

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ  
ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет»

# Молекулярный дизайн углеродных структур

студент группы ОАБ-03.03.02-41 МАТВЕЕВ ГЕННАДИЙ АЛЕКСЕЕВИЧ

[geno.matveev@gmail.com](mailto:geno.matveev@gmail.com)

научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент, САВИНСКИЙ С.С.

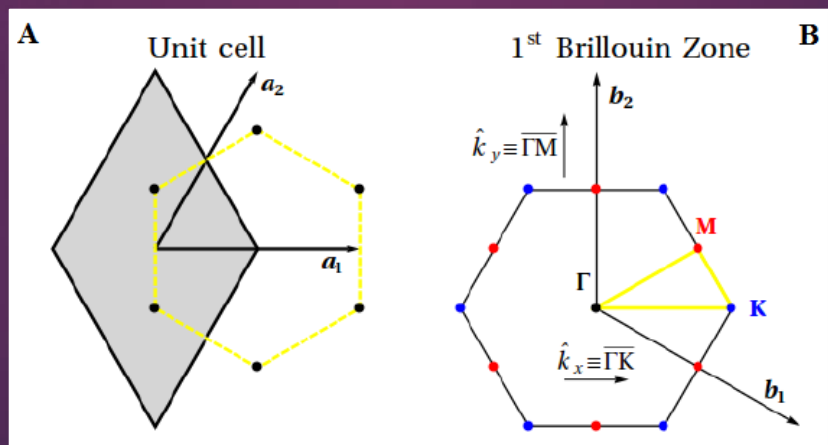
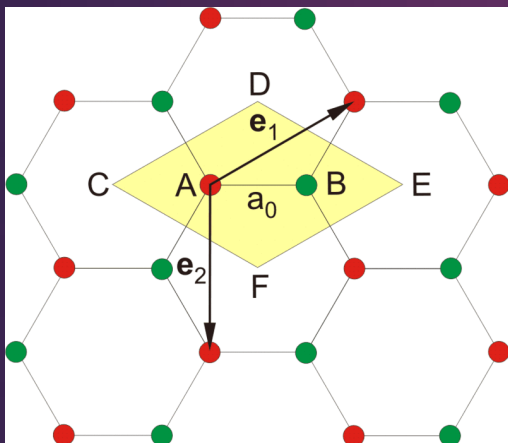
# Задачи:

1. ПОСТРОЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР В МОЛЕКУЛЯРНОМ КОНСТРУКТОРЕ.
2. ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ НА ФОРМИРОВАНИЕ НОВЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР.
3. ОБСУЖДЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКОГО МЕТОДА РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА ДЕФОРМИРОВАННЫХ И ДЕФЕКТНЫХ ДВУМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР, ОСНОВАННЫЙ НА ИСПОЛЬЗОВАНИИ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ДИРАКА В КРИВОЛИНЕЙНЫХ КООРДИНАТАХ.
4. ИЗУЧЕНИЕ КВАЗИДВУМЕРНЫХ СТРУКТУР, ПОЛУЧАЕМЫХ ПРИ ВНЕДРЕНИИ ДЕФЕКТОВ СТОУНА-УЭЛЬСА В ГРАФЕН.

# Обзор углеродных структур

Графен - первый известный истинно двумерный кристалл.

Двумерная аллотропная модификация углерода, образованная слоем атомов углерода толщиной в один атом, соединенных посредством  $sp^2$  связей в гексагональную двумерную кристаллическую решётку. Получена в 2004 году русскими учёными Андреем Геймом и Константином Новоселовым из Манчестерского университета, на подложке окисленного кремния.

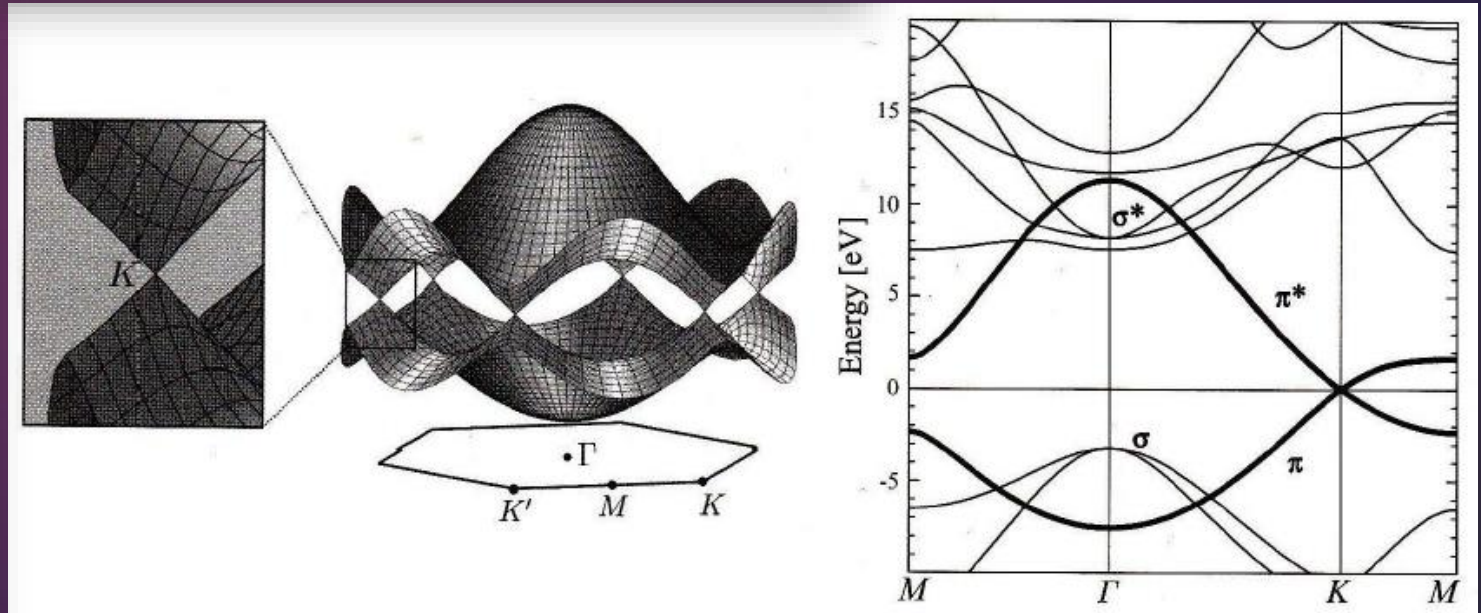
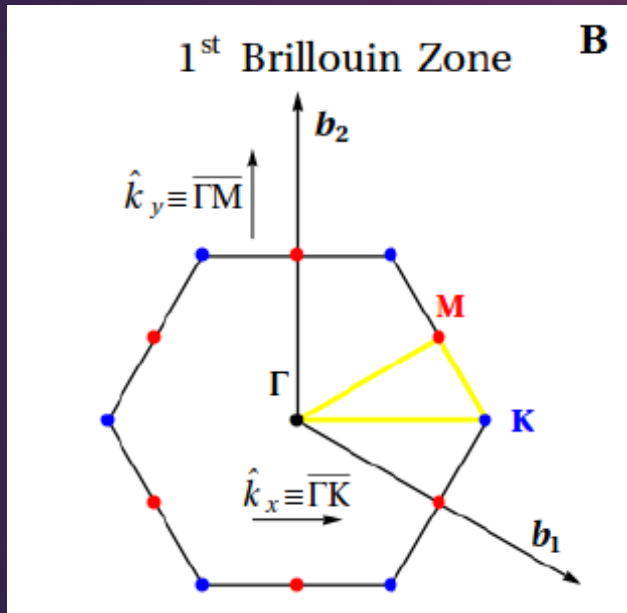


# Обзор углеродных структур

## Электронный спектр графена.

У идеального свободного графена точки Дирака расположены точно на уровне Ферми. Таким образом, графен является полупроводником с нулевой щелью или полуметаллом.

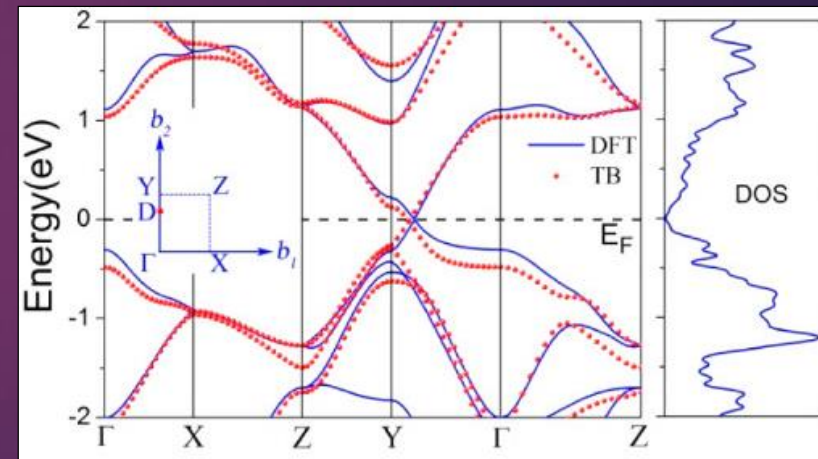
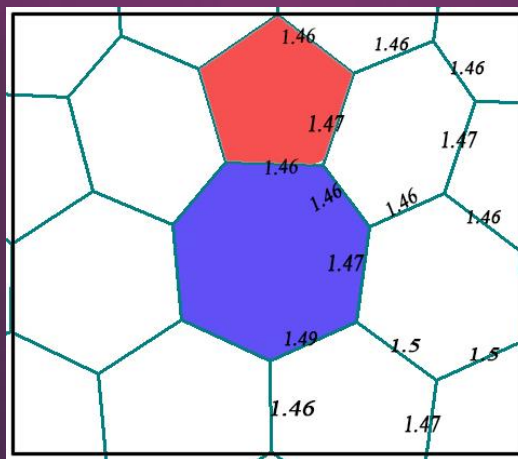
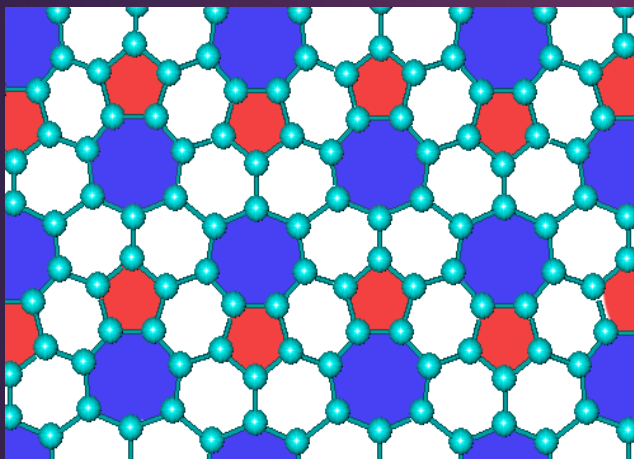
$$E_k = \gamma \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{1}{2} \sqrt{3} a k_y\right) \cos\left(\frac{1}{2} a k_x\right) + 4 \cos\left(\frac{1}{2} a k_x\right)^2}$$



# Обзор углеродных структур

## Фаграфен – «родственник» графена

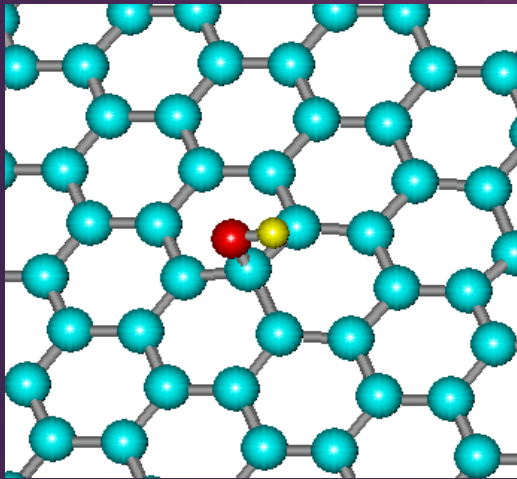
Структура получена при помощи разработанного Огановым алгоритма USPEX. В фаграфене, как и в графене, возникают конусы Дирака, а электроны ведут себя как безмассовые частицы. Из-за разного числа атомов в кольцах конусы Дирака «наклонены», поэтому скорость электронов в нем зависит от направления. Именно этим свойством фаграфен отличается от графена. Такие свойства позволяют рассматривать их как перспективные материалы для гибких электронных устройств, транзисторов, солнечных батарей, дисплеев.



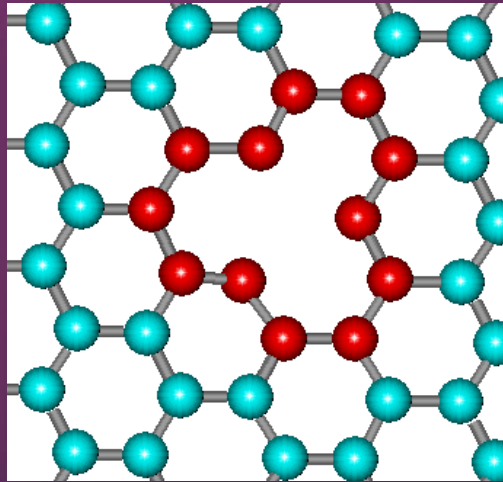
# Дефекты на структурах

## Структурные дефекты

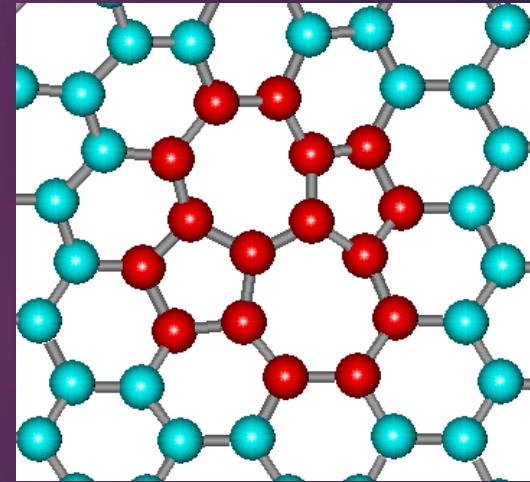
Такие дефекты изменяют электронный и фононный спектр графена, являясь центрами рассеяния для фононов и электронов, так что их наличие сказывается на транспортных характеристиках графена.



С присоединенным  
радикалом OH



Вакансионный дефект



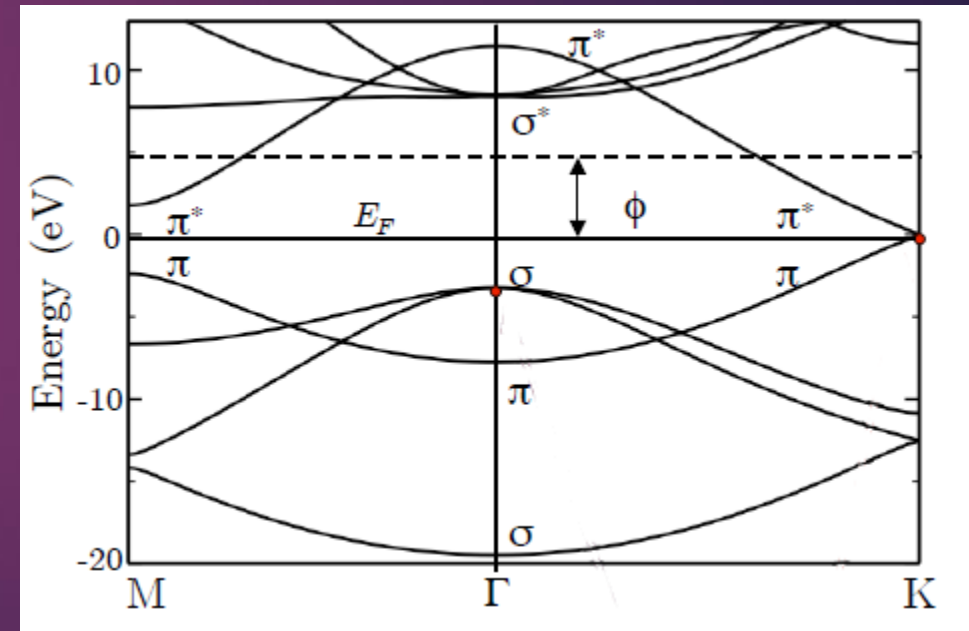
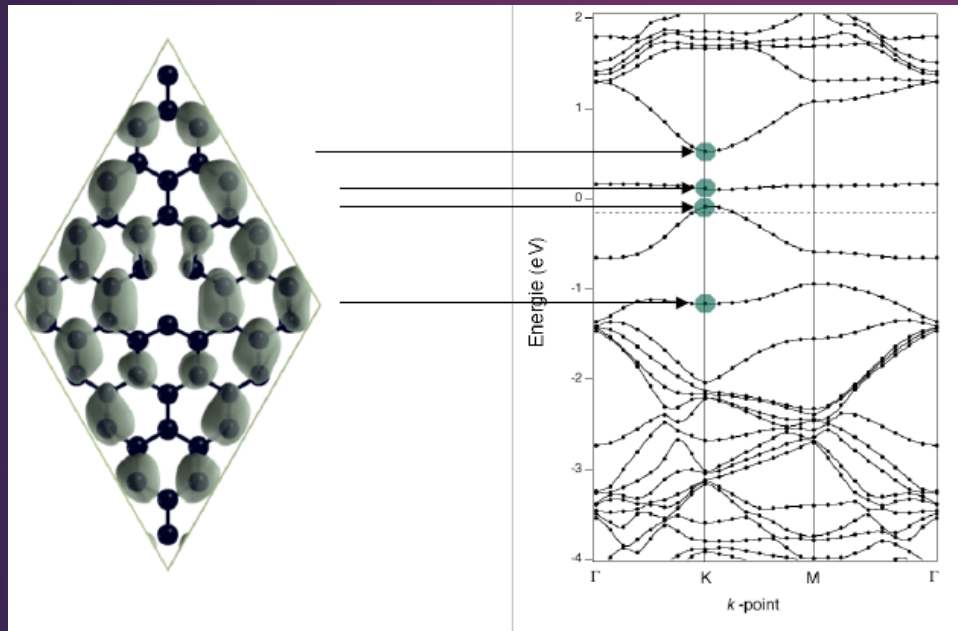
Дефект Стоуна - Уэльса



# Дефекты на структурах

## Структурные дефекты

Электронный спектр структуры с вакансионным дефектом, который существенно отличается от спектра графена

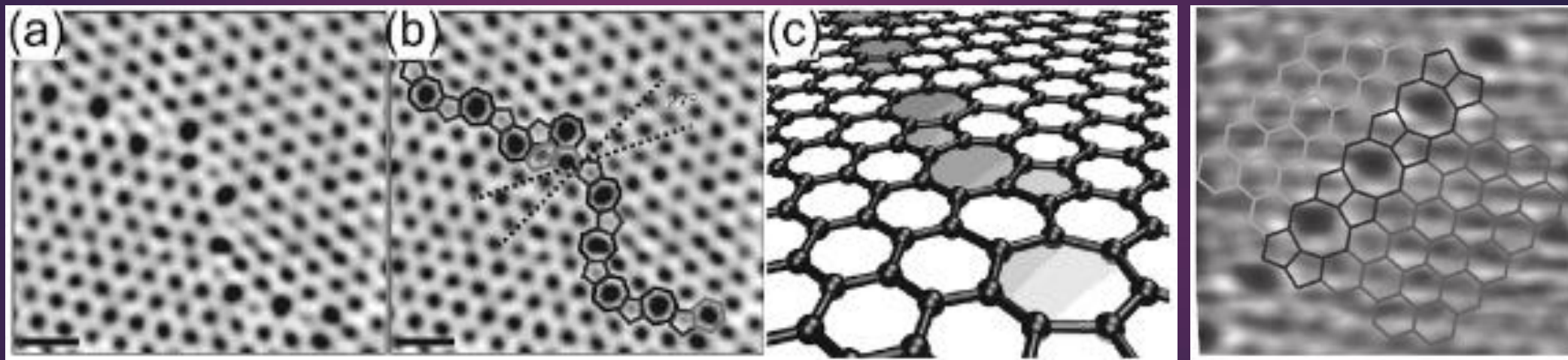


# Дефекты на структурах

## Линейные дефекты

Они вызывают деформацию графенового слоя вдоль линии. Представителями этого класса дефектов являются комбинированные дефекты 5-7 и 4-8. При наличии в графеновом листе такого типа дефекта, искаженной оказывается структура всего слоя – слой перестает быть плоским даже вдали от дефекта.

Изображения с помощью «просвечивающего (трансмиссионного) электронного микроскопа»

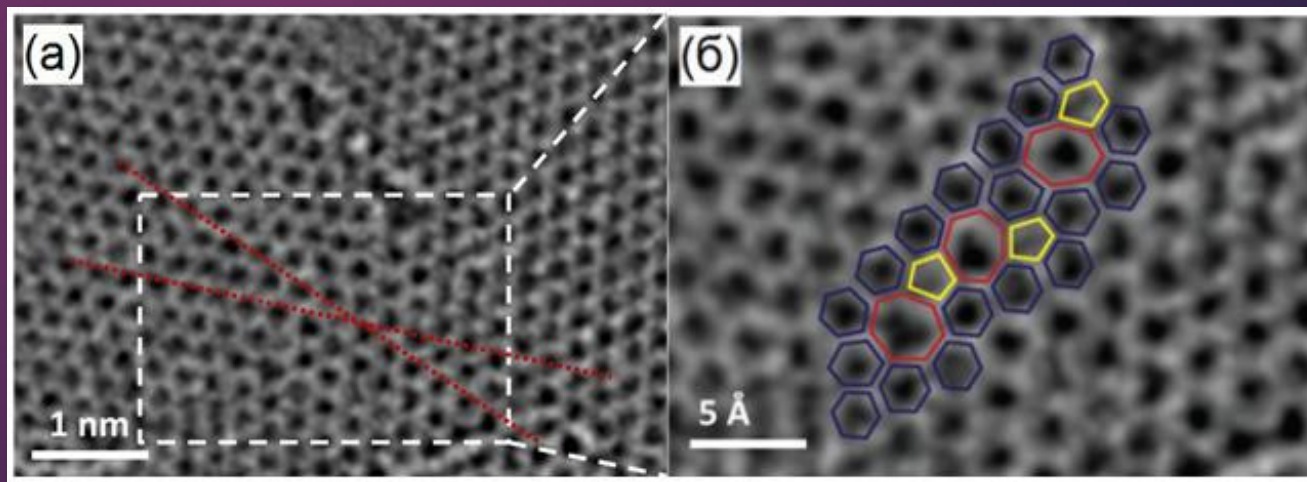
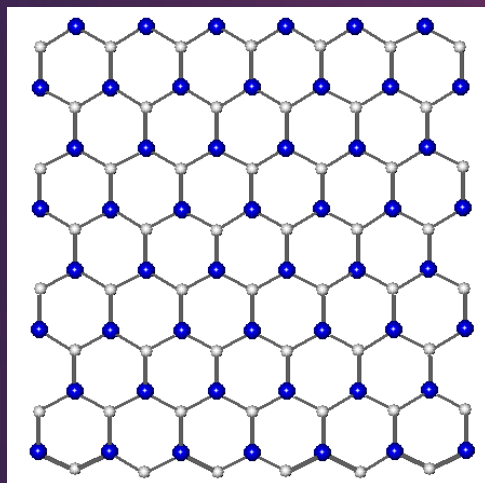




# Дефекты на структурах

## Гексагональный нитрид бора (белый графен)

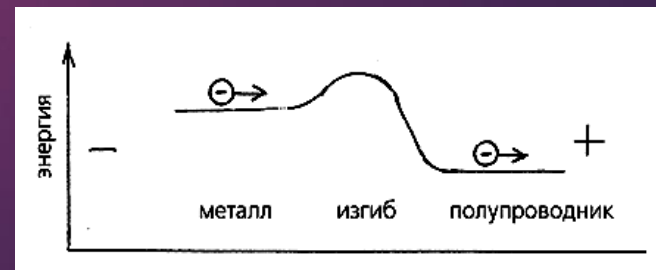
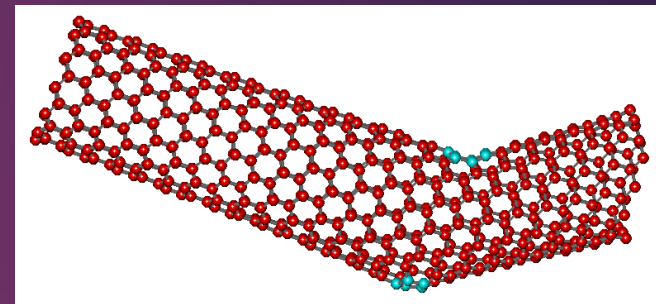
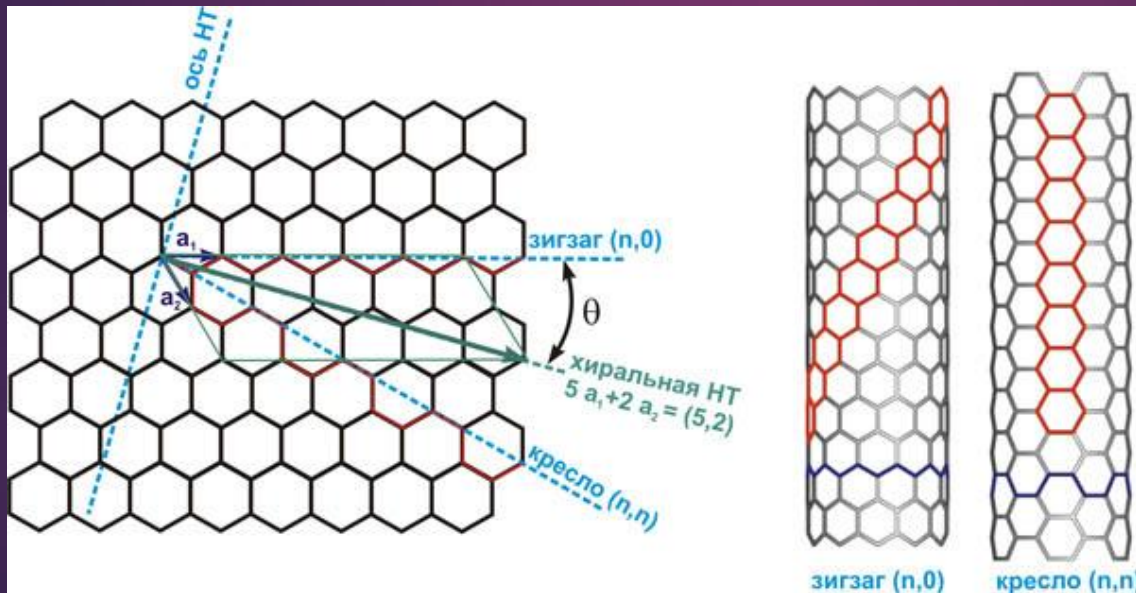
Кристаллический нитрид бора (рис. 1) изoeлектронен углероду и, подобно ему, существует в нескольких полиморфных модификациях. Нитрид бора формально считается полупроводником, однако запрещённая энергетическая зона в этом веществе настолько велика, что во всех практических ситуациях он ведёт себя как изолятор. На изображении, полученном с помощью ПЭМ (рис. 2), представлена межзеренная граница монослоя BN [1], подразумевает наличие связей между отдельными атомами бора или азота.



[1]. A.L. Gibb et al., *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 6758 (2013)

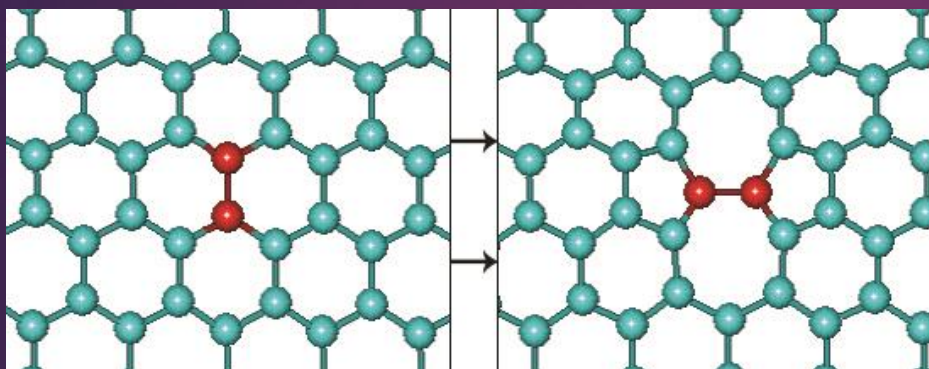
# Дефекты на структурах

Если углеродный шестиугольник заменить, например, на пятиугольник, семиугольник или на два таких дефекта, нанотрубка изогнется. С разных сторон относительно изгиба ориентация углеродных шестиугольников оказывается различной. Но с изменением ориентации шестиугольников по отношению к оси нанотрубки меняется ее электронный спектр, положение уровня Ферми, ширина оптической щели и т.п. Хиральность – вектор, соединяющий две эквивалентные точки на первичном графеновом листе, образующем при сворачивании в нанотрубку. Если  $m=n$  или  $m-n/3$  то трубка металлическая, в ином случае полупроводник.



# Дефект Стоуна-Уэльса (СУ)

Простейшим дефектом в графене является точечный дефект Стоуна-Уэльса (SW) - кристаллографический дефект в углеродных нанотрубках и графене, и, как полагают, имеет важное значение для механических свойств нанотрубки. Он образуется при повороте одной из связей углерод-углерод C-C на угол  $90^\circ$ , в результате чего четыре шестиугольника преобразуются в два семиугольника и два пятиугольника. Длина связи C-C в графене  $1.42 \text{ \AA}$ , после образования данного дефекта длина развернутой связи уменьшается  $\approx 0.03 \text{ \AA}$ .



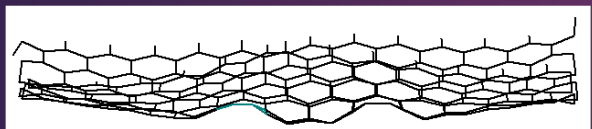
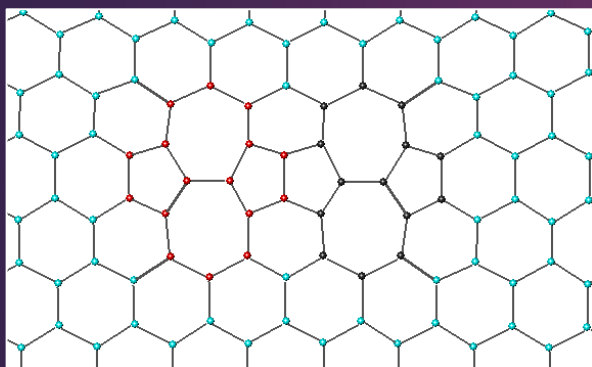
Дефект СУ в графене не остается плоским: существуют конфигурации с более низкой энергией, в которой атомы повернутой связи C-C смещаются перпендикулярно слою на  $\approx 0.3 \text{ \AA}$  в противоположных направлениях, что влечет за собой смещение других атомов, и приводит к волнообразному синусоподобному искажению (рис. 2.а). Наряду с этим имеется еще конфигурация – косинусоподобная – образуется в результате поперечного смещения на  $\approx 0.5 \text{ \AA}$  в одном направлении и соответствует седловой точке поверхности потенциальной энергии для переходов между двумя вырожденными синусоподобными конфигурациями (рис. 2.б).

## Литература:

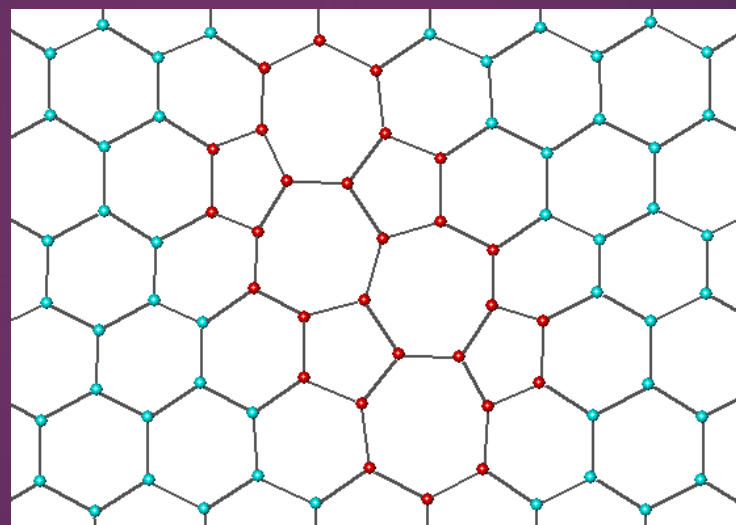
- Взаимодействие дефектов Стоуна-Уэльса в графене  
Л.А. Опенов 1, А.И. Подливаев 1,2

# Дефект Стоуна-Уэlsa (исследование)

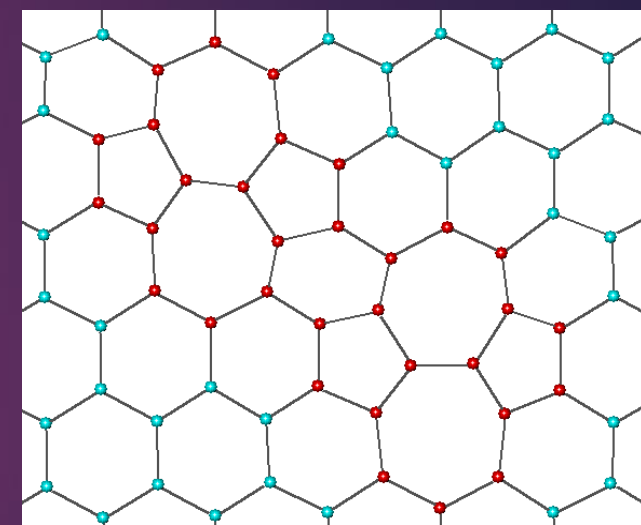
Исследование дефектов проведено на сверхъячейке из 100 атомов. Структура без дефектов имеет энергию  $E_0=80,0$  ккал/мол. С 1 дефектом СУ имеет энергию  $E_1=85,1$  ккал/мол.



$E_2=90,9$  ккал/мол



$E_2=91,6$  ккал/мол



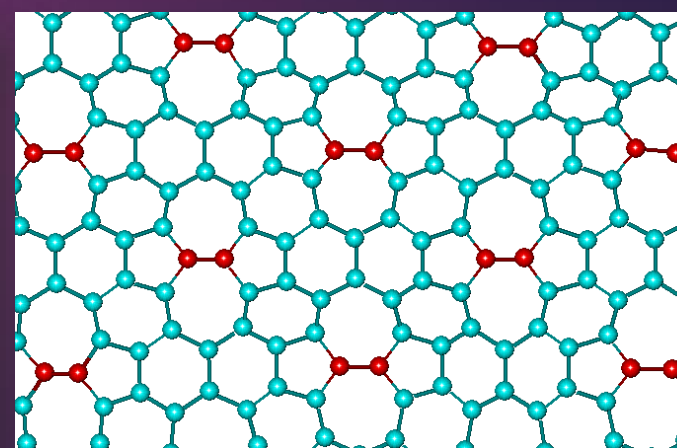
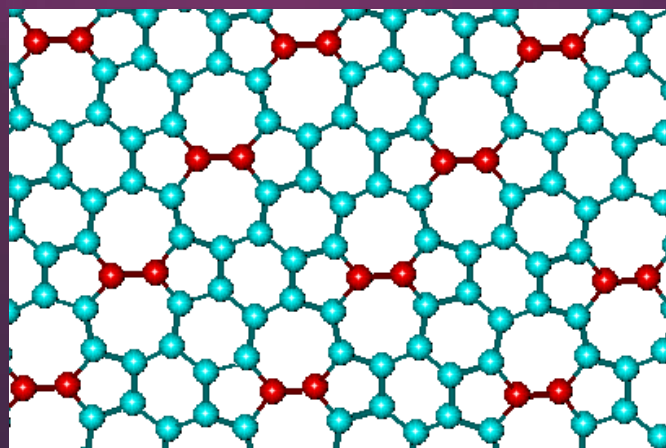
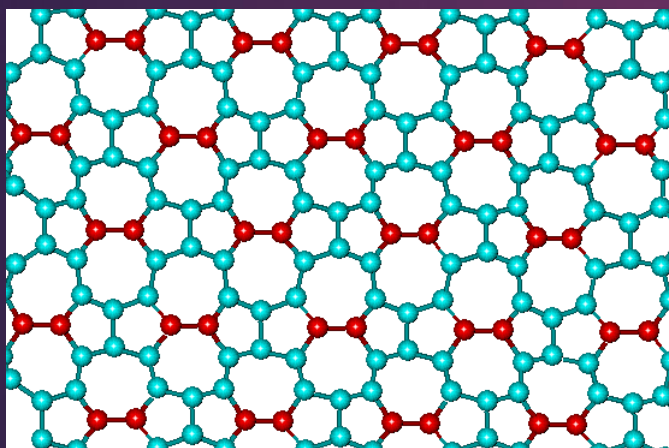
$E_2=90,0$  ккал/мол



# Новые структуры на основе дефектов СУ

На основе дефектов СУ, были получены ранее не упомянутые в литературах структуры. Исследование проводилось с ограниченным количеством атомов.

|                                    | Графен | Фаграфен | Структ_1 | Структ_2 | Структ_3 |
|------------------------------------|--------|----------|----------|----------|----------|
| Количество атомов<br>в сверхъчейке | 125    | 128      | 125      | 126      | 126      |
| Полная энергия, эВ                 | 3.45   | 12.20    | 16.94    | 13.33    | 12.33    |



## Вывод:

1. ПОСТРОЕНЫ РАЗЛИЧНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ СТРУКТУРЫ В МОЛЕКУЛЯРНОМ КОНСТРУКТОРЕ.
2. ИЗУЧЕНО ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ НА ФОРМИРОВАНИЕ НОВЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР.
3. ОБСУЖДАЕТСЯ АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА ДЕФОРМИРОВАННЫХ И ДЕФЕКТНЫХ ДВУМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР, ОСНОВАННЫЙ НА ИСПОЛЬЗОВАНИИ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ДИРАКА В КРИВОЛИНЕЙНЫХ КООРДИНАТАХ.
4. РЕДАКТИРОВАНЫ НОВЫЕ КВАЗИДВУМЕРНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ.



# Спасибо за внимание!

**МАТВЕЕВ ГЕННАДИЙ АЛЕКСЕЕВИЧ**

geno.matveev@gmail.com

научный руководитель: **САВИНСКИЙ С.С.**