**Текст выступления**

**Слайд 1.** Долгое время научному сообществу было известно 3 аллотропные модификации углерода – сажа графит, алмаз. Во второй половине 20 века существенно расширился список углеродных структур. Так в 80-ых открыли фуллерены, в 91-ом были получены и изучены УНТ, а в 2000-е годы был открыт двумерный объект, известный ныне как графен. Все вышеперечисленные структуры обладают поразительными физико-химическими свойствами: электропроводность, теплопроводность и т.д. Ко всему прочему графен, как и многие другие двумерные материалы, можно комбинировать друг с другом, улучшая свойства.

На данном слайде справа представлен созданный в университете Райса так называемый арматурный графен. В этой гибридной наноструктуре УНТ действуют как «арматура» для улучшения механической прочности и электропроводности листов графена. Полученный «арматурный графен» обладает высокой прозрачностью порядка 96% в видимом диапазоне спектра частот, а также прочностью, в десятки раз превосходящей прочность обычного графена.

**Слайд 2.** На данном слайде представлена гибридная пленка, образованная листом графена и горизонтально расположенными на нем одностенными УНТ, на основе которой группой ученых из Нанкинского университета был разработан прототип гибкого фотоприемника, в качестве светочувствительного слоя которого используется гибридная пленка. Полученный прототип обладает высокой светочувствительностью и устойчивостью к многократным изгибам, что крайне востребовано при разработке фотодатчиков и гибких солнечных элементов.

Суммируя все выше сказанное, можно с уверенностью сказать, что поиск и исследование новых сочетаний различных аллотропных модификаций углерода представляют собой актуальную задачу ввиду потенциальной возможности широкого применения новых композитных материалов.

**Слайды 6-8.** В данной работы использовался метод молеклярной динамики с потенциалом airebo для вычисления энергии компазита, а также квантовый метод dftb для уточнения значения энергии и расчета зонной структуры компазита

**Слайд 9.** В качестве объекта исследования были рассмотрены 2D-композитные структуры, образованные листом графена и одностенными нанотрубками типа armchair, расположенными на листе графена в ряд на одинаковом расстоянии друг от друга. Рассматривались нанотрубки диаметром 0,9 нм ÷ 1,6 нм, отвечающие наиболее часто синтезируемых одностенным нанотрубкам на практике. Тип armchair был выбран из-за хороших электропроводящих свойств этих нанотрубок. Трубки располагались на расстоянии 10-16 гексагонов друг от друга на листе графене.

**Слайд 10.** Для построения атомистических моделей супер-ячеек исследуемых композитов использовался «метод лупы», предложенный научной группой профессора Глуховой О.Е. В рамках этого метода построение моделей проводится в несколько этапов.

На первом этапе построения строился протяженный большой фрагмент атомной сетки композита, содержащий пять нанотрубок, расположенных на графеновом листе. Чтобы исключить влияние краевых эффектов, краевые атомы нанотрубок и графена насыщались атомами водорода. Общее число атомов в структуре было более двух тысяч. Построенная атомная структура оптимизировалась методом молекулярной динамики с использованием потенциала AIREBO для описания взаимодействия между атомами углерода и водорода. Расчет происходил в программе Kvazar, разработанной на кафедре радиотехники и электродинамики. На основании оптимизированного большого фрагмента композита строится расширенная супер-ячейка, содержащая части внутренних трех трубок. Построенная расширенная ячейка композита повторно оптимизируется потенциалом AIREBO для уточнения координат атомов. На рисунке видно, что в ходе оптимизации графен стал криволинейным, а трубки немного деформировались.

**Слайд 11.** На втором этапе из оптимизированной расширенной ячейки композита вырезается новая ячейка, которая содержит три нанотрубки шириной в один гексагон. Эта ячейка оптимизируется квантовым методом DFTB с помощью программы Mizar, разработанной на кафедре радиотехники и электродинамики. В ходе оптимизации изменялись как координаты атомов композитной ячейки, так длины вектором трансляции Lx и Ly. Цель оптимизации – поиск энергетически выгодной конфигурации структуры.

**Слайд 12.** На третьем этапе из оптимизированной на предыдущем шаге ячейки вырезается серединная часть, которая и является элементарной ячейкой 2D-композита графен-ОУНТ. Эта ячейка снова оптимизируется методом DFTB с помощью программы Mizar. Описанный алгоритм применялся для построения каждой супер-ячейки.

**Слайд 13.** Далее происходило изучение энергетической стабильности построенных супер-ячеек по изменению суммарной энергии исследуемой композитной структуры E в соответствии с формулой, приведенной на слайде. Структура графен-ОУНТ конфигурировалась таким образом, чтобы суммарная энергия композита по абсолютной величине была меньше, чем для отдельных графена и нанотрубки.

**Слайды 14.** Результаты численной оценки энергетической стабильности исследуемых структур, а также их метрические характеристики приведены в таблицах на следующих слайдах. На данном слайде показаны характеристики для композитов с ОУНТ (12,0). В таблице также представлены значения энергетической щели – интервала энергий между валентной зоной и зоной проводимости, которая определялась по результатам расчета зонной структуры. Из табличных данных видно, что построенные супер-ячейки композита графен-ОУНТ являются энергетически устойчивыми, поскольку изменение энергии принимает отрицательные значения. Так видно, что величина энергетической щели почти нулевая, следовательно, исследуемые композиты являются проводниками. **(МОЖНО ЛИСТАТЬ СЛАЙДЫ)** Аналогичные результаты были получены и для других типов трубок в составе композита. Из приведенных данных следует, что независимо от того, входит ли в их состав трубка с металлической проводимостью (12,0) и (18,0) или полупроводниковой (14,0) и (16,0), композит графен-ОУНТ обладает металлическим типом проводимости.

**Слайд 17.** Для объяснения особенностей электронного строения композитов графен/ОУНТ по результатам расчета зонной структуры были построены распределения плотности электронных состояний (DOS – density of states). На примере композита с ОУНТ (12,0) и расстоянием 10 гексагонов между нанотрубками рассмотрим, как строится профиль DOS композитных структур графен/ОУНТ. На данном слайде показаны распределения DOS композита графен/ОУНТ (12,0) и распределения DOS отдельно для фрагмента графена и для ОУНТ (12,0), входящих в его состав. Вертикальной линией сиреневого цвета отмечен уровень энергии Ферми – последний заполненный уровень в зонном спектре. Как видно из рисунка, на котором представлен полный профиль DOS композита и отдельных его составляющих, сильно изрезанный профиль DOS композита обусловлен вкладом входящих в него нанотрубок, профиль DOS которых полностью совпадает с профилем композита. Для объяснения нулевой энергетической щели композита рассмотрим более детально фрагмент распределений DOS композита и его составляющих вблизи энергии Ферми. Из рисунка видно, что в окрестности энергии Ферми DOS композита обращается в нуль только в одной точке, также как и DOS фрагмента графена. Следовательно, бесщелевой характер зонной структуры исследуемого композита графен/ОУНТ обусловлен вкладом графена, являющегося бесщелевым проводником.

**Слайд 18.** Отсутствие зависимости величины энергетической щели композита графен/ОУНТ от диаметра нанотрубок и расстояния между ними иллюстрируется на графиках DOS, для каждого типа рассматриваемых нанотрубок. Для более наглядной интерпретации закономерностей электронного строения композитов был выбран фрагмент распределения DOS вблизи энергии Ферми. На данном слайде приведены графики DOS для композитов с ОУНТ разного типа проводимости – полупроводникая (14,0) и металлическая (12,0)

**Слайды 19-20.** Основные выводы по проделанной работе приведены на слайде.

1. Что такое без ед - без размерные еденицы

2. Что такое дос - расшифровка смысл

3. Что такое торс

4. Что такое аеробо редо - дать расшифровку

5. Почему не зонной струкурры, не информативно, т.к целые зоны. дос - более информативнее. как кристалическая транслуруем структуру

6. Метод тысячной доли - dftf сточность до тысячной,

7. Метод хф от начал, не позволит произвести расчет т.к. структура большая. главная причина время

8. Уравнение кона-шема

9. Учитывается ли темпиратура.путем задания распределение скоростей. да она сидит в молекул динамики, T = 300K, алгоритм термостат Нозе-Гувера

10. Темпиратура учитывается в гамильтониане в DFTB

11. приближение регуляррных ячеек, проще рассчитывать. не зависит от рассояния между трубками

12. прилжение что графен без примесей.

13. наблюдается очищеный графен в реальной жизни

В данной работы использовался метод молеклярной динамики с потенциалом airebo для вычисления энергии компазита, а также квантовый метод dftb для уточнения значения энергии и расчета зонной структуры компазита

энегритические уровни отсчитыватся от 0 - уровень вкууума. 0 - покидает кристалическую решетку и становится свободным электроном.

почему уровень Ферми, индикатор, отмечает границу, когда последний заполнекный уровенб

+ добавить пояснения для англоязычных сокращений

1 [эл.В] - 1 [Дж]

- электронные характеристики - дос и энергит. щель

- оптимизация - проводится путем минимизщации полной энергии структуры композита по коорд. атомов структуры. поиск равновестного состояния композита

- решение минимаксной задачи -> как именно производится оптимизация.

- ван-дер-ваальсовы у меня,

Целевая функция <=> полная энергия и ваоьироваемы - параметры координаты, длины векторов трансляции ячейки.

- обменно-кор- что такое пэт- подложка