

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 топологии слоистых углеродных пленок на электронные  
свойства**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента **4** курса **4071** группы

направления 11.03.03 «Конструирование и технология электронных средств»

код и наименование направления

института физики

наименование института

Дворцова Дмитрия Александровича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. ст., уч. зв.

О.Е. Глухова

личная подпись, дата

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

уч. ст., уч. зв.

О.Е. Глухова

личная подпись, дата

инициалы, фамилия

Саратов 2021 г.

## **Введение.**

В настоящее время перспективным и актуальным является применение твердотельных углеродных наноструктур в области физической электроники. Такие наноструктуры, как углеродные нанотрубки (УНТ), графен обладают уникальными механическими и электронными свойствами, что открывает перспективы их использования в самых разных сферах - от электроники нового поколения до биомедицинских приложений.

Известно, что эффективным способом изменения электронных свойств графена является модификация его атомной структуры, например, деформацией различного рода или присоединением атомов другого типа.

Также композитные пленки графен/углеродные нанотрубки (УНТ) являются одним из перспективных наноматериалов. Гибридные композитные пленки представляют собой трубки, лежащие между монослоями графена, параллельно им, ковалентно связанные с графеном или ван-дер-ваальсово. Среди них, в свою очередь, выделяются структуры с параллельным расположением УНТ по отношению друг к другу, шахматным и хаотичным. Существует несколько способов получения таких пленок.

Таким образом, исследование особенностей (УНС) углеродных наноструктур и устройств является одним из перспективных направлений в наноэлектронике, которое способно решить принципиально важные проблемы связанных в электронике.

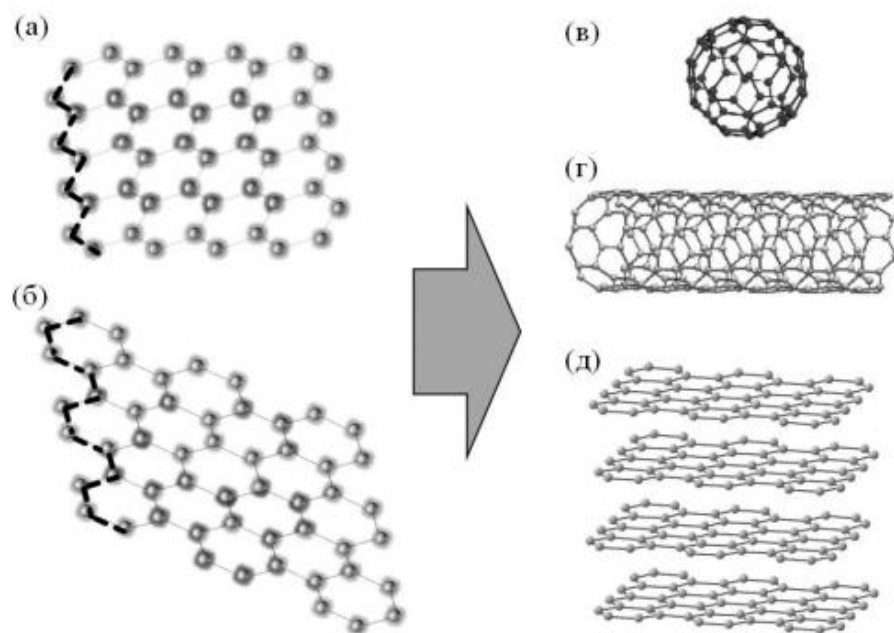


Рисунок 1. Кристаллическая решетка графена с краями типа «зигзаг» (а) и «кресло» (б) (тип края отмечен черной пунктирной линией). Различные производные графена: (в) фуллерен, (г) углеродная нанотрубка, (д) трехмерный графит (фрагмент).

- **Цель данной работы** – Установить влияние изменений электрических свойств на основе углеродных пленок с помощью программного пакета Kvazar

Для этого необходимо решить следующие **задачи**:

- Получить оптимизированные атомные структуры графена
- для полученных структур построить графики зависимости плотности электронных состояний от энергии, а также определить уровень Ферми

**Методы исследования свойств наноструктур.**

Описание поведения молекулярных систем в рамках математического моделирования может быть выполнено с использованием различных методов, а также подходов. Они различаются по точности, количеству используемых приближений и где они применяются.

Для моделирования более крупных молекулярных систем используются полуэмпирические методы, используя набор эмпирических параметров для описания взаимодействий ограниченного класса соединений. Одним из наиболее известных и точных методов этой группы будет называться функциональным методом электронной плотности в приближении сильной связи с расчетом заряда -SCC-DFTB. Этот метод используется для изучения биологических соединений, углеродных наноструктур полупроводников.

Метод SCC-DFTB, также рассчитывает различные электронные – энергетические свойства материала, включая плотность электронных состояний, зонную структуру, энергию Ферми. Кроме того, для различных молекулярных систем используют различные наборы эмпирических параметров - некоторые лучше подходят для описания биологических молекул, другие - для углерода.

Метод SCC-DFTB позволяет рассчитывать структуры, супер-ячейки, которые содержат тысячи атомов различных типов. Для определения оптимальной энергетической конфигурации атомов в молекулярной системе, могут быть использованы математические модели, внутри них энергия молекулы в электронном состоянии является функцией координат ее ядер. Собственными значениями энергии являются потенциалом межатомного взаимодействия с различными функциями.

### **Метод функционала электронной плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением заряда (SCC-DFTB)**

Задействуя приближение мощной связи в рамках способа ФЭП, можно получить последующий вид полной энергии многоатомной системы.

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{occ}} + E_{\text{sc}} + E_{\text{rep}}$$

Соответственно части формулы будут отвечать за взаимодействие электронов, а также энергия отталкивания и занятых состояний.

$$E_{occ} = 2 \sum_{\alpha} f(\epsilon_{\alpha}, E_F) \epsilon_{\alpha}$$

Это слагаемое будет отвечать за энергию занятых состояний, где  $E_F$  Энергия ферми,  $f$ - функция Дирака,  $\epsilon_{\alpha}$ - отвечает за собственные значения.

Следующим слагаемым будет рассматривать энергию взаимодействия электронов и оно будет выглядеть в виде:

$$E_{sc} = \sum_{i,j} Y_{ij}(U_i, U_j, R_{ij}) \Delta q_i \Delta q_j$$

Где,  $R_{ij}$ - расстояние между соседними атомами  $j, i$ .

$U_i$  – параметр Хаббарда, локальное воздействие частиц.

$\Delta q_i, \Delta q_j$  – заряды Малликена.

$Y$  – Кулоновское взаимодействие и корреляционное взаимодействие

К Рассмотрению осталось одно слагаемое выражение  $E_{tot}$ , которое показывает энергию отталкивания  $V_{IJ}$  зависящее от расстояния  $R_{IJ}$ . Если рассматривать систему, состоящую из  $N$  ядер, то

$$E_{REP} = \sum_{I>J} V_{IJ}(\vec{r}_{IJ})$$

$V_{IJ}$  подбирается на основе методов эмпирических данных исходя из метода ФЭП.

### **Зона Бриллюэна.**

Зона Бриллюэна определяется как примитивная ячейка Вигнера-Зейтца во взаимной решетке. Первая зона Бриллюэна-это наименьший объем, полностью закрытый плоскостями, которые являются перпендикулярными биссектрисами взаимных векторов решетки, взятых из начала координат. Концепция зоны Бриллюэна особенно важна при рассмотрении электронной структуры твердых тел. Есть также вторые, третьи и так далее зоны Бриллюэна, соответствующие последовательности непересекающихся

областей (все с одинаковым объемом) на увеличивающихся расстояниях от начала координат, но они используются реже.

### Сила Ван-дер-Ваальса

В молекулярной физике, сила Ван-дер-Ваальса, названная в честь голландского ученого Йоханнеса Дидерика ван дер Ваальса, представляет собой зависящее от расстояния взаимодействие между атомами или молекулами. В отличие от ионных или ковалентных связей, эти притяжения не являются результатом химической электронной связи; они относительно слабы и поэтому более восприимчивы к нарушениям. Сила Ван-дер-Ваальса быстро исчезает на больших расстояниях между взаимодействующими молекулами.

Когда молекулы движутся друг к другу, то возникает притяжение из-за конденсированного состояния. Виды Вандерваальсовской силы относятся водородные связи.

Ван-дер-Ваальс в 1873 году выдвинул предположение, что притяжение между молекулами существует, и вследствие времени называли такие силы Ван-дер Ваальскими. У данных сил есть три составляющие: Диполь дипольные, дисперсионные, а также индукционные взаимодействия.

#### Межмолекулярное взаимодействие (силы Ван-дер-Ваальса)

##### 1. Диполь-дипольное (ориентационное)



##### 2. Индукционное



##### 3. Дисперсионное



Рисунок 2. Вандерваальсовы взаимодействия молекул.

## Результаты моделирования структур углерода.

Атомистические модели углеродной плёнки.

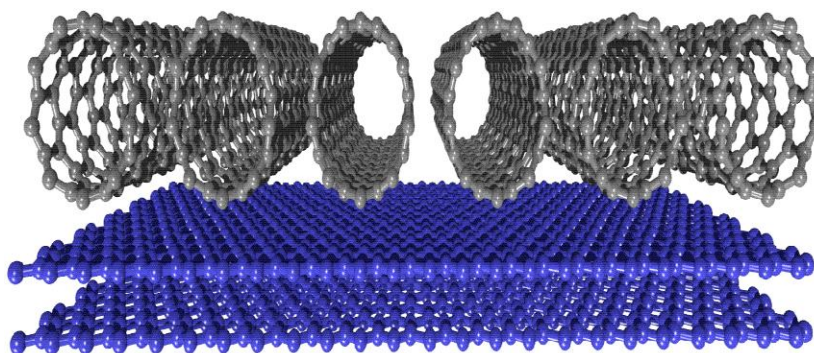


Рисунок 3. Атомистическая модель плёнки углерода(9,0) на двух подложках графена.

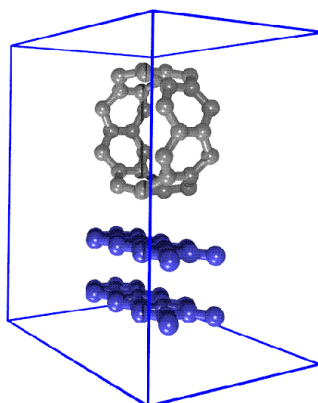


Рисунок 4. Супер-ячейка плёнки углерода (9,0) на двух подложках



Рисунок 5. График зависимости плотности состояний от энергии.

На данном графике можно увидеть следующее. Композитная структура, представляющая углеродную нанотрубку (9,0), расположенную на двух подложках графена демонстрирует полупроводимый тип металлический, поскольку график DOS не соприкасается с осью абсцисс, в нашем случае (Energy, eV). Энергия Ферми равна -4,62 eV. Полная энергия структуры составляет -3173,07 eV. Энергия на атом равна -46,66 eV. Запрещенная зона равна 0,00. Также интенсивность по сравнению с предыдущим графиком резко падает до значения 1,6 это обуславливается потому что мы добавили подложку графена.



Заключение.

В данной работе были рассмотрены углеродные плёнки с различными вариациями, с одной и с двумя подложками графена, в которых были выявлены изменения электрических свойств на основе углеродных пленок.

В данной работе применяли метод приближения сильной связи SCC DFTB+. В ходе работы научилась оптимизировать структуры углеродных плёнок, строить в программе Grapher графики зависимости наших исследуемых моделей, в которых строились графики зависимости плотности состояний DOS от энергии. По ходу выполнения работы рассчитывали энергию Ферми и полную энергию.

Так же рассматривали, как изменяется запрещённая зона с учетом видоизменений структур, то есть где-то энергетическая щель появлялась, а где-то она равнялась нулю. В ходе работы было выявлено, что Энергия на один атом углерода приходится в среднем  $-4,65$  эВ у каждой структуры. Также выявляли какой тип проводимости у углеродных плёнок, он мог быть проводником, полупроводником, а это выявлялось следующим путем, если отсутствует энергетическая щель, то данная структура является проводником, а если энергетическая щель есть, то данная структура имеет полупроводниковый тип проводимости.