

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

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

Кафедра радиотехники и электродинамики
наименование кафедры

Углеродные наноматериалы: элементная база электронных устройств

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 4 курса 4032 группы

направления 03.03.03 «Радиофизика»

код и наименование направления

института физики

наименование факультета

Фадеева Владимира Павловича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. ст., уч. зв.

личная подпись, дата

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

уч. ст., уч. зв.

личная подпись, дата

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Саратов 2021 г.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования обусловлена тем, что в XXI веке стремительными темпами развивается такая область науки и техники как электроника. Новые знания требуются для оптимизации и усовершенствованию процессов по созданию и эксплуатации различных приборов и устройств, работа которых обеспечивается за счет заряженных частиц – электронов. В связи с этим в настоящее время актуальными являются исследования в сфере материаловедения, так как для электронной аппаратуры требуются компактные в своих габаритах электронные компоненты, размеры которых сокращаются, стремятся к нанометровым размерам. Будущее за устройствами подобных размеров, а как следствие и за материалами на углеродной основе.

Степень научной разработанности проблемы.

Исследованиями в сфере углеродных наноматериалов занимаются следующие исследователи: К.Р. Асанов, П.В. Барков, И.И. Бобринецкий, Н.А. Бушуев, О.Е. Глухова, Ю. А. Григорьев, Д. В. Иванов, А. С. Курылева, В. А. Кондрашов, Т. М. Крачковская, Е. В. Лаптев, Л. А. Мельников, В. В. Митрофанов, В. К. Неволин, А. А. Николаев, Г. В. Савостьянов, М. М. Слепченков, П. Д. Шалаев, В. И. Шестеркин, С. Л. Шергин, Д. С. Шмыгин, В. В. Шунаев и др.

Объектом бакалаврской работы являются углеродные наноматериалы.

Предметом исследования являются электронные устройства, в которых применяются углеродные наноматериалы.

Цель: изучение углеродных наноматериалов как элементной базы электронных устройств.

Задачи, решаемые в рамках поставленной цели:

1. рассмотреть атомистическое строение углеродных наноструктур;
2. изучить особенности энергетической стабильности углеродных наноструктур;

3. исследовать электронные свойства углеродных наноструктур;
4. исследовать механические свойства углеродных наноструктур;
5. рассмотреть особенности применения в автоэмиссионной электронике.

Научная новизна бакалаврской работы заключается в том, что:

1. рассмотрены атомистическое строение углеродных наноструктур;
2. изучены особенности энергетической стабильности углеродных наноструктур;
3. исследованы электронные свойства углеродных наноструктур;
4. исследованы механические свойства углеродных наноструктур;
5. рассмотрены особенности применения в автоэмиссионной электронике.

Основные положения бакалаврской работы, выносимые на защиту:

1. В ходе рассмотрения атомистического строения углеродных наноструктур было выявлено основные особенности наноразмерных молекулярных комплексов на основе атомов углерода.

2. Основные особенности энергетической стабильности углеродных наноструктур требуют особого изучения, так как при изменении параметров, а именно при увеличении размеров молекулярных углеродных комплексов энергетическая стабильность растет.

3. При изучении базовых электронных свойств углеродных наноструктур было выявлено, что присутствует прямая зависимость между их геометрическими параметрами и основными электронными свойствами, которые присущи наноструктурам на основе изучаемого материала.

4. Механические свойства углеродных наноструктур во многом определяются энергетической стабильностью обозначенных ранее структур. При этом основная часть молекулярных углеродных наноструктур обладает такой

значимой характеристикой как упругость, что позволяет ей выступать в качестве надежного и удобного материала для нужд современного приборостроения.

5. Были рассмотрены основные особенности применения в автоэмиссионной электронике материалов на основе углеродных наноструктур. В автоэмиссионной электронике себя зарекомендовали электронные приборы на основе углеродных нанотрубок, благодаря их уникальным свойствам.

Теоретическая значимость бакалаврской работы обусловлена тем, что изучаемые в тексте задачи и представленный способ их решения способствуют развитию естественнонаучных знаний в области углеродных наноматериалов, а также являются одним из возможных способов приращения информации в данной сфере.

Практическая значимость бакалаврского исследования заключается в том, что основные данные, полученные в ходе проведенной работы, могут стать основой для дальнейших научных исследований, а также предстать в качестве базиса для проведения лекционных и семинарских занятий в высших и средне-профессиональных учебных учреждениях.

Структурно бакалаврская работа состоит из введения, первой главы, состоящей из двух параграфов, второй главы, состоящей из двух параграфов, третьей главы, заключения и списка используемой литературы.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В главе 1 рассматривает атомистические модели углеродных наноструктур. Так основой большинства наноразмерных устройств выступает, пожалуй, один из самых известных углеродных материалов – графен [1-4]. Графен – это плоская гексагональная структура образуемая атомами углерода. Одним из первых исследований, целью которого было синтезировать и изучить механические и электрические свойства графена, была работа Константина Сергеевича

Новосёлова и Андрей Константиновича Гейма [5]. При этом открытие графена позволило описать и другие наноразмерные структуры на основе углеродна такие, как углеродные нанотрубки (УНТ) [6], колонные графены [7], фуллерены [8] и торы [9].

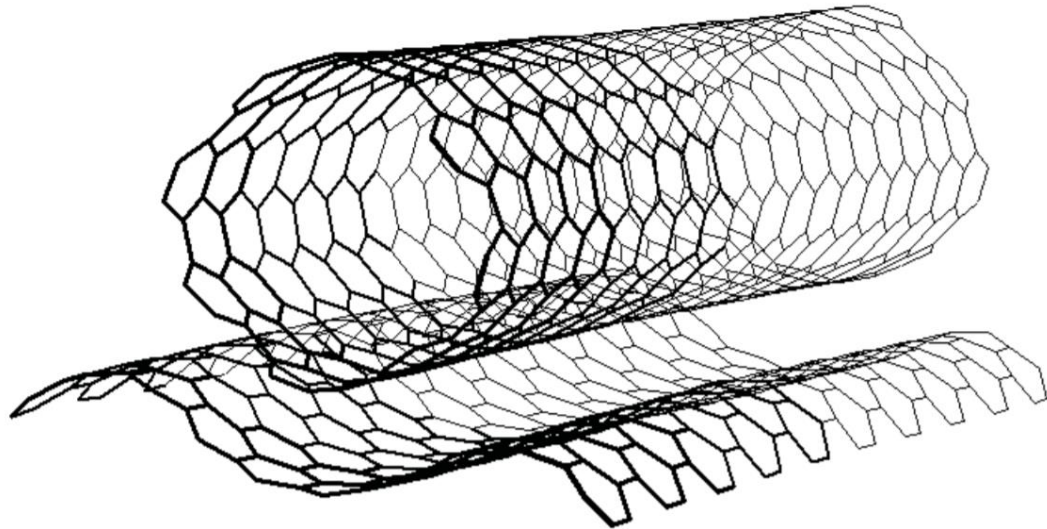


Рис. 1. Углеродная нанотрубка на подложке графена

Также в главе 1 рассматривается стабильность с энергетической точки зрения. Для исследования энергетической стабильности углеродных наноструктур часто используют потенциал Бренера [10]. Потенциал Бренера появился благодаря отсутствию математического аппарата, которых мог бы описать взаимодействие углеродных пленок с ацителеном. Также потенциал Бренера позволяет выявить роль атомов водорода, влияние температуры подложки и возникновение дефектов в углеродных пленках. В рамках данного подхода полная энергия E_{tot} системы представляется суммой трех слагаемых.

$$E_{tot} = E_b + E_{tors} + E_{vdW} \quad (1)$$

Как показано в работе [11] для описания взаимодействий атома с номером i и его окружения топологическая сетка разбивается в окрестности выбранного атома на три группы. Каждая группа определяется одним из потенциалов, входящих в выражение (1). Первая группа атомы, связанные с i -м химическими

связями, вторая группа — атомы, образующие химические связи с атомами первой группы, третья — всеми остальными атомами.

Применение приведенных выше уравнений легко иллюстрируются в исследовании [11]. В этой работе изучались структуры, образованные двумя графеновыми листами длиной 53.96 Å и шириной 46.74 Å, между которыми перпендикулярно графеновой плоскости располагалась углеродная нанотрубка типа кресло. Исследование показало, что присоединение к графеновому листу любой из рассматриваемой в данной работе трубок приводит к формированию энергетически устойчивой композитной структуры. Варьирование длиной нанотрубок не вызывает существенного изменения энергетической устойчивости композита, однако, увеличение нанотрубок в диаметре позволяет получать структуры с наиболее выгодной по энергии конфигурацией. Наибольшей энергетической устойчивостью обладают композиты, в состав которых входит нанотрубка диаметром 12.12 Å и длиной 18.44 Å.

В главе 2 изучаются механические и электрические свойства углеродных наноструктур

При исследовании закономерностей электропроводности в наноструктурах применяется аппарат неравновесных функций Грина–Келдыша и формализм Ландауэра–Буттикера [12], который позволяет рассчитать электропроводность на основе функции пропускания электронов $T(E)$:

$$G = \frac{I}{V} = \frac{e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) F_T(E - \mu) dE \quad (3)$$

где e — заряд электрона, h — постоянная Планка. Величина $\frac{e^2}{h}$ — квант проводимости, величина для единственного канала проводимости. Это значение удваивается для учета спина электронов. Функция теплового уширения $F_T(E)$ рассчитывается по формуле

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

где k_B — постоянная Больцмана, T — температура. Функция пропускания электронов, как известно, характеризует квантово-механическую прозрачность проводящего канала (участка структуры, заключенного между двумя контактами) в зависимости от энергии движущегося по нему электрона.

Так в работе [13] рассчитывались электронные свойства X-соединений нанотрубок. Было показано, что размеры поры определяют тип проводимости. При наименьших размерах поры пленка проявляет почти металлические свойства с шириной щели < 0.1 эВ. С увеличением размера поры щель в зонной структуре также увеличивается, и пленка становится полупроводником. Управляя размером поры, таким образом, можно управлять электропроводностью пленки.

Помимо электрических свойств углеродные наноструктуры обладают потрясающими механическими свойствами.

В работе [14] исследуется влияние содержания углеродных нанотрубок (УНТ) на механические свойства алюминиевых композитов, армированных УНТ. В этом исследовании диспергирование многостенных углеродных нанотрубок в алюминиевой матрице было достигнуто с помощью высокоэнергетического фрезерования в течение 30 мин при 400 об/мин. Было установлено, что такие условия в целом эффективны для диспергирования УНТ при ограничении деформационного упрочнения алюминиевого порошка. Было обнаружено, что механические свойства значительно улучшаются с увеличением содержания УНТ и либо превышают, либо близки к прогнозируемым значениям, основанным на теории композитов, за исключением 5 мас.%, когда механические свойства не соответствуют прогнозируемым значениям.

Глава 3 повествует о перспективных исследованиях углеродных наноматериалов в качестве автоэмиссионных устройств

Как было сказано выше, углеродные нанотрубки обладают достаточно привлекательными автоэмиссионными свойствами. Исследование [15] было посвящено изучению автоэмиссионных свойств УНТ.

В этой работе применялась континуальная модель, что позволяет рассматривать нанотрубки как сплошной проводящий цилиндр, вертикально ориентированный к подложке. Толщина стенки определяется количеством слоев: однослойная УНТ — 0.342 нм (межслойное расстояние в графите), n -слойная — $0.342n$. Схематичная расчетная модель представлена на рис. 1 (УНТ и область вокруг нее являются осесимметричными, поэтому рассматривается 2D-модель): напряжение на аноде $U_a = 300$ В, на катоде $U_c = 0$ В, межэлектродное расстояние $L = 10$ мкм, сепаративное расстояние между соседними трубками $R = 720$ нм. Напряженность поля на подложке $E_0 = (U_a - U_c)/L$ равна 30 В/мкм. Трубка выбрана одностенная диаметром ~ 2 нм, типа кресло. Как было показано ранее, стабильными являются УНТ с $d > 1$ нм, и трубки кресло являются проводящими. Решение задачи электростатики производилось в программе ANSYS 13 методом конечных элементов.

В работе отмечается, что напряженность быстро убывает по мере удаления атомов от верхнего края УНТ, т. е. весь вклад в эмиссионный ток вносят только краевые атомы. Плотность тока рассчитывалась по формуле Фаулера–Нордгейма.

$$j = aE^2 e^{\frac{-b\varphi^{3/2}}{E}}$$

где j – плотность тока автоэлектронной эмиссии, E – напряженность электрического поля φ – работа выхода из материала (в нашем случае из УНТ)

В качестве эмитирующей поверхности S принималась площадь одного верхнего кольца атомов, отмеченного на рисунке серой полосой.

При этом в расчет принимается только внешний слой многослойных УНТ. Исследования обнаружили, что даже при увеличении диаметра на несколько нанометров (от 2 до 10 нм) напряженность на внутреннем слое УНТ мала для эмиссии электронов и существенно меньше напряженности на внешнем слое. Чтобы эмиссия стала возможной, изнутри УНТ диаметр должен быть 40–50 нм, однако такой диаметр характерен не для трубок, а для гигантских полых

углеродных капсул. Достичь существенного увеличения β (в 10 и более раз) исследователям удалось благодаря изменению только сепарирующего расстояния R , например, для тонких трубок диаметром 1–2 нм и высотой ~ 1 мкм эффект экранирования эмиттеров друг другом исчезает при $R \sim 1$ мкм [15]. Однако неконтрольное возрастание напряженности приводит к разрушению атомной клетки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе проведения бакалаврской исследовательской работы были изучены углеродные наноматериалы в качестве элементной базы электронных устройств.

Для решения поставленной в бакалаврской работе цели был сформулирован ряд задач.

При решении задачи по рассмотрению атомистического строения углеродных наноструктур были выявлены основные особенности наноразмерных молекулярных комплексов на основе атомов углерода. Исследовательская работа в данной сфере позволила установить уникальный и неповторимых характер каждого из изученных углеродных комплексов. В связи с этим хочется особо отметить, что дальнейшие исследования в данном направлении являются весьма перспективными и многообещающими.

При решении задачи изучения особенностей энергетической стабильности углеродных наноструктур было выявлено, что при изменении параметров, а именно при увеличении размеров молекулярных углеродных комплексов энергетическая стабильность растет. Подобная интересная особенность позволяет по новому взглянуть на свойства углеродных наноматериалов и на возможные дальнейшие эксперименты и исследования в подобной области.

При решении задачи по исследованию электронных свойств углеродных наноструктур была отмечена следующая особенность, которая заключается в том, что присутствует прямая зависимость между геометрическими параметрами обозначенной структуры и основными электронными свойствами, которые

присущи наноструктурам на основе изучаемого материала. Исследование электронных свойств данного материала является необходимым для дальнейшего развития современной микро- и нанoeлектроники.

При решении задачи по исследованию механических свойств углеродных наноструктур были получены данные о том, что указанные свойства во многом определяются энергетической стабильностью исследуемых структур. При этом показано, что основная часть молекулярных углеродных наноструктур обладает такой значимой характеристикой как упругость. Подобное позволяет углеродным наноструктурам выступать в качестве надежного и удобного материала для нужд современного приборостроения.

При решении задачи по рассмотрению особенностей применения в автоэмиссионной электронике углеродных наноструктур было выявлено, что из всего многообразия углеродных молекулярных комплексов ярко выраженными автоэмиссионными свойствами обладают структуры на основе углеродных нанотрубок. Подобный тип материалов хорошо зарекомендовал себя, благодаря уникальным свойствам.

Таким образом, в ходе проведения бакалаврской работы были реализованы поставленные перед исследованием задачи и цель.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Булатова, И. М. Графен: свойства, получение, перспективы применения в нанотехнологии и нанокompозитах / И. М. Булатова // Вестник Казанского технологического университета. – 2011. – № 10. – С. 45-48.
2. Губин, С. П., Ткачѐв, С. В. Графен и материалы на его основе / С. П. Губин, С. В. Ткачѐв // Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии. – 2010. – Т. 2, № 1-2. – С. 99-137.

3. Лаптев Е. В., Шергин, С. Л. Обзор методов формирования локализованных слоёв графена / Е. В. Лаптев, С. Л. Шергин // Интерэкспо Гео-Сибирь. – 2012. – Т. 2, № 4. – С. 90-94.
4. Яновский, Ю. Г., Никитина, Е. А., Карнет, Ю. Н., Никитин, С. Квантово-механическое исследование механизма деформации и разрушения графена / Ю. Г. Яновский, Е. А. Никитина, Ю. Н. Карнет, С. Никитин // Физическая мезомеханика. – 2009. – № 4. – С. 61-70.
5. Geim, A. & Novoselov, K.S.. (2007). The Rise of Graphene / A. K. Geim, K. S. Novoselov // Nature materials. – 2007. – Vol. 6. – P. 183-191.
6. Iijima, S Helical Microtubules of Graphitic Carbon / S. Iijima // Nature. – 1991. – Vol. 354 – P. 56-58. – Сведения доступны также по Интернет: URL: <http://dx.doi.org/10.1038/354056a0> (дата обращения: 01.06.2021). – Загл. с экрана. Яз. Англ.
7. Paul, R., Ghazinejad, M., Penchev, M., Lin, J., Ozkan, M., Ozkan, C. Synthesis of a Pillared Graphene Nanostructure: A Counterpart of Three-Dimensional Carbon Architectures / R. Paul, M Ghazinejad, M. Penchev, J. Lin, M. Ozkan, C. Ozkan // Small. – 2010. – Vol. 6, № 20. – P. 2309-13.
8. Nimibofa, A., Newton, E. A., Cyprain, A.Y., Donbebe, W. Fullerenes: synthesis and applications / A. Nimibofa, E. A. Newton, A. Y. Cyprain, W. Donbebe // Journal of Materials Science Research. – 2018. – Vol. 7, № 3. – P. 22.
9. Zhang, S., Zhao, S., Xia, M., Zhang, E., Xu, T. Ring formation of single-walled carbon nanotubes: Competition between conformation energy and entropy / S. Zhang, S. Zhao, M. Xia, E. Zhang, T. Xu // Physical Review B. – Vol. 68, № 24.
10. Brenner, D. W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films / D.W. Brenner // Phys. Rev. B. – 1990. – Vol. 42, Iss. 1542. – P. 9458.
11. Глухова, О. Е., Колесникова, А. С., Слепченков, М. М., Шмыгин, Д. С. Атомная структура энергетически устойчивых композитов углеродные

нанотрубки/графен / О. Е. Глухова, А. С. Колесникова, М. М. Слепченков, Д. С. Шмыгин // Физика твердого тела. – 2015. – Т. 57, № 5. – С. 994-998.

12. Datta, S. Quantum Transport: Atom to Transistor / S. Datta. New York : Cambridge University Press, 2005. – 420 p.

13. Глухова, О. Е., Слепченков, М. М., Асанов, К. Р. Наносетчатые пленки из углеродных нанотрубок с X-соединениями для электронных и фотовольтаических приложений / О. Е. Глухова, М. М. Слепченков, К. Р. Асанов // Физика и техника полупроводников. – 2020. – Т. 54, № 12. – С. 1355-1363.

14. Esawi, A. M. K., Morsi, K., Sayed, A., Taher, M., Lanka, S. Effect of carbon nanotube (CNT) content on the mechanical properties of CNT-reinforced aluminium composites / A. M. K. Esawi, K. Morsi, A. Sayed, M. Taher, S. Lanka // Composites Science and Technology. – 2010. – Vol. 70, Iss. 16. – P. 2237-2241. – Сведения доступны также по Интернет: URL: <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2010.05.004> (дата обращения: 04.06.2021). – Загл. с экрана. Яз. англ.

15. Глухова О.Е., Колесникова А.С., Слепченков М.М. Влияние квантовых эффектов на параметры холодного катода с углеродными нанотрубками // Журнал технической физики. – 2016. – Т. 86, № 1. – С. 151-154.

16. Бельский, М. Д., Бочаров, Г. С., Елецкий, А. В., Sommerer, T. J. Усиление электрического поля в холодных полевых катодах на основе углеродных нанотрубок / М. Д. Бельский, Г. С. Бочаров, А. В. Елецкий, Т. J. Sommerer // Журнал технической физики. – 2010. – Т. 80, Вып. 2. – С. 130-138.