

УДК 621.3.038.825.5

## ДЕФЕКТ ДВОЙНОЙ ВАКАНСИИ В ГРАФЕНЕ THE DOUBLE VACANCY DEFECT IN GRAPHENE

В.А. Третьяк, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, научный руководитель – М.М. Слепченков, к.ф.-м.н., доцент кафедры радиотехники и электродинамики Института физики СГУ

**Аннотация.** Статья посвящена обзору научных исследований в области дефекта двойной вакансии графена типа 5-8-5 (локальная конфигурация «пятиугольник-восьмиугольник-пятиугольник»). Подобного типа дефект достоверно появляется в случаях термического и радиационного воздействия и значительно влияет на свойства графена.

**Ключевые слова.** Нанoeлектроника, углеродные структуры, графен, дефект двойной вакансии 5-8-5.

**Annotation.** The article is devoted to the review of scientific research in the field of graphene double vacancy defect of 5-8-5 type (local configuration 'pentagon-ectagon-pentagon'). This type of defect reliably appears in cases of thermal and radiation effects and significantly affects the properties of graphene.

**Keywords.** Nanoelectronics, carbon structures, graphene, double vacancy defect 5-8-5.

### Введение

В настоящее время модификации углерода, имеющие различное число атомов в молекуле, являются объектом исследований ученых-физиков и имеют весьма серьезные перспективы использования в практической сфере. В число подобных модификаций входит графен, представляющий собой «одионый слой атомов углерода, расположенных в виде гексагональной решетки. Необычные оптические, электрические, механические и термические свойства обуславливают возможность широкого применения этого материала» [1]. К специфическим свойствам графена относят высокую подвижность зарядов, самое низкое удельное сопротивление среди проводников, наибольшую прочность вещества, высокую проводимость тепла [1, 2].

Сейчас графен широко востребован в микроэлектронике при создании квантовых компьютеров и некремниевых транзисторов, солнечной энергетике, фильтрации воды, нефте- и газодобыче, медицине.

Тем не менее при существующих технологиях производство графена представляет собой трудоемкий процесс, в результате которого могут возникать различного рода дефекты. «Образующие структуры, как и все реальные кристаллы, обладают дефектами, которые оказывают значительное влияние на свойства материала» [3]. Они могут появиться на

стадии роста или очистки наноматериала, в результате ионной бомбардировки и иных воздействующих факторах. Дефекты активно формируются под влиянием радиации и высоких температур и могут коренным образом изменять характеристики графена в сравнении со свойствами идеальных бездефектных структур [4].

### Результаты исследования

Объектом исследования данной статьи стал дефект двойной вакансии графена типа 5-8-5.

Учеными из Омского научного центра СО РАН под руководством кандидата физико-математических наук Сачкова В.А. было изучено влияние дефекта двойной вакансии на свойства графена, а также изучена полученная ими зонная структура [4].

Дефект двойной вакансии характеризуется:

1. Специфической последовательностью координационных чисел атомов:

- Два атома имеют координационное число 5 (пентагоны);
- Один атом имеет координационное число 8 (октагон);
- Все остальные атомы сохраняют координационное число 3 (правильная структура графена);

2. Изменением длин связей и их перестраиванием.

Бивакансия создает локальную конфигурацию «пятиугольник-восьмиугольник-пятиугольник» в гексагональной кристаллической решетке графена [4], что показано на рис. 1.

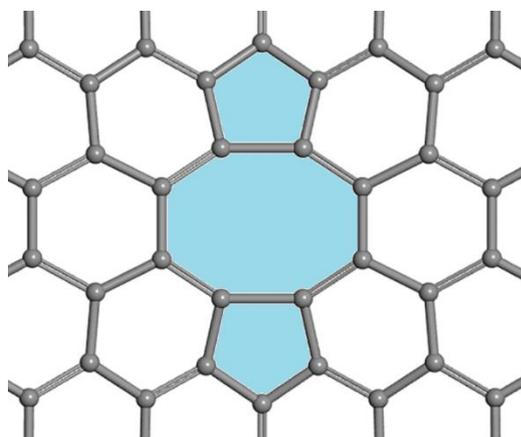


Рисунок 1 - Единичный дефект двойной вакансии графена типа 5-8-5 [4]

На рисунке 1 показаны фрагмент графеновой плоскости с дефектом двойной вакансии. Изображенная структура была получена из фрагмента графеновой плоскости, состоящей из 60 атомов, где ученые удалили два атома для получения дефекта. Этот фрагмент становился элементарной ячейкой периодической двухмерной бесконечной плоскости. После чего проводилась оптимизация положения всех атомов углерода с целью

нахождения минимальной энергии. Оптимизация проводилась путем численных расчетов на основе ТФП.

Из рисунке 1 видно, что в результате оптимизации геометрии структуры атомы углерода графеновой плоскости стремятся занять положение, при котором максимальное число атомов имеет три связи. Для 2-вакансионных кластеров все атомы углерода имеют три связи. Атомы с двумя связями (т.е. с оборванными связями) отсутствуют, и из-за этого нет уменьшения удельной энергии. Максимальная удельная энергия связи для двумерной углеродной структуры сохраняется в идеальной графеновой плоскости, которая состоит из правильных шестиугольников. Следовательно, наличие в оптимизированной структуре графеновой плоскости с вакансионным кластером неравносторонних шестиугольников и пятиугольников свидетельствует об уменьшении удельной энергии связи структуры. Поэтому при оптимизации геометрии структуры имеются два конкурирующих механизма: минимизация оборванных связей и минимизация деформации идеальной структуры графеновой плоскости. Также исследователи выяснили, что для дефекта двойной вакансии удельная энергия связи будет равняться 9,326 еВ.

При дефекте типа 5-8-5 формируется запрещенная зона, на поверхности Ферми минимум плотности электронных состояний.

Влияние деформации на структуру с дефектом типа 5-8-5 было изучено учеными А.С. Кочневым, И.А. Овидько и Б.Н. Семеновым из Санкт-Петербургского государственного университета и политехнического университета Петра Великого. Они изучали влияние данного дефекта на прочность графенового листа. Данное исследование проводилось учеными путём компьютерного моделирования методами молекулярной динамики, для расчётов использовался пакет LAMMPS [5].

В процессе работы учеными было проведено моделирование растяжения образца. Скорость растяжения составляла  $0.0005 \text{ фс}^{-1}$ . При расчётах модели использовались периодические граничные условия. При наличии в образце единственного дефекта разрушение всегда начиналось от ячейки с нарушением формы. На первом этапе происходило объединение ячейки дефекта с соседними шестиугольными ячейками. В этот момент образовывалась одна или несколько более крупных ячеек, состоящих из 8–15 атомов. Дальнейшее разрастание таких дефектов приводило к образованию трещины, а затем к полному разрушению образца. Характерным являлось образование углеродных нитей, которые на начальном этапе служили границами между объединёнными дефектами. В процессе образования трещин эти границы не разрушались и образовывали нити толщиной всего в один атом углерода, объединявшие уже фактически разделённые полуплоскости исходного графенового листа. Данный процесс показан на рисунке 2.

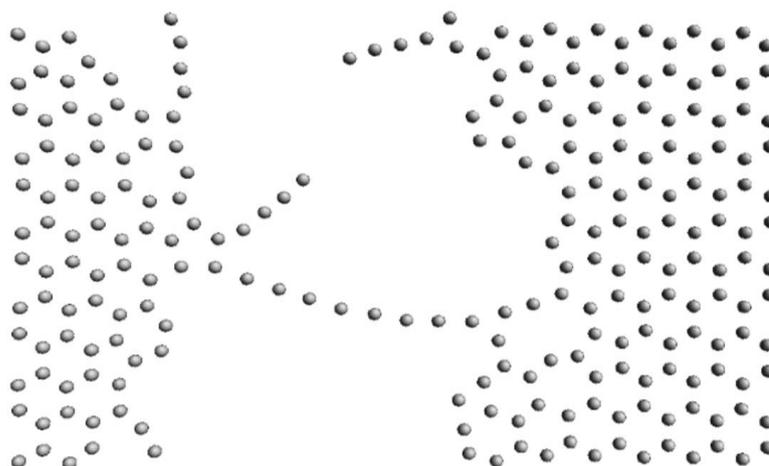


Рисунок 2 - Разрушение листа с единичным дефектом типа 5-8-5 [5]

Также ученые смоделировали нагрев образца до температуры 300<sup>0</sup>К. Моделирование происходило путём ввода в эксперимент случайных колебаний атомов, соответствующих установленной температуре, для этого была использована термостатическая модель Нозе–Гувера (Nose–Hoover thermostat). Для моделирования межатомарных взаимодействий применялся потенциал AIREBO с параметром разрыва (cutoff) равным 2.0. [5]

### **Заключение**

Дефект двойной вакансии типа 5-8-5 графена представляет особый интерес для исследователей, так как он является одним из наиболее стабильных дефектов в графене и может быть использован для целенаправленной модификации свойств материала. При этом важно отметить, что концентрация таких дефектов должна быть тщательно контролируемой, чтобы результаты не привели к существенному ухудшению желаемых свойств материала.

В настоящее время активно разрабатываются методы как предотвращения образования таких дефектов, так и их целенаправленного введения в структуру графена для получения материалов с заданными свойствами.

### **Список литературы**

1. Morozov, S. V. Giant Intrinsic Carrier Mobilities in Graphene and Its Bilayer/ S. V. Morozov, K. S. Novoselov. M. I. Katsnelson, F. Schedin// Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol. 100. – P.156 – 162.
2. Balandin, A. Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene/ A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao// Nano Lett. – 2008. – Vol 8. – P. 902–907.
3. Квашнин, А.Г. Теоретическое исследование механических свойств графеновых мембран методом молекулярной механики/ А.Г. Квашнин, П.Б. Сорокин, Д.Г. Квашнин// Журнал сибирского федерального университета. – 2009. – Т.2, № 4. – С.426 – 431.

4. Сачков В. А. Объединение дефектов типа вакансии в графеновой плоскости в кластеры и влияние вакансионных кластеров на морфологию и электронные свойства структуры // Омский научный вестник. 2020. № 5 (173). С. 114–118. DOI: 10.25206/1813-8225-2020-173-114-118.

5. Кочнев А.С., Овидько И.А., Семенов Б.Н. Прочностные характеристики графена с дефектами решётки // XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2015. - С. 2044-2046.