

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики

Слоистые пленки графен/УНТ с островковой структурой
наименование темы курсовой работы полужирным шрифтом

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

студента (ки) 2 курса 2233 группы

направления 03.04.03 «Радиофизика» профиль «Радиоэлектроника»

код и наименование направления

институт физики

наименование факультета

Иванов Евгений Романович

фамилия, имя, отчества

Научный руководитель

д. ф. - м. н., профессор

должность, ученая степень, уч. звание

подпись, дата

О. Е. Глухова

Инициалы Фамилия

Заведующий кафедрой

д. ф. - м. н., профессор

должность, ученая степень, уч. звание

подпись, дата

О. Е. Глухова

Инициалы Фамилия

Саратов 2021 г.

ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день наноразмерные электронные устройства получили большую популярность. Углеродные наноструктуры, являются одним из наиболее востребованных материалов для таких устройств. Углеродная наноэлектроника основывается на использовании углеродных наноструктурных материалов: фуллеренов, нанотрубок, графена и его модификаций.

Уникальные свойства графена открытого в 2007 году учеными А.К. Геймом и К.С.Новоселовым, являются причиной исследования, как наиболее перспективных материалов для наноэлектроники, биосенсорики и оптоэлектроники. Важными задачами являются получение полупроводниковой наноэлектроники на основе графена, создание материала на его основе с запрещенной зоной и управление ее величиной. Для их решения необходимо изучение влияния примесей и дефектов на электронные свойства материалов на базе графена. При получении графена из оксида графена путем восстановления происходит изменение типа проводимости от диэлектрического до проводникового. Электрические свойства такого графена, значительно хуже, чем у чистого графена. Поэтому способ управления величиной электронной зоны без ухудшения проводимости графена остается актуальной задачей и на сегодняшний день.

Эффективным современным методом для моделирования процесса протекания тока в наноструктурах является метод неравновесных функций Грина-Келдыша. В рамках данного метода возможно исследование влияния особенностей атомного строения на электронную проводимость наноразмерных проводников, благодаря чему в настоящее время можно детально исследовать влияние как регулярных, так и нерегулярных структурных модификаций на электропроводность наноструктур.

Целью выпускной квалификационной работы является поиск закономерностей электрохимических и электрофизических свойств, на примере слоистых пленок Графен/УНТ с островковой структурой.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи

1. Построение атомистических моделей.
2. Построение зон Бриллюэна и расчет зонной структуры исследуемой модели.
3. Исследование электронного строения в рамках функционала электронной плотности в приближении сильной связи (метод DFTB), путем расчета плотности электронных состояний.
4. Исследование электронной проводимости построенных моделей в рамках метода неравновесных функций Грина-Келдыша, путем вычисления функции пропускания.

Несмотря на существенный прогресс методов, используемых для описания многоатомных систем, основанных на уравнении Шредингера, вычислительная сложность этих методов достаточно велика. Чтобы уменьшить вычислительную сложность можно использовать различные аппроксимации и эмпирические параметры. Ставший классическим метод сильной связи позволяет при помощи подбора эмпирических параметров описывать электронную структуру различных наноструктур и кристаллов на базе одноэлектронного уравнения Шредингера в приближении невзаимодействующих электронов с точностью, достаточной для практических применений.

. Метод сильной связи учитывает только взаимодействие электронных оболочек атомов, расположенных близко друг к другу [8]. Чаще всего это соседи первого порядка, т.е. атомы, которые участвуют в образовании ковалентных связей. Но также существуют модификации, которые включают соседей дальних порядков. Вычислительная сложность данного метода сопоставима с вычислительной сложностью решения матричной задачи на собственные значения.

Одноэлектронный гамильтониан представляется в виде:

$$H = H_{at} + \Delta U, \quad (1)$$

где H_{at} - гамильтониан одного атома

ΔU - разница между потенциалом, изолированного атома, и действующего в кристалле

Предположим, что $\Delta U \rightarrow 0$ в центре каждого атома, тогда уравнение Шредингера запишется в виде:

$$H\Psi_{nk}(r) = E_n\Psi_{nk}(r), \quad (2)$$

где $\Psi_{nk}(r)$ – волновая функция

n - число волновых функций Блоха

k – волновой вектор в первой зоне Бриллюэна.

Представим волновую функцию $\Psi_{nk}(r)$ в виде линейной комбинации функции Блоха $\varphi_{nk}(r)$:

$$\Psi_j(k, r) = \sum_{j=1}^n c_{jj}(k)\varphi_j(k, r), \quad (3)$$

где c_{jj} - коэффициенты, которые необходимо найти.

Так как $\varphi_{nk}(r)$ удовлетворяет теореме Блоха, то суммирование будет происходить по орбиталям Блоха $\varphi_j(k, r)$ с одним и тем же волновым вектором. Собственное значение E_k может быть получено из следующего выражения:

$$E_{nk} = \frac{\langle \Psi_n | H | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} = \frac{\int \Psi_n^* H \Psi_n d^3r}{\int \Psi_n^* d^3r}. \quad (4)$$

После подстановки получим

$$E_{nk} = \frac{\sum_{i,j=1}^n c_{ij} c_{ij}^* \langle \Psi_n | H | \Psi_n \rangle}{\sum_{i,j=1}^n c_{ij} c_{ij}^* \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} = \frac{\sum_{i,j=1}^n H_{ij} c_{ij} c_{ij}^*}{\sum_{i,j=1}^n S_{ij} c_{ij} c_{ij}^*}, \quad (5)$$

где S_{ij} - матрица интеграла перекрытия

H_{ij} -матрица интеграла переноса

c_{ij}^* -коэффициент, определяющий энергетический уровень.

Отсюда

$$\frac{\partial E_i}{\partial c_{ij}^*} = \frac{\sum_{i,j=1}^n H_{ij} c_{ij}^*}{\sum_{i,j=1}^n S_{ij} c_{ij}^* c_{ij}} - \frac{\sum_{i,j=1}^n H_{ij} c_{ij}^* c_{ij}}{(\sum_{i,j=1}^n S_{ij} c_{ij}^* c_{ij})^2} \sum_{j=1}^n S_{ij} c_{ij} = 0. \quad (6)$$

Умножив на $\sum_{i,j=1}^n H_{ij} c_{ij} c_{ij}^*$ и подставив E_{ik} во второй член, получим следующее выражение:

$$\sum_{j=1}^n H_{ij} c_{ij} = E_i \sum_{j=1}^n S_{ij} c_{ij}. \quad (7)$$

В результате уравнение Шредингера сведено к секулярному уравнению:

$$(H_{ij}^0 - \varepsilon_n S_{ij}) c_i^n = 0. \quad (8)$$

Расчеты электронных свойств слоистых пленок, основанные на приближении

сильной связи, могут предсказать качественное поведение запрещенной зоны исследуемых моделей.

Для проведения исследования электрофизических свойств слоистых пленок с островковой структурой была создана супер-ячейка с листами графена и УНТ. На (рис. 1) приведена атомистическая модель сегмента с листами графена и УНТ хиральностью (6,0), аналогичные модели были построены для слоистых пленок с УНТ типа «зигзаг» хиральностью (16,0) (рис. 2) и УНТ типа «кресло» хиральностью (5,5) (рис. 3).

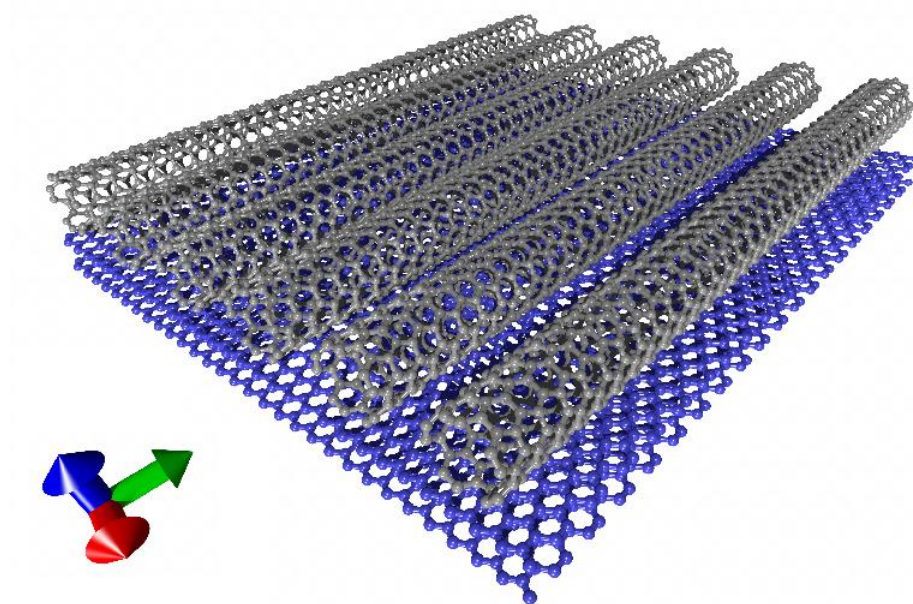


Рисунок 1 - Супер-ячейка слоистой пленки с островковой структурой, содержащая 2 листа графена шириной в 7 гексагон и УНТ типа «кресло» (5,5), транслированная в двух направлениях.

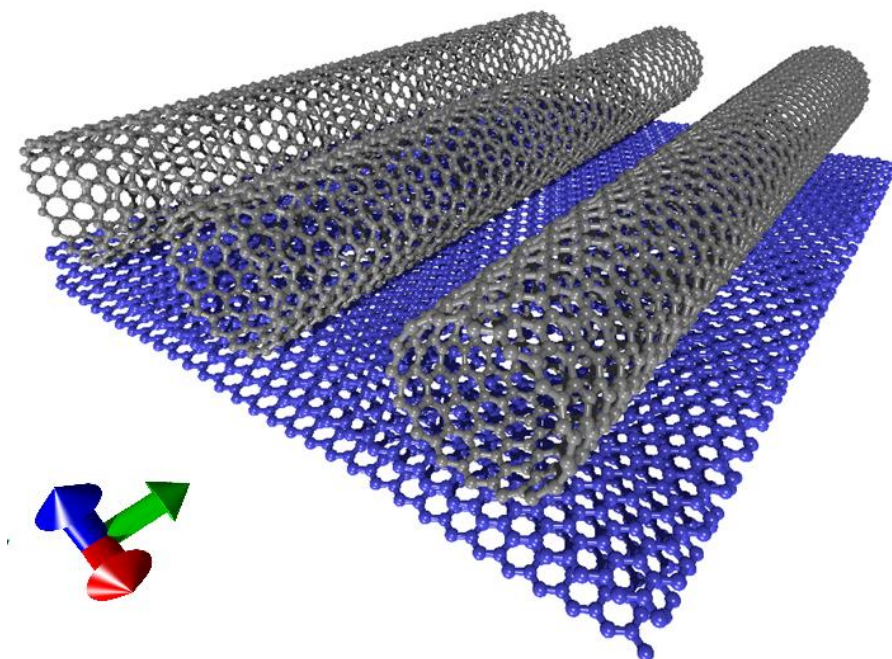


Рисунок 2 - Супер-ячейка слоистой пленки с островковой структурой, содержащая 2 листа графена шириной в 1 гексагон и УНТ типа «зигзаг» (16,0), транслированная в двух направлениях.

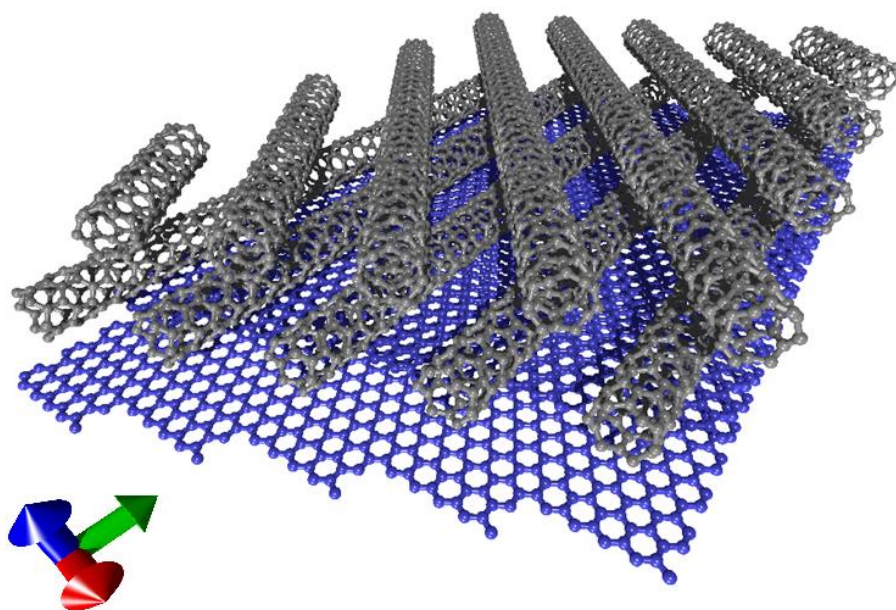


Рисунок 3 - Супер-ячейка слоистой пленки с островковой структурой, содержащая 2 листа графена шириной в 9 гексагон и 2 УНТ типа «зигзаг» (6,0), транслированная в двух направлениях.

Была построена конфигурация слоистой пленки, состоящей из листов графена и УНТ различной хиральности, для исследования плотности электронных состояний проведены расчеты и построены графики DOS (рис. 4-6).

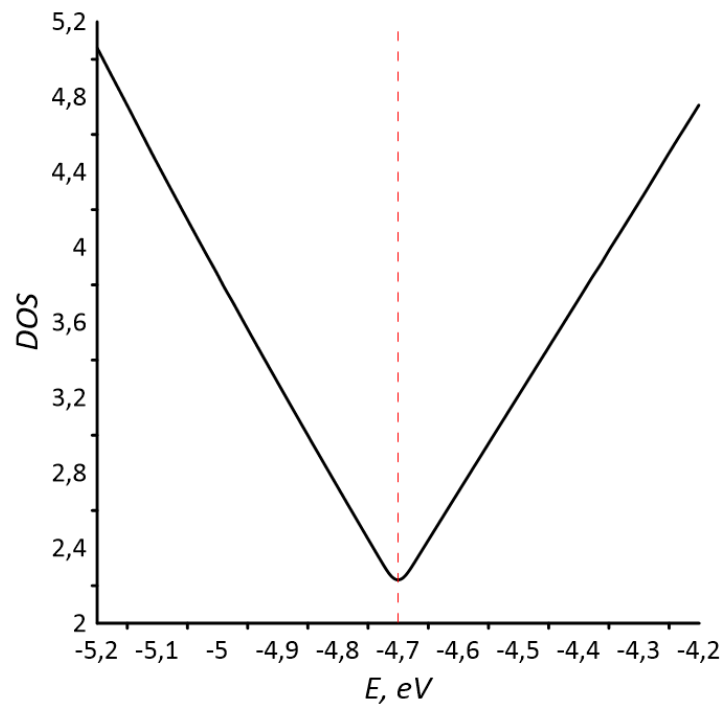


Рисунок 4 - График плотности электронных состояний для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 7 гексагон и УНТ типа «кресло» (5,5).

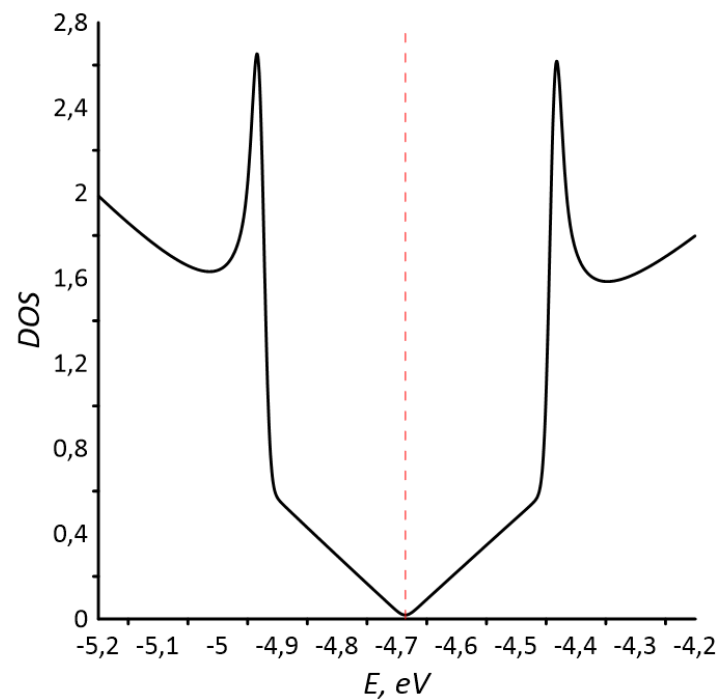


Рисунок 5 - График плотности электронных состояний для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 1 гексагон и УНТ типа «зигзаг» (16,0).

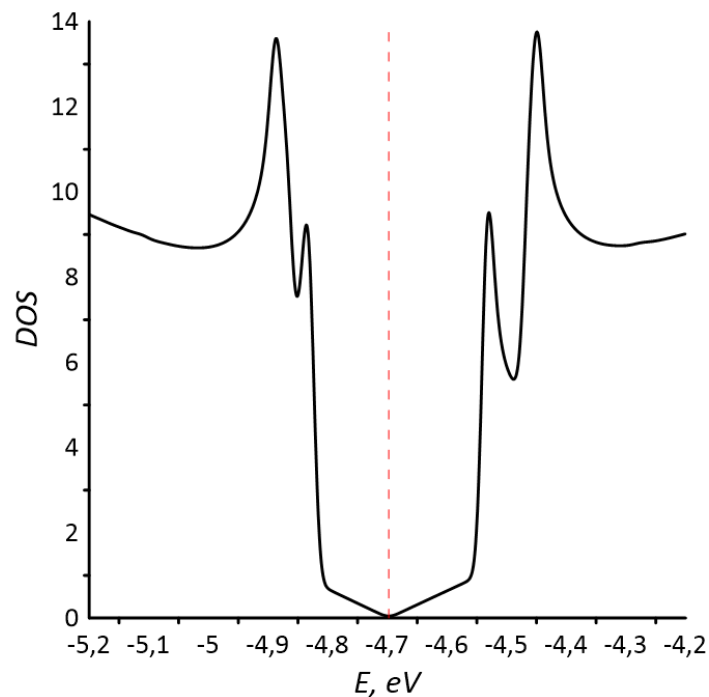


Рисунок 6 - График плотности электронных состояний для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 9 гексагон и 2 УНТ типа «зигзаг» (6,0).

Также была исследована зонная структура для трех исследуемых моделей слоистых пленок. Полученные зависимости изображены на (рис. 7-9).

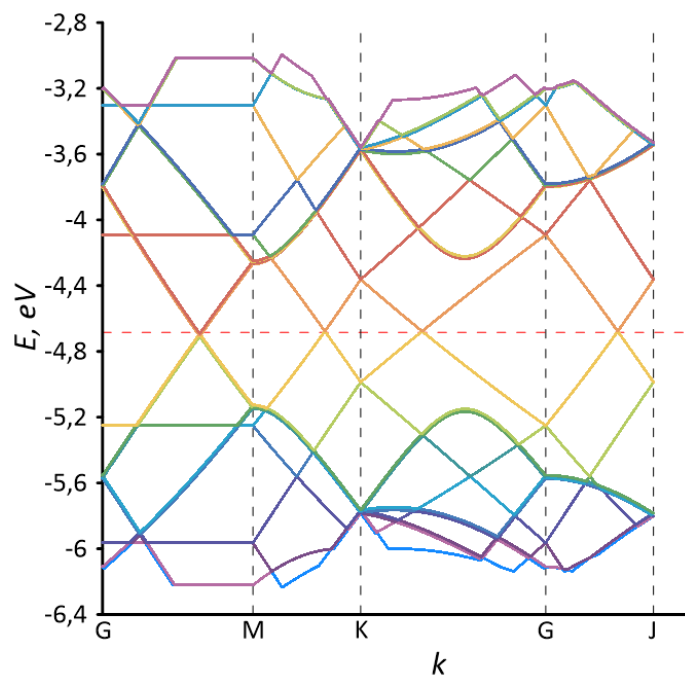


Рисунок 7 - Зонная диаграмма (20 уровней вблизи уровня Ферми) для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 7 гексагон и УНТ типа «кресло» (5,5). Красной пунктирной линией отмечена энергия Ферми.

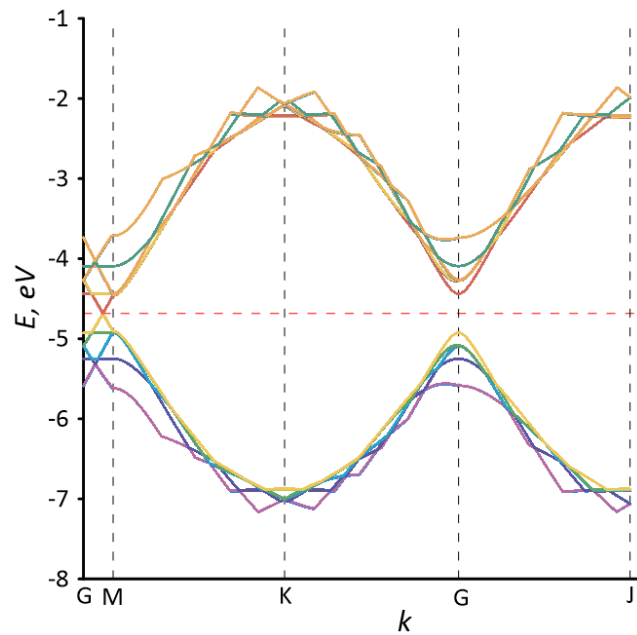


Рисунок 8 - Зонная диаграмма (20 уровней в близи уровня Ферми) для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 1 гексагон и УНТ типа «зигзаг» (16,0). Красной пунктирной линией отмечена энергия Ферми.

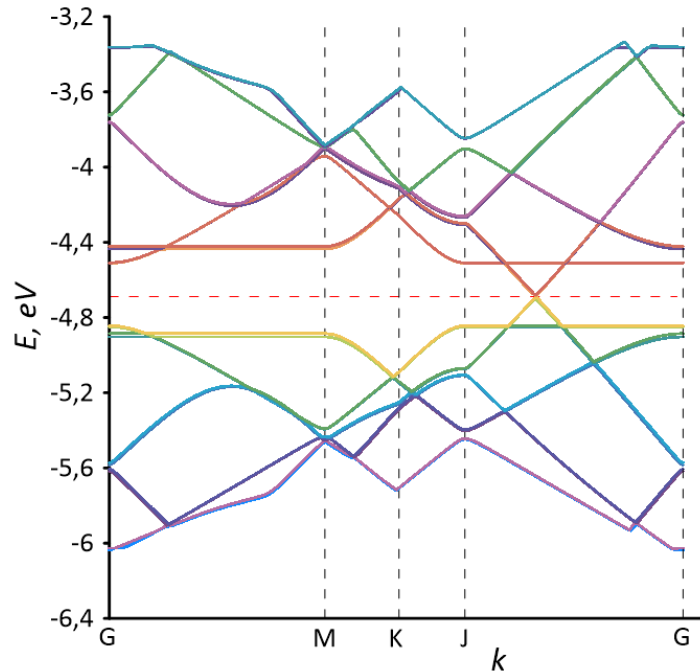


Рисунок 9 - Зонная диаграмма (20 уровней в близи уровня Ферми) для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 9 гексагон и 2 УНТ типа «зигзаг» (6,0). Красной пунктирной линией отмечена энергия Ферми.

На рис. 10-12 приведены графики для функции пропускания слоистых пленок с островковой структурой в двух направлениях, вдоль оси X, вдоль оси Y. Из графиков электропроводности видно, что в зависимости от направления меняется тип проводимости исследуемой структуры.

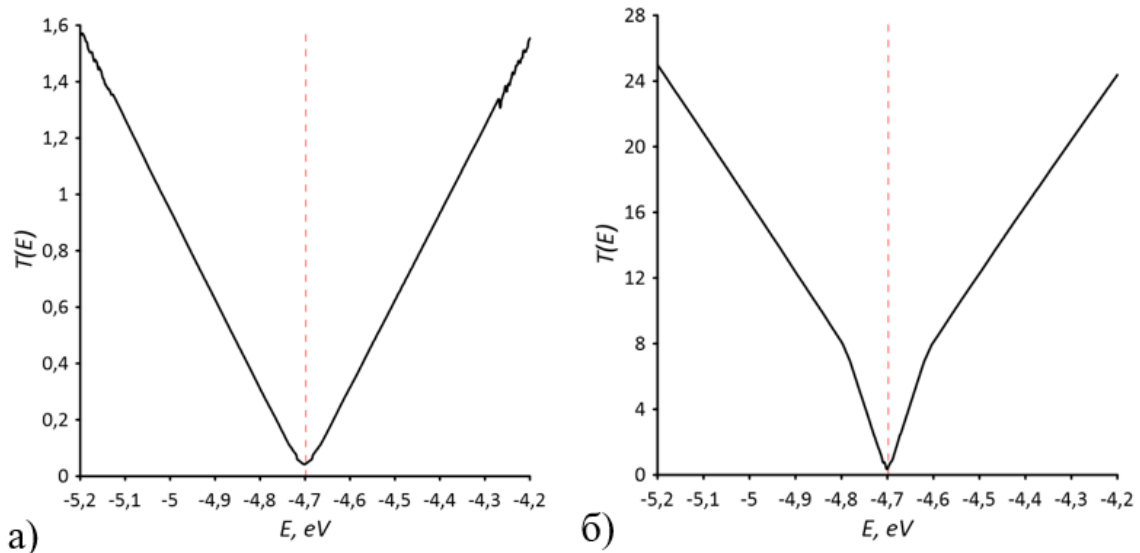


Рисунок 10 - Функция пропускания для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 7 гексагон и УНТ типа «кресло» (5,5). График а) – соответствует направлению токопереноса вдоль оси Ox , б) соответствует направлению токопереноса вдоль оси Oy .

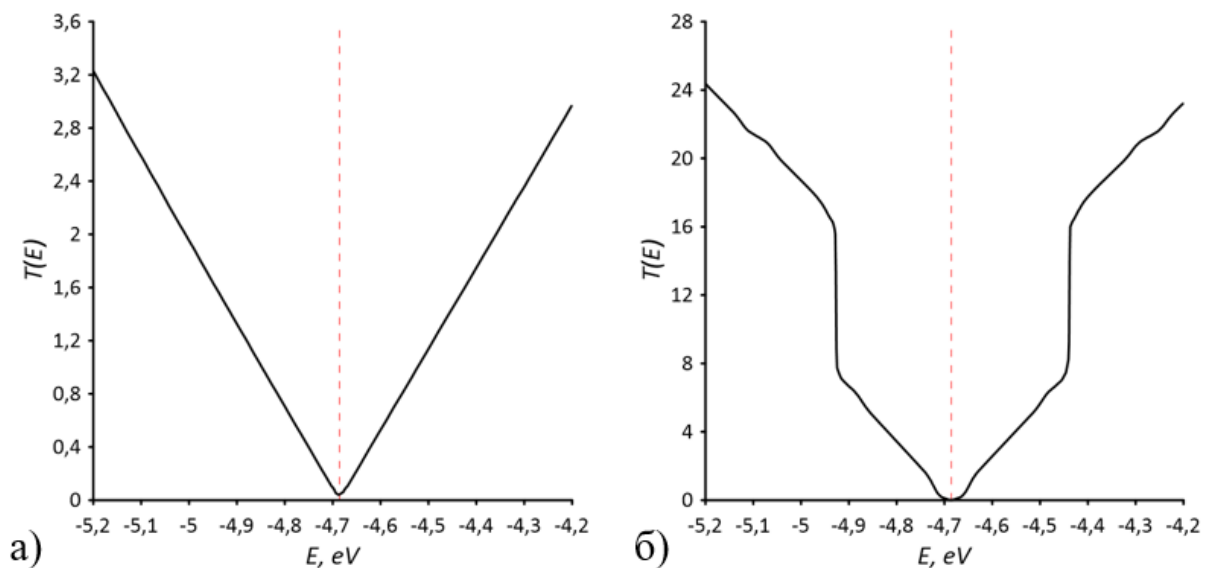


Рисунок 11 - Функция пропускания для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 1 гексагон и УНТ типа «зигзаг» (16,0). График а) – соответствует направлению токопереноса вдоль оси Ox , б) соответствует направлению токопереноса вдоль оси Oy .

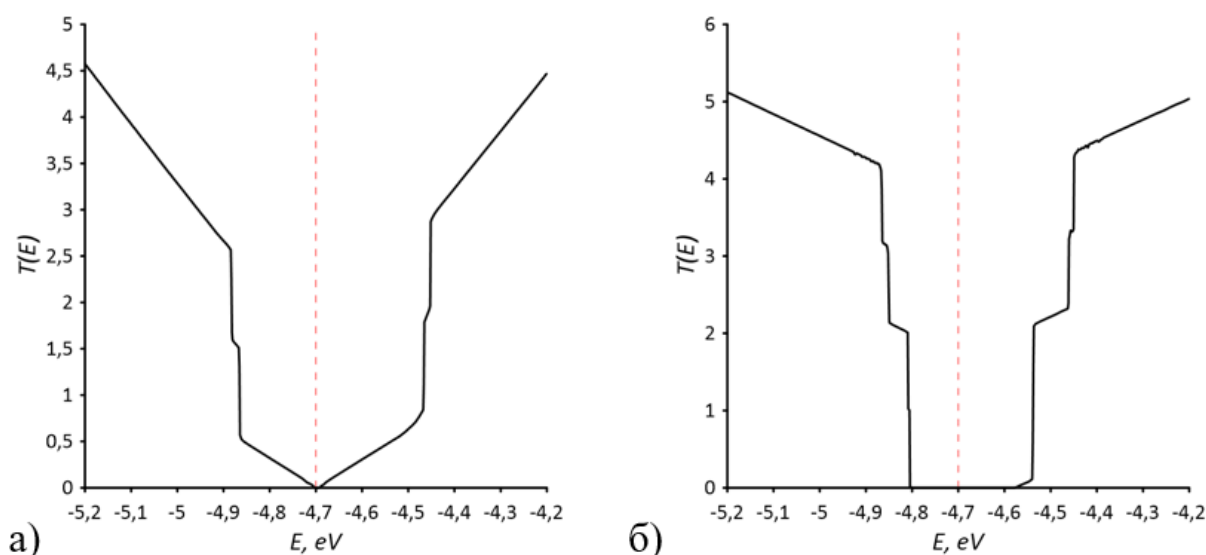
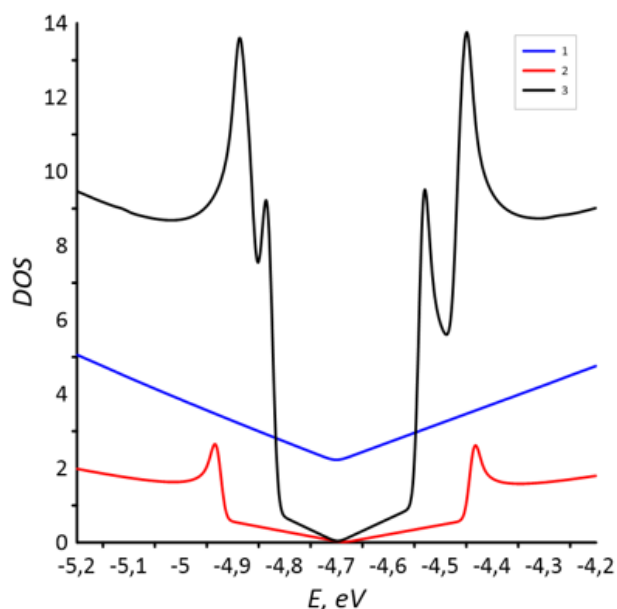


Рисунок 12 - Функция пропускания для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 9 гексагон и 2 УНТ типа «зигзаг» (6,0). График а) – соответствует направлению токопереноса вдоль оси Ох, б) соответствует направлению токопереноса вдоль оси Оу.

На рис. 13 приведены графики плотности электронных состояний. При сравнении графиков видно, что запрещенная зона изменяется в зависимости от хиральности УНТ для трех рассмотренных вариантов.



№	E_F , eV
1	-4.679
2	-4.685
3	-4.697

Рисунок 13 - Плотность электронных состояний для трех исследуемых моделей.

График 1 – соответствует конфигурации слоистой пленки с островковой структурой, содержащая 2 листа графена шириной в 9 гексагон и 2 УНТ типа «зигзаг» (6,0), 2 - соответствует конфигурации слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 7 гексагон и УНТ типа «кресло» (5,5), 3 – соответствует конфигурации слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 1 гексагон и УНТ типа «зигзаг» (16,0).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения выпускной квалификационной работы было проведено исследование закономерностей электрофизических свойств слоистых пленок графен/УНТ с островковой структурой. В ходе решения основной задачи с применением описанных методов построены атомистические модели этих структур. На основе построенных моделей рассчитаны зонные диаграммы материалов, плотность электронных состояний, функция пропускания. Значение уровня Ферми для исследуемых материалов составило -4.679 E, eV для слоистой пленки с островковой структурой содержащая 2 листа графена шириной в 7 гексагон и УНТ типа «кресло» (5,5), -4.685 E, eV для слоистой пленки с островковой структурой, содержащая 2 листа графена шириной в 1 гексагон и УНТ типа «зигзаг» (16,0), -4.697 E, eV для слоистой пленки с островковой структурой, содержащая 2 листа графена шириной в 9 гексагон и 2 УНТ типа «зигзаг» (6,0). Показано, что у первой вышеописанной модели металлический тип проводимости, у остальных моделей полупроводниковый тип проводимости.

Исследование показало, что рассмотренные материалы являются перспективными для дальнейшего исследования и разработки электронных наноустройств.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. П.Б.Сорокин, Л.А. Чернозатонский Полупроводниковые наноструктуры на основе графена // Успехи физических наук. 2013.
2. Sidorov, A., Yazdanpanah, M., Jalilian, R., Ouseph, P.J., Cohn, R.W., & Sumanasekera, G.U. (2007). Electrostatic deposition of graphene. *Nanotechnology*, 18 13, 135301.
3. D.Porezag, Th.Frauenheim, Th.Kohle. Construction of tight-binding-like potentials on the basis of density-functional theory: Application to carbon // *Physical Review B*. — 1995. — Т. 51, № 19. — С. 12947–12957.
4. K.A.Park, Y.S.Choi, Y.H.Lee. Atomic and electronic structures of fluorinated single-walled carbon nanotubes // *Physical Review B*. — 2003. — Т. 68. — С. 045429–1–8.
5. K.A.Park, Y.S.Choi, Y.H.Lee. Atomic and electronic structures of fluorinated single-walled carbon nanotubes // *Physical Review B*. — 2003. — Т. 68. — С. 045429–1–8.
6. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // *Physical Review*. — 1964. — Vol. 136, 3B. — B864–B871. — DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>.
7. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Physical Review*. — 1965. — Nov. — Vol. 140, 4A. — A1133–A1138.
8. Ohno K. Some remarks on the Pariser-Parr-Pople method // *Theoretica chimica acta*. — 1964. — Vol. 2, iss. 3. — P. 219–227.
9. Tersoff J. Empirical Interatomic Potential for Carbon, with Applications to Amorphous Carbon // *Physical Review Letters*. — 1988. — Vol. 61, no. 25. — P. 2879–2882.
10. Modeling of Thermal Transport in Pillared-Graphene Architectures / Varshney V., Patnaik S.S., Roy A.K., Froudakis G., Farmer B. // *ACS NANO*. — 2010. — Vol. 4, 2. — P. 1153–1161.
11. Köhler C., Seifert G., Frauenheim Th. Density functional based calculations for Fen ($n \leq 32$) // *Chemical Physics*. — 2005. — Vol. 309, iss. 1. — P. 23–31.

12. Falkenberg J. T., Brandbyge M. Simple and efficient way of speeding up transmission calculations with k-point sampling // *Beilstein Journal of Nanotechnology*. — 2015. — Vol. 6. — P. 1603–1608.
13. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation / Soler J. M., Artacho E., Gale J. D., García A., Junquera J., Ordejón P., Sánchez-Portal D. // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — Vol. 14, no. 11. — 2745–2779.
14. Dijkstra E. W. A note on two problems in connexion with graphs // *Numer. Math.* — 1959. — Springer Science+Business Media. — Vol. 1, Iss. 1. — P. 269–271. — ISSN 0029-599X.
15. Slater J. C., Koster G. F. Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem // *Physical Review*. — 1954. — Vol. 94, no. 6. — P. 1498–1524.
16. Sidorov, A., Yazdanpanah, M., Jalilian, R., Ouseph, P.J., Cohn, R.W., & Sumanasekera, G.U. (2007). Electrostatic deposition of graphene. *Nanotechnology*, 18 13, 135301.
17. А.В. Елецкий «Углеродные нанотрубки» **167** 945–972 (1997)
18. А.В. Елицкий «Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства» **172** 401-438 (2002)
19. Stoddard S. D., Ford J. Numerical experiments on the stochastic behavior of a lennard-jones gas system // *Physical Review A*. — 1973. — Т. 8. — С. 1504—1512.
20. О.Е.Глухова, А.С.Колесникова, Г.В.Савостьянов. ПО «KVAZAR» платформа для прогностического моделирования в области нано и биомедицинских технологий. Саратов: Саратовский источник, 2015.
21. О.Е.Глухова, Г.В.Савостьянов. Многопроцессорный программно-информационный комплекс моделирования молекулярных систем для супер - ЭВМ «Mizar». Свид№201661289. РФ. 2016.
22. Датта С. Квантовый транспорт. От атома к транзистору. — Журнал “Регулярная и хаотическая динамика”, 2009. — 532 с.

