

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики
наименование кафедры

Влияние дефектов на электронные свойства графеновых наноструктур

АВТОРЕФЕРАТ ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Студентки 4 курса 423 группы

направления 11.03.03 Конструирование и технология электронных средств
код и наименование направления

физического факультета

наименование факультета

Пономаревой Любви Алексеевны

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

ассистент, кафедра

радиотехники и

электродинамики

должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

Д.С. Шмыгин

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Саратов 2019 г.

Введение

В настоящее время графен является одним из самых перспективных материалов современной нанoeлектроники. Известно, что этот углеродный материал обладает уникальными электрофизическими свойствами: высокой тепло- и электропроводностью, большой эластичностью и жесткостью. Благодаря этим свойствам, графен находит свое применение во многих областях науки и техники. На его основе создаются новые функциональные устройства, что требует знаний его электронной структуры и ее закономерностей.

Структура графеновой наноленты представляет собой моноатомный слой гексагонов с атомами углерода в вершинах. В зависимости от формы протяженного края ленты различают на два типа: zigzag и armchair.

Графеновые наноленты являются перспективным материалом для создания нанопроводов или нанотранзисторов. В связи с этим является актуальным изучение электродинамических свойств, в зависимости от процентного соотношения дефектов на площади ленты.

Целью квалификационной работы является выявление закономерностей появления сопротивления в нанолентах типа zigzag.

Для достижения поставленной цели будут решены следующие задачи:

- □ построение атомистической модели нанолент из углерода
- □ расчет электропроводимости, плотности состояний, коэффициентов пропускания в программном комплексе MIZAR.

Описание структуры

Данная работа состоит из двух частей – теоретической и практической. Первая включает в себя описание методов расчета, вторая описывает инструменты и методы расчета. В конце работы делаются выводы и заключение.

Краткий обзор методов исследования

Метод, основанный на теории функционала плотности (Density Functional Theory – DFT), является альтернативой методу Хартри-Фока. В рамках этого метода для описания электронной системы многоэлектронную волновую функцию заменяют электронной плотностью. Метод сильной связи (Tight Binding – TB), относящийся к классу полуэмпирических методов, предполагает формирование многочастичного гамильтониана в базисе валентных электронных орбиталей с использованием параметризованных матричных элементов и последующую диагонализацию гамильтониана. Таким образом можно решить проблему учета электронной корреляции. Параметризация гамильтониана проводится так, чтобы наилучшим образом воспроизвести экспериментальные характеристики соединений, выбранных для калибровки параметров.

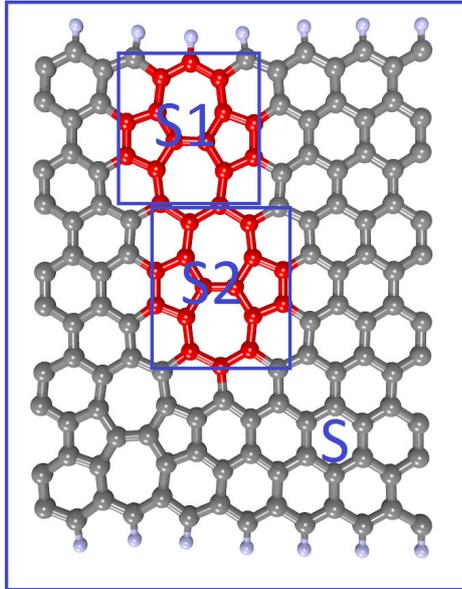
Проведенный критический обзор методов компьютерного моделирования наноструктур позволил установить, что для реализации цели, поставленной в квалификационной работе, будет использоваться метод сильной связи в приближении теории функционала плотности;

Выбор используемого метода исследования обусловлен спецификой решаемых в работе научных задач и особенностями атомного строения объектов исследования.

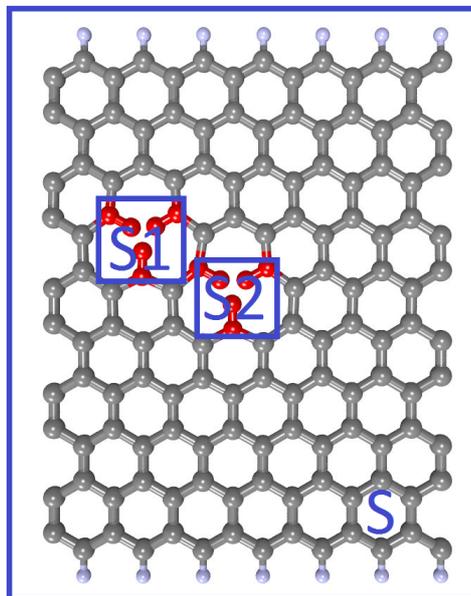
Объекты исследования

Для изучения свойств нанолент были использованы программы «MIZAR» и «KVAZAR».

В ходе работы в программном комплексе «KVAZAR» были построены атомистические модели графеновых нанолент типа «zigzag» шириной 2.22 нм. Каждая лента была подвергнута созданию дефектов разных типов (от одного до четырех).



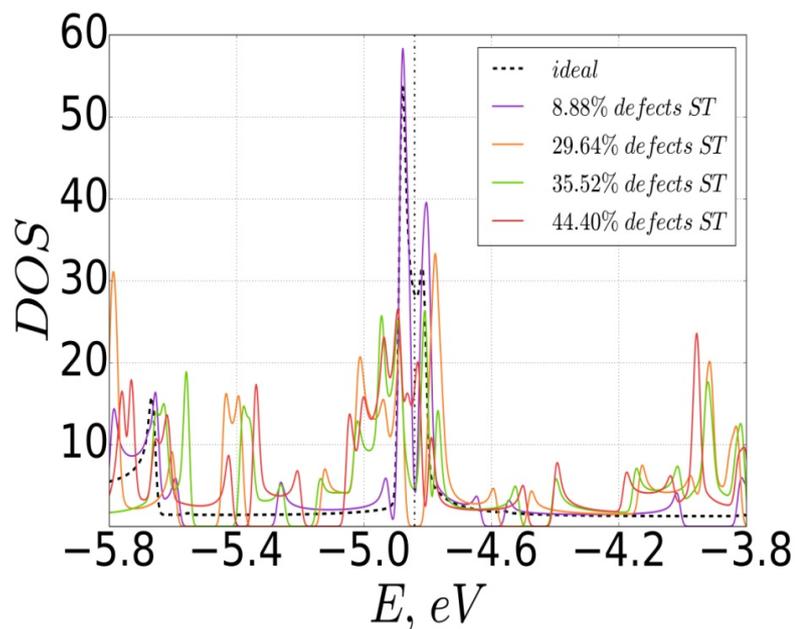
Нанолента с двумя дефектами типа Стоуна-Уэллса



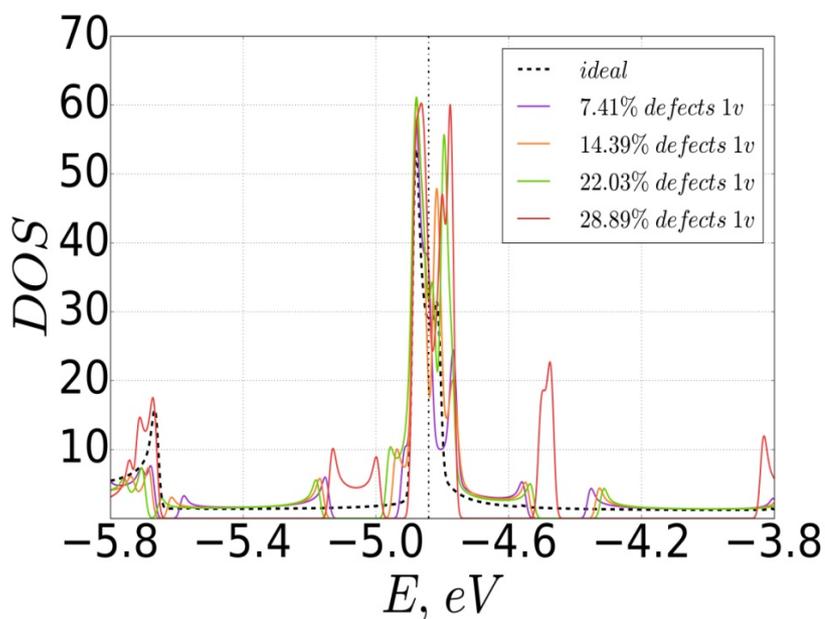
Нанолента с двумя дефектами типа одной вакансии

Результаты расчетов

В ходе работы были проведены расчеты плотности состояний для каждой из лент и по полученным результатам построены графики:



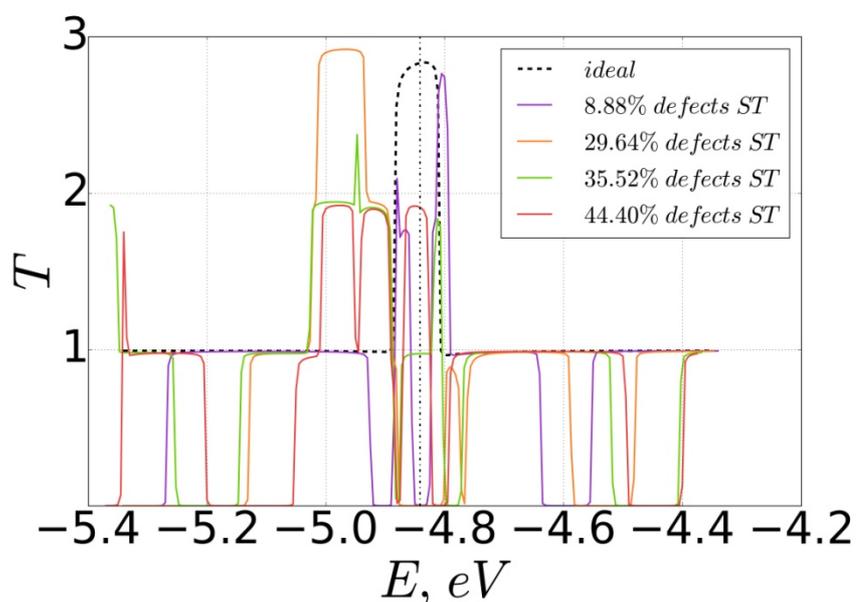
Графики плотности состояний (DOS) для лент с разным количеством дефектов типа Стоуна-Уэльса (ST)



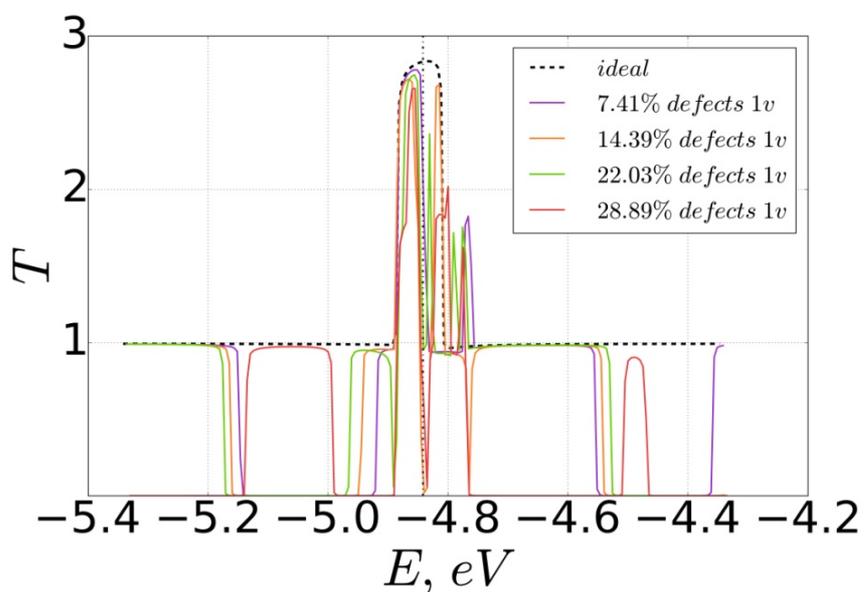
Графики плотности состояний (DOS) для лент с разным количеством дефектов типа одной вакансии (1v)

Рассчитав число свободных состояний (DOS), был определен тип проводимости. Он является металлическим для всех типов лент, в связи с отсутствием запрещенной зоны.

Далее был произведен расчет функции пропускания, который показал следующие графики:

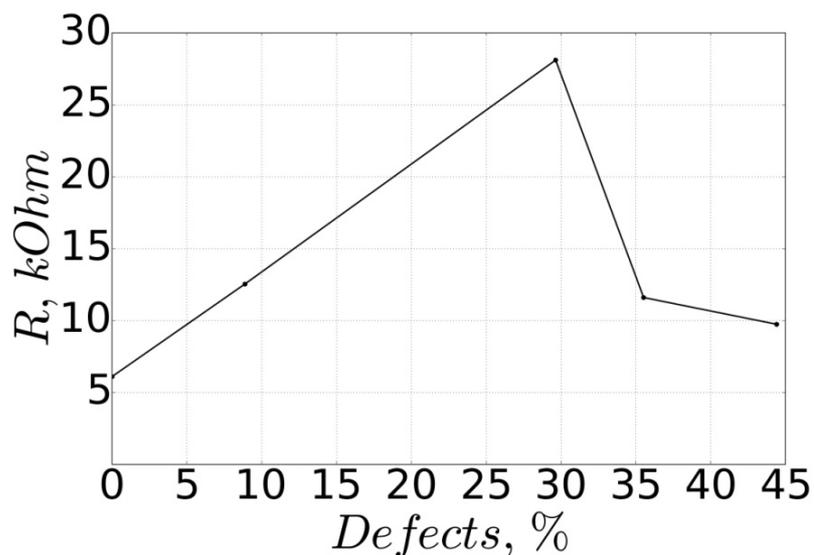


Графики функции пропускания для лент с разным количеством дефектов типа Стоуна-Уэльса (ST)



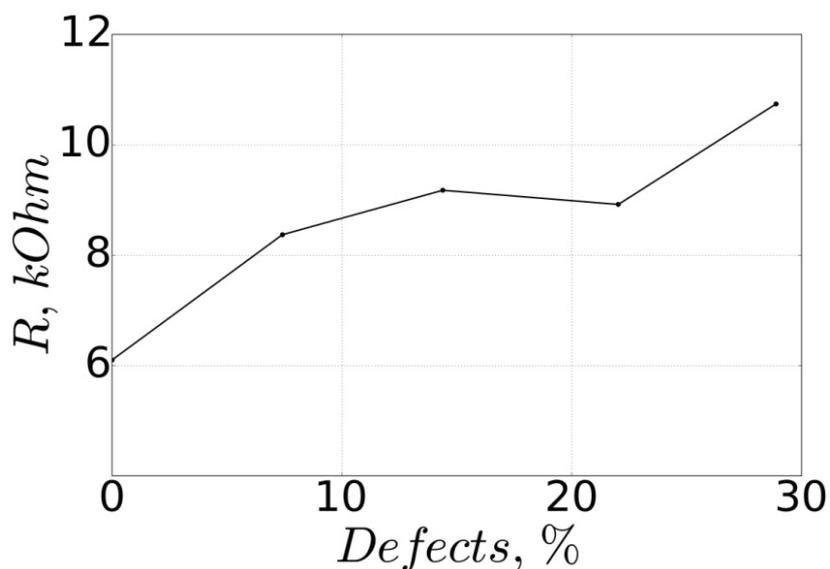
Графики функции пропускания для лент с разным количеством дефектов типа одной вакансии (1v)

В функции пропускания электронов появляются нехарактерные для идеального случая значения, что влияет на электропроводность структуры.



Значения сопротивлений для лент с дефектом типа Стоуна-Уэльса

В случае дефекта Стоуна-Уэллса, сопротивление возрастает до определенного момента (29,64% дефектов), после которого резко падает.



Значения сопротивлений для лент с дефектом типа одной вакансии

При дефекте одной вакансии сопротивление растет с увеличением числа дефектов.

По полученным графикам можно сделать вывод, что для лент с дефектами возникают нехарактерные для идеального случая значения сопротивления, что влияет на проводимость всей структуры.

Результаты

1. Рассматриваемая лента обладает металлическим типом проводимости в отсутствие и при наличии дефектов Стоуна-Уэльса и одной вакансии.
2. Наличие дефектов оказывает существенное влияние на функцию пропускания электронов, что, в свою очередь, приводит к изменению электропроводности материала.
3. Сопротивление графеновой наноленты при увеличении процентного содержания дефектов одной вакансии возрастает и достигает величины 10.739 кОм при 28.89% содержании дефектов.
4. Сопротивление графеновой наноленты, содержащей дефекты Стоуна-Уэльса, выше, чем сопротивление идеальной наноленты, причем при 29.64% содержании дефектов значение сопротивления наноленты превышает сопротивление идеальной наноленты в 4,7 раз.

Заключение

В работе были исследованы электрофизические свойства графеновых нанолент типа "зигзаг" шириной 2.22 нм методами математического моделирования. Для отыскания равновесной конфигурации применялся метод сопряженных градиентов в рамках программного пакета DFTB+, расчёт полной энергии структуры производился методом функционала электронной плотности в приближении сильной связи с самосогласованием заряда, использовалась параметризация pbc-0-3. Функция пропускания электронов определена с помощью математического аппарата функций Грина-Келдыша.

Показано, что металлический тип проводимости графеновой наноленты типа "зигзаг" сохраняется при наличии дефектов одной вакансии и Стоуна-Уэльса, но сопротивление структуры увеличивается по отношению к значению для идеальной наноленты. Тип проводимости определялся из графика плотности электронных состояний для рассматриваемой структуры.