

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
наименование кафедры

**Исследование влияния паранитротолуола на проводимость массивов
одностенных углеродных нанотрубок с позиции их применения в
сенсорных устройствах**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента(ки) 4 курса 423 группы
направления (специальности) 11.03.03 Конструирование и технология
электронных средств код и наименование направления (специальности)

физического факультета
наименование факультета, института, колледжа

Зогова Андрея Фархадовича
фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

ассистент кафедры
должность, учёная степень, звание

подпись, дата

Савостьянов Г.В.
инициалы, фамилия

Зав.кафедрой

д.ф.-м. н., проф.
должность, учёная степень, звание

подпись, дата

Глухова О.Е
инициалы, фамилия

Саратов 2018

Введение

В настоящее время в мире ведутся исследования, конечной целью которых является создание миниатюрных полупроводниковых сенсоров с низким энергопотреблением и высоким быстродействием, способных определять концентрацию токсичных и взрывоопасных газов. Перспективным типом сенсоров являются так называемые резистивные сенсоры, то есть в которых под действием внешнего фактора изменяется сопротивление того или иного участка электрической цепи.

В настоящее время перспективным и актуальным является применение твердотельных углеродных наноструктур в области физической электроники. С открытием в 1991 году углеродных нанотрубок (УНТ), представляющих собой свернутую в трубку графитовую плоскость, и развитием нанотехнологий в целом появилась возможность создания сенсоров, которые, в связи с высокой чувствительностью электрических свойств углеродных нанотрубок к внешней среде, будут превосходить современные полупроводниковые сенсоры по всем рабочим параметрам, такими как селективность, быстродействие, надежность, миниатюрность.

В исследовании сенсорных свойств углеродных нанотрубок важную роль играет контактное сопротивление. Как правило контактное сопротивление между нанотрубками лежит в широком диапазоне, в зависимости от типа нанотрубок. В структурах, состоящих из большого числа УНТ, имеет место возникновение тока между отдельными УНТ вследствие туннелирования электронов. Исследование флуктуации контактного сопротивления при помещении в структуру посторонней молекулы является важной задачей на пути создания наносенсоров.

Экспериментальное исследование процессов, происходящих в наноструктурах является технологически сложной задачей, поэтому важное место в этой сфере занимает компьютерное моделирование.

В данной работе исследуется квантовый транспорт электронов через УНТ и массивы УНТ с помощью метода функции пропускания.

Целью данной работы является изучение влияния органической молекулы – паранитротолуола на проводимость углеродных нанотрубок.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Выявление закономерностей протекания тока в одностенных углеродных нанотрубках.

2. Установление влияния молекулы паранитротолуола на проводимость углеродных нанотрубок.

Методология и методы исследования:

Для исследования проводимости наноструктур был использован метод функции пропускания. Для нахождения функции пропускания был задействован метод неравновесных функций Грина-Келдыша. Перед тем, как исследовать проводимость, была проведена оптимизация исследуемых структур с использованием метода теории функционала плотности в приближении сильной связи (DFTB).

ВКР состоит из введения, 3-х разделов, заключения и списка литературы, содержащего 13 ссылок. Общий объем ВКР составляет 48 страниц.

Названия разделов:

1. Электронный транспорт в наноразмерных структурах;

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

3. Исследование влияния паранитротолуола на контактное сопротивление между углеродными нанотрубками

ВКР носит теоретический характер, предметом исследования являются структуры УНТ в конфигурации с молекулами паранитротолуола. Первый

раздел посвящен описанию методов решения задачи квантового транспорта. Второй раздел посвящен описанию использованного в работе метода оптимизации структур DFTB. В третьем разделе приведен основной ход работы и результаты исследования.

Основное содержание работы

В первой главе приведено решение задачи квантового транспорта в наноразмерных структурах. Для описания квантового транспорта в наноразмерных проводниках нельзя применить закон Ома. Закон Ома сам по себе имеет множество пределов применимости, однако в нашем случае основное ограничение – это неспособность описать сопротивление в случаях, когда проводник имеет длину меньше, чем длина свободного пробега электрона. В таких случаях, электрон начинает проявлять свои волновые свойства.

Формализм Ландауэра-Буттикера позволяет описать квантовый транспорт с помощью функции пропускания, или функции прозрачности $T(E)$. Зная функцию пропускания, можно найти ток, протекающий через канал, а также сопротивление структур. Функцию пропускания можно вычислить с помощью метода неравновесных функций Грина-Келдыша.

Нашу структуру можно рассматривать как «полупроницаемую» мембрану, разделяющую два электронных резервуара (исток и сток), а функция пропускания будет определять при таком рассмотрении проницаемость этой мембраны для электронов с энергией E .

Во второй главе дается описание метода теории функционала плотности в приближении сильной связи (DFTB). Данный метод был использован в работе с целью определить оптимальную геометрию и распределение электронной плотности изучаемых структур. Метод DFTB (Density-functional tight-binding) основан на теории DFT (Теория функционала плотности), сформулированной Хоэнбергом, Коном и Шэмом, а также на методе сильной связи. DFTB представляет собой разложение суммарной энергии Кона-Шэма

теории функционала плотности по ряду Тейлора. Метод позволяет рассчитывать матричные элементы гамильтониана структур. Также гамильтониан может быть модифицирован путем введения в расчет самопроизвольного перераспределения зарядов Милликена(SCC)

Третья глава посвящена исследованию проводимости структур УНТ. Исследование структуры проходило в два этапа: первый этап представлял из себя создание с помощью графического интерфейса программного пакета Mizar необходимых структур с дальнейшей её оптимизацией методом DFTB. Во втором этапе уже оптимизированная структура запускалась на расчёт функции пропускания в программном пакете Mizar. Зная функцию пропускания, можно определить проводимость канала с помощью формулы Ландауэра

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

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

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

где k_B – постоянная Больцмана, μ – электрохимический потенциал(энергия Ферми), T – температура.

Сопротивление канала определяется, соответственно, как величина, обратная проводимости.

Одиночные УНТ без дефектов

Основная идея исследования сенсорных свойств УНТ – сравнение проводимости каналов в случае отсутствия молекулы паранитротолуола и в случае присутствия. Таким образом, прежде чем исследовать структуры УНТ в системе с молекулой паранитротолуола, необходимо для начала определить проводимость канала УНТ в отсутствии посторонних молекул. Общий вид исследуемых бездефектных структур изображен на рис. 1

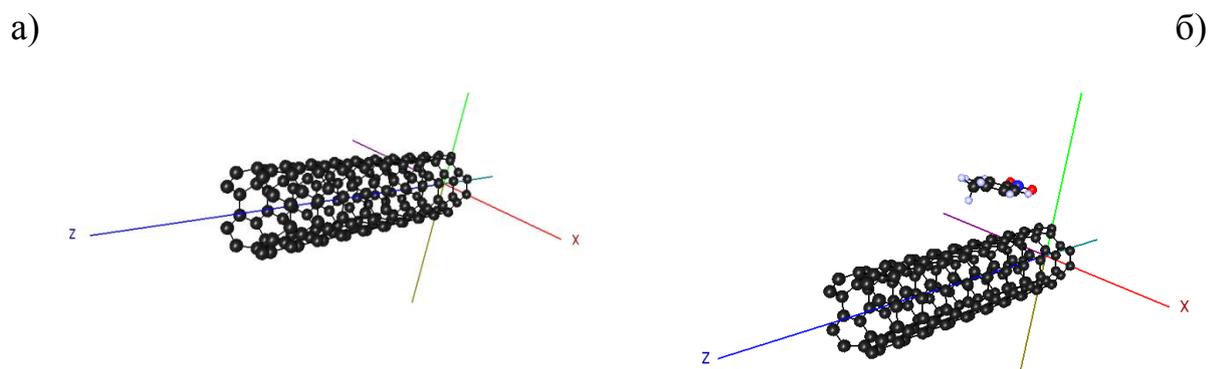


Рисунок 1 - Смоделированная и оптимизированная методом DFT Вуглеродная нанотрубка без посторонних молекул (а), с расположенной рядом молекулой паранитротолуола(б)

Также для усиления влияния внешних молекул на проводимость УНТ были добавлены дополнительные молекулы паранитротолуола.

По формулам (1) были определены значения сопротивлений одиночных бездефектных УНТ (таблица 1):

Молекула паранитротолуола отсутствует	Присутствие одной молекулы паранитротолуола	Присутствие множества молекул паранитротолуола
6510 Ом	6526 Ом	6679 Ом

Таблица 1 - Сопротивление одиночной УНТ без дефекта

Одиночные УНТ с дефектами

В случае с дефектными УНТ исследовались УНТ с дефектом двойной вакансии. Дефект двойной вакансии характеризуется отсутствием в структуре нанокластера двух смежных атомов. Данный дефект приводит к перестраиванию четырех смежных шестиугольников в два пятиугольника и один восьмиугольник. Отличие сегмента идеального нанокластера от сегмента, содержащего дефект двойной вакансии, представлено на рис. 2.

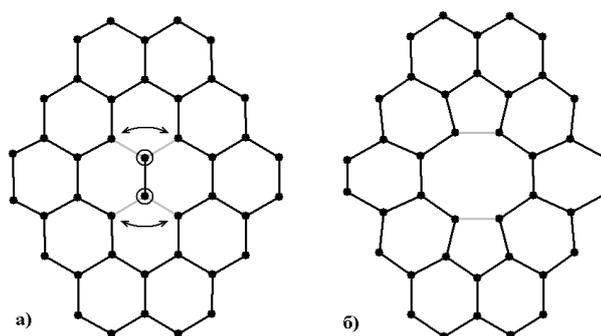


Рисунок 2 - Изменение структуры нанокластера в окрестности дефекта двойной вакансии: а) сегмент идеального нанокластера, б) сегмент нанокластера, содержащий дефект. Серым цветом и стрелочками помечены те связи, которые перестраиваются при появлении дефекта

Результаты расчёта контактного сопротивления дефектных УНТ представлены в таблице 2.

Молекула паранитротолуола отсутствует	Присутствие одной молекулы паранитротолуола
9814 Ом	12019 Ом

Таблица 2 - Сопротивление одиночной УНТ с дефектом

Массивы УНТ

Исследование массивов углеродных нанотрубок, в отличие от проводимости одиночных УНТ, представляет собой более сложную задачу. Здесь, даже в системах без внешних молекул, таких как паранитротолуол, присутствует внешнее влияние со стороны других нанотрубок системы.

Рассмотрим систему, состоящую из двух УНТ без молекулы (Рис.3а) и с молекулой паранитротолуола(Рис.3б). Такие структуры являются четырехтерминальными, поэтому они будут иметь четыре функции пропускания. Нас интересует функции пропускания между терминалами разных нанотрубок, так как функция пропускания между двумя терминалами одной нанотрубки не имеет принципиального различия с вышерассмотренными случаями с одиночными УНТ.

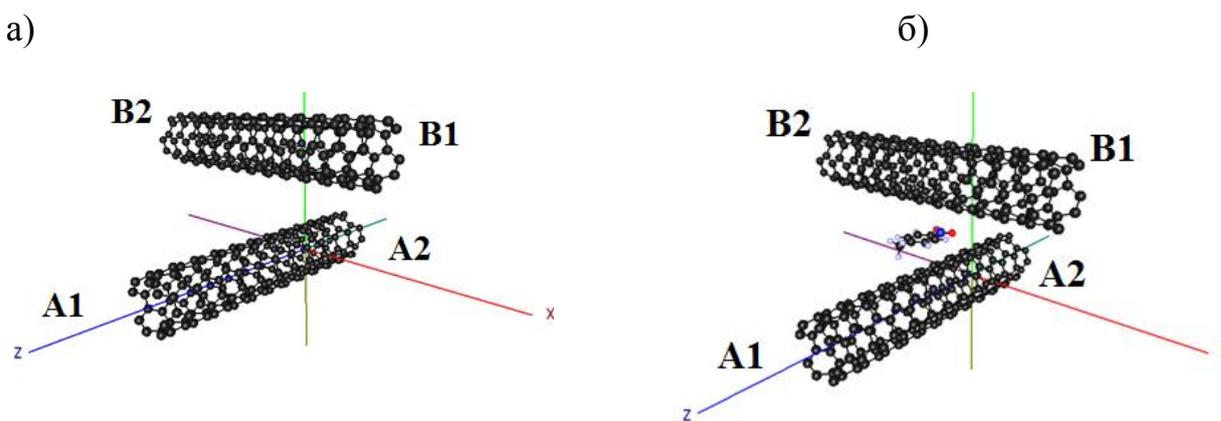


Рисунок 3 Система из двух УНТ без внешних молекул(а), с молекулой паранитротолуола(б)

Контактные сопротивления между различными терминалами бездефектных УНТ приведены в таблице 3

Номера терминалов	Молекула паранитротолуола отсутствует	Присутствие одной молекулы паранитротолуола	Присутствие множества молекул паранитротолуола
A1-B1	71 МОм	70.9 МОм	71 МОм
A1-B2	134 МОм	132 МОм	136 МОм
B1-A2	132 МОм	129 МОм	132 МОм
B2-A2	75.2 МОм	75.6 МОм	75.4 МОм

Таблица 3 -Сопrotивление многотерминальной системы УНТ без дефектов

Контактные сопротивления между различными терминалами дефектных УНТ приведены в таблице 3. Исследовались УНТ с дефектом двойной вакансии.

Номера терминалов	Молекула паранитротолуола отсутствует	Присутствие одной молекулы паранитротолуола	Присутствие множества молекул паранитротолуола
A1-B1	27.6МОм	42МОм	43.9МОм
A1-B2	33 МОм	52МОм	53МОм
B1-A2	57.7 МОм	86МОм	91.6МОм
B2-A2	61.2 МОм	85.5МОм	80.8МОм

Таблица 4 -Сопrotивление многотерминальной системы УНТ с дефектами

Заключение

В ходе компьютерного моделирования было установлено:

- При исследовании контактного сопротивления между терминалами одной УНТ во всех случаях было замечено, что присутствие молекулы паранитротолуола уменьшало проводимость;
- При исследовании массивов УНТ наблюдалось сильное влияние дефектов на контактное сопротивление. В случае с бездефектными УНТ контактное сопротивление между терминалами разных УНТ уменьшалось, однако уменьшение происходило только между теми терминалами, между которыми была помещена молекула паранитротолуола. В случае с дефектными УНТ контактное сопротивление между терминалами разных УНТ увеличивалось, однако не было выявлено определенной зависимости между контактным сопротивлением между терминалами разных УНТ и расположением относительно них молекул паранитротолуола;
- Изменение проводимости дефектных УНТ оказалось более существенным по сравнению с бездефектными УНТ. Таким образом можно сделать вывод, что дефектные УНТ будут лучше функционировать в качестве чувствительных материалов сенсоров

Используемые источники

1. Датта С. Квантовый транспорт. От атома к транзистору. — Журнал "Регулярная и хаотическая динамика", 2009. — 532 с.
2. Prabhakar R. Bandaru «Electrical Properties and Applications of Carbon Nanotube Structures» // Journal of Nanoscience and Nanotechnology Vol.7, 1–29, 2007.
3. A. J. SalehAhammad, Jae-Joon Lee, Md. AminurRahman «Electrochemical Sensors Based on Carbon Nanotubes»//Sensors, 2009. - URL: <http://www.mdpi.com/journal/sensors>.

4. NirajSinha, Jiazhi Ma, and John T. W. Yeow «Carbon Nanotube-Based Sensors»//Journal of Nanoscience and Nanotechnology- Vol.6, P.573–590, 2006
5. Гаман В.И. «Физика полупроводниковых газовых сенсоров»// Томск: Изд-во НТЛ, 2012. — 112 с.
6. PekkaKoskinen, Ville Makinen «Density-functional tight-binding for beginners»//ComputationalMaterialsScience, 2009.