

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Физическая мезомеханика.
Материалы с многоуровневой иерархически
организованной структурой и интеллектуальные
производственные технологии»,**

посвященная 90-летию со дня рождения
основателя и первого директора ИФПМ СО РАН
академика Виктора Евгеньевича Панина

в рамках
**Международного междисциплинарного симпозиума
«Иерархические материалы: разработка и приложения
для новых технологий и надежных конструкций»**

**5–9 октября 2020 года
Томск, Россия**

Томск
Издательство ТГУ
2020

DOI: 10.17223/9785946219242/306

МОДЕЛЬ РЕАЛИСТИЧНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ФТОРА НА ГРАФЕНЕ И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЕ К ИССЛЕДОВАНИЮ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА

¹Катков В.Л., ²Ямалетдинов Р.Д.

¹Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголобова, ОИЯИ, Дубна

²Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск

В рамках стохастического молекулярно-динамического моделирования был развит метод быстрой генерации *фторированных* графеновых структур с настраиваемым типом распределения фтора. Электронные транспортные свойства фторированного графена были исследованы в широком интервале степени фторирования и способа упорядочения. Была обнаружена заметная корреляция между степенью регулярности в распределении графена и транспортными свойствами. В частности, предложенное рассмотрение позволяет воспроизвести два свойства, наблюдаемые ранее экспериментально - электрон-дырочную асимметрию и пик в проводимости в районе 10% концентрации фтора [1].

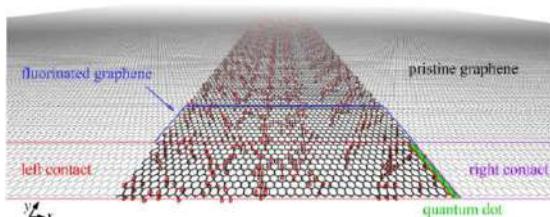


Рис. 1. Схематическая иллюстрация моделируемой системы

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-32-60012)

I. R. D. Yamaletdinov, V. L. Katkov, Y. A. Nikiforov, A. V. Okotrub, and V. A. Osipov, "Effect of Fluorine Patterns on Electronic Transport in Fluorinated Graphene," *Advanced Theory and Simulations*, vol. 3, p. 1900199, apr 2020.