

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники

УДК 538.911

ГВОЗДОВСКИЙ
Дмитрий Чеславович

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГРАФЕНА С МАТЕРИАЛОМ ПОДЛОЖКИ:
КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

АВТОРЕФЕРАТ

на соискание степени магистра технических наук
по специальности 1-41 80 01 Твердотельная электроника,
радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника,
приборы на квантовых эффектах

Научный руководитель
кандидат техн. наук, доцент
СТЕМПИЦКИЙ Виктор Романович

Минск 2018

КРАТКОЕ ВВЕДЕНИЕ

Высокий интерес к графену вызван широким набором его уникальных свойств. Для квазисвободного графена характерны: наибольшая среди всех материалов подвижность носителей заряда; он выдерживает плотность тока на шесть порядков больше, чем медь; обладает рекордной прочностью, гибкостью и теплопроводностью. Его проводимостью можно управлять с помощью электрического поля в широких пределах, что делает его перспективным для использования в электронике. Носители заряда в графене подчиняются релятивистскому уравнению Дирака для безмассовых частиц, поэтому их называют дираковскими фермионами. Это свойство связано с уникальной электронной структурой графена, характеризуемой линейным законом дисперсии электронных состояний вблизи уровня Ферми.

Неоднородность пространственного заряда в графене, возникающая из-за особенностей структуры поверхности подложки, приводит к деградации электронных свойств графена. Каждая система на основе графена обладает своими уникальными свойствами, которые требуют детального исследования. Существенным фактором является расположение атомов углерода графена относительно приповерхностных атомов подложки.

Актуальной задачей является моделирование воздействия различных подложек на электронные свойства графена с целью выбора материала подложки обеспечивающего необходимые структурные и электронные свойства графена, его полную адсорбцию и, следовательно, эффективное применение графена в качестве материала элементов приборов микро-, нано-, оптоэлектроники, а также спинтроники и солнечной энергетики.

Для реальных экспериментов по исследованию свойств наноструктурных объектов требуется сложная, высокоточная и дорогостоящая аппаратура. В таких условиях особую роль приобретает моделирование наномасштабных объектов. Моделирование из первых принципов осуществляется для небольших молекулярных систем с числом атомов 10 – 500 и является мощным инструментом для определения электрофизических свойств исследуемых систем. Программный комплекс VASP дает большие возможности для исследования перспективных материалов микро- и нанoeлектроники, снижая тем самым количество дорогостоящих экспериментов.

Цель диссертационной работы заключается в оценке сил взаимодействия графена с металлическими, полупроводниковыми и диэлектрическими подложками посредством моделирования из первых принципов, а также в разработке рекомендации по выбору подложек для электронных устройств на основе графена.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы магистерской диссертации

Актуальной задачей является моделирование воздействия различных подложек на электронные свойства графена с целью выбора материала подложки обеспечивающего необходимые структурные и электронные свойства графена, его полную адсорбцию и, следовательно, эффективное применение графена в качестве материала элементов приборов микро-, нано-, оптоэлектроники, а также спинтроники и солнечной энергетики.

Цель и задачи магистерской диссертации

Целью диссертационной работы является оценка степени взаимодействия графена с подложкой и определение особенностей структурных и электронных свойств графена, расположенного на поверхности металлических, полупроводниковых и диэлектрических подложек посредством *ab initio* (из первых принципов) компьютерного моделирования.

Для достижения целей работы поставлены следующие *задачи*:

- выбрать материал подложки для моделирования систем «графен/подложка»;
- разработать методику моделирования структурных и электронных свойств систем «графен/подложка» в рамках теории функционала электронной плотности;
- выполнить *ab initio* моделирование структурных и электронных свойств систем «графен/подложка»;
- предложить критерии оценки степени взаимодействия графена с материалом подложки, установить особенности взаимодействия графена с выбранными подложками;
- оценить в рамках моделирования из первых принципов адсорбционную способность графена на исследуемых подложках.
- предложить рекомендации по выбору подложек для устройств на основе графена по результатам анализа данных квантово-механического моделирования особенностей его взаимодействия с выбранными материалами.

Объект и предмет исследования

Объектом исследования является однослойный графен расположенный на поверхности металлических, полупроводниковых и диэлектрических подложек.

Предметом исследования являются структурные и электронные свойства графена расположенного на поверхности металлических, полупроводниковых и диэлектрических подложек.

Связь работы с приоритетными направлениями научных исследований и запросами реального сектора экономики

Работа проводилась в рамках задания гранта 3.02 Государственной программы научных исследований «Конвергенция – 2020».

Основные положения, выносимые на защиту

В структурах типа «графен/подложка», в которых в качестве материала подложки используется гексагональный нитрид кремния или гексагональный нитрид бора, графен имеет нулевую величину запрещенной зоны, линейный характер закона дисперсии энергетических состояний электронов в интервале энергий от -1,6 до 0,7 эВ, отсутствует перенос заряда с атомов углерода графена на подложку, то есть сохраняются его структурные и электронные свойства, что обусловлено связями с приповерхностными атомами подложки посредством слабых сил Ван-дер-Ваальса. Это свидетельствует об эффективности использования графена, размещенного на диэлектрической подложке из нитрида кремния или полупроводниковой подложке нитрида бора в качестве конструктивного элемента графенового транзистора.

Личный вклад соискателя

Личный вклад автора состоит в непосредственном участии в проведении всех квантово-механических расчетов, участии в обсуждении полученных результатов, подготовке научных статей по тематике диссертационной работы, а также в написании докладов и участии на конференциях. Совместно с научным руководителем определены структура, цели и задачи исследования, обобщены основные научные результаты. Совместно с соавторами публикаций осуществлялась подготовка и проведение исследований, обсуждались полученные результаты.

Апробация результатов диссертации

Основные теоретические результаты и законченные этапы диссертационной работы были доложены: на XVI Белорусско-российской научно-технической конференции «Технические средства защиты информации» в БГУИР (июнь, 2018); на XXVI международной научно-практической конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика конденсированного состояния» в Гродно (апрель 2018); на 54-ой научной конференции студентов, магистрантов, аспирантов в БГУИР (апрель 2018); на 3-ем междисциплинарном научном форуме с международным участием «Новые материалы и перспективные технологии» в Москве (ноябрь 2017); на форуме «Nano-Design, Technology, Computer Simulations – 2017» в Минске (октябрь 2017).

Публикации

По материалам диссертации опубликовано и подготовлено к опубликованию 17 работ. Из них: 5 статьи в научных журналах, 5 статей в сборниках материалов научных конференций, 7 тезисов докладов на конференциях. Получен 1 акт внедрения в учебный процесс.

Структура и объем диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, общей характеристики работы, трех глав, заключения, списка использованных источников, графического материала. Общий объем магистерской диссертации составляет 70 страниц, включая 38 иллюстраций, 4 таблицы, библиографический список из 79 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В *первой главе* проведен детальный анализ литературных источников, посвященных исследованиям в области управления электронной структурой систем на основе графена. Показаны основные механизмы формирования графена. Приведены некоторые примеры взаимодействия графена с материалом подложки, оценены изменения структурных и электронных свойств графена. Установлено, что интеркаляции различных веществ между графеном и подложкой может оказать значительное влияние на электронные свойства графена.

Вторая глава посвящена методологии квантово-механического моделирования. В ней описываются основные методы и подходы компьютерного моделирования. Данная глава содержит в себе краткое описание основных уравнений и сущности методов квантово-механического моделирования кристаллических систем, в частности метода теории функционала электронной плотности, метода Кона-Шэма, а также описание основных вычислительных алгоритмов, используемых в программном комплексе VASP. В данной главе рассмотрен ряд критериев для оценки силы взаимодействия графена с материалом подложки.

В *третьей главе* представлены результаты квантово-механического моделирования системы «графен/подложка», включающие: учет влияния металлических подложек (Co, Ni, Cu, Rh, Pd, Ag, Ir, Pt, Au) на структурные и электронные свойства графена; учет влияния полупроводниковых подложек (карбид кремния, нитрид бора) на структурные и электронные свойства графена; учет влияния диэлектрических подложек (кварц, нитрид кремния) на структурные и электронные свойства графена. Представлен анализ и обобщение результатов расчетов систем «графен/подложка». Установлены особенности взаимодействия графена с выбранными подложками, а также проанализирована адсорбционная способность графена на исследуемых подложках. Предложен ряд рекомендаций по выбору подложек для устройств на основе графена.

В *заключении* кратко изложены основные результаты магистерской диссертации, приведены результаты моделирования структурных и электронных свойств систем «графен/подложка» для металлических, полупроводниковых и диэлектрических подложек.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках проведения научных исследований по теме магистерской диссертации получены следующие основные результаты:

1. Результаты моделирования системы «графен/ β - Si_3N_4 » указывают на эффективность применения гексагонального нитрида кремния в качестве основной диэлектрической подложки, которая не оказывает влияния на электронные и структурные свойства адсорбированного графена. Установлено, что энергия адсорбции графена составляет 21,3 кДж/моль, расстояние между слоем графена и поверхностью подложки – 3,042 Å, характер закона дисперсии энергетических состояний электронов графена имеет такой же, что и свободный квазидвумерный графен, атомы углерода графена связаны с приповерхностными атомами подложки посредством слабых сил Ван-дер-Ваальса.

2. Результаты моделирования системы «графен/h-BN» указывают на эффективность применения гексагонального нитрида бора в качестве основной полупроводниковой подложки, которая не оказывает влияния на электронные и структурные свойства адсорбированного графена. Установлено, что энергия адсорбции графена составляет 5,2 кДж/моль, расстояние между слоем графена и поверхностью подложки – 3,28 Å, закон дисперсии энергетических состояний электронов графена имеет линейный характер в интервале энергий от -1,6 до 0,7 эВ и вблизи уровня Ферми, для системы «графен/h-BN» характерно отсутствие переноса заряда с атомов углерода графена на подложку.

3. Результаты моделирования систем «графен / подложка из d -металлов 9-ой и 10-ой групп периодической таблицы Менделеева» указывают на эффективность применения подложек тяжелых металлов Co, Ni, Rh, Pd, Ir и Pt, контакт графена с которыми приводит к спиновому расщеплению π -состояний графена, что крайне важно для применения графена в устройствах спинтроники. Установлено, что энергии адсорбции графена на поверхности подложки составляет от 16,10 до 36,20 кДж/моль; расстояние между слоем графена и поверхностью подложки от 2,03 до 2,23 Å; присутствует перераспределение заряда между атомами углерода графена и приповерхностными атомами металлических подложек. Перераспределение заряда и межслоевые расстояния свидетельствуют о наличии химической связи между атомами углерода графена и приповерхностными атомами подложки.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА

Статьи в рецензируемых научных журналах

[1-A.] Hvezdouski, D. C. Spin splitting in band structures of BiTeX (X=Cl, Br, I) monolayers / D. C. Hvezdouski, M. S. Baranova, V. R. Stempitsky // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2018. – 347. – P. 012017.

[2-A.] Баранова, М. С. Энергетическая зонная диаграмма слоистых гетеросистем графен–ZnO, графен–ZnS: квантово-механическое моделирование / М. С. Баранова, В. А. Скачкова, Д. Ч. Гвоздовский и др. // Известия Национальной академии наук Беларуси. Серия физико-технических наук. – 2017. – № 3. – С. 99 - 107.

[3-A.] Skachkova, V. A. Electronic properties of graphene-based heterostructures / V. A. Skachkova, M. S. Baranova, D. Ch. Hvezdouski // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – 917. – P. 092012.

Статьи в сборниках материалов научных конференций

[4-A.] Гвоздовский, Д. Ч. Особенности взаимодействия графена с поверхностью подложки / Д. Ч. Гвоздовский, М. С. Баранова, В. А. Скачкова // Технические средства защиты информации: Тезисы докладов XVI Белорусско-российской научно-технической конференции, 5 июня 2018 г., Минск. – Минск: БГУИР, 2018. – С. 30 - 31.

[5-A.] Гвоздовский, Д. Ч. Влияние металлической подложки на структурные и электронные свойства графена. *Ab initio* моделирование / Д. Ч. Гвоздовский, М. С. Баранова, В. Р. Стемпицкий // Физика конденсированного состояния: Материалы XXVI междунар. науч.-практ. конф. аспирантов, магистрантов и студентов. (Гродно, 19 апр. 2018 г.) – Гродно: ГрГУ, 2018. – С. 127 - 129.

[6-A.] Hvezdouski, D. *Ab initio* simulation of graphene interaction with SiO₂ substrate for nanoelectronics application / D. Hvezdouski, V. Stempitsky // Nano-Design, Technology, Computer Simulations: proc. of 17th Int. Workshop on New Approaches to High-Tech. – 2017. – Pp. 201 - 204.

[7-A.] Баранова, М. С. Свойства графенсодержащих структур. Квантово-механическое моделирование / М. С. Баранова, В. А. Скачкова, Д. Ч. Гвоздовский и др. // Актуальные вопросы физики и техники: материалы VI Республ. науч. конф. студентов, магистрантов и аспирантов (Гомель, 26 апреля 2017 г.) – Гомель, 2017. – Ч. 2. – С. 10 - 13.

[8-A.] Skachkova, V. Electronic properties of graphene-based heterostructures / V. A. Skachkova, M. S. Baranova, D. Ch. Hvezdouski // Book of Abstracts «Saint Petersburg OPEN 2017». 4th Int. Sc. and Conf. on Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures. April 3–6, 2017. St. Petersburg, Russia. – 2017. – Pp. 601 - 602.

Публикации, не относящиеся к тематике диссертационных исследований

[9-А.] Гвоздовский, Д. Ч. Исследование эффекта Рашбы в BiTeX ($X=\text{Br}$, Cl , I) для использования в спинтронике / Д.Ч. Гвоздовский, М.С. Баранова // Новые материалы: сборник материалов третьего междисциплинарный научный форум с международным участием, Москва 21-24 ноября. – 2017. – С. 57 - 59.

[10-А.] Hvazdouski, D. Optical properties of CuCr_2Se_4 : *ab initio* simulation / D. Ch. Hvazdouski, M. S. Baranava, V. R. Stempitsky // Book of Abstracts «Saint Petersburg OPEN 2017». 4th Int. Sc. and Conf. on Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures. April 3–6, 2017. St. Petersburg, Russia. – 2017. – Pp. 607 - 608.

[11-А.] Baranava, M. Electrophysical properties of transition metals chalcogenides structures used as structural elements of the nanoelectronics devices / M. Baranava, M. Najbuk, D. Hvazdouski and etc. // Nano-Design, Technology, Computer Simulations: proc. of 17th Int. Workshop on New Approaches to High-Tech. – 2017. – Pp. 191 - 192.

[12-А.] Гвоздовский, Д. Ч. Особенности гетероструктур, применяемых в сенсорных устройствах / Д. Ч. Гвоздовский, М. С. Баранова, В. Р. Стемпицкий // Техн. ср-ва защ. инф.: тезисы докладов XV Белорусско-российской науч.-техн. конф. (Минск, 6 июня 2017 г.). – Минск : БГУИР, 2017. – С. 84.

[13-А.] Гвоздовский, Д. Ч. Структурные, магнитные и электронные свойства CuCr_2Se_4 . *Ab initio* моделирование / Д. Ч. Гвоздовский, М. С. Баранова, В. Р. Стемпицкий // Физика конденсированного состояния: Материалы XXV междунар. науч.-практ. конф. аспирантов, магистрантов и студентов. (Гродно, 20 апр. 2017 г.) – Гродно: ГрГУ, 2017. – С. 133 - 134.

[14-А.] Скачкова, В. А. Электронные свойства дефектных структур фосфорена / В. А. Скачкова, М. С. Баранова, Д. Ч. Гвоздовский // Техн. ср-ва защ. инф.: тезисы докладов XV Белорусско-российской науч.-техн. конф. (Минск, 6 июня 2017 г.). – Минск : БГУИР, 2017. – С. 101 - 102.

[15-А.] Скачкова, В. А. Электронные свойства фосфорена, легированного атомами O, C и S / В. А. Скачкова, М. С. Баранова, Д. Ч. Гвоздовский // Физика полупроводников и наноструктур, полупроводниковая опто- и наноэлектроника: тезисы докладов 19-й Всерос. молод. конф. 27 ноября – 1 декабря 2017 года. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2017. – С. 119.

[16-А.] Скачкова, В. А. Электронные свойства фосфорена, легированного азотом / В. А. Скачкова, М. С. Баранова, Д. Ч. Гвоздовский // Техн. ср-ва защ. инф.: тезисы докладов XVI Белорусско-российской научно-технической конференции, 5 июня 2018 г., Минск. – Минск: БГУИР, 2018. – С. 88.

[17-А.] Интегральный трехмерный магнитометр на основе датчиков Холла, изготовленный по стандартной КМОП-технологии / Дао Динь Ха [и др.] // Доклады БГУИР. – Минск, 2016. – № 7 (101). – С. 167 - 171.