

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

Кафедра радиотехники и электродинамики  
наименование кафедры

**Топологическое управление электронными и электрическими свойствами  
графен-нанотрубных композитных плёнок**

**АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАРВСКОЙ РАБОТЫ**

Студента 4 курса 4033 группы

направления 03.03.03 «Радиофизика»  
код и наименование направления

Института физики

наименование факультета

Прудниковой Евгении Андреевны

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

доцент, к.ф.-м.н., доцент

должность, уч. степень, уч. звание

08.06.2026

дата, подпись

М.М. Слепченков

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

08.06.2026

дата, подпись

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Саратов 2026

## ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время элементная база устройств наноэлектроники создается на основе низкоразмерных материалов, обладающих уникальными свойствами и характеристиками. Одним из наиболее перспективных материалов в этой области считается углерод, который рассматривается специалистами в качестве основного кандидата на замену кремния. Уникальность углерода определяется наличием у него множества аллотропных модификаций, характеризующихся различными свойствами. Среди аллотропных модификаций углерода широко востребованы графен и углеродные нанотрубки (УНТ), а также гибридные материалы на их основе.

На основе графена и графен-содержащих материалов уже разработаны такие устройства, как транзисторы, детекторы электромагнитных волн, фотодетекторы, терагерцовые лазеры, а также гибкие светодиоды [1-3]. В целях дальнейшего улучшения показателей проводимости, теплопроводности и прочности углеродных наноматериалов исследователи стали рассматривать возможность создания так называемых углеродных композитов в виде различных структурных сочетаний УНТ и графена [4,5]. Для формирования гибридных структур графен-УНТ используются как одностенные УНТ (ОУНТ), так и многостенные УНТ (МУНТ), которые могут либо располагаться на графене, либо служить для него подложкой [6,7]. Создаваемые гибридные структуры графен-ОУНТ могут быть использованы в качестве гибких и прозрачных электродов для транзисторов аккумуляторных батарей, сенсоров, а также в качестве эмиссионного источника вакуумных электронных устройств и светособирающего слоя фотоприемника [8,9]. Помимо разработок устройств на основе графен-нанотрубных структур активно проводятся фундаментальные исследования, направленные на выявление закономерностей топологического управления свойствами этих полностью углеродных наноструктур [10,11]. Широкие возможности для проведения фундаментальных исследований физических свойств полностью углеродных наноструктур предоставляют

методы атомистического моделирования, в частности, метод функционала плотности в приближении сильной связи (DFTB) [10], который позволяет рассчитывать квантовый транспорт наноструктур, кристаллические ячейки которых насчитывают сотник и даже тысячи атомов.

Одной из важных особенностей атомного строения нанотрубок и графена является наличие точечных дефектов атомной сетки, формируемых в ходе синтеза. В связи с этим, при проведении вычислительных экспериментов, направленных на прогнозирование свойств графен-нанотрубных гибридных наноматериалов, важно учитывать наличие в них дефектов атомной сетки для более корректного оценивания присущих им физических свойств. К числу наиболее распространенных дефектов относят дефект Стоуна-Уэльса и дефект двойной вакансии. Объектом изучения в выпускной квалификационной работе являются гибридные квази-2D пленки, образованные бислойным графеном и одностенными углеродными нанотрубками (ОУНТ), горизонтально ориентированными по отношению графена и располагающимися, как на графене, так под ним, играя роль подложки. Целью выпускной квалификационной работы было установление закономерностей влияния точечных дефектов Стоуна-Уэльса и двойной вакансии на электронно-энергетические и электропроводные характеристики композитных углеродных плёнок графен–нанотрубка методами атомистического моделирования.

В структуре работы можно выделить несколько составных частей. Во введении обосновывается актуальность темы исследования, формулируются цели и задачи работы. Первая глава посвящена критическому обзору исследований особенностей строения и физических свойств графен-нанотрубных гибридных наноструктур. Вторая глава включает в себя описание используемого в работе физико-математического аппарата. В третьей главе приведены результаты расчета электронно-энергетических и электропроводных характеристик графен-нанотрубных гибридных структур с различными вариантами расположения дефектов. В заключении сформулированы основные результаты и выводы проведенного исследования.

## Основное содержание работы.

Для достижения поставленной цели была разработана комплексная схема вычислительного эксперимента, включающая несколько последовательных этапов.

На первом этапе осуществлялось построение атомистических моделей суперъячеек композитных плёнок. Были выбраны три типа базовых структур, различающихся хиральностью нанотрубок [(5,5), (8,4), (12,6)] и типом упаковки графеновых слоев (AA и AB). Направление оси нанотрубок выбиралось вдоль направления «кресло» графенового листа для минимизации несоответствия решеток.

Второй этап заключался в реализации комбинаторной схемы введения дефектов. Для каждой из трех базовых моделей были определены четыре фиксированные позиции (два слоя графена и две стенки нанотрубки), в которые вводились дефекты типа «двойная вакансия» и «дефект Стоуна — Уэльса». Полный перебор конфигураций ( $3^4 = 81$  для каждого типа) позволил реализовать идею топологического управления свойствами.

Третий этап включал в себя геометрическую оптимизацию всех созданных структур. Использовался метод SCC DFTB, который обеспечивает оптимальный баланс между точностью расчетов и вычислительными затратами для систем, содержащих сотни и тысячи атомов.

На четвертом этапе проводился отбор термодинамически устойчивых конфигураций на основе расчета энергии связи. Для отобранных структур выполнялся квантово-транспортный расчет с использованием формализма функций Грина (NEGF). В результате были получены электронные (плотность состояний, зонная структура) и транспортные (функция пропускания, вольт-амперные характеристики, проводимость) параметры. Общая логика эксперимента направлена на выявление корреляции «топология дефектов — электронный отклик».

Для оценки термодинамической устойчивости гибридных графен-нанотрубных структур рассчитывалась энергия связи  $E_b$  как разность полной энергии композита  $E_{total}$  и суммы энергий его изолированных компонент (графена и УНТ  $E_{bilayer\ graphene} + E_{CNT}$ ) с теми же дефектами:

$$E_b = E_{total} - (E_{bilayer\ graphene} + E_{CNT}). \quad (1)$$

Отрицательные значения  $E_b$  указывают на то, что образование композита энергетически выгодно и структура не развалится при комнатной температуре.

В работе были рассмотрены 3 топологических типа графен-нанотрубных гибридных структур:

1) STR1 - композитная квази-2D пленка, образованная бислоем графеном с типом укладки слоев AA, где каждый атом одного слоя находится над атомами другого слоя, и ОУНТ типа «кресло» с индексами хиральности (5,5) и диаметром  $\sim 0.8$  нм (рис. 17а).

2) STR2 - композитная квази-2D пленка, образованная бислоем графеном с типом укладки слоев AB, где каждый атом одного слоя смещен относительно атомов другого слоя, и одностенными хиральными ОУНТ с индексами хиральности (8,4) и диаметром  $\sim 0.83$  нм (рис. 17б).

3) STR3 - композитная квази-2D пленка, образованная бислоем графеном с типом укладки слоев AB, где каждый атом одного слоя смещен относительно атома другого слоя, и хиральными ОУНТ с индексами хиральности (12,6) и диаметром  $\sim 1.24$  нм (рис. 17в).

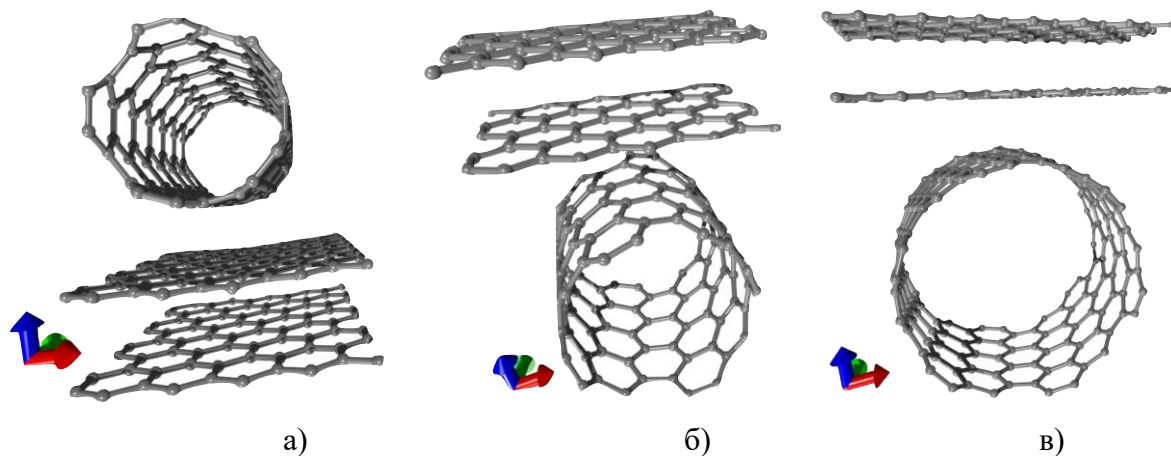


Рисунок 17 – Атомные структуры суперъячеек гибридных квази-2D углеродных пленок: а) графен-ОУНТ (5,5); б) графен-ОУНТ (8,4); в) графен-ОУНТ (12,6)

ОУНТ во всех случаях ориентированы вдоль направления «кресло» графенового листа (вдоль оси  $Y$ ). Взаимодействие между листами графенового листа и ОУНТ во всех моделях осуществляется силами Ван-дер-Ваальса.

Для каждой из исследуемых структур были рассмотрены все возможные варианты расположения структурных дефектов при условиях:

1) В каждом из рассматриваемых мест расположения дефектов (верхний слой графена, нижний слой графена, верхняя и нижняя стенки нанотрубки) может находиться не более одного дефекта.

2) Рассматривается только два типа структурных дефектов: дефект двойной вакансии, при котором из атомной сетки удаляются два соседних атома углерода, и дефект Стоуна-Уэльса, при котором происходит поворот связи между парой соседних атомов на угол  $90^\circ$ .

Для обозначения всех возможных топологических вариантов построения дефектных графен-нанотрубных структур был введен четырехзначный код. Четыре цифры в коде соответствуют четырем возможным местам расположения дефектов в атомной структуре: первая цифра кода — дефект располагается на верхней стенке нанотрубки, вторая — на нижней стенке нанотрубки, третья — верхний лист графена, четвертая — нижний лист графена. Система кодирования троичная, поскольку возможных вариантов для каждой позиции (места возможного расположения дефекта) именно три: 0 — отсутствие дефекта, 1 — дефект двойной вакансии, 2 — дефект Стоуна-Уэльса.

Для графен-нанотрубных структур топологического типа STR1 из 81 возможных вариантов структурных конфигураций с дефектами термодинамически устойчивыми являются 28 вариантов, для структур типа STR2 — 35 вариантов, а для структур типа STR3 — 31.

Для отобранных суперъячеек сначала проводились расчеты зонной структуры, из которых определялись значения уровня Ферми  $E_F$ , используемые в дальнейшем для расчета электрической проводимости  $G$  и электрического сопротивления  $R$ . Для расчета зонной структуры каждой топологической модели

применялся квантовый метод DFTB, в рамках которого строился гамильтониан и рассчитывались энергетические зоны. Отметим, что первая зона Бриллюэна для всех атомных конфигураций гибридных пленок графен-ОУНТ представляет собой прямоугольник, поскольку суперъячейка является периодической только в двух направлениях. Была выбрана траектория обхода зоны Бриллюэна М–Г–J–К–Г. Расчеты проводились в базисе атомных р-орбиталей. Шаг дискретизации для данного расчета был выбран  $dk = 0.0001$ , что обеспечивает достаточную точность расчета. При расчете электропроводных характеристик рассматривались два направления токопереноса: вдоль оси X (направление «зигзаг» гексагональной решетки графена) и вдоль оси Y (направление «кресло» гексагональной решетки графена).

Для гибридных структур топологического типа STR1 наибольшая проводимость вдоль оси Y зафиксирована для конфигурации 2221. В этой структуре все четыре позиции содержат дефекты: двойная вакансия в верхней стенке нанотрубки, дефект Стоуна–Уэльса в нижней стенке нанотрубки, дефект Стоуна–Уэльса в верхнем листе графена и двойная вакансия в нижнем листе графена. Проводимость этой структуры составляет 174.8 мкСм при сопротивлении 5.7 кОм. Близкие значения демонстрируют структуры 0021, 2011 и 2212 с проводимостью около 170 мкСм. Важно отметить, что бездефектные или симметрично дефектные структуры показывают значительно меньшую проводимость. Диапазон значений проводимости для данного типа структур составляет от 4.5 до 174.8 мкСм, то есть различается почти в 40 раз.

Для структур топологического типа STR2 получены наиболее высокие значения проводимости. Структура 1100 демонстрирует рекордную проводимость вдоль оси Y, равную 1.6 мСм, что более чем на порядок превышает значения для всех остальных конфигураций. Коэффициент анизотропии для этой структуры достигает 41, то есть проводимость вдоль оси Y в 41 раз выше, чем вдоль оси X. Интересно, что для структуры 0022 наблюдается обратная картина: проводимость вдоль оси X составляет 194.7 мкСм, что значительно выше проводимости вдоль оси Y, равной 61.7 мкСм. Это подтверждает, что выбор типа

дефектов и их расположения критически влияет на направление максимальной проводимости.

Для структур топологического типа STR3 наибольшая проводимость вдоль оси Y зафиксирована для конфигурации 0100, где дефект двойной вакансии находится на верхней стенке нанотрубки, а все остальные позиции бездефектны. Проводимость этой конфигурации структуры составляет 281.9 мкСм при сопротивлении 3.55 кОм. Близкое значение показывает конфигурация 1000 с проводимостью 275.3 мкСм. Конфигурация 1122 показала значение проводимости 244.8 мкСм, а конфигурация 0122—211.4 мкСм. Обращает внимание, что конфигурация 2122 демонстрирует высокую проводимость вдоль оси X, равную 132.1 мкСм, при достаточно низкой проводимости вдоль оси Y, составляющей всего 0.195 мкСм. Это означает, что для данной конфигурации направление максимальной проводимости переключается с оси Y на ось X.

### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Таким образом, направленно изменяя хиральность нанотрубок, дефектную структуру и взаимную ориентацию компонентов гибридной пленки, можно эффективно управлять её электронными и транспортными свойствами, что открывает перспективы для применения таких материалов в наноэлектронике, сенсорике и гибкой электронике.

### **СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ**

- [1] Schwierz F. Graphene transistors // *Nature Nanotech.* 2010. Vol. 5. P. 487–496.
- [2] Rogalski A. Graphene-based materials in the infrared and terahertz detector families: a tutorial // *Adv. Opt. Photon.* 2019. Vol. 11. pp. 314–379.
- [3] Ryzhii V., Dubinov A., Otsuji T., Aleshkin V., Ryzhii M., Shur M. Double-graphene-layer terahertz laser: concept, characteristics, and comparison // *Opt. Express.* 2013. Vol. 21. pp. 31567–31577.
- [4] Li X. L., Sha J. W., Lee S. K., Li Y. L., Ji Y. S., Zhao Y. J., Tour J. M. Rivet graphene // *ACS Nano.* 2016. Vol. 10. No. 8. pp. 7307–7313.

[5] Lin X., Liu P., Wei Y., Li Q., Wang J., Wu Y., Feng C., Zhang L., Fan S., Jiang K. Development of an ultrathin film comprised of a graphene membrane and carbon nanotube vein support // *Nat. Commun.* 2013. Vol. 4. pp. 2920.

[6] Liu Y., Wang F., Wang X., Wang X., Flahaut E., Liu X., Li Y., Wang X., Xu Y., Shi Y., Zhang R. Planar carbon nanotube–graphene hybrid films for high-performance broadband photodetectors // *Nat. Commun.* 2015. Vol. 6. pp. 8589.

[7] Kumar P., Woon K. L., Wong W. S., Saheed M. S. M., Burhanudin Z. A. Hybrid film of single-layer graphene and carbon nanotube as transparent conductive electrode for organic light emitting diode // *Synthetic Metals.* 2019. Vol. 257. pp. 116186.

[8] Kim H., Kim J., Jeong H. S., Kim H., Lee H., Ha J. M., Choi S. M., Kim T. H., Nah Y. C., Shin T. J., Bang J., Satija S. K., Koo J. Spontaneous hybrids of graphene and carbon nanotube arrays at the liquid-gas interface for Li-ion battery anodes // *Chemical Communications.* 2018. Vol. 54. No. 41. pp. 5229–5232.

[9] Cai B., Yin H., Huo T., Ma J., Di Z., Li M., Hu N., Yang Z., Zhang Y., Su Y. Semiconducting single-walled carbon nanotube/graphene van der Waals junctions for highly sensitive all-carbon hybrid humidity sensors // *Journal of Materials Chemistry C.* 2020. Vol. 8. No. 10. pp. 3386–3394

[10] Hong X., Shi W., Zheng H., Liang D. Effective carbon nanotubes/graphene hybrid films for electron field emission application // *Vacuum.* 2019. Vol. 169. pp. 108917.

[11] Liu Y., Liu Y., Qin S., Xu Y., Zhang R., Wang F. Graphene-carbon nanotube hybrid films for high-performance flexible photodetectors // *Nano Research.* 2017. Vol. 10. No. 6. pp. 1880–1887.