

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 механической деформации на электронные свойства графена

АВТОРЕФЕРАТ

ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ БАКАЛАВРА

студента 4 курса 423 группы
направления 11.03.03 «Конструирование и технология электронных средств»
Воронцова Вадима Дмитриевича

Научный руководитель

к.ф.-м.н. _____ В.В.Шунаев

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор _____ О.Е. Глухова

Саратов 2018

Содержание

Введение.....	3
1. Свойства деформированного графена.....	4
1.1 Применение графена в электронных приборах.....	4
1.2 Чем волнистый графен лучше плоского	4
1.3 Зонная структура графена.....	5
2. Электронные свойства деформированного графена.....	6
2.1 Прогиб графенового листа платиновой пирамидой.....	6
2.2 Электронное строение деформированной графеновой наночастицы	6
2.3 Динамика дефекта Стоуна–Уэльса в графене.....	7
2.4 Модификация электрических свойств графена методом субстратно-индуцированной наномодуляции.....	8
2.5 Изображение графенового участка на платиновой подложке, полученное с помощью сканирующего туннельного микроскопа.....	9
2.6 Чрезвычайно деформированный графен.....	10
Заключение.....	11
Список используемых источников.....	12

Введение

Актуальность темы данной дипломной работы.

Работа связана с тем, что на данный день механические и электронные свойства графена дают большие перспективы его практического применения в различных отраслях науки и техники . В частности, графен сегодня применяется при разработке и создании нано-резонаторов. Пиксели, созданные с помощью этой технологии в десять раз меньше, чем то, что сейчас на мониторе компьютера. Но на данный момент, вместе с экспериментальными методами исследования графена активно используется теория и компьютерное моделирование. Поскольку промышленное получение графена до сих пор является трудоемким и дорогостоящим процессом.

Ключевым вопросом данной работы является влияние дефектов на электронные свойства графена. Наличие механических дефектов графена позволяют менять такие характеристики электронного строения графена, как дисперсионная энергия и плотность электронных состояний . Однако точно не известно как сильно влияют эти дефекты на электронные свойства (по сравнению с идеальным графеном) и влияют на какие-либо другие.

Цель данной дипломной работы: узнать изменение электронных свойств графена при его деформации. Для достижения цели использовался анализ литературных источников по теме

1. Свойства деформированного графена

1.1 Гибкая электроника

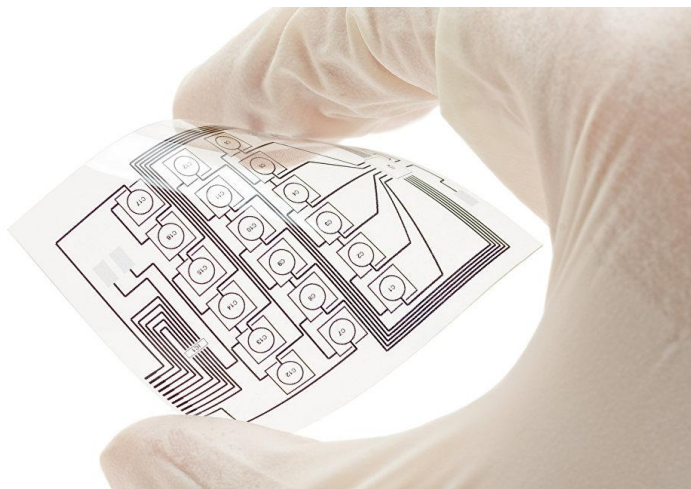


Рис.1 Гибкая (растягиваемая, изгибаемая) электроника

Изображение с сайта: www.sib-science.info

Гибкая (растягиваемая, изгибаемая) электроника графен — полуметалл, который можно получить из очищенного графита. Он может растягиваться на 25%, изгибаться, сворачиваться, при этом его свойства останутся почти неизменными.

1.2 Чем волнистый графен лучше плоского

Исследователи и теоретически, и экспериментально доказали, что гребни "волн" оказались проводящими, легко позволяя электронам путешествовать по графену, а остальная (плоская) поверхность стала полупроводниковой. Грубо говоря, обычный графен слишком "плоский", чтобы по желанию затруднять электронам движение в ту или иную сторону.

1.3. Зонная структура графена

Электронные свойства графена зависят от его двумерной структуры и свойств ее полной симметрии. Решетка состоит из двух треугольных подрешеток, поэтому электронный спектр графена характеризуется двумя ветвями, которые касаются друг друга в так называемых точках Дирака, т.е. в двух неэквивалентных точках K и K' , расположенных в углах гексагональной первой зоны Бриллюэна. Зона Бриллюэна — множество точек в обратном пространстве, не пересекающих ни одной брэгговской плоскости (K и K').

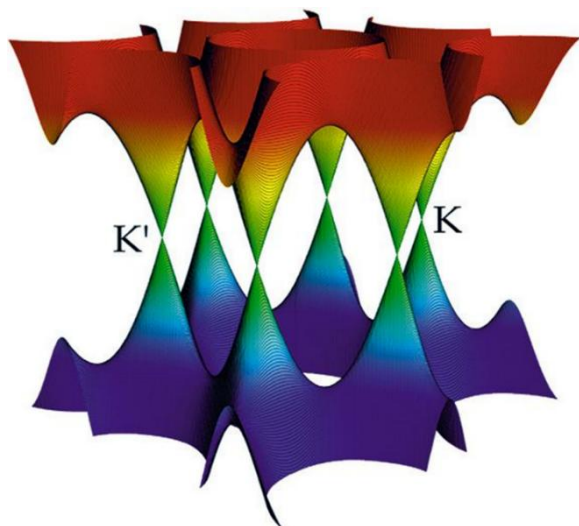


Рис.2 Зонная структура графена. Зона проводимости касается валентной зоны в особых точках K и K' первой зоны Брлюэна.

Изображение с сайта: www.rusgraphene.ru

2. Электронные свойства деформированного графена

2.1 Прогиб графенового листа платиновой пирамидой.

Для исследования электронных свойств деформированной графеновой наночастицы использовался метод сильной связи. После каждого из этапов прогиба графена осуществлялись оптимизация исследуемой

структуры и расчет энергетического спектра, по которому определялись: потенциал ионизации и энергетическая щель.

Было обнаружено, что с ростом прогиба графена потенциал ионизации снижается. Таким образом, деформация прогиба способствует улучшению эмиссионной способности графеновых листов. Энергетическая щель с ростом прогиба практически не меняется, а значит графен остается бесщелевым проводником.

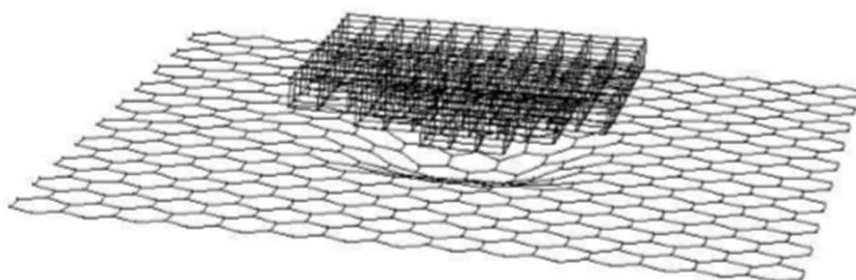


Рис.3 Прогиб графенового листа платиновой пирамидой. Игла атомно-силового микроскопа моделировалась платиновой пирамидой, имеющей гранецентрированную кубическую решетку. Изображение с сайта: www.sgu.ru

2.2 Электронное строение деформированной графеновой наночастицы

Для исследования электронных свойств деформированной графеновой наночастицы использовался квантовохимический метод сильной связи. После каждого из этапов прогиба графена осуществлялись оптимизация исследуемой структуры и расчет неравновесного энергетического спектра, по которому определялись энергетические характеристики: потенциал ионизации и энергетическая щель.

Из рис. 4.1 видно, что потенциал ионизации графенового листа по мере его прогиба изменяется немонотонно. Его плавное снижение сменяется незначительным ростом. При дальнейшем увеличении прогиба наблюдается резкое снижение потенциала ионизации. Снижение потенциала ионизации

графена с ростом прогиба свидетельствует об общей тенденции снижения работы выхода материала. Следовательно, деформация прогиба способствует улучшению эмиссионной способности графеновых листов.

Из рис. 4.2 видно, что энергетическая щель графенового листа изменяется немонотонно с ростом деформации. Резкий спад уже при незначительном прогибе сменяется нелинейным ростом в диапазоне последующим убыванием при дальнейшем прогибе листа. Однако, учитывая полученный диапазон значений данной характеристики, можно заключить, что проводимость деформированного графенового листа меняется незначительно. Графен, подвергнутый деформации прогиба, сохраняет свойства хорошего металлического проводника

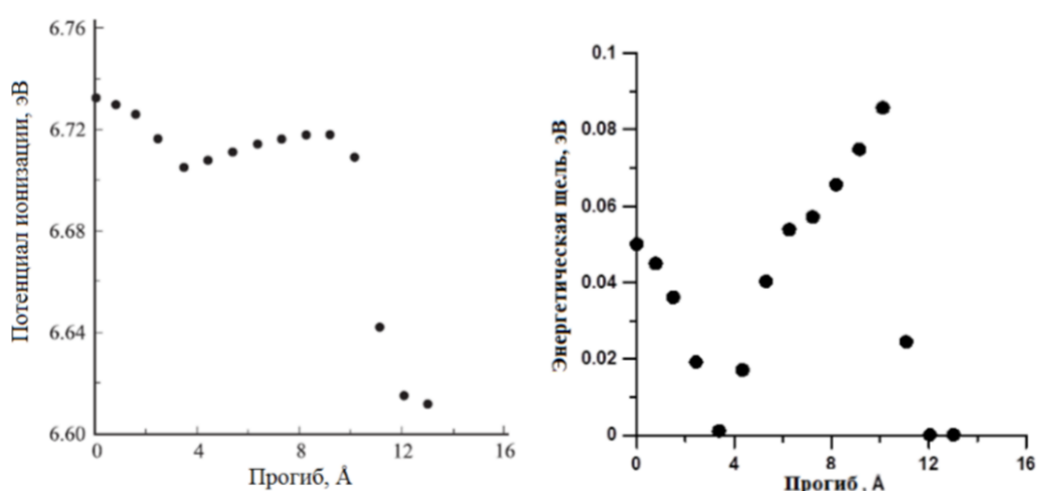


Рис.4 Зависимость потенциала ионизации графенового листа от величины прогиба и зависимость энергетической щели графенового листа от величины прогиба. Изображения с сайта: www.sgu.r

2.3 Динамика дефекта Стоуна–Уэльса в графене

Дефекты кристаллической решетки оказывают большое влияние на электронные свойства твердых тел. Графен также не является исключением, благодаря двумерной структуре графена возможно наличие в нем

топологических дефектов, не возможных в трехмерных материалах. Дефект Стоуна–Уэльса самый простой из них. Появляется он при трансформации SW— повороте одной из связей C–C на угол 90° , в результате чего четыре шестиугольника преобразуются в два семиугольника и два пятиугольника.

Из соображений симметрии ясно, что получается две вырожденные по энергии синусоподобные конфигурации дефекта SW, различающиеся знаком поперечных координат атомов (т. е. фактически фазой) и получающиеся друг из друга путем зеркального отражения относительно плоскости исходного монослоя.

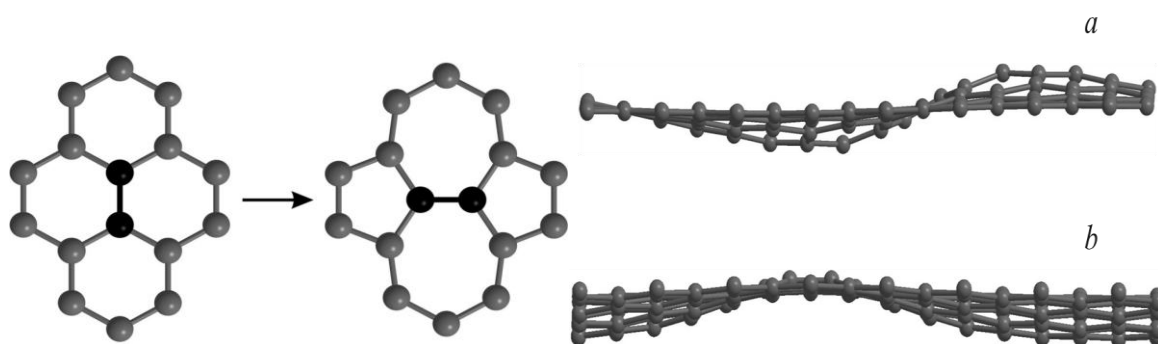


Рис.5 Трансформация Стоуна–Уэльса в гексагональной решетке. Синусоподобная (a) и косинусоподобная (b) конфигурации дефекта Стоуна–Уэльса в графене (вид сбоку).

Изображение с сайта: www.journals.ioffe.ru

2.4 Модификация электрических свойств графена методом субстратно-индуцированной наномодуляции

Периодически модулированный графен (ПМГ), образованный нанопереходными поверхностями, глубоко модифицирует внутренние электронные свойства графена.

Влияние периодического, переменного контакта с поверхностью подложки изучалось в терминах деформации, вызванной изгибом графена и легированием посредством химических взаимодействий с атомами подложки. Расчеты электронной структуры, выполненные на модели PMG, показывают, что можно настроить ширину запрещенной зоны в пределах 0,14-0,19 эВ, рассматривая как периодический механический изгиб, так и химическую координацию поверхности. Поэтому ПМГ можно рассматривать как еще один шаг к созданию техники зазоров графена.

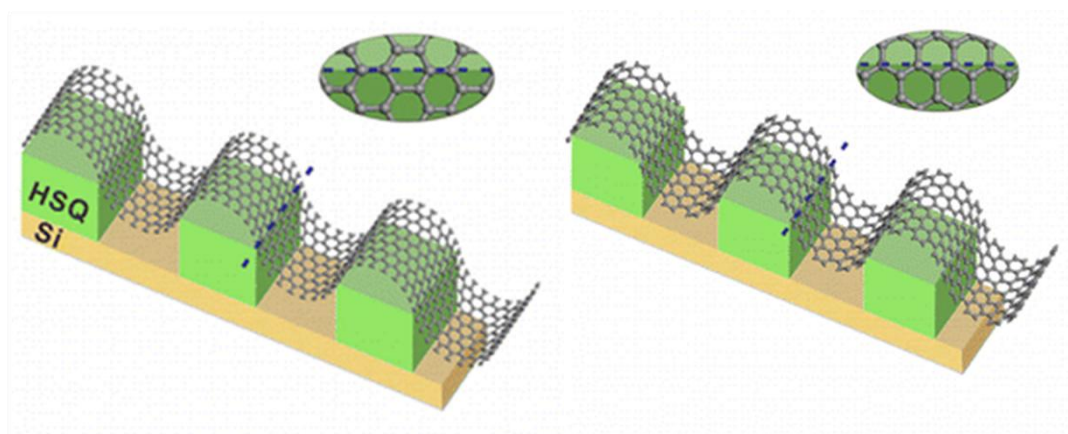


Рис.6 Модификация электрических свойств графена методом субстратно-индуцированной наномодуляции.

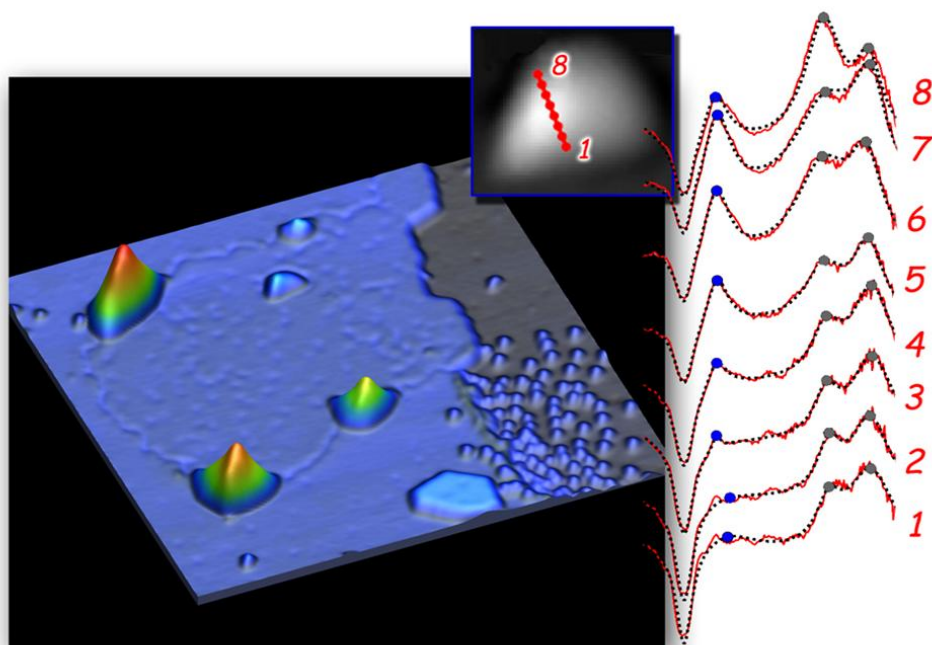
Изображения с сайта: www.pubs.acs.org

2.5 Изображение графенового участка на платиновой подложке, полученное с помощью сканирующего туннельного микроскопа.

Графен покрылся микроскопическими «пузырьками» (рисунок 7), размер которых у основания изменялся от 4 до 10 нм, а их высота достигала 2 нм; в некоторых случаях результаты измерений свидетельствовали об

образовании псевдомагнитного поля с гигантской индукцией в 300 Тл и выше.

Обнаруженный эффект может использоваться и для изучения свойств электронов в графене, помещённых в магнитные поля с недоступными экспериментаторам параметрами, и в практических целях — для изменения электронных характеристик материала.



*Рис.7*Изображение графенового участка на платиновой подложке, полученное с помощью сканирующего туннельного микроскопа.

Изображение с сайта: www.membrana.ru

2.6 Чрезвычайнодеформированный графен

Изменение структуры углеродного материала, повлекшее за собой изменение его пространственной формы, привело к кардинальному изменению его электронных свойств по сравнению с другими формами углерода.

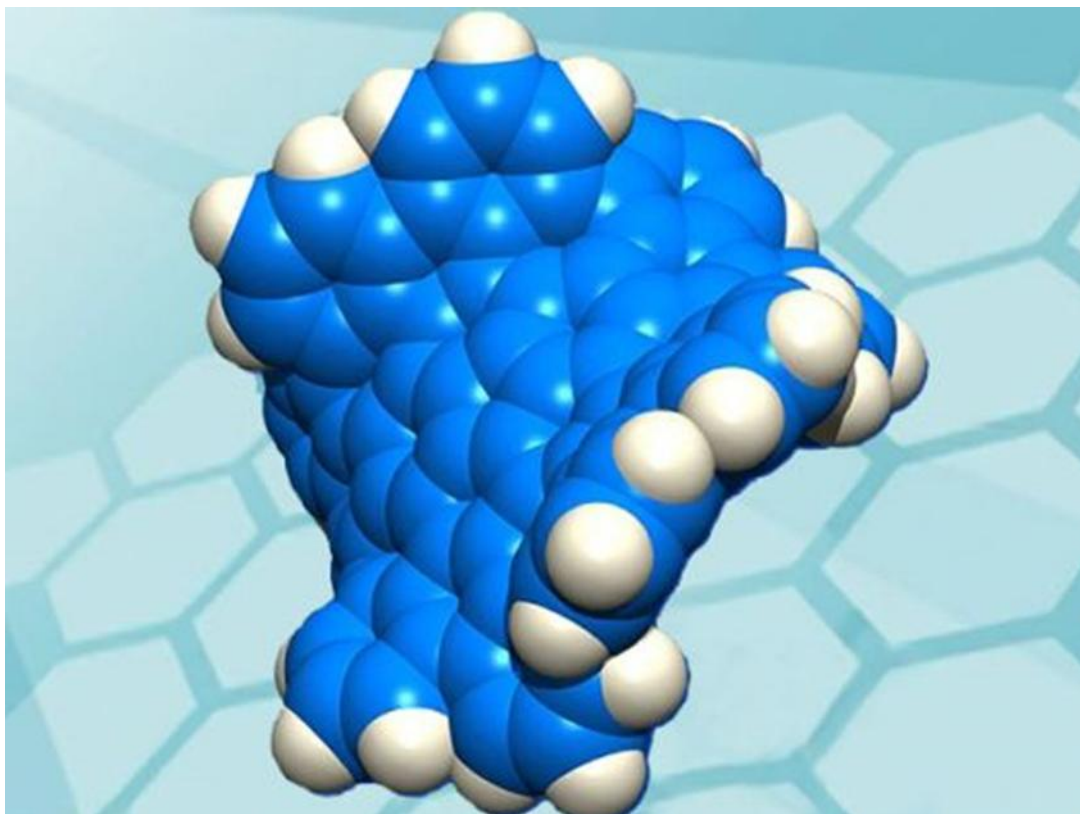


Рис.8 Деформированный графен более слабо подвергается деформации под влиянием внешних механических воздействий

Изображение с сайта: www.senchenko.uaprom.net

Заключение

Были изучены изменения таких характеристик электронного строения графена, как дисперсионная энергия и плотность электронных состояний под воздействием механических дефектов. Показано что графен, подвергнутый деформации прогиба, сохраняет свойства хорошего металлического проводника.

Список использованных источников

1. Галашев А.Е., Рахманова О.Р. Устойчивость графена и материалов на его основе при механических и термических воздействиях//Успехи физических наук. 2014. Т.184. №10. С.1045-1065.
2. URL: <http://www.rusgraphene.ru/single-post/2017/02/03/graphene-conference> (дата обращения 27.05.2017) Загл. с экрана. Яз. рус.
3. URL: <http://www.rusgraphene.ru/graphene2> (дата обращения 24.03.2017) Загл. с экрана. Яз. рус.
4. URL: <http://www.ehorussia.ru/new/node/1115>(дата обращения 24.03.2018) Загл. с экрана. Яз. рус.
5. URL: <http://nuclphys.sinp.msu.ru/nseminar/17.05.11.pdf>(дата обращения 20.04.2018) Загл. с экрана. Яз. рус.
6. X. Peng and R. Ahuja, Nano Lett. 8, 4464 (2008).
7. L. Chen, H. Hu, Yu. Quyang, H.Z. Pan, Y.Y. Sun, and F. Liu, Carbon 49, 3356 (2011).
8. J. Ma, D. Alfe, A. Michaelides, and E. Wang, Phys. Rev. B 80, 033407 (2009).
9. S.N. Shirodkar and U.V. Waghmare, Phys. Rev. B 86, 165401 (2012).
10. В.Ф. Елесин, В.А. Кашурников, Л.А. Опенов, А.И. Подливаев, ЖЭТФ 99, 237 (1991).
11. М.М. Maslov, А.И. Podlivaev, and L.A. Openov, Phys. Lett. A 373, 1653 (2009).
12. L.A. Openov, А.И. Podlivaev, and М.М. Maslov, Phys. Lett. A 376, 3146 (2012).
13. Графен/ А.Г. Алексенко.-М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014.- 168с.: ил., [8] с. цв. вкл.

- 14.URL: <http://www.nanonewsnet.ru/news/2010/istochnik-unikalnykh-svoystv-grafena-mekhanicheskaya-deformatsiya>(дата обращения 24.04.2018) Загл. с экрана. Яз. рус.
- 15.URL: <http://www.dinos.ru/sci/20080801392.html>(дата обращения 28.04.2018) Загл. с экрана. Яз. рус.
- 16.URL: <https://senchenko.uaprom.net/a202558-otkrytie-cherezvychano-deformirovannogo.html>(дата обращения 17.05.2018) Загл. с экрана. Яз. рус.