#### МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

# «САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики

наименование кафедры

## Прогнозирование электронных свойств молекулярного комплекса графен/фуллеренС60

#### АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

студента <u>2</u> курса <u>2</u>	<u> 242 </u> группы		
направления	03.04.03 «Pa	диофизика»	
	код	и наименование направл	ения (специальности)
	физического ф	ракультета	_
наим	енование факультет	а, института, колледжа	
Арал	баева Тимура К	Оргулыевича	
•	фамилия, им	* *	
Научный руководитель			
<u>к.фм. н., доцент</u>			Слепченков М.М.
должность, ученая степень	звание	подпись, дата	инициалы, фамилия
Зав.кафедрой			
д.фм. н., профессо	<b>p</b>		Глухова О.Е.
лолжность ученая степен	· -	полнись дата	фамилия

#### Введение

С момента экспериментального получения графена А. Геймом и К. Новосёловым, в индустрии наносистем стало развиваться новое направление – графеновая наноэлектроника [1,2]. Одним из ключевых векторов развития данного направления является создание на основе графена интегральных схем нового поколения [3-5]. В 2011 году компания ІВМ представила первую в мире графеновую интегральную схему, на базе которой был создан широкополосный радиочастотный смеситель, работающий на тактовой частоте 10 гигагерц [3]. Созданная микросхема продемонстрировала высокую термическую стабильность с незначительным производительности (менее 1 децибела) при изменении температуры от 300 до 400 Кельвин. В дальнейшем, ІВМ представили и другие свои разработки в области графеновой микросхемотехники, в частности микросхемы радиочастотного приемника [4] и кольцевого генератора [5]. Важной научно-технической задачей для дальнейшего развития графеновой схемотехники является достижение возможности управления током в графеновых схемах. Для этого необходимо обеспечить появление в спектре графене запрещенной зоны. Одним из возможных способов открытия щели в спектре графена является его интеграция с другими материалами в композитную структуру, в том числе, с другими углеродными наноматериалами, имеющими энергетическую щель спектра. В частности, можно использовать в сочетании с графеном молекулы фуллерена С<sub>60</sub>, обладающие энергетической щелью порядка 1.7 эВ [6].

Уже получены первые экспериментальные образцы гетероструктур графен/ $C_{60}$  и начато изучение их свойств. Для получения гетероструктур графен/ $C_{60}$  используются различные технологии синтеза этого материала, в частности технология осаждения фуллеренов на графене с помощью метода распыления [7]. Большое внимание исследователей уделяется изучению электронной структуры системы графен/фуллерен  $C_{60}$  [8], а также электронному трансферу между атомами  $C_{60}$  и атомами графена в процессе

взаимодействия двух объектов [9]. В то же время, исследования возможности формирования на основе гарфена и  $C_{60}$  новых композитных материалов с различными физическими свойствами только начинают развиваться.

В связи с этим, целью данной работы является теоретическое прогнозирование новых композитных материалов на основе графена и фуллерена  $C_{60}$  и изучение их электронных свойств.

### Новые 2D/3D композитные материалы на основе монослоев графена и фуллеренов C<sub>60</sub>: атомное строение и электронные свойства

Получение и изучение электронных свойств молекулярного комплекса графен/С60 осуществлялось путем решения следующих задач:

- Построение топологических моделей 2D и 3D композитов графен/С<sub>60</sub> и выявление наиболее энергетически устойчивых конфигураций построенных композитов;
- Расчет электронно-энергетических характеристик исследуемых топологических моделей композита графен/С60;
- Расчет зонной структуры топологических моделей углеродного комплекса графен/С60 и определение энергетической щели спектра исследуемых структур;
- Выявления закономерностей управления электронными свойствами композитов графен/С<sub>60</sub> путем варьирования параметрами топологии структуры.

Объектом исследования был молекулярный комплекс графен/ фуллерен C60 в трех различных конфигурациях.

На исходном этапе работы необходимо было построить серию различных топологических моделей комплекса графен/фуллерен С60 и выявить из них наиболее энергетически устойчивые.

В первом случае рассматривалась объемная структура — трансляция проводилась сразу в трех направлениях по оси X, Y и Z. При этом расстояние между молекулами фуллерена менялось от 3,1 Å до 17,85 Å — 4 структуры оказались энергетически устойчивыми.

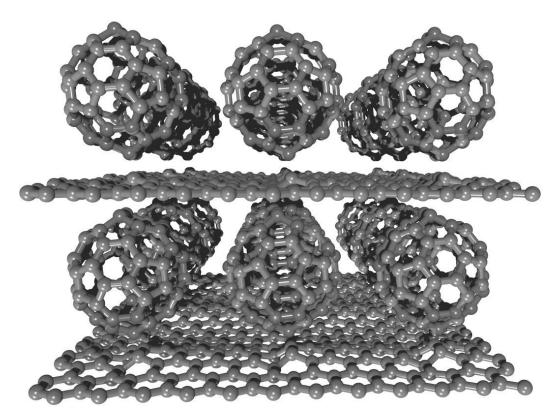


Рис. 1 Фрагмент объемного композита (расстояние между фуллеренами 3,1 Å)

Для изучения электронной структуры комплекса графен/С60 из каждого построенного фрагмента комплекса вырезалась элементарная ячейка.

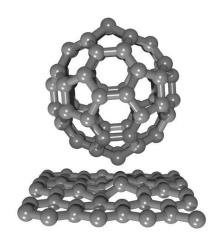


Рис. 2 Супер-ячейка объемного композита (расстояние между фуллеренами 3,1 Å)

Во втором случае исследовалась однослойная структура на базе графена и молекулы  $C_{60}$ , при этом менялось расстояние между фуллеренами – от 3,1 Å и до 17,85 Å. 4 модели оказались энергетически-устойчивыми.

Можно отметить, что минимальное расстояние при котором способна существовать модель вида G/C60/G составляет 8 Å. Все структуры с расстоянием между крайними точками C60 были энергетически не устойчивыми.

В отличие от объемной структуры, в случае с монослойной моделью трансляция задавалась по двум осям - Х и У.

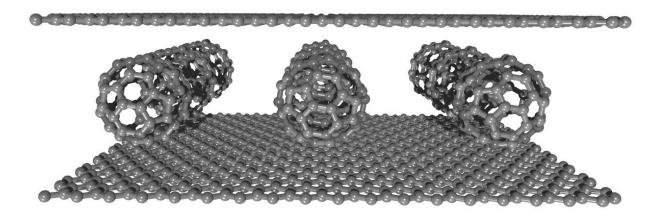


Рис. 3 Фрагмент монослойного композита (расстояние между фуллеренами 8 Å)

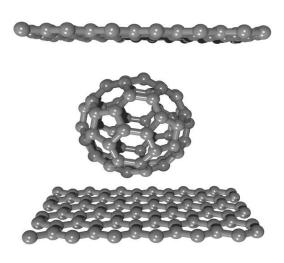


Рис. 4 Супер-ячейка монослойного композита (расстояние между фуллеренами 8 Å)

Последняя вариация графена и фуллерена, которая была рассмотрена – это бислойная структура. Расстояние, как в случае и для монокомпозита менялось от 3,1 Å и до 17,85 Å. Но в отличие от однослойной модели, здесь 5 структур были энергетически устойчивыми.

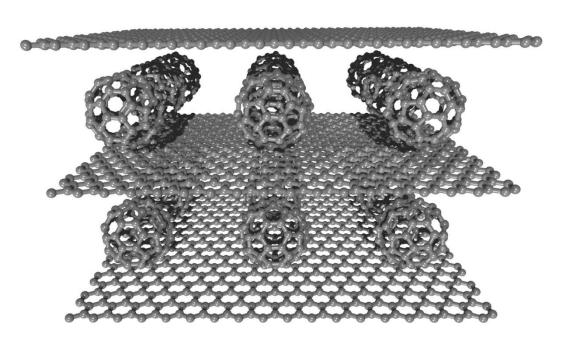


Рис. 5 Фрагмент бислойного композита (расстояние между фуллеренами 8 Å)

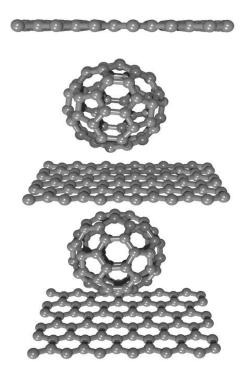


Рис. 6 Супер-ячейка бислойного композита (расстояние между фуллеренами 8A).

Распределение плотности электронных состояний для монослоя графен/C60 имеет следующий профиль:

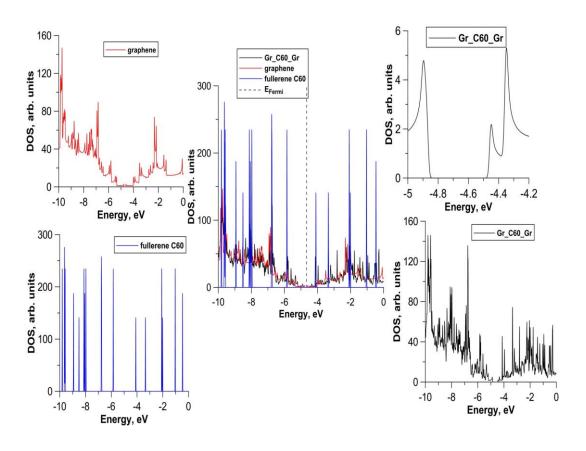


Рис. 7 Распределение DOS монослойного композита

Можно заметить, что в DOS финальной структуры вносят свой вклад графен и фуллерен. Однако в целом, спектр приобретает вид свойственный чистому графену. При этом пики в валентной зоне и зоне проводимости обязаны своему влиянию молекуле C60, Также в спектре композита на основе графена и C60 появляется энергетическая щель, которая отсутствует у графена.

Распределение плотности электронных состояний для бислойного композита имеет следующий профиль:

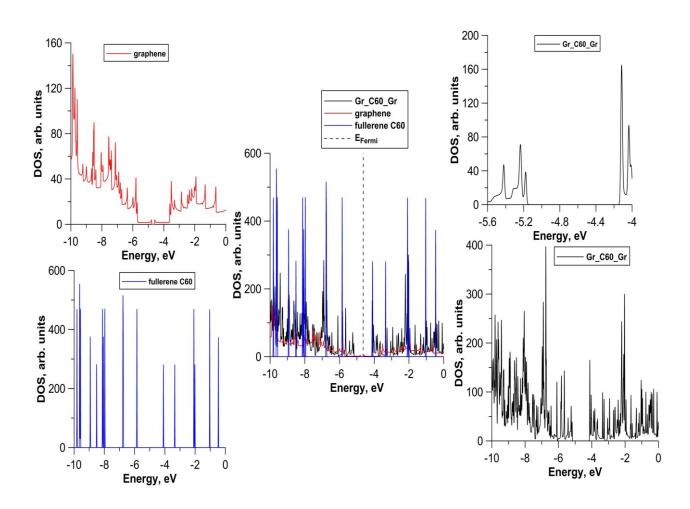


Рис. 8 Распределение DOS бислойного композита

Распределение плотности электронных состояний для двухслойной структуры повторяет профиль монослоя. Однако для бислойного композита увеличивается густота пиков и их интенсивность. Это вызвано большей плотностью молекул С60.

Распределение плотности электронных состояний для объемной структуры имеет следующий профиль:

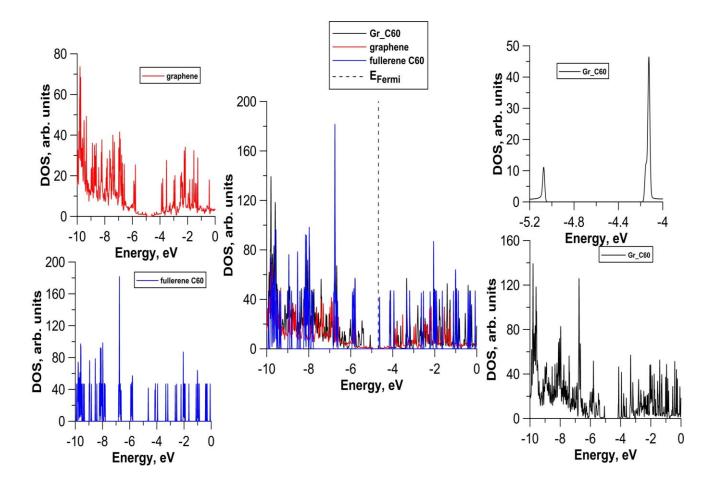


Рис. 9 Распределение DOS объемной структуры

Распределение плотности электронных состояний объемной структуры аналогично первым двум случаям. Однако по сравнения с финальным спектром бислойного и монослойного композита интенсивность пиков здесь становится меньше, в то время, как густота пиков, напротив, превышает превышает первые два случая — за счет того, что посадка фуллеренов еще более плотная.

#### Заключение

Построены атомистические модели энергетических устойчивых 2D/3D композитов графен/С60 с различными расстояниями между фуллеренами C60.

Установлено, что для всех рассмотренных в работе топологических разновидностей структур графен/С60 в зонной структуре появляется энергетическая щель, отсутствующая у чистого графена.

Величина энергетической щели в зависимости от расстояния между фуллеренами С60 варьируется в диапазоне 0.2-0.4 эВ для рассмотренных моделей монослойных 2D-композитов графен/С60, в диапазоне 0.2-1 эВ для рассмотренных моделей бислойных 2D-композитов графен/С60 и принимается значения  $\sim 1$  эВ для всех рассмотренных моделей 3D структур графен-С60.

Характер распределения плотности электронных состояний композита графен/С60 в целом повторяет картину, характерную для чистого графена. Вклад фуллерена С60 в электронную структуру комплекса выражается появлением многочисленных пиков как в валентной зоне, так и в зоне проводимости при тех же значениях энергии, что и в спектре фуллерена.

Согласно полученным данным можно говорить о том, что чем плотнее распределяется посадка фуллеренов, тем больше размер энергетической щели.

#### Библиографический список

- [1] P.V. Ratnikov, A.P. Silin Two-dimensional graphene electronics: current status and prospects // Phys. Usp. 2018. Vol. 61. P. 1139–1174.
- [2] Y. Wu, D. B. Farmer, F. Xia, P. Avouris Graphene Electronics: Materials, Devices, and Circuits // Proceedings of the IEEE. 2013. Vol. 101, No. 7. P. 1620-1637.
- [3] Y.M. Lin, A.Valdes-Garcia, S.J. Han, D.B. Farmer, I. Meric, Y. Sun, Y. Wu, C. Dimitrakopoulos, A. Grill, P. Avouris, K.A. Jenkins Wafer-scale graphene integrated circuit // Science. 2011. Vol. 332. P. 1294-1297.
- [4] S.J. Han, A.V. Garcia, S. Oida, K.A. Jenkins, W. Haensch Graphene radio frequency receiver integrated circuit // Nature Communications. 2014. Vol. 5. P. 3086.
- [5] M.Bianchi, E.Guerriero, M.Fiocco, R. Alberti, L. Polloni, A. Behnam, E.A. Carrion, E. Pop, R.Sordan Scaling of graphene integrated circuits // Nanoscale, 2015,7, 8076-8083
- [6] J.R.D. Copley, D.A. Neumann, R.L. Cappelletti, W.A. Kamitakahara. Neutron scattering studies of C<sub>60</sub> and its compounds // Phys. Chem. Sol. 1992. Vol. 53. No. 1. P. 1353-1371.
- [7] R. Wang S. Wang X. Wang, J. A. S. Meyer, P. Hedegård, B. W. Laursen, Z. Cheng, X. Qiu Charge Transfer and Current Fluctuations in Single Layer Graphene Transistors Modified by Self-Assembled C60 Adlayers // Small. 2013. Vol. 9. I. 14. P. 2420–2426.
- [8] L. A Chernozatonskii1, A. G Kvashnin, P. B Sorokin Heterostructures based on graphene and MoS2 layers decorated by C60 fullerenes // Nanotechnology. 2016. Vol. 27. P. 365201.

[9] G. Jnawali, Y. Rao, J. H. Beck, N. Petrone, I. Kymissis, J. Hone, T.F. Heinz Observation of Ground- and Excited-State Charge Transfer at the C60/Graphene Interface // ACS Nano. 2015. Vol. 97. P. 7175-7185.