

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

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

Кафедра радиотехники и электродинамики  
наименование кафедры

**Закономерности квантового транспорта электронов в 2D-углеродных  
тонких графен/нанотрубных плёнках с учётом туннельного тока  
между их структурными элементами**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

Студента(ки) 2 курса 2233 группы

направления 03.04.03 «Радиофизика»

код и наименование направления

института физики

наименование института

Колесниченко Павла Андреевича

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 2022 г.

**Введение.** Данная работа посвящена вычислению электропроводности туннельного контакта не связанных ковалентно углеродных наноструктур, а также вычислению вольт-амперных характеристик данного процесса и выявлению в них закономерностей для таких структур как листы графена и одностенные углеродные нанотрубки, которые будут представлены не только как отдельные элементы, но и как композиты. Вычисления проводились методами математического моделирования в программе для ЭВМ «Mizar» с использованием методов и теории источников [1], [2]. Непосредственное моделирование структур в программе для ЭВМ «Kvazar» [3].

Двумерные материалы перспективны для использования в атомарно-тонкой электронике, оптоэлектронике и гибкой электронике из-за их контролируемых электронных свойств, оптической прозрачности, легкости переноса на подложку и совместимости с современными технологиями для интегральных схем [4]. Однако подобными свойствами обладают и тонкие пленки с разветвленной структурой, созданные на основе одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ), многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) и графеновых чешуек/нанолеп [5]. В частности, в приведённом источнике наглядно показана структура и процесс формирования таких тонких плёнок в виде снимков сканирующего электронного микроскопа (СЭМ), что показано на рисунке 1. Данное свидетельство ярко показывает важность исследований подобных структур, поскольку в настоящее время уже существуют методики их создания. К тому же, на основании проведённых исследований была опубликована работа [6], показывающая важность и перспективность данного исследования.

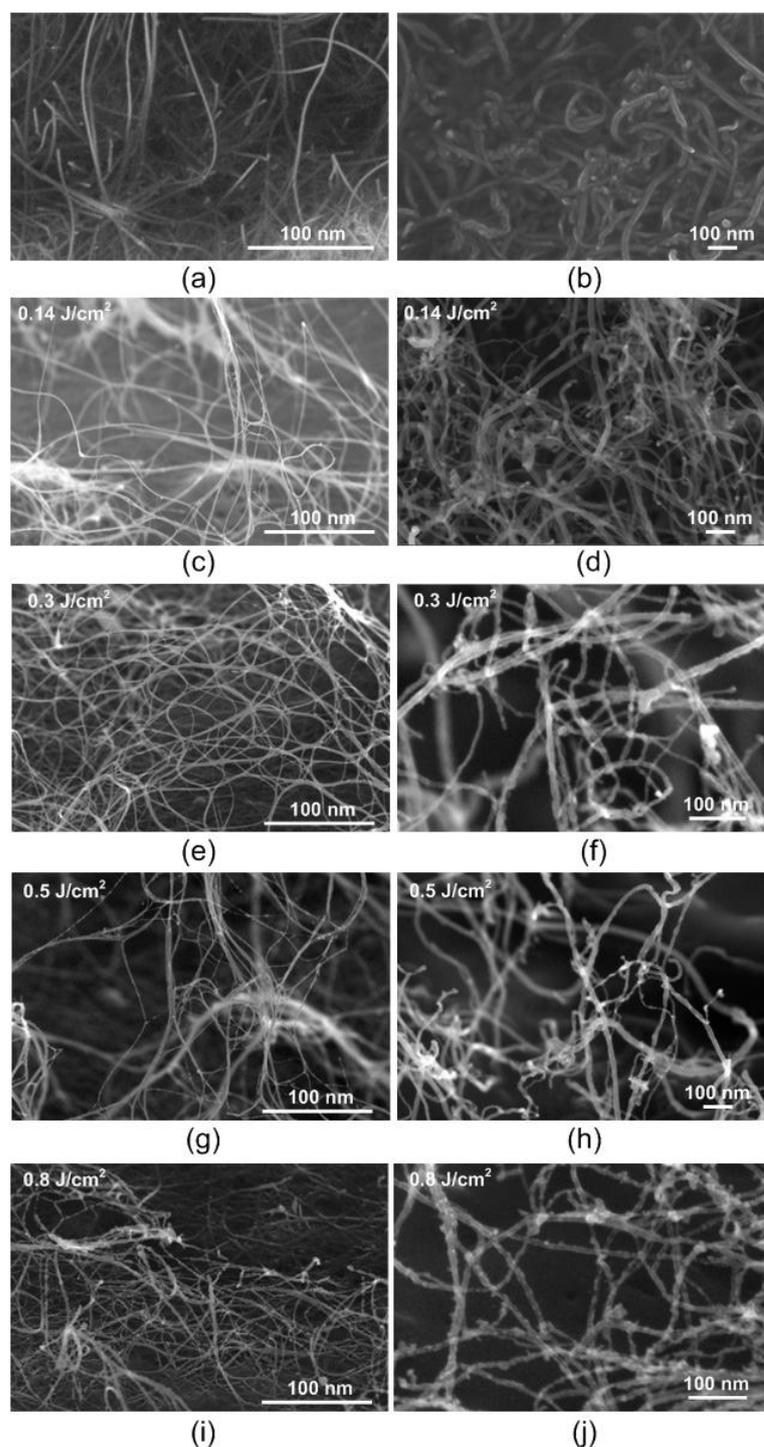


Рисунок 1. Снимки СЭМ (a,c,e,g,i) ОУНТ и (b,d,f,h,j) МУНТ (a,b) перед и (c-j) после воздействия лазером различной энергии на них [5].

Управление топологией пленок осуществляется лазерным направленным воздействием, с одной стороны, а с другой — синтез графена с молекулярно ровными краями был достигнут уже десятилетие назад [7–11]. Эффект краевых состояний графеновых нанолент уже исследован для применений в планарной графеновой электронике [12]. Показано, что планарная конфигурация графена

открывает широкие возможности для построения на его базе туннельного полевого транзистора [13]. Применениям ОУНТ посвящено много работ. Как неоднократно показано, ОУНТ могут использоваться в полевых транзисторах [14], в нанохроматографии [15], различных сенсорах [16]. При этом нанотрубки образуют сетки с разветвленной структурой. Современный подход к синтезу сеток на основе ОУНТ и графеновых фрагментов с помощью лазерного облучения, позволяет получить высокопрочные и высокопроводящие тонкие пленки, применяемые не только в электронике, но и в биомедицине [5].

Одним из важных вопросов применения таких сеток в полевых транзисторах является влияние сопротивления туннельного перехода между структурными элементами сетки и контактными электродами на характеристики транзисторов. Однако если подобные сетки и не применяются в транзисторах, то всегда остается актуальной проблема влияния туннельных переходов, связывающих отдельные фрагментарные структурные элементы друг с другом, на электропроводность всей наноструктурной системы [17,18].

Целью данной работы является изучение протекания контактного туннельного тока в ковалентно несвязанных наноструктурах путём построения ВАХ процесса и вычисления контактного сопротивления (электропроводности) для них.

Для достижения этой цели необходимо решить следующие задачи:

- 1) Изучить специальную литературу по данной теме;
- 2) Построить атомистические модели суперячеек исследуемых структур в программе для ЭВМ «Kvazar»;
- 3) На основе составленных моделей для отдельных структур рассчитать и построить графики ВАХ процесса в программе «Mizar», а для фрагментов сетки – определить энергетически стабильные, рассчитав энтальпию реакции;
- 4) Построить ВАХ для энергетически стабильных фрагментов сетки;

- 5) Рассчитать контактное сопротивление (электропроводность) для всех рассмотренных случаев;
- б) Сделать соответствующие выводы на основании полученных результатов.

Новизна данной работы заключается в исследовании туннельных контактов листов графена с различной топологией контактирующих краёв типа «зигзаг» и «кресло», ОУНТ различных типов, а также их совокупности в виде листов графена, размещённых над ОУНТ.

Практическая значимость работы состоит в том, что благодаря определению зависимостей в туннельных контактах структур в сетках, данные материалы можно использовать в интегральных схемах и электромагнитных устройствах, в т.ч. полевых транзисторах, наиболее эффективно.

Работа состоит из трёх глав. Первая глава посвящена рассмотрению физико-математического аппарата, используемого в данной работе. Эта глава включает в себя формализм неравновесных функций Грина и метода сильной связи, и их применимость к исследуемым структурам. Во второй главе приведены результаты численного моделирования структур, а так же сравнение полученных результатов с результатами работ [19-22] для доказательства достоверности данной работы. В третьей главе приведены результаты моделирования для композитов структур, рассмотренных во второй главе. В ней исследовались энергетические характеристики оптимизированных структур. Все результаты оформлены в виде рисунков, таблиц и графиков. В заключении, на основе полученных зависимостей приведены соответствующие выводы по работе.

**Основное содержание работы.** Теоретическую основу данной работы составляет метод неравновесных функций Грина (НРФГ) и метод сильной связи применительно к углеродным наноструктурам, таким как листы графена и ОУНТ.

В рамках формализма метода функций Грина и приближения сильной связи [45, 46] ток описывается выражением (1):

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} Tr[A_L(1 - t^+ g_R^- t g_L^-)^{-1} t^+ A_R t(1 - g_L^+ t^+ g_R^+ t)^{-1}] \times [f_L - f_R] d\varepsilon, \quad (1)$$

где  $g_{R,L}^+ = [(\varepsilon + i0^+)1 - H_{R,L}]^{-1}$  – запаздывающая функция Грина для краевых атомов правого (левого) контактов,  $g_{R,L}^- = (g_{R,L}^+)^+$ ,  $A_{R,L} = i(g_{R,L}^+ - g_{R,L}^-)$  – спектральная плотность электронов,  $t$  – матрица взаимодействия атомов левого и правого контактов,  $f_L = f(\varepsilon - eV/2)$ ,  $f_R = f(\varepsilon + eV/2)$ ,  $f(\varepsilon) = [1 + \exp(\varepsilon/kBT)]^{-1}$  – функция Ферми-Дирака,  $kBT = 0.001t0$ ,  $1$  – единичная матрица. Локальная плотность состояний для  $n$ -го атома пропорциональна соответствующему диагональному элементу функции Грина,  $\rho_n(\varepsilon) = -(1/\pi)Img_{nn}^+$ . Поэтому данная величина не иллюстрируется отдельно, ограничиваясь предъявлением действительной и мнимой части функции Грина. Оба контакта подвержены влиянию общего затвора. Реакция системы на напряжение затвора учтена обычным образом:  $H_{R,L}(\varepsilon) \rightarrow H_{R,L}(\varepsilon + V_g)$ .

На основе данного выражения были рассчитаны и построены графики ВАХ для листов графена, расположенных друг к другу сторонами «зигзаг», сторонами «кресло», сторонами с различной топологией «зигзаг» – «кресло» и «кресло» – «зигзаг», а так же углеродные нанотрубки киральностей (6,3), (6,5), (12,6) и (16,0). Вычисления проводились в зависимости от межэлектродных расстояний в 3, 3.4 и 4 Å для листов графена. Для УНТ расстояния были фиксированные и выбирались в диапазоне от 3 до 4 Å. К тому же, для доказательства достоверности работы были вычислены и построены графики ВАХ для монослоёв графена на расстоянии 4.26 Å, аналогично тем параметрам, что использовались в источниках [19-22].

На рисунке 2 показаны сравнения полученных результатов в данной работе (цифра 2) с результатами работ в источниках [19-22] (цифра 1) в виде

ВАХ для листов графена сторонами «зигзаг». Межэлектродное расстояние 4.26 Å.

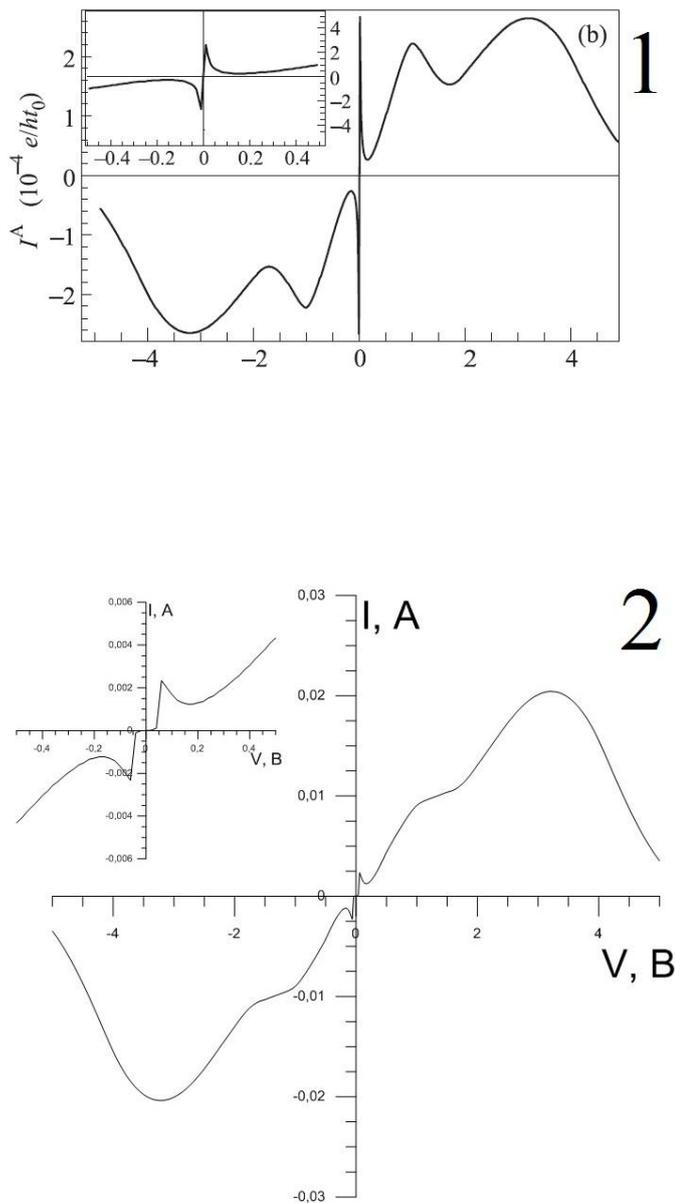


Рисунок 2. Сравнение результатов работы [19-22] (цифра 1) с результатами данного исследования (цифра 2). Изображены ВАХ для случая контакта краёв «зигзаг».

Аналогичные результаты были получены и для случая контакта листов графена сторонами «кресло». На основании этих результатов можно сделать вывод, что ВАХ качественно совпадают на всех участках измерения напряжения. Небольшие качественные отличия объясняются тем, что в работах [19-22] величины тока и напряжения нормировали на величину взаимодействия

двух ближайших атомов углерода. В данном же исследовании величины не нормированы.

На рисунке 3 представлены результаты моделирования прохождения туннельного тока через контакт листов графена сторонами зигзаг (слева) и кресло (справа) в виде графиков ВАХ для различных межэлектродных расстояний. Расстояния отмечены: красным – 4 Å, зелёным – 3.4 Å, синим – 3 Å.

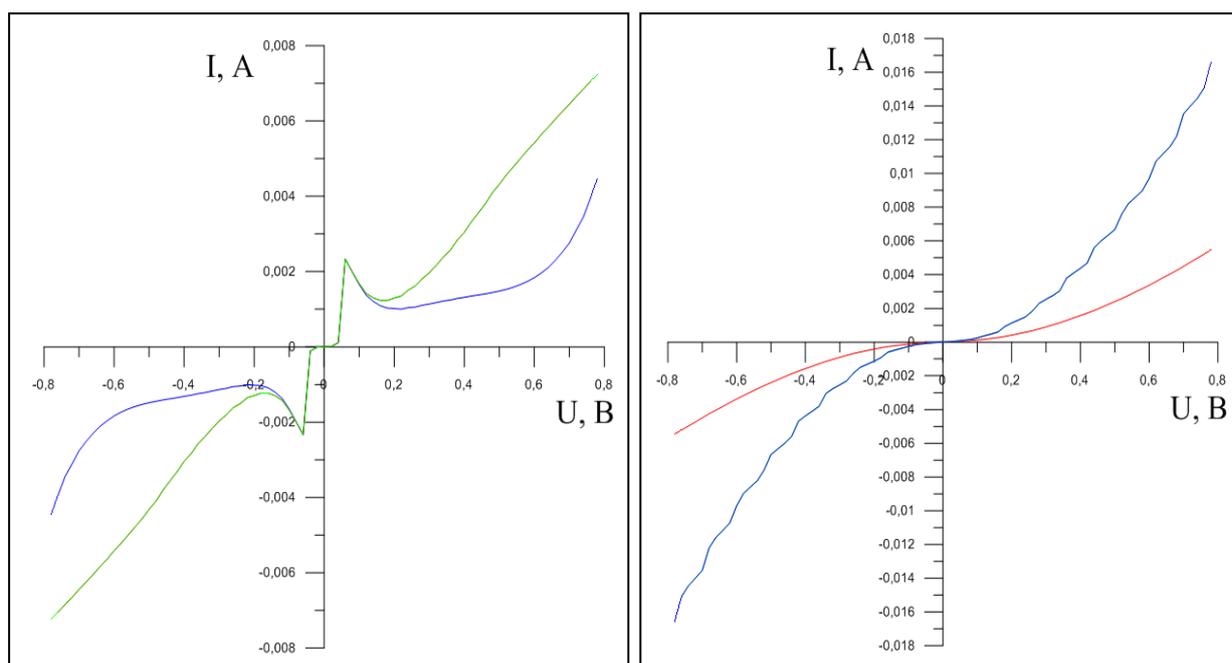


Рисунок 3. Графики ВАХ для контакта листов графена сторонами зигзаг (слева) и кресло (справа).

Как можно увидеть из рисунка 3 на графике слева совпадают красная и зелёная кривые, а на графике справа зелёная и синяя. Можно сказать, что для контакта зигзаг на участке от 0.1 до 0.2 В наблюдается отрицательное диф. сопротивление, чего нет для контакта кресло. Тем не менее, все ВАХ нелинейные.

На рисунке 4 представлены Графики ВАХ для контакта графена сторонами «зигзаг» – «кресло» (слева) и «кресло» – «зигзаг» (справа) для различных межэлектродных расстояний. Расстояния отмечены: красным – 4 Å, зелёным – 3.4 Å, синим – 3 Å.

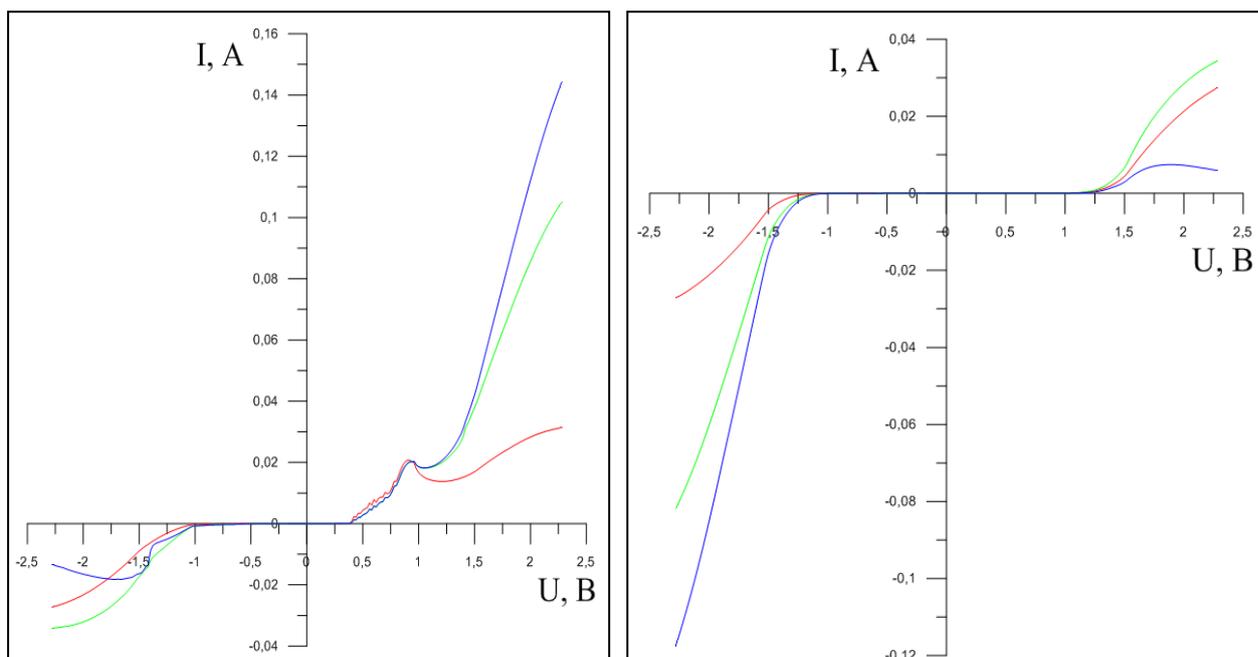


Рисунок 4. Графики ВАХ для контакта листов графена сторонами зигзаг – кресло (слева) и кресло – зигзаг (справа).

Из рисунка 4 видно, что в данном случае ВАХ построены в большем масштабе, поскольку при низких напряжениях ток отсутствует. Здесь можно заметить, что характеристики несимметричны.

Аналогичные результаты для УНТ представлены на рисунке 5. Для сравнения показаны ВАХ для металлической УНТ (6,3) и полупроводниковой УНТ (6,5) слева и справа соответственно.

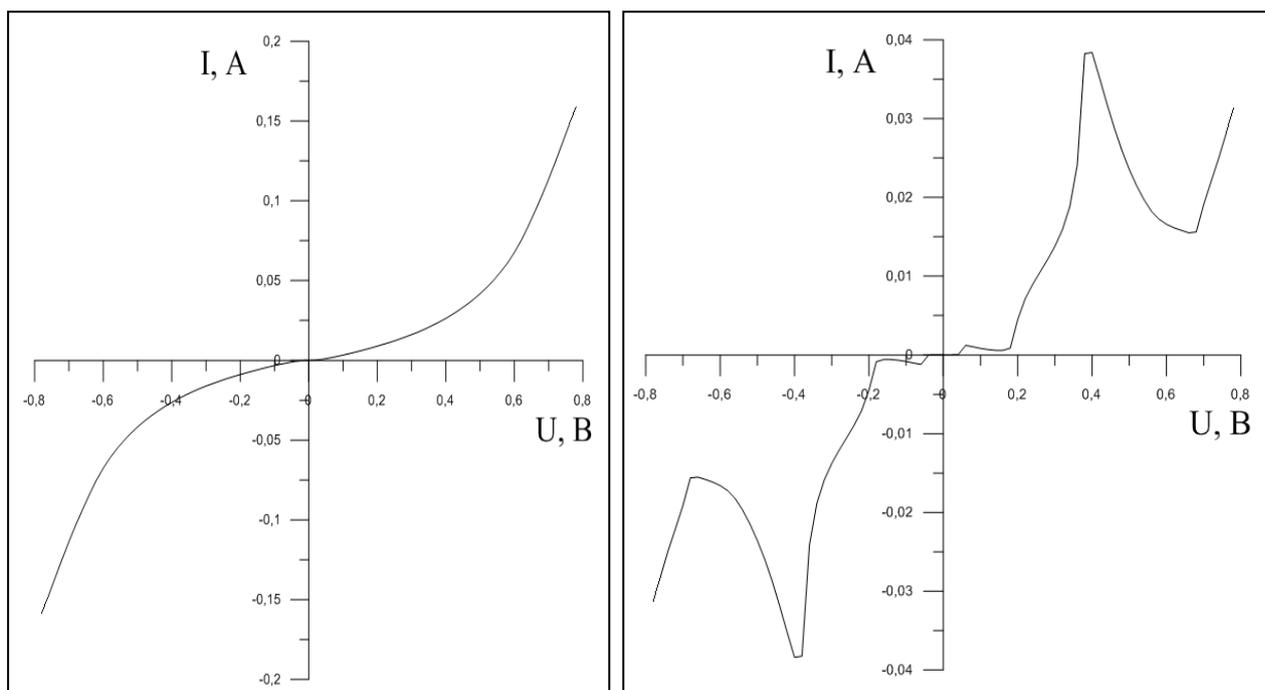


Рисунок 5. Графики ВАХ для случая контакта УНТ различных киральностей.

Характерной особенностью данных графиков является наличие ярко выраженного отрицательного дифференциального сопротивления для полупроводниковой УНТ. Подобные результаты справедливы и для всех исследованных в работе нанотрубок. Для исследованных в работе металлических УНТ сопротивление всюду положительно, а для полупроводниковых имеются участки с отрицательным сопротивлением.

На основании построенных графиков ВАХ были вычислены динамические сопротивления при низком напряжении. Результаты вычислений представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Динамические сопротивления.

Структура	$d, \text{Å}$	$\Delta U, \text{В}$	$\Delta I, \text{А}$	$R_d, \text{Ом}$
№1. Зигзаг	4	0.02	$9.79 \cdot 10^{-5}$	204.29
№1. Зигзаг	3.4	0.02	$9.79 \cdot 10^{-5}$	204.29
№1. Зигзаг	3	0.02	$9.79 \cdot 10^{-5}$	204.29
№2. Кресло	4	0.02	$2.46 \cdot 10^{-5}$	813
№2. Кресло	3.4	0.02	$4.91 \cdot 10^{-5}$	407.33
№2. Кресло	3	0.02	$4.91 \cdot 10^{-5}$	407.33

Продолжение таблицы

№3.1. Зигзаг-кресло	4	0.02	$167 \cdot 10^{-5}$	12
№3.1. Зигзаг-кресло	3.4	0.02	$89 \cdot 10^{-5}$	22.56
№3.1. Зигзаг-кресло	3	0.02	$89 \cdot 10^{-5}$	22.56
№3.1. Обратный ток.	4	-0.02	$-4 \cdot 10^{-7}$	50000
№3.1. Обратный ток.	3.4	-0.02	$-8 \cdot 10^{-7}$	25000
№3.1. Обратный ток.	3	-0.02	$-7 \cdot 10^{-7}$	28571
№3.2. Кресло-зигзаг	4	0.02	$5.71 \cdot 10^{-8}$	350263
№3.2. Кресло-зигзаг	3.4	0.02	$1.438 \cdot 10^{-7}$	139082
№3.2. Кресло-зигзаг	3	0.02	$1.72 \cdot 10^{-7}$	116279
№4. УНТ (6,3)	3.376	0.02	$102 \cdot 10^{-5}$	19.5
№5. УНТ (6,5)	3.715	0.02	$116 \cdot 10^{-5}$	17.2
№6. УНТ (12,6)	3.212	0.02	$63 \cdot 10^{-5}$	31.8
№7. УНТ (16,0)	3.909	0.02	0.015	1.33

Как видно из таблицы 1 для контакта графеновых листов самое малое сопротивление при малом напряжении в случае 3.1, при контакте «зигзаг» – «кресло». В случае же углеродных нанотрубок самое низкое сопротивление наблюдалось в случае контакта зигзагообразных УНТ (16,0).

Помимо отдельных структур были исследованы также композиты на основе листов графена и УНТ. В них листы графена различной ширины располагались над УНТ с частичным перекрыванием листов в вертикальной проекции. Эти структуры оптимизировались в программном пакете DFTB+ и затем для них были вычислены энергетические характеристики, а именно

энтальпия формирования и энергия Ферми. Всего были исследованы композиты на основе УНТ (6,3), (8,4), (16,0) и (12,8). При этом было выяснено, что композиты на основе УНТ (16,0) теряют свою структурную целостность при оптимизации, поэтому для вычислений они не использовались.

Энтальпия формирования структур представлена в таблице 2.

Таблица 2 – Сводная таблица для энтальпии формирования.

№	УНТ	Ширина графена, гексагоны	$L_y, \text{Å}$	$L_x, \text{Å}$	$N_{\text{ат}}$	Энтальпия формирования $E, \text{эВ}$	$E_{\text{прив}}, \text{эВ} / \text{атом}$
1	(6,3)	2	11.273	11.26	138	-4.2023	-0.030
2		3			156	-12.1574	-0.078
3		4			174	-2.4182	-0.014
4	(8,4)	2	11.271	13.72	178	20.4566	0.115
5		3			200	-3.5185	-0.018
6		4			222	-6.3026	-0.028
7	(16,0)	2	4.26 (12.78)	16.006	276	Не оптимизируется	-
8		3			304	Не оптимизируется	-
9		4			332	Не оптимизируется	-
10	(12,8)	4	18.573	19.68	464	-7.7967	-0.017
11		5			496	-8.5653	-0.017
12		6			528	-8.7022	-0.016

В таблице 2 находятся следующие данные: киральности нанотрубок; число гексагонов в листах графена;  $L_y$  – длина композита по оси Y, она же является длиной УНТ;  $L_x$  – длина композита по оси X, она же является длиной листов графена + 1.42 Å (постоянная решётки графена); количество атомов в композите; энтальпия формирования, которая вычисляется как разность энергий между всей структурой и отдельными её частями, при этом все энергии отрицательные по знаку; приведённая энтальпия, приходящаяся на один атом структуры.

Согласно таблице 2 можно сделать следующие выводы. Все три случая для УНТ (6,3) являются стабильным, т.к. энтальпия образования отрицательна. При этом случай с листами графена, имеющих ширину в 3 гексагона является самым стабильным из всех исследованных структур и имеет энергию -12.1574 эВ. Для УНТ (12,8) результаты схожие. Здесь также все три случая являются одинаково стабильными, разница в энергиях энтальпии образования составляет меньше 1 эВ. Отдельно можно заметить, что в случае УНТ (8,4) при ширине графена в 2 гексагона структура после оптимизации оказалась нестабильной, с энтальпией формирования выше нуля.

Другой энергетической характеристикой структур, вычисленной при помощи программного комплекса «Kvazar», была энергия Ферми. Результаты вычисления представлены в таблице 3.

Таблица 3 – Энергия Ферми.

№	УНТ	Ширина графена, гексагоны.	Энергия Ферми, эВ.
1	(6,3)	2	-5.524
2		3	-5.173
3		4	-4.606
4	(8,4)	3	-5.362
5		4	-4.683
6	(12,8)	4	-5.240
7		5	-5.229
8		6	-5.318

На основании результатов, представленных в таблице 3, можно сделать следующие выводы. Для композитов на основе нанотрубок малой толщины видна зависимость: чем больше размер структуры, тем выше энергия Ферми для неё. А значит тем меньше работа выхода для композита. Подобной зависимости не наблюдается для композита на основе УНТ большого диаметра (12,8). В данном случае уровень Ферми мало меняется при изменении ширины листов графена.

**Заключение.** При написании данной работы была изучена литература по данной теме, были построены атомистические модели суперячеек исследуемых структур в программе для ЭВМ «Kvazar». На основе составленных моделей для отдельных структур рассчитаны и построены графики ВАХ процесса в программе «Mizar», а для фрагментов сетки – определены энергетически стабильные, рассчитана энтальпия реакции. К тому же рассчитаны контактные сопротивления для отдельных структур, а для стабильных фрагментов сетки (композитов) вычислена энергия Ферми. На основании полученных результатов сделаны соответствующие выводы.

При освоении данной темы были выявлены проблемы. А именно: туннельный контакт листов графена расположенных разной топологией имеет несимметричную характеристику. Такое явление нужно учитывать при создании плёночных структур на их основе. А отрицательное дифференциальное сопротивление в контактах полупроводниковых УНТ может сильно влиять на электропроводность плёнок в целом, что также необходимо учитывать.

Новые знания о туннельных контактах фрагментов графен/нанотрубных плёнок, полученные в результате данной работы, крайне важны при оценке электропроводности данных плёнок, поскольку они широко применяются в настоящее время в планарной электронике, в гибкой и высокорастяжимой электронике.

### **Библиографический список**

1. Глухова О.Е., Колесникова А.С., Савостьянов Г.В., Слепченков М.М. ПО "KVAZAR" – платформа для прогностического моделирования в области нано- и биомедицинских технологий: коллективная монография. // Саратов: Изд-во «Саратовский источник». – 2015. – 247 с.
2. Салий И.Н., Колесникова А.С., Глухова О.Е., Кириллова И.В., Коссович Е.Л., Слепченков М.М., Савин А.Н., Шмыгин Д.С. Теоретические методы

- исследования наноструктур // Вестник Самарского государственного университета. Естественнонаучная серия. – 2012. – № 9 (100). – С. 106-117.
3. Glukhova O.E., Savostyanov G.V., Slepchenkov M.M. A new approach to dynamical determination of the active zone in the framework of the hybrid model (quantum mechanics/molecular mechanics) // *Procedia Materials Science*. – 2014. – V. 6. – P. 256-264
  4. J. Liu, R. Li, H. Li, Y. Li, J. Yi, H. Wang, X. Zhao, P. Liu, J. Guo, L. Liu. *New Carbon Mater.* 33, 6, 481 (2018).
  5. A.Yu. Gerasimenko, A.V. Kuksin, Y.P. Shaman, E.P. Kitsyuk, Y.O. Fedorova, A.V. Sysa, A.A. Pavlov, O.E. Glukhova. *Nanomaterials* 11, 8, 187 (2021).
  6. О.Е. Глухова, М.М. Слеченков, П.А. Колесниченко. Туннельный ток между структурными элементами тонких графен/нанотрубных пленок. // *Физика твердого тела*, 2021, том 63, вып. 12.
  7. X. Jia, M. Hofmann, V. Meunier, B.G. Sumpter, J. Campos-Delgado, J.M. Romo-Herrera, H. Son, Y.P. Hsieh, A. Reina, J. Kong, M. Terrones, M.S. Dresselhaus. *Science* 323, 5922, 1701 (2009).
  8. C. Jin, H. Lan, L. Peng, K. Suenaga, S. Iijima. *Phys. Rev. Lett.* 102, 20, 205501 (2009).
  9. A. Chuvilin, J.C. Meyer, G. Algara-Siller, U. Kaiser. *New J. Phys.* 11, 8, 083019 (2009).
  10. Y. He, H. Dong, T. Li, C. Wang, W. Shao, Y. Zhang, L. Jiang, W. Hu. *Appl. Phys. Lett.* 97, 13, 133301 (2010).
  11. H.M. Wang, Z. Zheng, Y.Y. Wang, J.J. Qiu, Z.B. Guo, Z.X. Shen, T.Yu. *Appl. Phys. Lett.* 96, 2, 023106 (2010).
  12. D.A. Ryndyk, J. Bundesmann, M.H. Lin, K. Richter. *Phys. Rev. B* 86, 19, 195425 (2012).
  13. A.M. Ionescu, H. Riel. *Nature* 479, 7373, 329 (2011).
  14. A.D. Franklin, Z. Chen. *Nature Nanotechnol.* 5, 12, 858 (2010).

15. H. Alhassen, V. Antony, A. Ghanem, M.M.A. Yajadda, Z.J. Han, K.K. Ostrikov. *Chirality* 26, 11, 683 (2014).
16. S. Yick, M.M.A. Yajadda, A. Bendavid, Z.J. Han, K.K. Ostrikov. *Appl. Phys. Lett.* 102, 23, 233111 (2013).
17. A. Salehi-Khojin, F. Khalili-Araghi, M.A. Kuroda, K.Y. Lin, J.P. Leburton, R.I. Masel. *ACS Nano* 5, 1, 153 (2011).
18. M.M. Aghili Yajadda. *J. Phys. Chem. C* 120, 7, 3646 (2016).
19. В.Л. Катков, В.А. Осипов. *Письма в ЖЭТФ* 98, 11, 782 (2013).
20. A. A. Glebov, V. L. Katkov, V. A. Osipov. Effect of edge vacancies on performance of planar graphene tunnel field-effect transistor. *EPL*, 118 (2017) 27003 doi: 10.1209/0295-5075/118/27003
21. V. L. Katkov, V. A. Osipov. Graphene-Based Tunnel Junction. ISSN 0021-3640, *JETP Letters*, 2013, Vol. 98, No. 11, pp. 689–694. Pleiades Publishing, Inc., 2013.
22. V. L. Katkov, V. A. Osipov. Review Article: Tunneling-based graphene electronics: Methods and examples. *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena* 35, 050801 (2017);