

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

**Зависимость электронных свойств X-образного соединения углеродных  
нанотрубок от диаметра структуры**

**АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ**

студента 4 курса 423 группы

направления 11.03.03 – Конструирование и технология электронных средств

физического факультета

Болванова Владислава Олеговича

Научный руководитель

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

Зав. кафедрой

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

Саратов 2018

## Введение

В настоящее время углеродные нанотрубки являются основным материалом нанoeлектроники. На основе различных соединений УНТ синтезируются полупроводниковые гетероструктуры, позволяющие создавать нанодиоды, нанотранзисторы и т.д. Изучение электронных свойств материалов на основе углеродных нанотрубок имеют научную и практическую значимость ввиду широчайших возможностей, которые открываются при использовании различных соединений углеродных тубулярных структур. Уникальность углеродных нанотрубок определяется различными параметрами, такими как: высокая прочность и электропроводность. Высокая величина удельной проводимости единичной УНТ достигается благодаря уникальным электронным свойствам углеродных наноструктур. При создании материалов с высокой проводимостью используют большое количество случайно ориентированных УНТ. Уменьшение сопротивления в контактах между нанотрубками позволит улучшить характеристики материалов [1]. К сожалению, экспериментально синтезировать X-образное соединение УНТ является сложной задачей, и характер связи определяется косвенным образом, из полученных свойств. Альтернативным вариантом является компьютерное моделирование соединений, так как оно может предоставить подробную информацию об атомной структуре. Целью данной работы является исследование X-образного соединения углеродных нанотрубок, а именно, нахождение зависимости электронных свойств такого соединения от диаметра структуры. Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Моделирование структуры X-образного соединения на основе углеродных нанотрубок.
2. Нахождение функции пропускания четырехтерминального устройства на базе X-образного соединения углеродных нанотрубок.
3. Вычисление контактного сопротивления X-образного соединения УНТ.

Исследования данной работы производились в программном комплексе KVAZARи Mizar, разработанные на кафедре радиотехники и электродинамики[2].

Геометрия структуры определялась в рамках метода молекулярной динамики с использованием потенциала REBO. Далее, для нахождения оптимальной конфигурации системы, соединение оптимизировалось согласно методу теории функционала электронной плотности в приближение сильной связи. Для нахождения функции пропускания системы использовался метод неравновесных функций Грина-Келдыша.

ВКР состоит из введения, 3-х разделов, заключения и списка литературы, содержащего 13 ссылок. Общий объем ВКР составляет 30 страниц.

Название разделов:

1. Методы компьютерного моделирования
2. Атомное строение X-образного соединения
3. Электронный транспорт в X-образных соединениях

ВКР носит теоретический характер, предметом исследования является X-образное соединение УНТ. Первый раздел посвящен описанию методов компьютерного моделирования, которые были задействованы в данной работе. Во втором разделе приведены результаты моделирования соединений с различными диаметрами. Третий раздел содержит результаты электронных свойств соединений, найденные в ходе численного эксперимента.

### **Основное содержание работы**

В первом разделе описаны методы компьютерного моделирования, которые были использованы в процессе исследования: метод молекулярной динамики (МД), метод теории функционала электронной плотности в приближении сильной связи (DFTB-SCC), метод неравновесных функций Грина-Келдыша (НРФГ).

Метод молекулярной динамики позволяет моделировать процессы движения многоатомной системы. Для расчета движения необходимо задать

потенциал  $U(r)$  и решить уравнение движения Ньютона с заданными начальными условиями. Метод теории функционала электронной плотности в приближении сильной связи определяет энергию многоатомной системы. Данный метод основывается на параметризации уравнений Кона-Шэма стандартного метода DFT в приближении сильной связи [3]. Метод неравновесных функций Грина-Келдыша позволяет описывать процессы электронного транспорта между электродами и каналом. С помощью данного метода определяется функция пропускания структуры [4].

Вторая глава посвящена атомному строению сформированных X-образных соединений. В данной работе производилось моделирование X-образного соединения одностенных углеродных нанотрубок типа armchair. Формирование X-образного соединения подразумевает присоединение двух углеродных нанотрубок к третьей путем образования топологических дефектов в местах соединения. Соединение было получено согласно методу молекулярной динамики в результате серии оптимизаций геометрии структуры с использованием потенциала REBO. Предполагается, что открытые концы УНТ под влиянием высокой температуры присоединяются к дефектным участкам другой нанотрубки, образуя при этом большое количество связей, что способствует образованию прочного каркаса. Причины такого предположения связаны с тем, что дефектные участки нанотрубок обладают большей химической активностью, чем бездефектные [5]. Данная работа включает в себя моделирование четырех X-образных соединений с различными диаметрами нанотрубок (0.4 нм, 0.8 нм, 1.2 нм, 1.6 нм) с последующим изучением зависимости электронных свойств от диаметра этих соединений. Моделирование производилось в термостате Нозе-Гувера с температурой 300 К в течении 500 фмс. При построении атомной структуры, исключались топологические дефекты вида «треугольник» и «четырёхугольник». Допустимыми являлись дефекты Стоуна-Уэльса и дефекты двойной вакансии (2V).

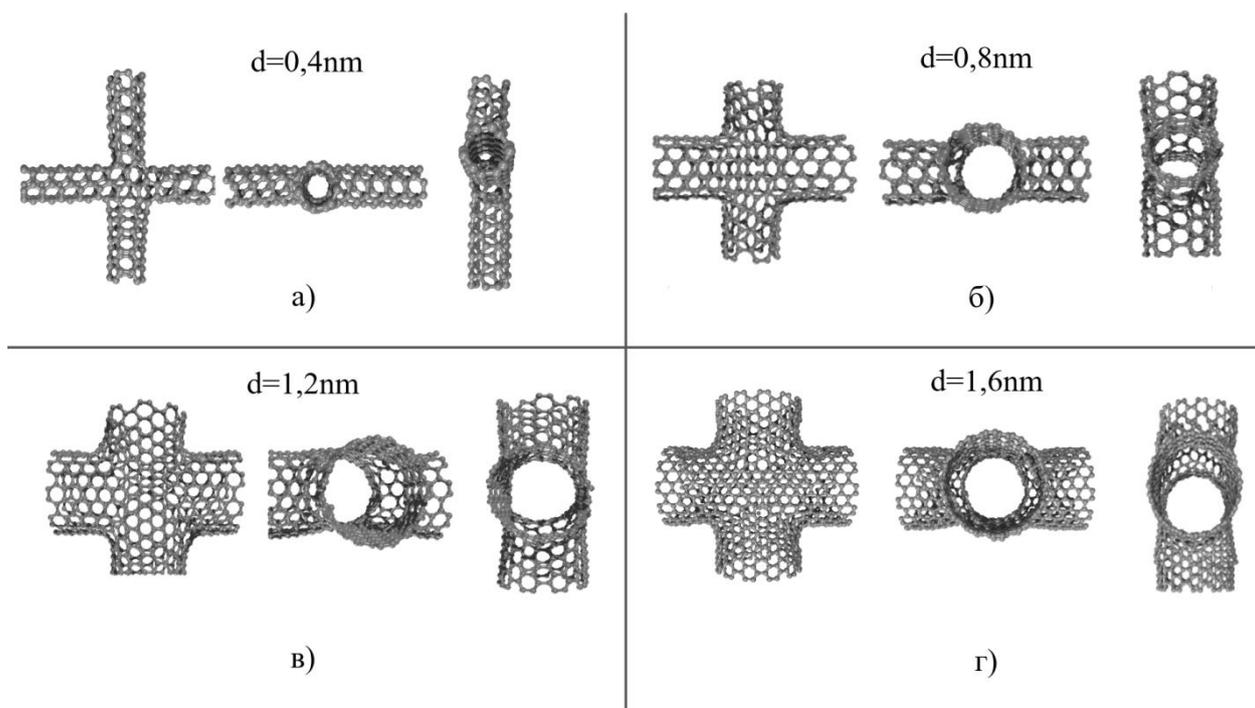


Рис. 1. - Модели бесшовного X-образного соединения диаметром различных диаметров в программном комплексе KVAZAR в трех плоскостях.

На рис. 1 изображены модели X-образного соединения различных диаметров. При моделировании соединений наблюдалось образование дефектов Стоуна-Уэлса (пятиугольники и семиугольники) и дефектов двойной вакансии (восьмиугольники). Число дефектов приведено в таблице 1.

Таблица 1. – Количество топологических дефектов.

	Диаметр соединения- 0.4 нм	Диаметр соединения- 0.8 нм	Диаметр соединения- 1.2 нм	Диаметр соединения- 1.6 нм
Дефект вида «пятиугольник»	0	3	17	15
Дефект вида «семиугольник»	2	6	16	16
Дефект вида «восьмиугольник»	3	2	3	5

Далее, для более точной проверки модели атомного каркаса, была произведена оптимизация соединений методом DFTB с вычислением

самосогласованного заряда. Модель четырехтерминального устройства на базе X-образного соединения углеродных нанотрубок его эквивалентная схема имеет вид, представленный на рис. 2.

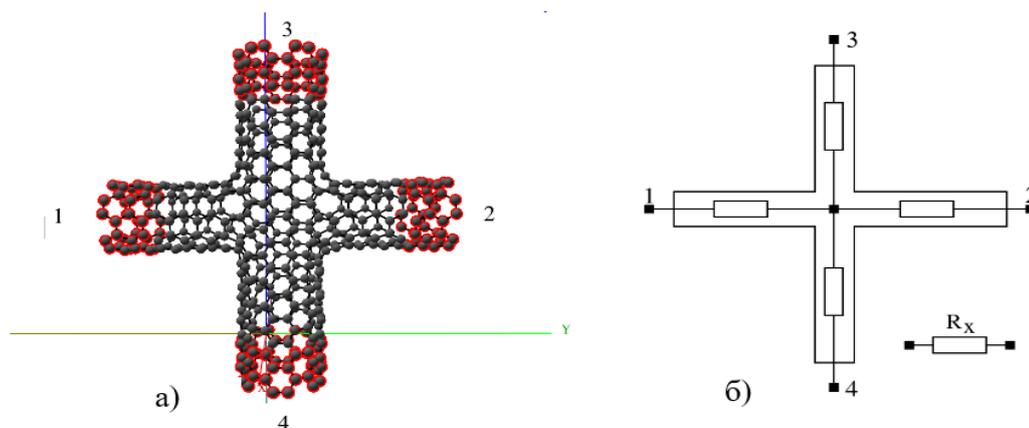


Рис. 2 - Модель четырехтерминального электронного устройства (а) и его эквивалентная схема (б).

На рис. 2 (а) выделенная область принадлежит полубесконечным терминалам. Эквивалентная схема четырехтерминального устройства (б) имеет вид четырех резистивных элемента  $R_x$ , величина которых определяется контактным сопротивлением между парой терминалов.

В третьей главе описывается электронный транспорт в структуре, состоящей из 4 терминалов и X-образного соединения. Для построения четырехтерминального устройства на базе X-образного соединения используются электроды, представляющие собой полубесконечные идеальные нанотрубки. В рамках метода неравновесных функций Грина-Келдыша осуществлялось вычисление функции пропускания канала вблизи уровня Ферми между парами электродов:  $T_{12}(E)$ ,  $T_{13}(E)$ ,  $T_{14}(E)$ ,  $T_{23}(E)$ ,  $T_{24}(E)$ ,  $T_{34}(E)$ . Уровень Ферми был определен в рамках DFTB метода для нанотрубок диаметра 0.4 нм, 0.8 нм, 1.2 нм, 1.6 нм:

$$\begin{aligned}
 f_{0.4}(E) &= -3.7934 \text{ эВ}, & f_{0.8}(E) &= -5.1664 \text{ эВ}, \\
 f_{1.2}(E) &= -5.0442 \text{ эВ}, & f_{1.6}(E) &= -5.0486 \text{ эВ}
 \end{aligned}$$

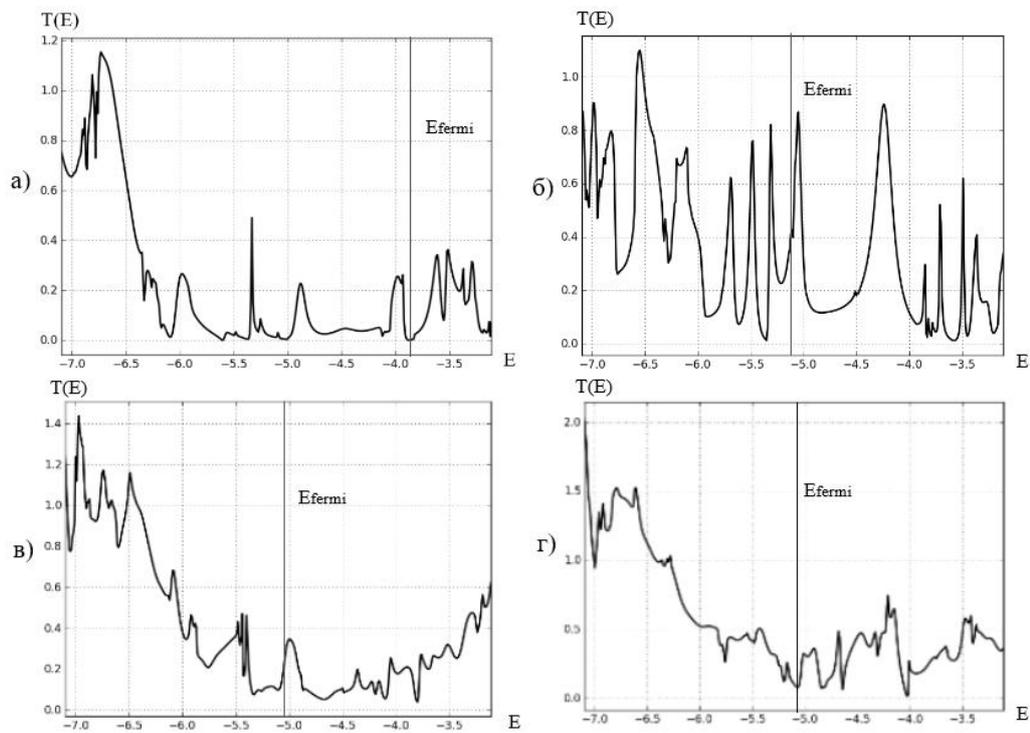


Рис. 7 - Функции пропускания X-образных соединений между терминалами 1\_2 для диаметров 0.4 нм(а), 0.8 нм(б), 1.2 нм(в), 1.6 нм(г).

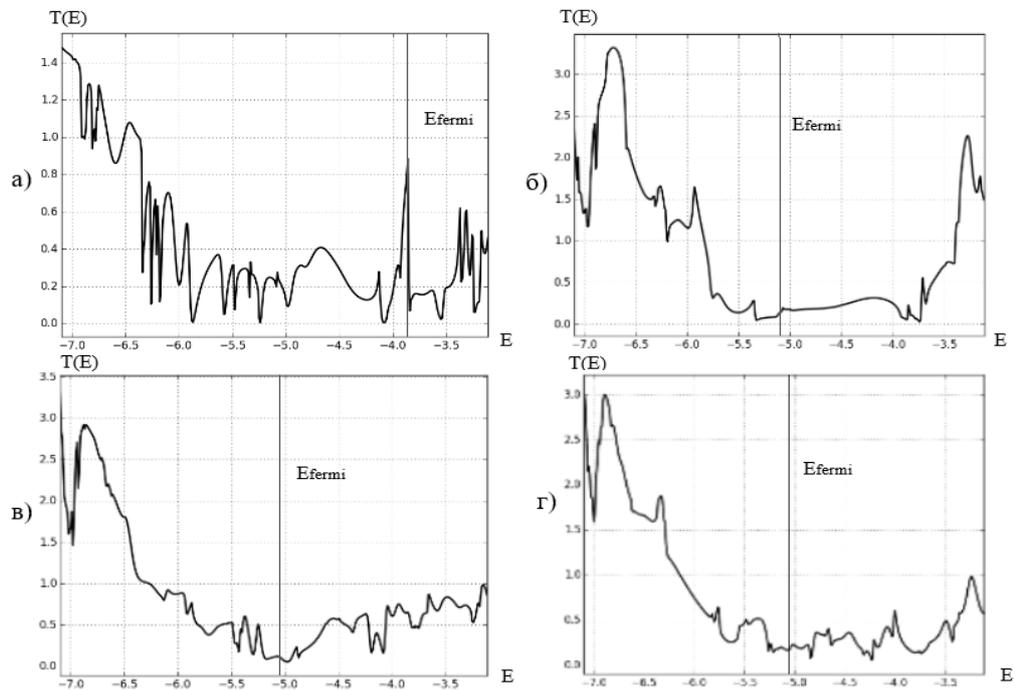


Рис. 8 - Функции пропускания X-образных соединений между терминалами 3\_4 для диаметров 0.4 нм(а), 0.8 нм(б), 1.2 нм(в), 1.6 нм(г).

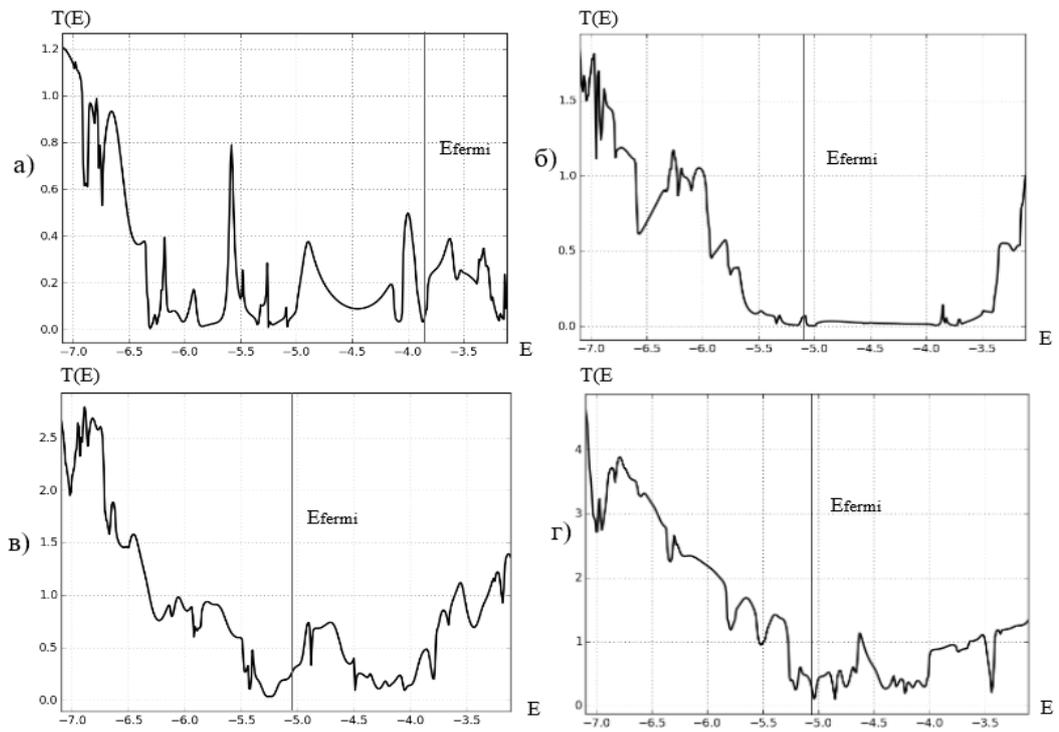


Рис. 9 - Функции пропускания X-образных соединений между терминалами 1\_3 для диаметров 0.4 нм(а), 0.8 нм(б), 1.2 нм(в), 1.6 нм(г).

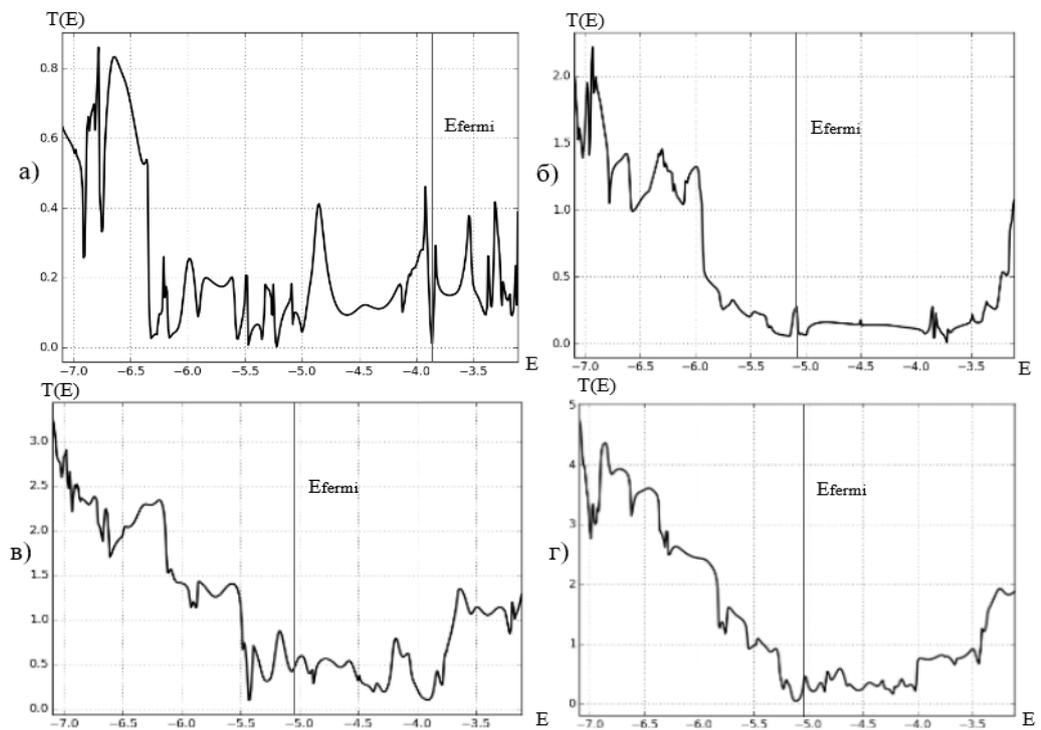


Рис. 10 - Функции пропускания X-образных соединений между терминалами 1\_4 для диаметров 0.4 нм(а), 0.8 нм(б), 1.2 нм(в).

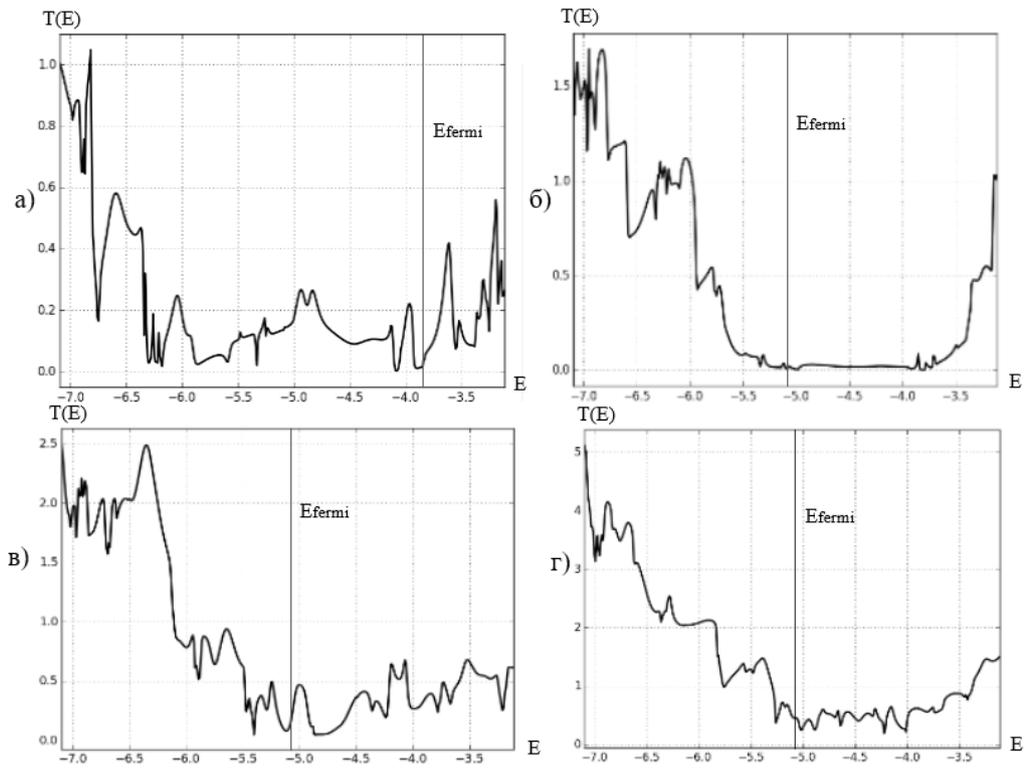


Рис. 11 - Функции пропускания X-образных соединений между терминалами 2\_3 для диаметров 0.4 нм(а), 0.8 нм(б), 1.2 нм(в), 1.6 нм(г).

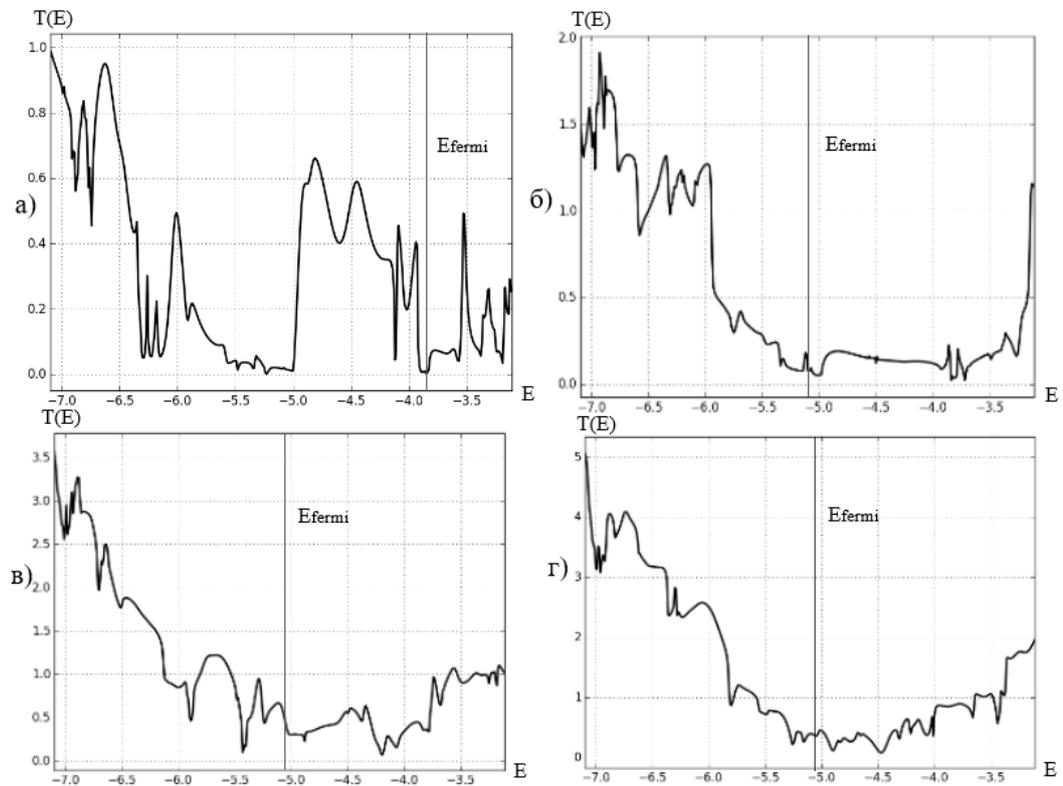


Рис. 12 - Функции пропускания X-образных соединений между терминалами 2\_4 для диаметров 0.4 нм(а), 0.8 нм(б), 1.2 нм(в), 1.6 нм(г).

На рисунках 7-12 приведены функции пропускания для различных терминалов X-образного соединения. Функция пропускания имеет вероятностный характер прохождения электрона на определенном энергетическом уровне. Пики с высокой амплитудой, разделенные интервалами энергии, где коэффициент пропускания становится пренебрежимо малым, определяют сильную локализованность электронных волновых функций. Исходя из рассмотрения графиков, можно заметить, что значение коэффициента пропускания растет с увеличением диаметра структуры. Учитывая тот факт, что проводимость пропорциональна пропусканию, можно предположить, что проводимость структуры так же будет возрастать. Для сравнения результатов усредним значения функции пропускания по всем терминалам (Рис. 13).

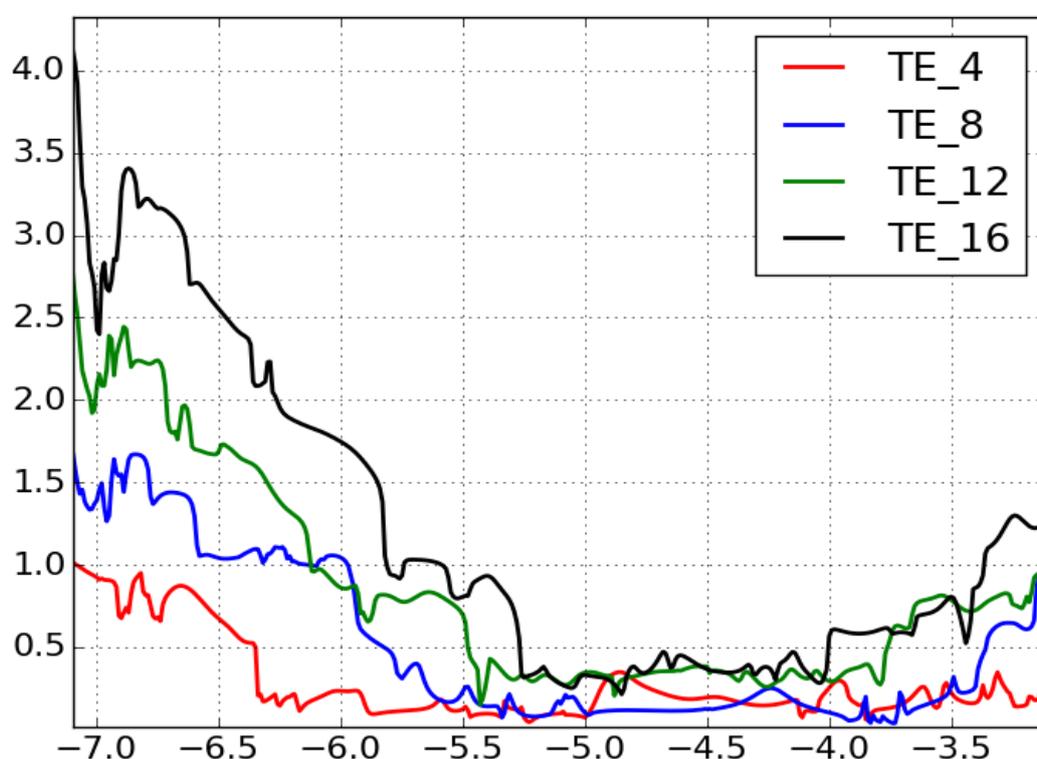


Рис.13 – Усредненные значения функций пропускания по всем терминалам для различных диаметров.

Проводимость канала многотерминального устройства, соответствующая низким значениям приложенного между истоком и стоком напряжения, определяется как:

$$G = 2G_0 \int T(E) F_T(E) dE, \quad (1)$$

где  $G_0 = \frac{e^2}{h}$  - квант проводимости, множитель 2 учитывает вырождение по спину,  $F_T(E)$  – функция, учитывающая влияние температурного уширения:

$$F_T(E) = \frac{1}{4k_B T} \operatorname{sech}^2\left(\frac{E-\mu}{2k_B T}\right), \quad (1.1)$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $\mu$  – значение энергии Ферми,  $T$  – температура моделирования системы. Величины сопротивлений соединения вычисляются по формуле:

$$R_{ij} = \frac{1}{G_{ij}} \quad (1.2)$$

где  $i, j$  – номера терминалов. Значения сопротивлений X-образных соединений различного диаметра приведены в таблице 2 (D–диаметр соединения, T–терминалы устройства).

Таблица 2 – Величины сопротивлений X-образного соединения.

	R(D=0.4 нм), кОм	R(D = 0.8 нм), кОм	R(D = 1.2 нм), кОм	R(D = 1.6 нм), кОм
T – 1_2	328	41	55	39
T – 3_4	66	139	128	52
T – 1_3	61	784	46	71
T – 1_4	76	148	25	63
T – 2_3	169	764	41	31
T – 2_4	220	140	29	32
R <sub>x</sub>	77	168	27	24

Величина сопротивления  $R_x$  эквивалентной схемы четырехтерминального устройства на базе X-образного соединения рассчитывается по формуле:

$$R_x = \frac{R_{cp}}{2} \quad (1.3)$$

где  $R_{cp} = \frac{\sum R_i}{6}$  усредненное значение сопротивления по всем парам терминалов.

## Заключение

В результате данного исследования были смоделированы X-образные соединения различных диаметров методом молекулярной динамики с использованием потенциала REBO. В рамках метода неравновесных функций Грина-Келдыша найдены функции пропускания для различных пар терминалов. Контактное сопротивление определялось вблизи уровня Ферми с учетом влияния температурного уширения уровней. Согласно полученным данным было определено, что величина контактного сопротивления X-образного соединения уменьшается с ростом диаметра структуры. Однако при малых диаметрах структуры бывают отклонения от зависимости. При диаметрах соединений порядка 0.4 - 0.8 нм электронные свойства имеют иную зависимость от диаметра нанотрубок. Возможно, причиной этого отклонения является топологическое строение структуры, а именно дефекты Стоуна-Уэлса и дефекты двойной вакансии, которые образуются при моделировании соединений.

Список литературы:

1. *Buldum A., Lu J. P. Contact resistance between carbon nanotubes* // *Physical Review B*. — 2001. — Vol. 63. — P. 161403.
2. *Глухова О., Савостьянов Г. Учебный практикум по моделированию наноструктур в программном комплексе Kvazar.* / под ред. В. М. Аникин. — 2015. — С. 4 — 10. — URL: [http://elibrary.sgu.ru/uch\\_lit/1352.pdf](http://elibrary.sgu.ru/uch_lit/1352.pdf).
3. *Заводинский В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем* // ФИЗМАТЛИТ. — 2013. — С. 18 — 21.
4. *Ryndyk D. A. Theory of Quantum Transport at Nanoscale. An Introduction.* — Springer International Publishing AG, 2016. — 246 pp. — (Springer Series in Solid-State Sciences).

5. *Bettinger H. F.* The Reactivity of Defects at the Sidewalls of Single-Walled Carbon Nanotubes: The Stone–Wales Defect // *Journal of Physical Chemistry B.* — 2005. — Vol. 109, no. 15. — P. 6922–6924.