

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 регулярных структурных модификаций на электропроводность  
графеновых нанолент**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента (ки) 4 курса 423 группы

направления 11.03.03 «Конструирование и технология электронных средств»  
код и наименование направления

физического факультета

наименование факультета

Иванова Евгения Романовича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

к.ф.-м. н., ассистент  
должность, уч. степень, уч. звание

\_\_\_\_\_  
дата, подпись

Г.В.Савостьянов  
инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор  
должность, уч. степень, уч. звание

\_\_\_\_\_  
дата, подпись

О.Е. Глухова  
инициалы, фамилия

Саратов 2019 г.

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, и его производных - графеновых нанолент, 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 и графеновых нанолент 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 графеновых нанолент.

**Целью** выпускной квалификационной работы является исследование влияния регулярных и нерегулярных структурных модификаций, на примере нанопор, на электронные свойства графеновых нанолент типа «зигзаг».

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Построение модели графеновых нанолент, содержащих конечное число структурных модификаций (нанопор).
2. Исследование электронной проводимости построенных моделей в рамках метода неравновесных функций Грина-Келдыша, путем вычисления функции пропускания.

Для проведения исследования электропроводности графеновой наноленты типа «зигзаг» были созданы сегменты с различными вариантами пор. На рис. 1 приведены модели нанопор для графеновой наноленты типа зигзаг шириной 15 гексагон, аналогичные модели были построены для наноленты типа «зигзаг» шириной 30 гексагон. Полученные сегменты были использованы для построения протяженных участков графеновых нанолент с конечным числом нанопор. Протяженная модель наноленты представляла собой последовательность бездефектных сегментов наноленты и сегментов с нанопорами, путем варьирования количества бездефектных сегментов осуществлялось управление расстоянием между нанопорами (см. рис. 1).

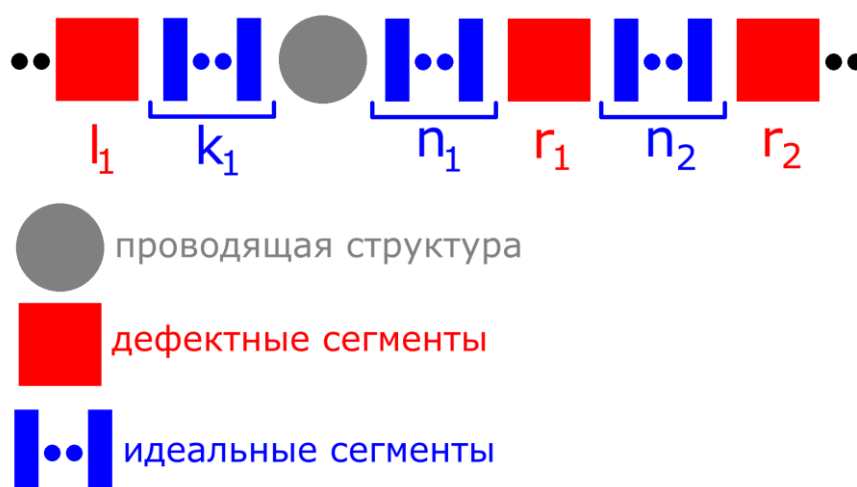


Рисунок 1 – Модель протяженной структуры, представленной виде серии идеальных сегментов и сегментов с дефектами.

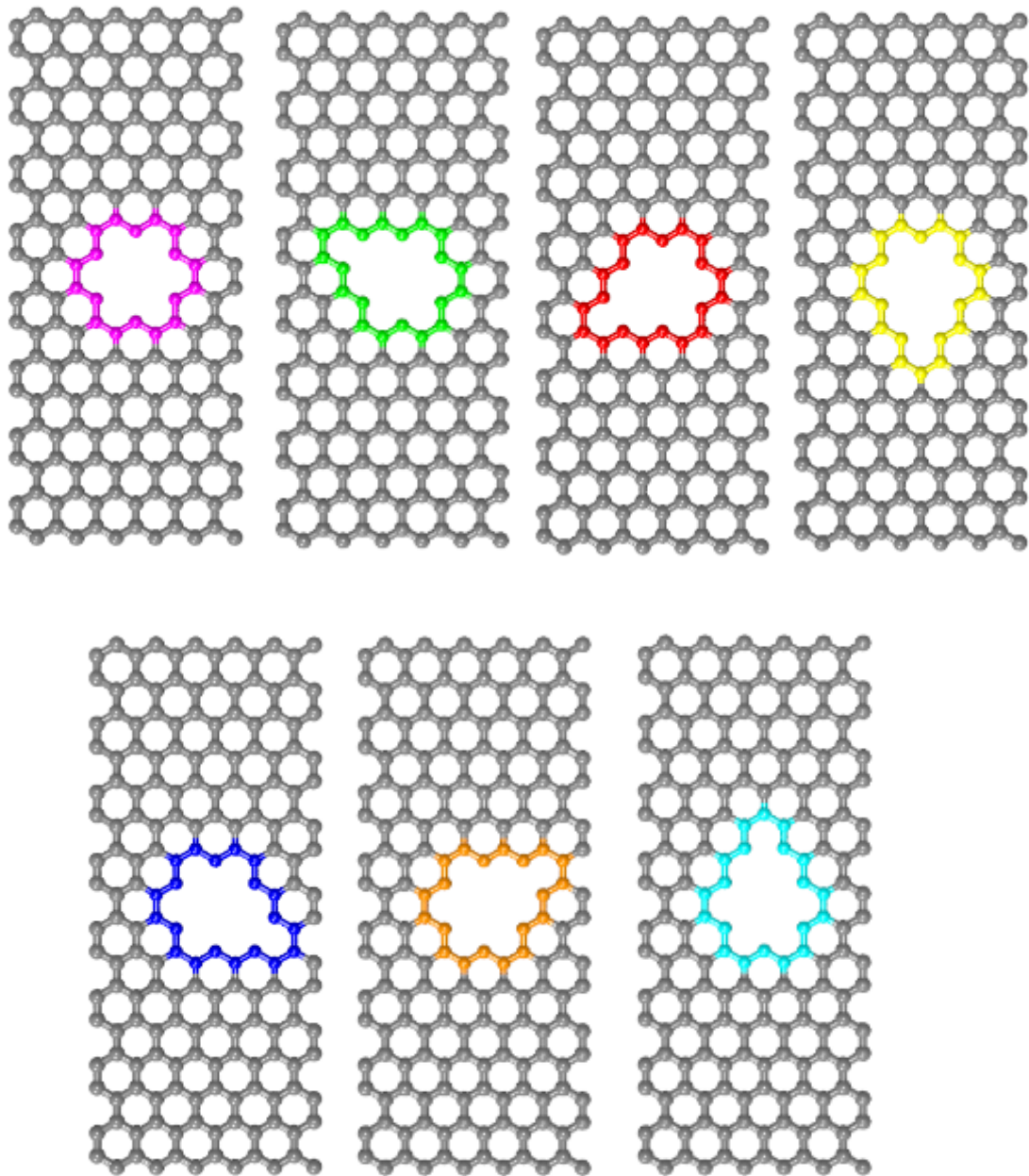


Рисунок 2 - Поры графеновой наноленты типа «зигзаг» с небольшими вариативными изменениями.

Была построена конфигурация графеновой наноленты, состоящей из одинаковых сегментов по (5,10,15,20 пор), при различных расстояниях между сегментами для исследования электропроводности проведены расчеты и построены графики функции пропускания. На рис. 3-5 приведены графики для функции пропускания графеновых наноленты с регулярным расположением конечного числа нанопор, для различных вариантов расстояния между соседними нанопорами. По мере увеличения числа

нанопор наблюдается образование участков нулевой проводимости в функции пропускания, положение которых зависит от расстояния между соседними нанопорами.

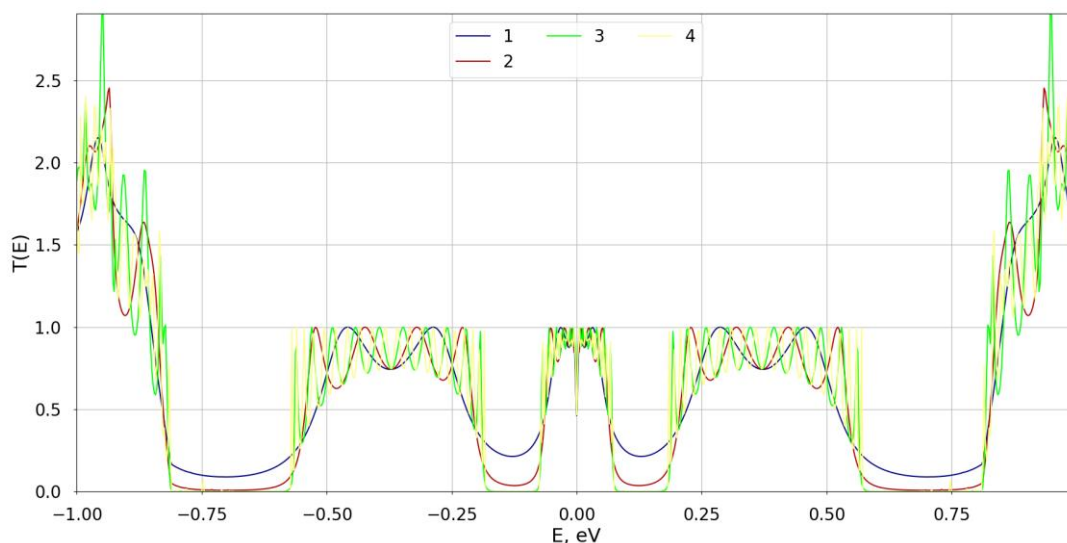


Рисунок 3 - Функция пропускания для 15-ZGNR с N порами при расстоянии между ними  $19.72\text{\AA}$ . График 1 – соответствует конфигурации с количеством пор 3, 2– соответствует конфигурации с количеством пор 5, 3 – соответствует конфигурации с количеством пор 10, 4- соответствует конфигурации с количеством пор 20

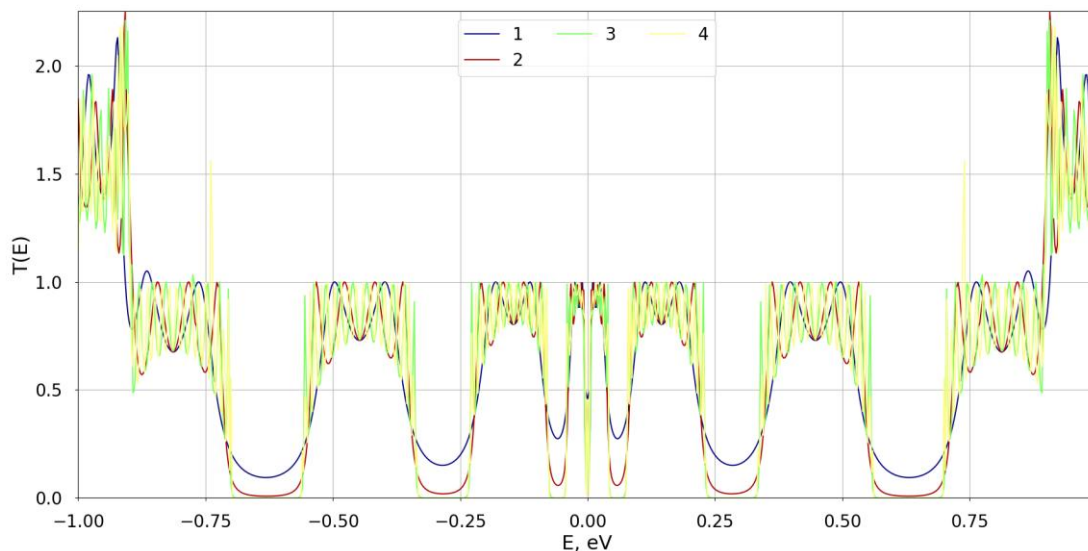


Рисунок 4 - Функция пропускания для 15-ZGNR с N порами при расстоянии между ними 39.56Å. График 1 – соответствует конфигурации с количеством пор 3, 2– соответствует конфигурации с количеством пор 5, 3 – соответствует конфигурации с количеством пор 10, 4- соответствует конфигурации с количеством пор 20

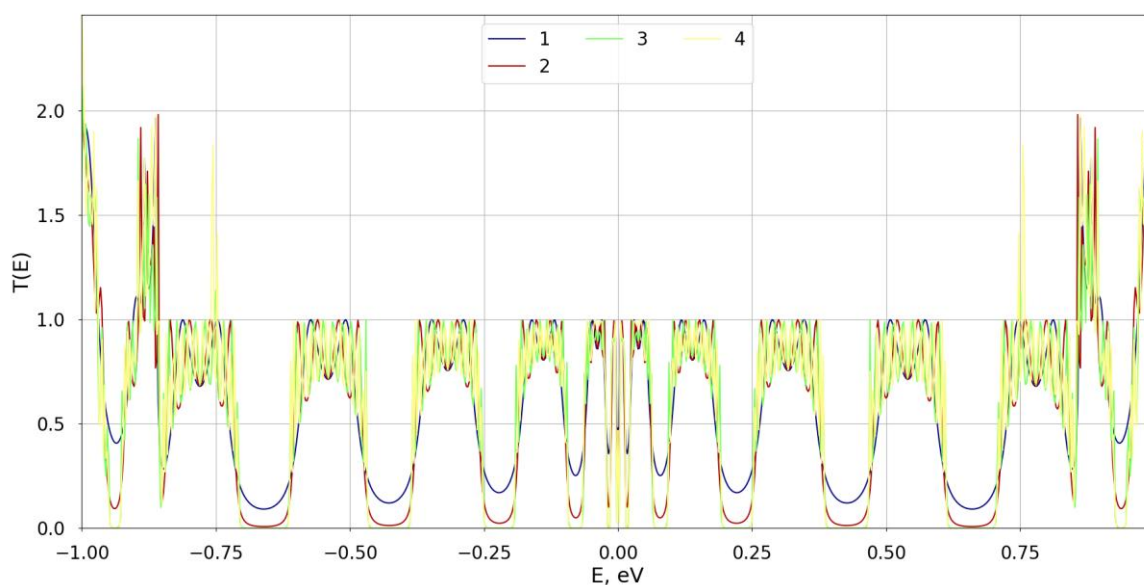


Рисунок 5 - Функция пропускания для 15-ZGNR с N порами при расстоянии между ними 64.36Å. График 1 – соответствует конфигурации с количеством пор 3, 2– соответствует конфигурации с количеством пор 5, 3 – соответствует конфигурации с количеством пор 10, 4- соответствует конфигурации с количеством пор 20

Также была исследована электропроводность нанолент с шириной ленты в 30 гексагон с увеличенным отверстием. Полученные зависимости изображены на рисунках 6-8.

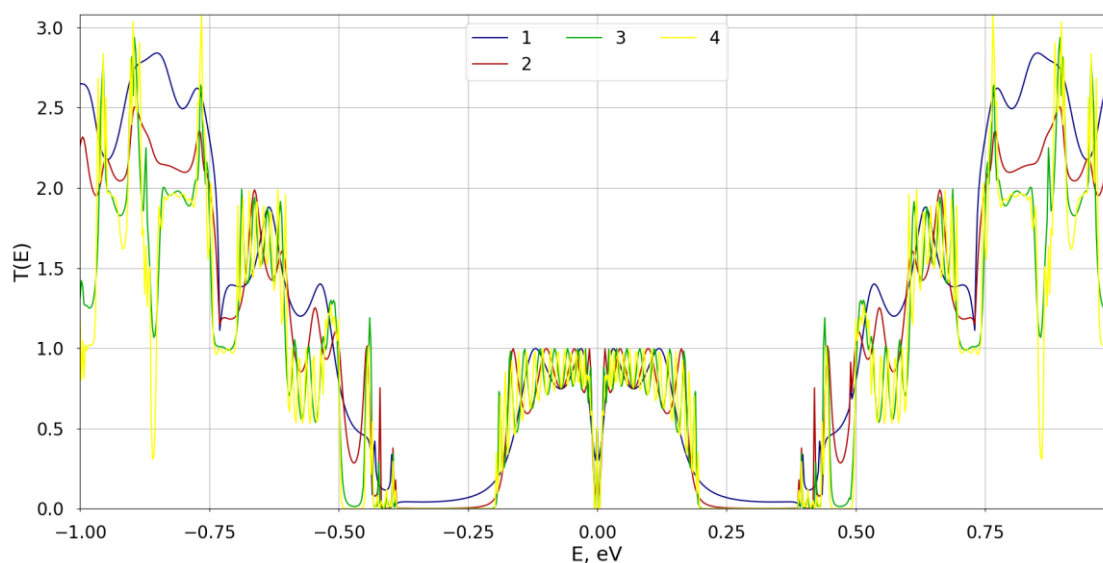


Рисунок 6 - Функция пропускания для 30-ZGNR с N порами при расстоянии между ними  $22.18\text{\AA}$ . График 1 – соответствует конфигурации с количеством пор 3, 2– соответствует конфигурации с количеством пор 5, 3 – соответствует конфигурации с количеством пор 10, 4- соответствует конфигурации с количеством пор 20

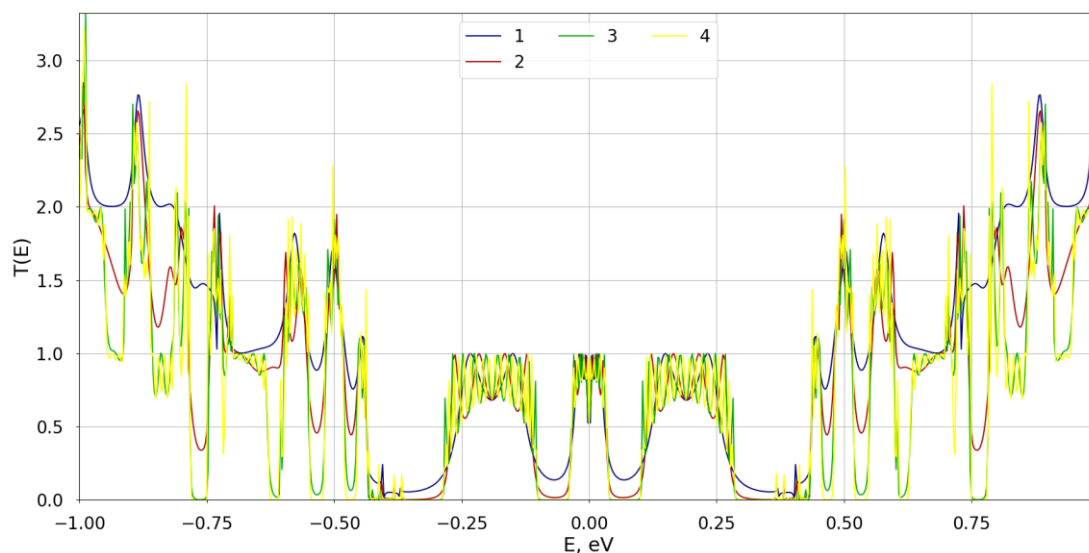


Рисунок 7 - Функция пропускания для 30-ZGNR с N порами при расстоянии между ними 42.02Å. График 1 – соответствует конфигурации с количеством пор 3, 2– соответствует конфигурации с количеством пор 5, 3 – соответствует конфигурации с количеством пор 10, 4- соответствует конфигурации с количеством пор 20

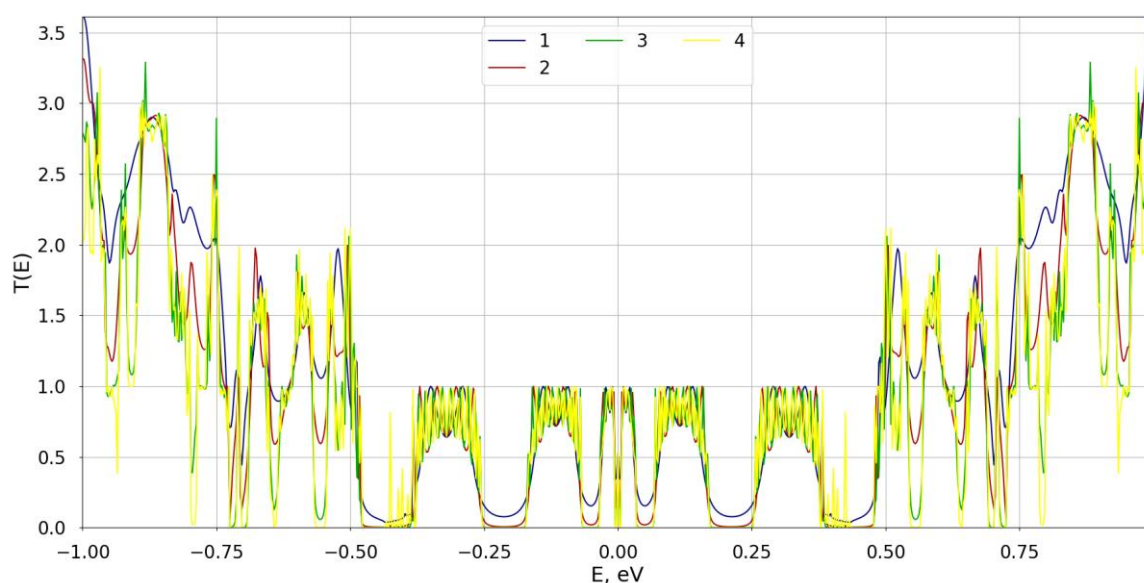


Рисунок 8 - Функция пропускания для 30-ZGNR с N порами при расстоянии между ними 66.82Å. График 1 – соответствует конфигурации с количеством пор 3, 2– соответствует конфигурации с количеством пор 5, 3 – соответствует конфигурации с количеством пор 10, 4- соответствует конфигурации с количеством пор 20



Рассматривались модели графеновых нанолент шириной 15 и 30 гексагон, с нерегулярными структурными модификациями при одинаковых расстояниях между соседними порами. На рис. 9,10 приведены графики функции пропускания для различных рандомизированных конфигураций. Из графиков видно, что функция пропускания может существенно менять в зависимости от конфигурации.

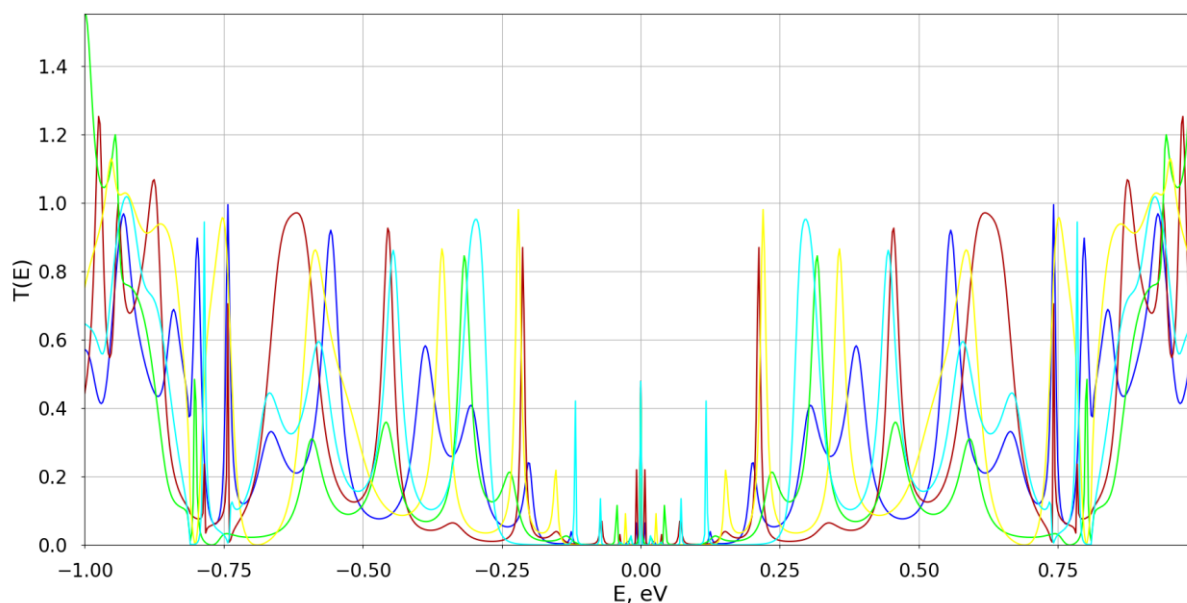


Рисунок 9 - Функция пропускания для 15-ZGNR. 5 конфигураций для серий из 5 неидентичных пор при расстоянии между ними равном 39.56 Å.

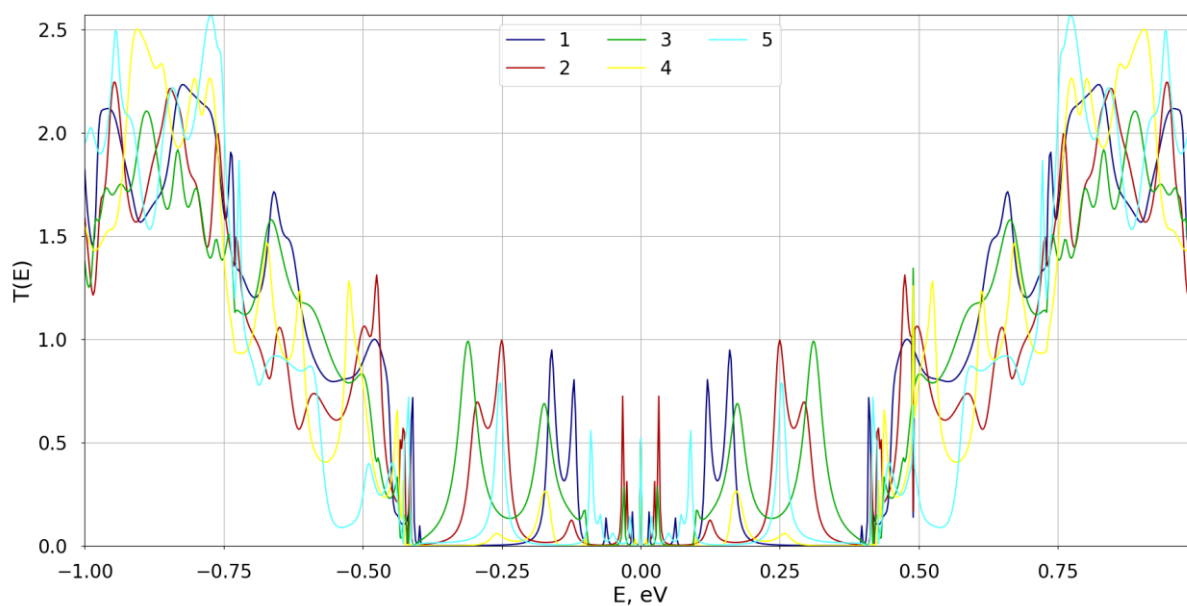


Рисунок 10- Функция пропускания для 30-ZGNR. 5 конфигураций для серий из 5 неидентичных пор при расстоянии между ними равном 66.82 Å.

Рассматривались модели графеновых нанолент, с нерегулярными структурными модификациями. Рассматривалось два варианта

- рандомизированная последовательность моделей нанопор при одинаковых расстояниях между соседними нанопорами (10 конфигураций).

- рандомизированная последовательность моделей нанопор при различных расстояниях между нанопорами (10 конфигураций).

На рисунке 11 приведены усреднённые по конфигурациям графики функции пропускания. При сравнении графиков видно, что существенных изменений в характере функции пропускания не наблюдается для двух рассмотренных вариантов. В частности, не наблюдается образования участков низкой проводимости, как в случае регулярных структурных модификаций.

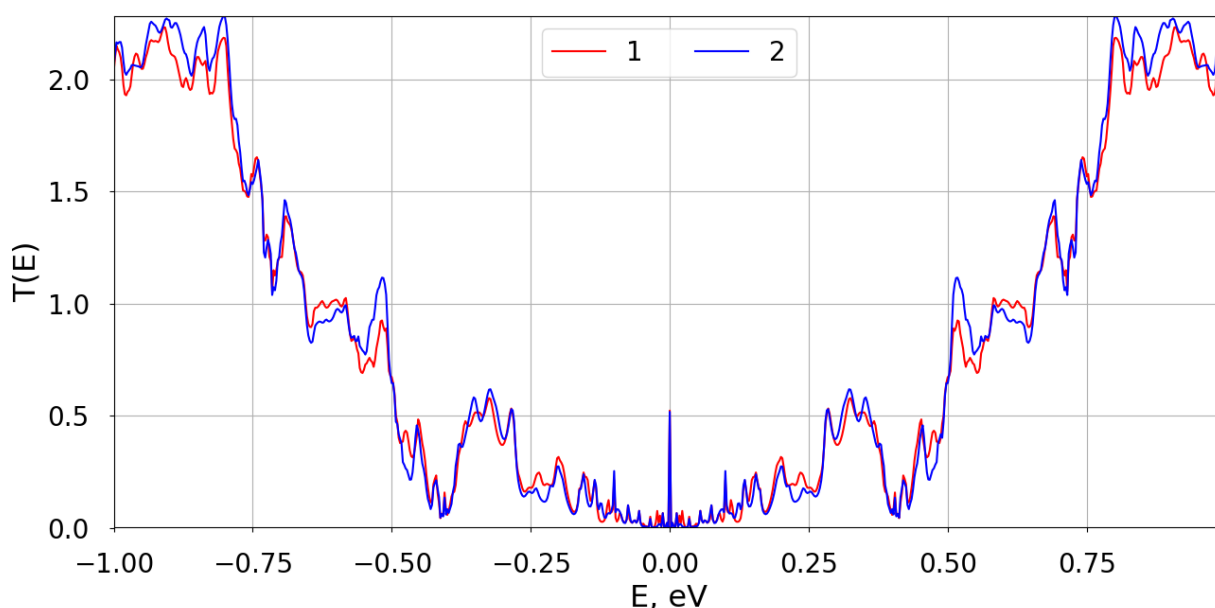


Рисунок 11 – Усредненная функция пропускания для 30-ZGNR с 5 структурными модификациями в виде нанопор. График 1 – соответствует конфигурации с различными расстояниями между нанопорами, 2- соответствует конфигурации с расстоянием между нанопорами  $66.82\text{\AA}$ .

В результате выполнения выпускной квалификационной работы было проведено исследование влияние регулярных и нерегулярных структурных модификаций на электропроводность графеновых нанолент типа «зигзаг». Было установлено, что создание регулярной последовательности конечного числа идентичных нанопор приводит к появлению участков низкой проводимости и локальной электронной плотности в графеновых нанолентах типа "зигзаг". По мере увеличения количества нанопор величина проводимости в этих участках уменьшается до нуля. Путем рассмотрения статистики из 10 моделей нанолент с нерегулярными структурными модификациями было установлено, что как при одинаковом расстоянии между структурными модификациями (нанопорами), так и при различных расстояниях между ними эффекта образования участков нулевой проводимости не наблюдается.