно двум графеновым листам и связаны с ними химически. Такие композиты нашли применение в качестве материала для создания ионисторов, адсорбирующих губок и т. д. Однако, в настоящее время отсутствуют работы, в которых бы проводились исследования зависимости электропроводящих свойств колонного графена от геометрических параметров его компонентов, а влияния атомов щелочных металлов на эмиссионные характеристики колонного графена.

Целью данной работы является поиск новых физических закономерностей электропроводящих и эмиссионных свойств колонного графена различных топологических конфигураций.

Для достижения поставленной цели решаются следующие **задачи**:

1. Исследование энергетической стабильности колонного графена.
2. Разработка методики ускорения расчета функции пропускания электронов для квазидвумерных структур с многоатомными супер-ячейками.
3. Исследование статической электропроводности и сопротивления квазидвумерных структур колонного графена с одним и двумя слоями нанотрубок (колонный графен с одним слоем далее будем называть однослойным, в два слоя – двухслойным).
4. Исследование эмиссионных свойств квазидвумерного и 3D-колонного графена при добавлении калия.

Научная новизна работы:

1. Впервые установлено, что формирование квазидвумерного и 3D-колонного графена с различной топологией является энергетически выгодным, что свидетельствует об энергетической стабильности этого материала, независимо от диаметра нанотрубок, их длины и шага между ними.
2. Разработана новая методика ускорения расчета функции пропускания электронов квазидвумерных периодических структур, которая позволяет рассчитывать статическую электропроводность для колонного графена с супер-ячейками из 1000 и более атомов.
3. Впервые рассчитаны значения статической электропроводности и сопротивления однослойных и двухслойных структур колонного графена, и для них выявлены новые закономерности поведения сопротивления с изменением расстояния между графеновыми листами и количества слоев. Было определено, что сопротивление вдоль края «кресло» ниже для всех рассмотренных конфигураций колонного графена.
4. Впервые исследовано влияние атомов калия, заполняющих нанополости квазидвумерного и 3D-колонного графена, на электронное строение и эмиссионные свойства этого материала. Установлена закономерность снижения работы выхода квазидвумерного и 3D-колонного графена с

увеличением массовой доли атомов калия в нанополостях. Выявлено увеличение плотности электронных состояний на уровне Ферми для двухслойного и трехмерного колонного графена при заполнении нанополостей калием.

Научное и практическое значение результатов работы.

Результаты исследования электропроводящих и эмиссионных свойств колонного графена представляют фундаментальный интерес с позиции физической электроники. Колонный графен независимо от расстояния между графеновыми слоями может быть использован в качестве электропроводящего материала, максимальное сопротивление которого не превышает 256 кОм/нм. Заполненный атомами калия колонный графен, обладающий пониженной работой выхода (на 1 эВ и более) по сравнению с чистым колонным графеном, имеет перспективы в качестве материала для конструирования наноэмиттеров автоэмиссионных катодов. Разработанная методика ускорения расчёта функции пропускания электронов позволяет улучшить исследовательский физико-математический инструментарий исследования электрофизических свойств плёнок с любой структурой и химическим составом. Данная методика реализована в виде новых модулей программного пакета Kvazar и уже применяется в ходе проведения научных исследований на базе СГУ им. Н.Г. Чернышевского.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Разработанный новый метод ускоренного вычисления функции пропускания электронов для квазидвумерных структур различного строения с многоатомными супер-ячейками позволил выявить, что статическая электропроводность колонного графена выше вдоль края «кресло».
2. Наличие атомов калия в нанополостях колонного графена приводит к снижению работы выхода на 1 эВ при 10% массовой доле калия в структуре.

3. Добавление частиц калия в нанополости двухслойного колонного графена и 3D-колонного графена приводит к увеличению плотности электронных состояний на энергии Ферми.

Апробация работы

Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих международных конференциях:

- Международная школа для молодых ученых по оптике, лазерной физике и биофотонике (Saratov Fall Meeting 2014), г. Саратов, Россия.
- Международная школа для молодых ученых по оптике, лазерной физике и биофотонике (Saratov Fall Meeting 2015), г. Саратов, Россия.
- Всероссийская конференция молодых ученых «Нанoeлектроника, нанoфотоника и нелинейная физика» (НННФ 2014) г. Саратов, Россия.
- Всероссийская конференция молодых ученых «Нанoeлектроника, нанoфотоника и нелинейная физика» (НННФ 2015) г. Саратов, Россия.
- Всероссийская конференция молодых ученых с международным участием по практической биомеханике, 2015, г. Саратов, Россия.
- Первая российская конференция «Графен: молекула и 2D-кристалл», 2015, г. Новосибирск, Россия.

Публикации

По теме работы опубликовано 10 печатных работ, 4 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК РФ для публикации результатов диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, 2 в международных периодических изданиях, 4 – в трудах конференций. Получено одно свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Личный вклад автора

Все представленные в диссертации результаты были получены лично автором или при его непосредственном участии. Постановка задач и обсуждение полученных результатов проводились при участии научного руководителя д.ф.-м.н., профессора Глуховой Ольги Евгеньевны и соавторов работ. Автор разрабатывал используемый при выполнении работы программный пакет Kvazar, реализовал модули, используемые для ускорения расчёта функции пропускания.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и списка литературы. Во **введении** обоснована актуальность выбранной темы, ее новизна и практическая значимость, определена цель работы, представлены основные результаты, полученные в ходе работы, и основные положения, выносимые на защиту.

Графен и углеродные нанотрубки, а также их модификации являются популярными и перспективными материалами наноэлектроники, эмиссионной электроники. На базе УНТ создаются сверхплоские и гибкие дисплеи высокого разрешения, катоды. Производные графена, такие как графеновые наноленты используются для создания биосенсоров нуклеотидов ДНК, транзисторов и т.д.

В то же время, существуют проблемы использования чистых УНТ в эмиссионной электронике, в том числе деформация и разрушение углеродных нанотрубок под действием сильных внешних электрических полей вследствие разогрева отдельного участка УНТ. Разрушение наноэмиттеров приводит к снижению яркости свечения, а также отрицательно сказывается на долговечности компонента в целом. Для решения данной проблемы осуществляется поиск новых материалов на базе УНТ и графена со свойствами, перспективными для реализации целого ряда задач науки и техники. Одним из таких материалов может стать колонный графен – углеродный композит, состоящий из горизонтально расположенных графеновых листов и вертикально ориентированных УНТ, связанных с листами химическими связями.

На данный момент отсутствуют работы, исследующие закономерности изменения электропроводящих свойств колонного графена в зависимости от геометрических параметров его компонентов, а также влияния атомов щелочных металлов на эмиссионные характеристики колонного графена.

В **первой главе** представлена информация об используемых методах и подходах вычислительного эксперимента.

Для изучения поведения молекулярных систем во времени используется метод молекулярной динамики, в котором расчёт межатомного взаимодействия может происходить согласно различным выбранным потенциалам. Для отыскания устойчивой конфигурации из начальных позиций частиц используется потенциал Бреннера (AIREBO/REBO (adaptive intermolecular reactive empirical bond-order potential/reactive empirical bond-order potential) — реактивный эмпирический потенциал порядка связи с учетом межмолекулярного взаимодействия и без него). Для отыскания равновесной конфигурации и расчёта энергии Ферми использовался метод функционала электронной плотности в приближении сильной связи.

Моделирование электронного транспорта через проводящий канал и расчёт величины статической электропроводности объектов нанометрового масштаба вычислялся согласно методу неравновесных функций Грина-Келдыша. Электронный транспорт описывался с учётом когерентного рассеивания. Согласно формализму Ландауэра-Буттикера, проводимость нанообъекта может быть вычислена через его функцию пропускания электронов:

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) F_T(E - E_F) dE \quad (1)$$

где $T(E)$ — функция пропускания электронов, характеризующая квантово-механическую прозрачность проводящего канала (участка молекулярной структуры, заключенного между двумя контактами) в зависимости от энергии движущегося по нему электрона, E_F — энергия Ферми материала контактов, к которым подсоединен исследуемый объект, e — заряд электрона, h — постоянная

Планка. e^2/h – квант проводимости, величина для единственного канала проводимости. Это значение удваивается для учёта спина электронов.

Функция теплового уширения $F_T(E)$ рассчитывается по формуле:

$$F_T(E) = \frac{1}{4k_b T} \operatorname{sech}^2 \frac{E}{2k_b T}, \quad (2)$$

где k_b — постоянная Больцмана, T — температура. Интеграл при нахождение статической электропроводности на практике рассматривается по выбранному небольшому интервалу энергии – ввиду характера функции теплового уширения, наибольший вклад в величину получившегося результата вносят значения функции пропускания электронов вблизи энергии Ферми и, как правило, интервала $[E_F - \alpha, E_F + \alpha]$ ($\alpha = 0.2, 0.3$ эВ) оказывается достаточно для расчёта статической электропроводности. Дальнейшее увеличение рассматриваемого интервала энергий не приводит к изменению результата расчёта электропроводности.

Функция пропускания электронов определяется выражением:

$$T(E) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \operatorname{Tr}(\Gamma_s(E) G_C^A(E) \Gamma_D(E) G_C^R(E)), \quad (3)$$

где $G_C^A(E), G_C^R(E)$ — опережающая и запаздывающая матрицы Грина, описывающие контакт с электродами, $\Gamma_s(E), \Gamma_D(E)$ — матрицы уширения уровней для истока и стока.

Функция пропускания электронов обозначает вероятность перехода через проводящий канал электрона с энергией E , суммированную по всем каналам проводимости. Для кристаллических структур функция пропускания в одной точке обратного пространства имеет ступенчатый вид с целыми значениями на каждой ступеньке.

Функция $T(E)$ отыскивается суммированием по всем точкам первой зоны Бриллюэна (ЗБ), поскольку могут быть рассмотрены материалы, обладающие трансляционной симметрией, N – число точек обратного пространства. Точность расчета $T(E)$ определяется подробностью разбиения обратного пространства для двумерных и трехмерных структур, обладающих трансляционной симметрией.

Разбиение будет достаточным, когда с увеличением числа точек обратного пространства $\mathbf{k}$ функция $T(E)$ не меняется. Например, для ЗБ в виде конечного отрезка (а, б) функция $T(E)$ сходится к своему истинному виду при $N \geq 10^3$. Для материалов, у которых ячейка содержит порядка нескольких сотен атомов и тысячи атомов, расчет в одной точке – то есть функции $T(E)$ для фиксированного $\mathbf{k}$, занимает достаточно большое время, таким образом, проведение 10^3 вычислений становится невозможным. Если ЗБ является не отрезком, а двумерной/трехмерной фигурой, число N возрастает на порядки.

Предложена новая методика ускорения расчета функции пропускания двумерных периодических структур, которая включает в себя пост-обработку полученных в результате грубого расчета значений ФПЭ, а также небольшую модификацию самой схемы расчёта.

Описание алгоритма проведено на примере вычисления ФПЭ для графена (рис. 1).

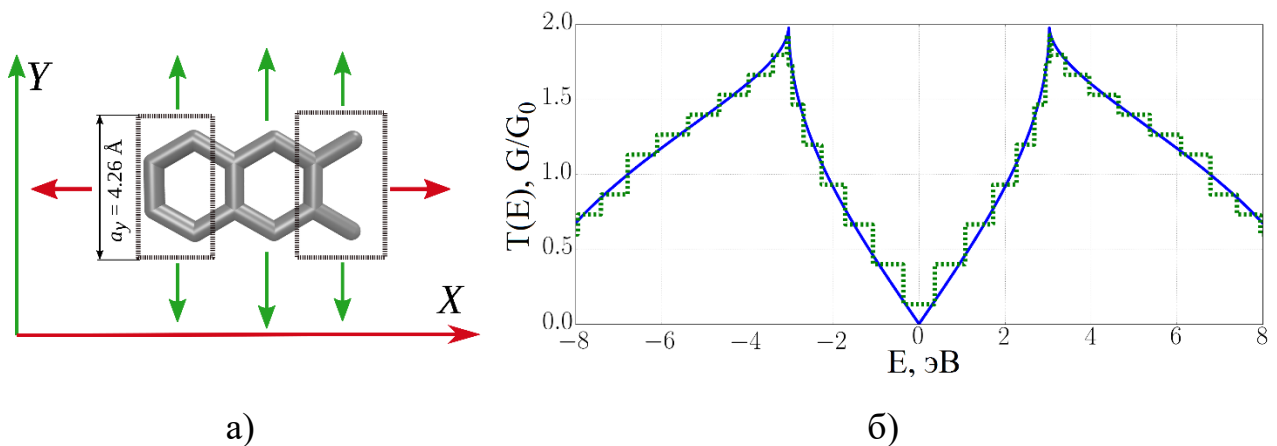


Рисунок 1. Графен: а) элементарные ячейки исследуемого материала (посередине) и контактов (выделены пунктиром); б) функция пропускания электронов для графена (зеленая – при $dk=0.1$ $1/\text{\AA}$, синяя – для $dk=0.0015$ $1/\text{\AA}$)

Функция пропускания электронов, аналогичная изображенной на рис. 1, получается в результате сложения значений ФПЭ для одинаковых значений энергии, но разных точек обратного пространства. Результирующая сумма делится на количество рассмотренных $\mathbf{k}$. На рис. 2 изображена трехмерная картина зависимости значений ФПЭ от энергии и текущей точки обратного пространства.

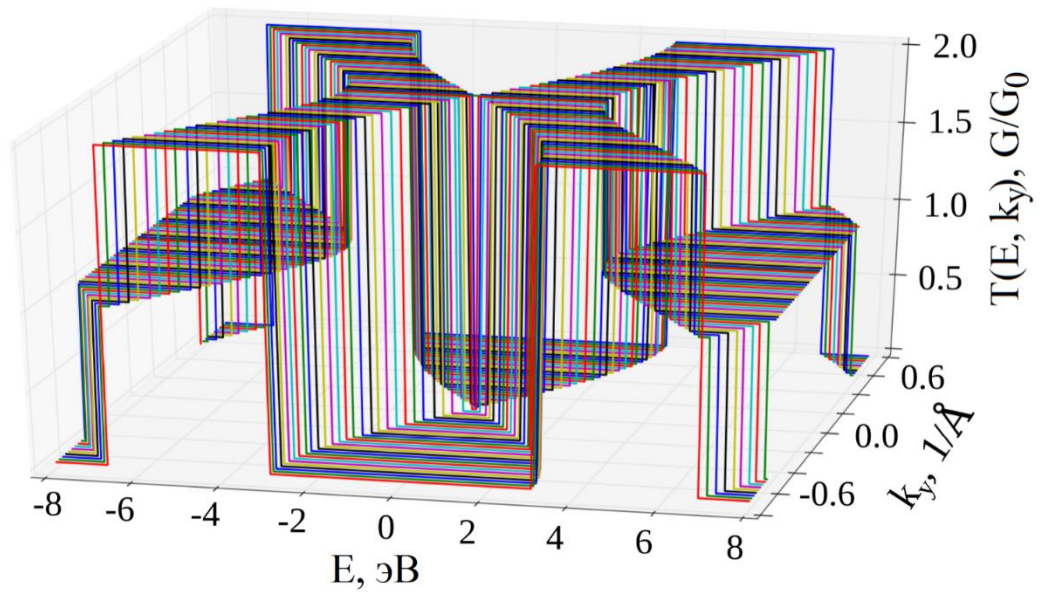


Рисунок 2. Зависимость ФП электронов для графена от энергии и текущей точки обратного пространства ($dk = 0.025 \text{ \AA}^{-1}$).

Для каждой точки обратного пространства полученная зависимость функции пропускания электронов от энергии дополнительно обрабатывается — уточняются значения вблизи перехода между ступенями, чтобы сделать их более резкими. Для этого используется аналог метода половинного деления, который позволяет получить в 16 раз более точное значение границы между ступенями за 4 дополнительных шага вычисления функции пропускания.

Для устранения ступенчатого вида конечной функции пропускания электронов нами проводится интерполяция функции $T(E)$ между двумя соседними точками обратного пространства. Отыскиваются все точки соседних ломаных, имеющие одинаковое значение функции пропускания электронов, а затем по модулю разности энергий выбираются ближние.

На отрезок, соединяющий ближайшие точки с разных ломаных, добавляются дополнительные точки (рис. 3). Все дополнительные точки характеризуются тем же значением $T(E)$, что и точки на концах отрезка. Число добавленных точек зависит от длины отрезка: чем больше длина отрезка, тем больше дополнительных точек добавляется. Исходные точки и добавленные используются для построения интерполирующей двумерной функции $T_1(E, k_y)$,

которая используется для нахождения значений функции пропускания электронов в точках, не содержащихся в первоначальном наборе (E, k_y) .

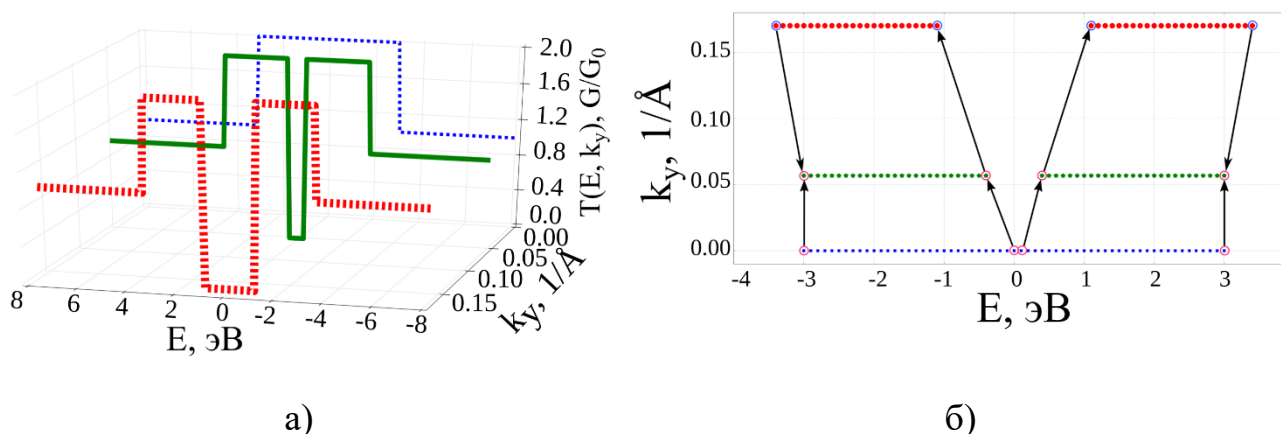


Рисунок 3. Функция пропускания электронов: а) графики $T(E)$ для графена в соседних k_y ; б) точки графика функции пропускания электронов для разных энергий и величин k_y , в которых $T(E) = 2$

На рис. 4 приведена карта функции пропускания электронов для графена, а также сама ФПЭ после интерполяции в сравнении с результатом точного расчёта. Среднее отклонение одного графика от другого не превышает 1-2%.

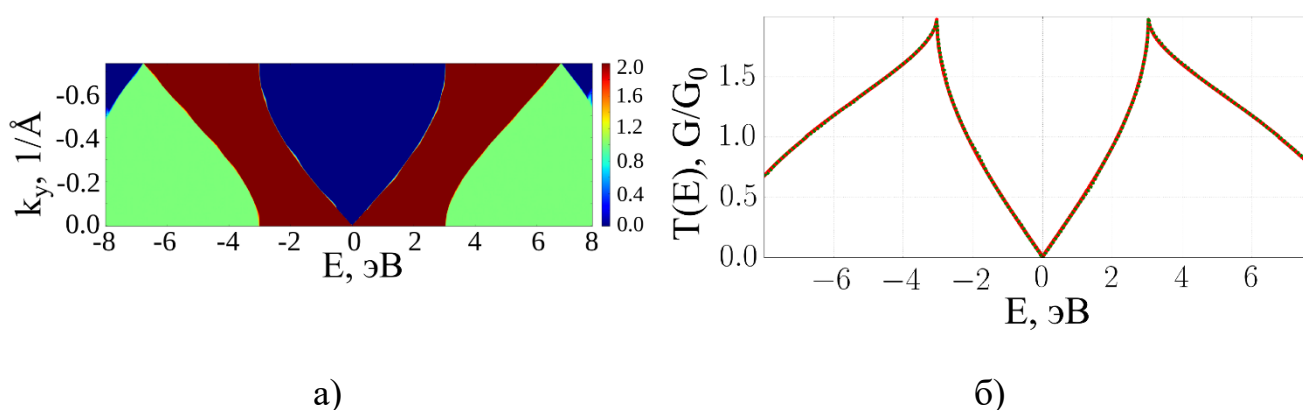


Рисунок 4. Функция пропускания электронов для графена: а) карта функции пропускания электронов после применения интерполирующей функции $T(E, k_y)$; б) функция пропускания при усреднении по всем k_y (зеленый — результат интерполяции, красный — результат подробного расчёта)

При ускорении вычисления функции пропускания электронов, используя разработанную методику, для расчётов ФПЭ графена и графана было достигнуто ускорение в 14.38 и 19.92 раза соответственно. Однако скорость расчётов

ограничена сложностью зависимости функции пропускания от энергии и рассматриваемой точки обратного пространства. Иными словами, если переходы между ступеньками для одного k_y чередуются слишком часто, не получится сократить используемый в расчёте набор значений энергии, аналогична ситуация и с разными k_y . Области, в которых предположение значения функции пропускания в промежуточных точках может быть потенциально ошибочным, определяются однозначно по карте функции пропускания электронов.

Во **второй главе** были проведены исследование стабильности моделей колонного графена и расчёт статической электропроводности однослойной и двухслойной плёнок колонного графена.

Стабильность определялась согласно значению теплоты образования — разности между суммой энергий составных частей композита и энергии конечной структуры. В случае образования устойчивой конфигурации, данная величина отрицательна. Были рассмотрены композиты с разными геометрическими параметрами: они отличались диаметрами и длинами трубок, входящих в их состав. На данном этапе рассматривались композиты малого размера, в состав которых входят два графеновых листа и одна УНТ (рис. 5), без применения периодических граничных условий.

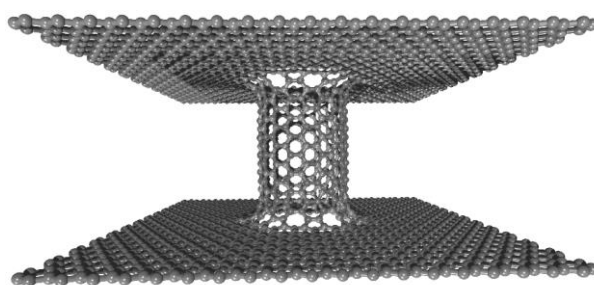


Рисунок 5. Пример модели колонного графена, в состав которого входят два графеновых листа и одна углеродная нанотрубка с длиной 1.845 нм и диаметром 1.212 нм.

Впервые рассчитана теплота образования для однослойного колонного графена при различных диаметрах и длинах углеродных нанотрубок.

На рис. 6 изображены графики зависимости теплоты образования от длины УНТ для разных диаметров нанотрубок.

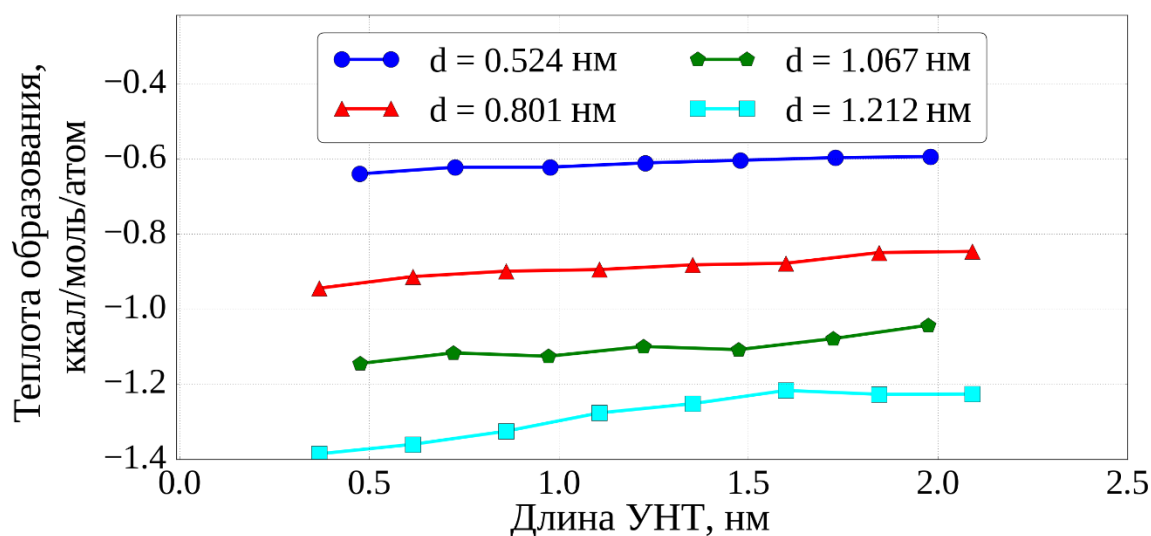


Рисунок 6. Зависимость теплоты образования от длины и диаметра УНТ в составе композита.

На рис. 7 изображены примеры рассчитываемых систем.

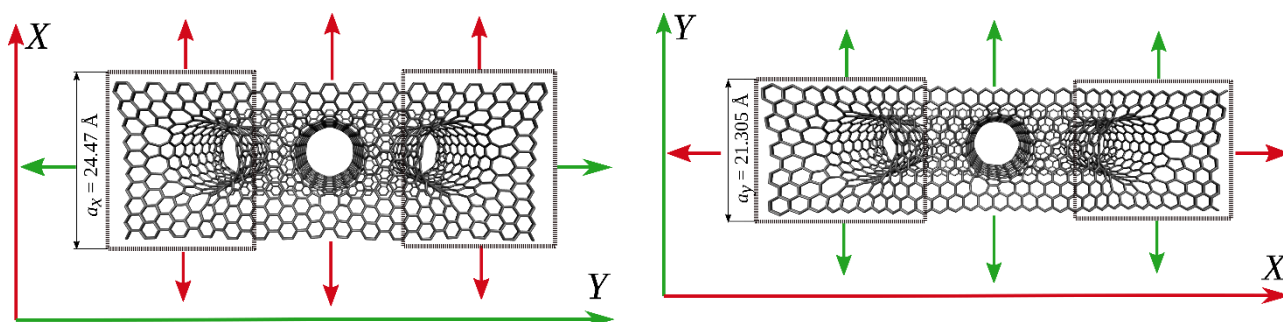
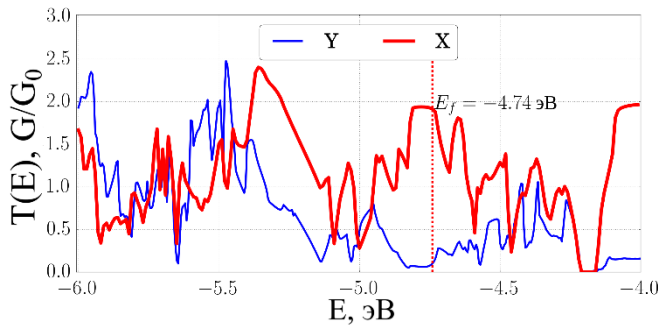


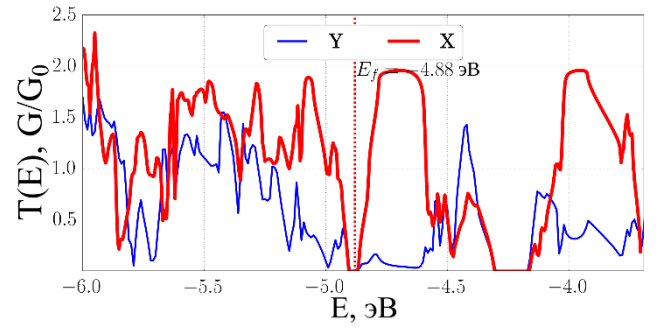
Рисунок 7. Пленка колонного графена с углеродной нанотрубкой (9,9) и длиной 2.4 нм: ячейка композита, заключенная между контактами, которые представлены аналогичными ячейками, при электронном транспорте вдоль направления Y (слева) и вдоль X (справа).

Впервые получены значения проводимости и сопротивления однослойных и двухслойных плёнок колонного графена в зависимости от геометрических параметров его компонентов.

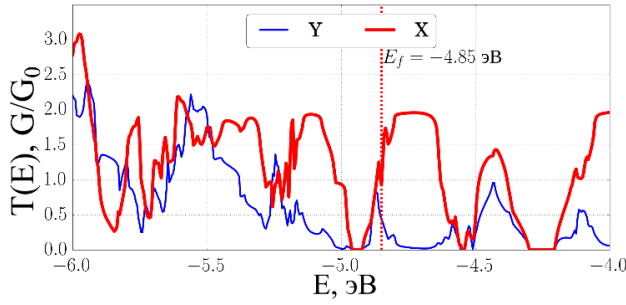
На рис. 8 представлены результаты для композитов со всеми рассмотренными длинами УНТ. Расстояние между трубками было одинаковым во всех случаях — 2.1 нм.



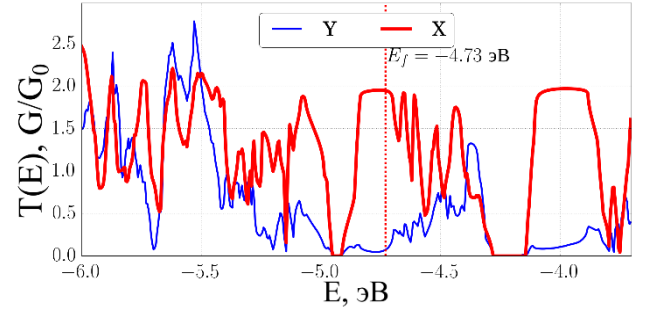
а)



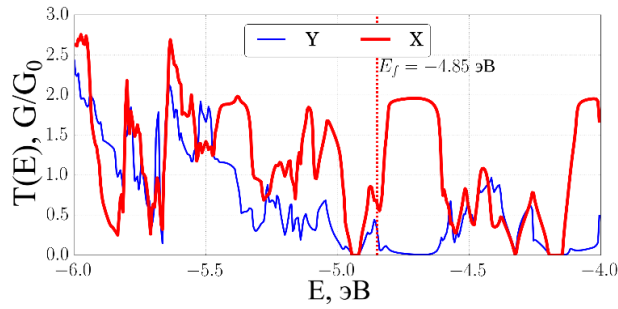
б)



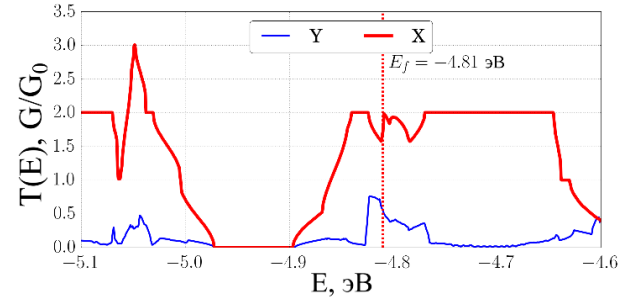
в)



г)



д)



е)

Рисунок 8. Функция пропускания электронов для однослойной пленки колонного графена при разных длинах углеродных нанотрубок в её составе: а) $L = 0.607$ нм; б) $L = 0.858$ нм; в) $L = 1.102$ нм; г) $L = 1.349$ нм; д) $L = 1.598$ нм; е) $L = 1.844$ нм. X, Y — направления трансляции ячейки проводящего канала.

В таблице 1 приведены значения сопротивлений и проводимости для однослойных и двухслойных плёнок колонного графена.

Таблица 1. Характеристики супер-ячеек исследуемых однослойных композитных плёнок и результаты моделирования.

Длина трубки, нм	Число атомов в супер-ячейке композита	Направление трансляции	Энергия Ферми, эВ	Проводимость, мкСм/нм	Сопротивление, кОм/нм
0.60	400	X	-4.74	55.55	18.00
		Y		5.18	193.20
0.85	436	X	-4.88	13.27	75.34
		Y		3.90	256.13
1.10	472	X	-4.85	37.68	26.54
		Y		11.68	85.62
1.34	508	X	-4.73	58.42	17.12
		Y		4.89	204.71
1.59	544	X	-4.85	29.53	33.86
		Y		6.19	161.56
1.84	580	X	-4.81	49.89	20.04
		Y		9.29	107.62

Аналогичные исследования были проведены для двухслойного колонного графена. В таблице 2 приведены результаты расчётов.

Таблица 2. Характеристики супер-ячеек исследуемых двухслойных композитных плёнок и результаты моделирования.

Длина трубки, нм	Число атомов в супер-ячейке композита	Направление трансляции	Энергия Ферми, эВ	Проводимость, мкСм/нм	Сопротивление, кОм/нм
0.60	2400	X	-4.712	29.45	33.96
		Y		10.12	98.85
1.10	2544	X	-4.798	17.68	56.56
		Y		7.36	135.91
1.84	2760	X	-4.781	17.94	55.74
		Y		7.85	127.45

Рассчитанные характеристики пленок колонного графена — электрической проводимости и сопротивления в направления «кресло» и «зигзаг» графенового листа показывают, что сопротивление вдоль края типа «кресло» для обоих типов композитов ниже, чем в направлении «зигзаг». В этом направлении сопротивление не зависит явным образом от расстояния между графеновыми слоями (иными словами, от длины углеродной нанотрубки, соединяющей листы) и всегда ниже сопротивления той же ячейки вдоль направления, перпендикулярного данному. Средняя величина сопротивления для однослойного композита составляет 31.81 кОм/нм. Для двухслойного композита величина среднего сопротивления составляет 48.75–120.74 кОм/нм в зависимости от направления. Высокая проводимость вдоль края «кресло» может быть объяснена геометрией соединения УНТ и графена, а также шириной графеновых дорожек данного типа в композите: 4 гексагона составляют дорожку вдоль направления токопереноса в этом случае. Для «зигзаг»-направления — 3 гексагона, из которых два значительно деформированы.

В направлении края «кресло» графенового листа электропроводность меняется с большей амплитудой, в 2-3 раза превышающей по абсолютному значению аналогичный показатель для направления типа «зигзаг» — сопротивление сильно меняется с увеличением длины УНТ.

Следует отметить, что возросшее сопротивление вдоль края «зигзаг» и уменьшившееся для края «кресло» показывают более сглаженные проводящие характеристики двухслойного композита в зависимости от направления токопереноса.

В целом, можно прийти к важному выводу, что пленки колонного графена с нанотрубками диаметром 1.23 нм характеризуются сравнительно высокой электрической проводимостью. В связи с высокой прочностью и проводимостью, они могут с успехом применяться в электронных устройствах и в качестве электродов аккумуляторных батарей; к тому же их структура содержит множество пор и полостей, что позволяет заполнение различными необходимыми соединениями.

В **третьей главе** было проведено исследование закономерностей эмиссионных свойств колонного графена при добавлении частиц калия в поры и полости материала.

Впервые исследованы эмиссионные характеристики однослойного, двухслойного и трехмерного колонного графена в зависимости от длины углеродных нанотрубок, входящих в состав супер-ячейки, а также содержания атомов калия в порах и полостях композита (рис. 9).



Рисунок 9. Заполненные атомами калия элементарные ячейки однослойной пленки колонного графена с длиной УНТ 0.6 нм (8, 33 атома).

Для ячеек колонного графена, не содержащих частицы калия, были рассчитаны работа выхода и плотность электронных состояний в зависимости от вида ячейки и длины углеродных нанотрубок в ней. Было выяснено, что работа выхода в двухслойных пленках ниже аналогичной величины однослойных на 0.129 эВ в среднем. В трехмерном композите работа выхода ниже на ~ 0.022 эВ работы выхода в двухслойных плёнках. Плотность электронных состояний выше в однослойных пленках, и самая низкая в двухслойных.

Для однослойных пленок с атомами калия была рассчитана теплота образования, значения которой показали стабильность таких соединений.

Для всех рассмотренных систем наблюдалось существенное снижение работы выхода материала при росте числа добавленных частиц калия (рис. 10-12). При этом существенное снижение работы выхода (не менее 1 эВ) наблюдается для всех рассмотренных систем при массовой доле калия 10%. Дальнейшее увеличение числа добавленных частиц калия приводит к ещё большему снижению работы выхода — более 50% относительно первоначальной величины (~ 2.5 эВ).

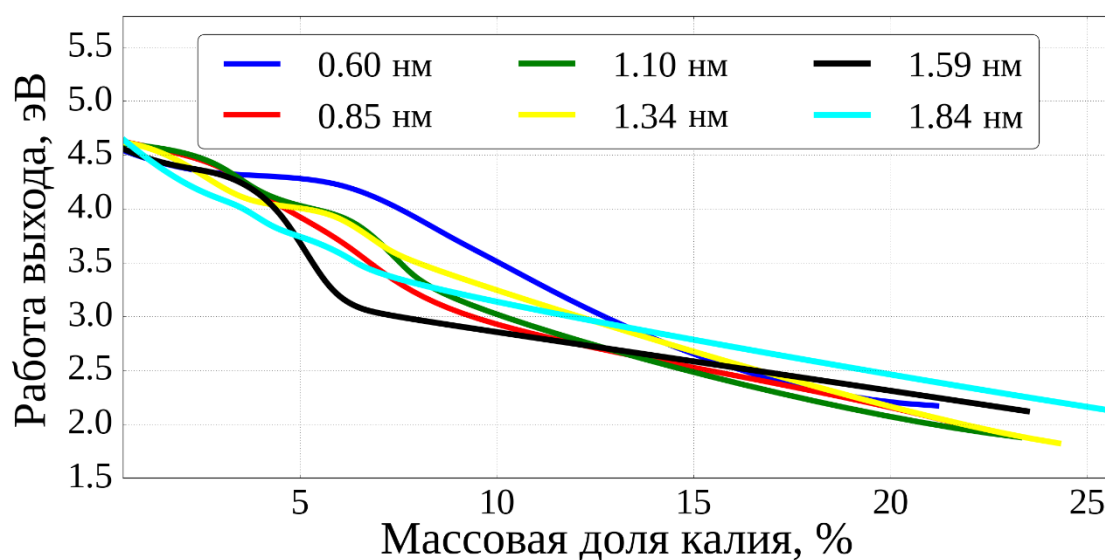


Рисунок 10. Значение работы выхода однослойного колонного графена при различных массовых долях калия в системе.

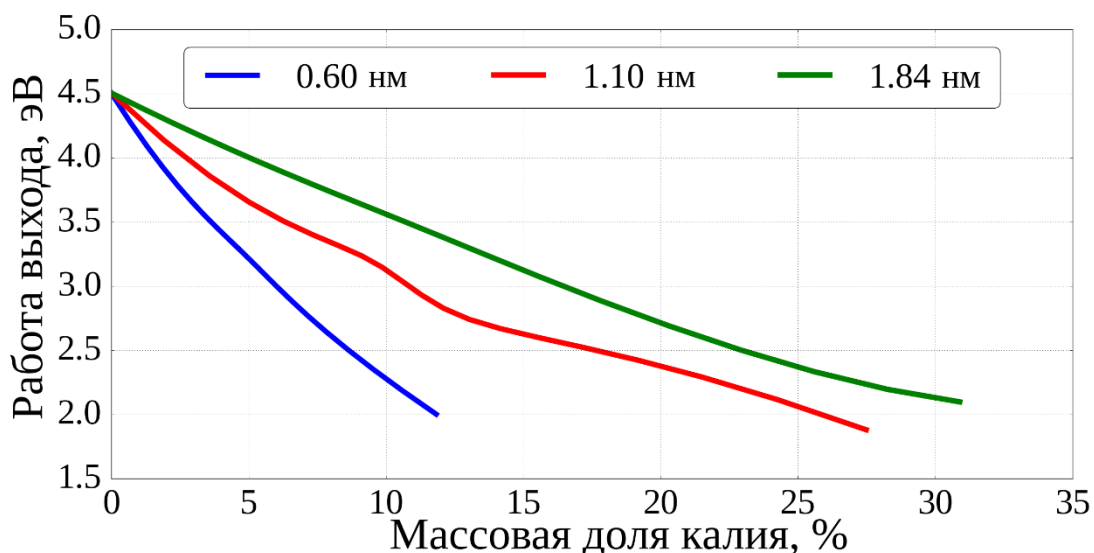


Рисунок 11. Зависимость работы выхода двухслойного колонного графена при различных массовых долях калия в системе.

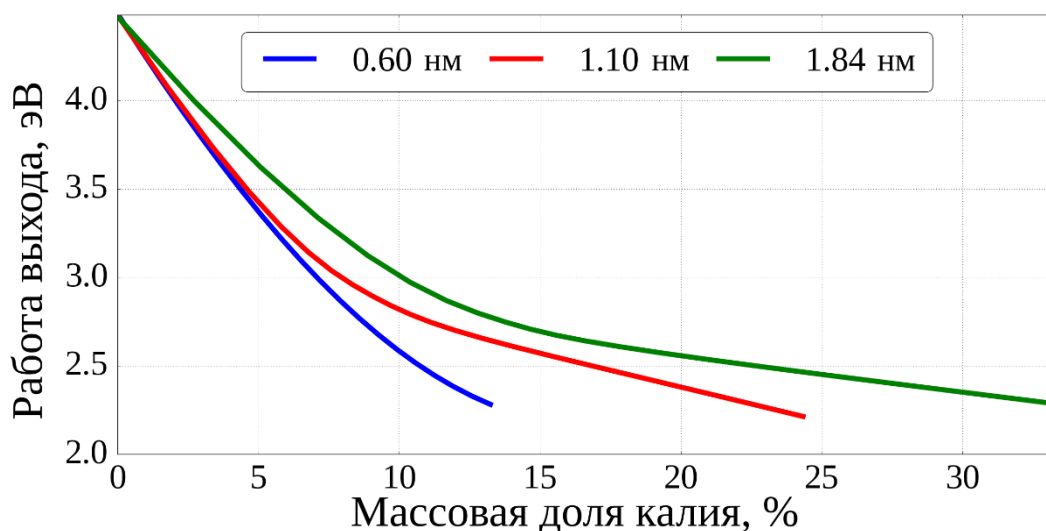


Рисунок 12. Зависимость работы выхода трехмерного колонного графена при различных массовых долях калия в системе.

Закономерности поведения плотности электронных состояний носят неоднозначный характер для однослойных пленок колонного графена, в котором наблюдается снижения данной величины на энергии Ферми для композитов с двумя наименьшими углеродными нанотрубками и повышение для остальных рассматриваемых структур (относительно не содержащих калия ячеек). Для двухслойного и трехмерного композитов ярко выражено возрастание плотности электронных состояний на энергии Ферми при добавлении частиц калия — от трехкратного (3.390) до более чем восьмикратного (8.816) (рис. 13-14). Это

свидетельствует о том, что эмиссионные свойства материалов повышаются ещё и по той причине, что число электронов вблизи энергии Ферми будет больше.

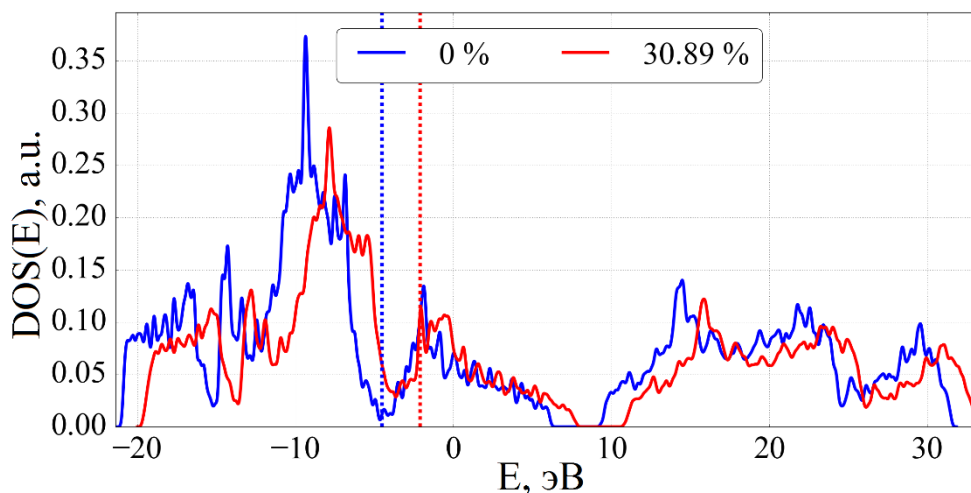


Рисунок 13. Плотность электронных состояний для двухслойного колонного графена с длиной УНТ 1.84 нм при разном числе частиц калия. Пунктирными линиями отмечены положения уровня Ферми.

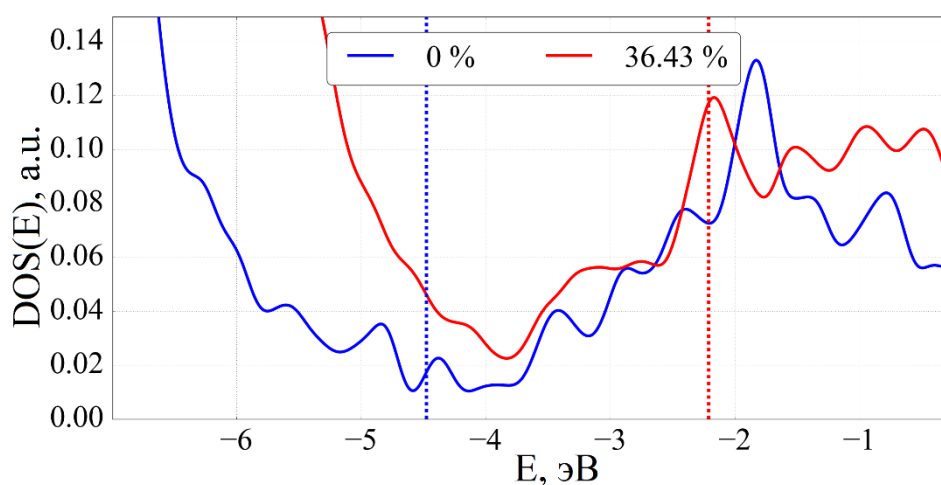


Рисунок 14. Плотность электронных состояний для трехмерного колонного графена с длиной УНТ 1.84 нм при разных массовых долях калия. Пунктирными линиями отмечены положения уровня Ферми.

Основные результаты работы

1. Разработанная методика ускорения расчёта функции пропускания электронов для плёнок любой структуры и химического состава позволила исследовать закономерности статической электропроводности однослойного и двухслойного колонного графена;

2. Рассчитанная теплота образования соединений УНТ/графен в колонном графене позволила сделать вывод об энергетической устойчивости всех рассмотренных соединений;

3. Исследована функция пропускания электронов для однослойных и двухслойных плёнок колонного графена, найдены сопротивление и статическая электропроводность материала в зависимости от длины УНТ в составе композита и направления токопереноса – сопротивление вдоль края «кресло» ниже для всех рассмотренных ситуаций;

4. Установлено влияние заполнения нанополостей колонного графена атомами калия на величину работы выхода материала – она снижается на 1 эВ и более;

5. Плотность электронных состояний на энергии Ферми для двухслойного и трёхмерного колонного графена при добавлении частиц калия увеличивается.

Список работ, опубликованных автором по теме диссертации

1. Глухова О. Е., Кириллова И.В., Шмыгин Д.С. и др., Методы повышения эмиссионной способности углеродных нанотрубок // Известия Саратовского университета. Новая серия, 2014, Т. 14, Вып. 2, С. 15-21.

2. Глухова О.Е., Слепченков М.М., Шмыгин Д.С. и др., Перспективный композитный материал на основе нанотрубок и графена для эмиссионной электроники // Радиотехника, 2015, № 3, С. 64-69.

3. Глухова О.Е., Слепченков М.М., Шмыгин Д.С. и др., Атомная структура энергетически устойчивых композитов углеродные нанотрубки/графен // Физика твердого тела, 2015, Т. 57, Вып. 5, С. 994-998.

4. Glukhova O.E., Shmygin D.S., The electrical conductivity of CNT/graphene composites: a new method for accelerating transmission function calculations // Beilstein J. Nanotechnol. 2018, 9, P. 1254–1262

5. Глухова О.Е., Шмыгин Д.С., Закономерности электрической проводимости графен-нанотрубных пленок: новая универсальная методика

вычисления функции пропускания // Нано- и микросистемная техника, 2018, Т. 20, № 2, С. 78-86.

6.Glukhova O.E., Slepchenkov M.M., Shmygin D.S. and etc., Atomic structure of energetically stable composites, based on carbon nanotubes and graphene // Proc. of SPIE, VII, 2015, 93390W.

7.Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016619185 «Многопроцессорный программно-информационный комплекс моделирования молекулярных систем для супер-ЭВМ «Kvazar II»» 15.08.2016, Глухова Ольга Евгеньевна (RU), Савостьянов Георгий Васильевич (RU), Шмыгин Дмитрий Сергеевич (RU).