

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ  
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра радиотехники и электродинамики

наименование кафедры

**Расчет динамической проводимости Т-образных соединений  
из углеродных нанотрубок**

**АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ**

Студента 2 курса 242 группы

направления 03.04.03 «Радиофизика»

код и наименование направления

физического факультета

---

наименование факультета

Муратова Романа Сергеевича

---

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

к.ф.-м.н., ст. преподаватель

должность, уч. степень, уч. звание

\_\_\_\_\_

дата, подпись

В.В. Шунаев

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

\_\_\_\_\_

дата, подпись

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Саратов 2019 г.

Углеродные наноструктуры, в частности графен и углеродные нанотрубки (УНТ), а также их производные, привлекают внимание ученых из-за обилия уникальных и практически важных физических свойств. Последние достижения в этой области связаны с разработкой фотодетекторов атомной толщины, которые потребляют мало энергии и не нуждаются в охлаждении [1,2]. Данные фотодетекторы могут использоваться при создании портативных матриц высокого разрешения, составляющих основу современных фото- и видеокамер. Однако помимо графена и УНТ в последнее время все чаще исследуются более современные модификации УНТ – так называемые Т-образные соединения, образованные в результате ортогонального бесшовного соединения УНТ [3,4]. Оптическая проводимость данных соединений в УФ, видимом и ИК диапазонах не исследована. В связи с этим целью работы является расчет оптической проводимости пленок, составленных из Т-образных соединений углеродных нанотрубок.

Объектами исследования являются УНТ (10,10), (12,12) и (14,14) типа armchair, УНТ (18,0), (21,0), (24,0) типа zigzag, а также Т-соединения, составленные из данных трубок. На первом этапе Т-соединение строилось нами с помощью оригинально разработанной программы Blistmaker [5]. Так как в работе рассматривалось бесшовное соединение, у горизонтально расположенной углеродной нанотрубки была удалена часть атомов, так чтобы получилось отверстие диаметром больше диаметра второй трубки. В процессе расчета между выделенными кольцами программа начинает построение соединения путем добавления и удаления атомов для нахождения равновесной конфигурации. На каждом шаге расчета создаются файлы с модифицированной структурой. На втором этапе координаты полученного Т-соединения уточнялись нами методом SCC DFTB 2, который представляет гибридный самосогласованный метод теории функционала плотности (DFT) на основе метода сильной связи [6]. На рис. 1. представлены атомные суперячейки Т-соединений из УНТ (18,0) и (10,10). Как видно из рисунка, образование таких соединений сопровождалось появлением нехарактерных для УНТ негексагональных элементов – пентагонов и оптагонов. Общих закономерностей в появлении таких дефектов не прослеживалось.

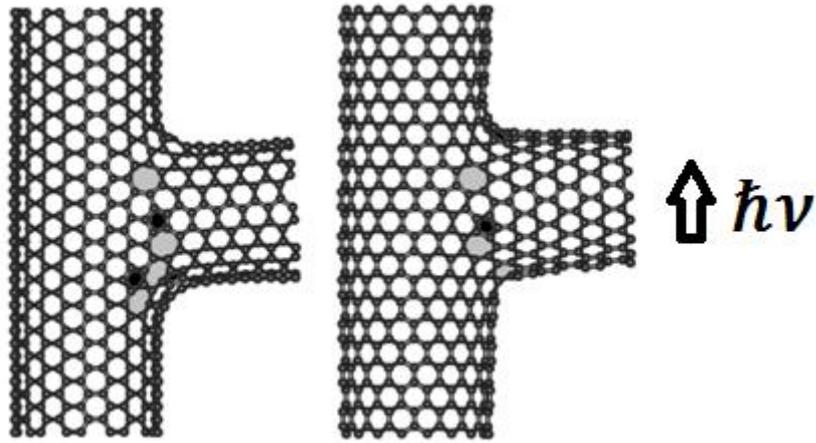


Рис. 1. Атомные суперячейки Т-соединений из УНТ (18,0) и (10,10). Черным и серым цветами обозначены дефекты виде пентагонов и септагонов, соответственно. Стрелкой показано направление падения электромагнитной волны.

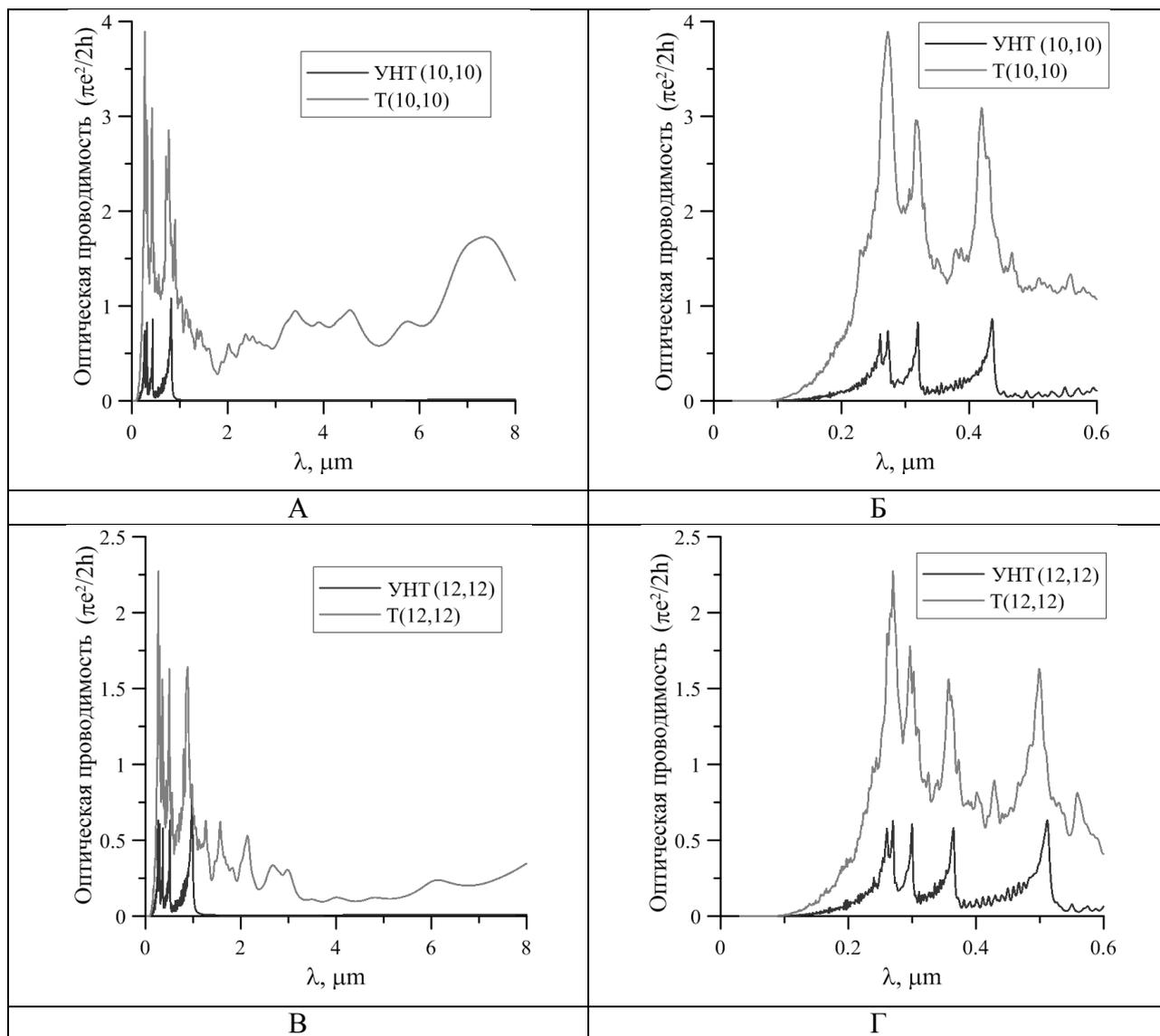
Для расчета оптической проводимости рассматриваемых объектов была использована формула Кубо-Гринвуда [7]:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{-e^2}{im\omega V} \left[ \sum_i f_i \delta_{\alpha\beta} + \sum_{i'} \frac{f_i}{\hbar m} \frac{\langle l | P_{\alpha} | l' \rangle \langle l' | P_{\beta} | l \rangle}{\omega_l - \omega_{l'} + \omega + i\eta} \right], \quad (1)$$

где  $e$  – заряд свободного электрона,  $m$  – эффективная масса электрона,  $\omega$  – частота электромагнитного поля,  $\gamma$  – мнимая часть электромагнитного поля,  $V$  – элементарный объем исследуемой ячейки,  $P$  – матрица моментов в соответствующих состояниях  $\alpha$  и  $\beta$ ,  $l$  и  $l'$  – соответствующие индексы подзон валентной зоны и зоны проводимости,  $\omega$  – частоты, соответствующие энергиям подзон,  $f$  – распределение Ферми-Дирака,  $\delta$  – символ Кронекера,  $\hbar$  – постоянная Планка

На рис. 2а и приведена зависимость действительной части оптической проводимости от длины падающей электромагнитной волны для УНТ(10,10) и Т(10,10). Волна падает вдоль направления трансляция соединения, как показано на рис. 1. УНТ (10,10) демонстрирует оптическую проводимость в диапазоне 0.1-0.46 мкм, что соответствует ультрафиолетовому и видимому излучению, в то время как оптическая проводимость для Т(10,10) наблюдается также в ближнем и среднем инфракрасном диапазонах. Рассмотрим более подробно диапазон 0.1-0.46 мкм (рис. 2б). В этом диапазоне наблюдается 3 пика проводимости: расщепленный на частоте 0.27 мкм и еще два на частотах 0.32, 0.44 мкм. Для Т(10,10) расщепленный пик на частоте 0.27 мкм переходит в один пик на частоте, пики на частотах 0.32 и 0.44 сохраняются, но смещаются на длины волн 0.33 и 0.42 мкм. При этом действительная часть оптической проводимости Т-соединения на этих пиках значительно увеличивается: в 3.5-5.5 раз. Для соединения с киральностью УНТ (12,12) ситуация

повторяется. УНТ (10,10) демонстрирует оптическую проводимость в ультрафиолетовом и видимом диапазонах, в то время как оптическая проводимость для Т(10,10) наблюдается также в ближнем и среднем инфракрасном диапазонах (рис. 2в). При этом количество пиков в диапазоне 0.1-0.46 мкм увеличивается на 1 и становится равным 4. Для Т(12,12) пики наблюдаются на тех же частотах и увеличиваются примерно в 2-2.5 раза (рис. 2г). Аналогичная картина наблюдается для соединений УНТ (14,14) (рис. 2д). В диапазоне 0.1-0.46 мкм количество пиков вновь увеличивается на 1 и становится равным 5. Значения оптической проводимости для Т(14,14) увеличиваются примерно 2-5 раз (рис. 2е).



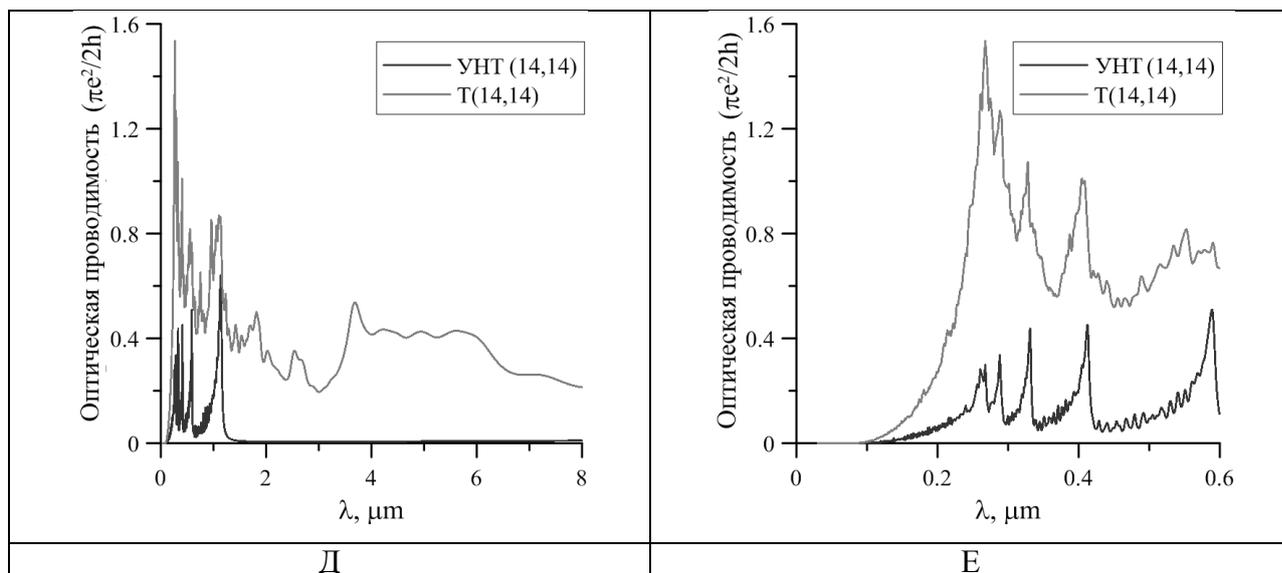


Рис. 2. Зависимость оптической проводимости от длины волны для УНТ типа zigzag и Т-соединений, составленных из этих трубок.

Для УНТ типа зигзаг картина меняется (рис. 3). Для УНТ(18,0) оптическая проводимость наблюдается на частотах 0.1 – 4 мкм (в ультрафиолетовом, видимому и ближнем инфракрасном диапазонах), за пределами этого диапазона пик проводимости для УНТ наблюдается на частоте 3 мкм, для Т-соединения – в районе 5 мкм (рис. 3а). В отличие от ситуации с нанотрубками типа armchair в диапазоне 0.1-0.6 мкм пики УНТ не сохраняются, однако значительное увеличение проводимости в 3-7 раз наблюдается и здесь (рис. 3б). Для УНТ(21,0) вновь наблюдается пик в ближнем ИК диапазоне на частоте 3 мкм, который переходит в пик на частоте 3.4 мкм для Т-соединения (рис. 3в). В диапазоне 0.1-0.6 мкм наблюдается значительное увеличение оптической проводимости в 2-5 раз (рис. 3г). Для УНТ (24,0) наблюдается небольшой пик на частоте 2 мкм, который сохраняется у Т(24,0) (рис. 3д). В ультрафиолетовом и видимом диапазонах наблюдается увеличение оптической проводимости (рис. 3е).

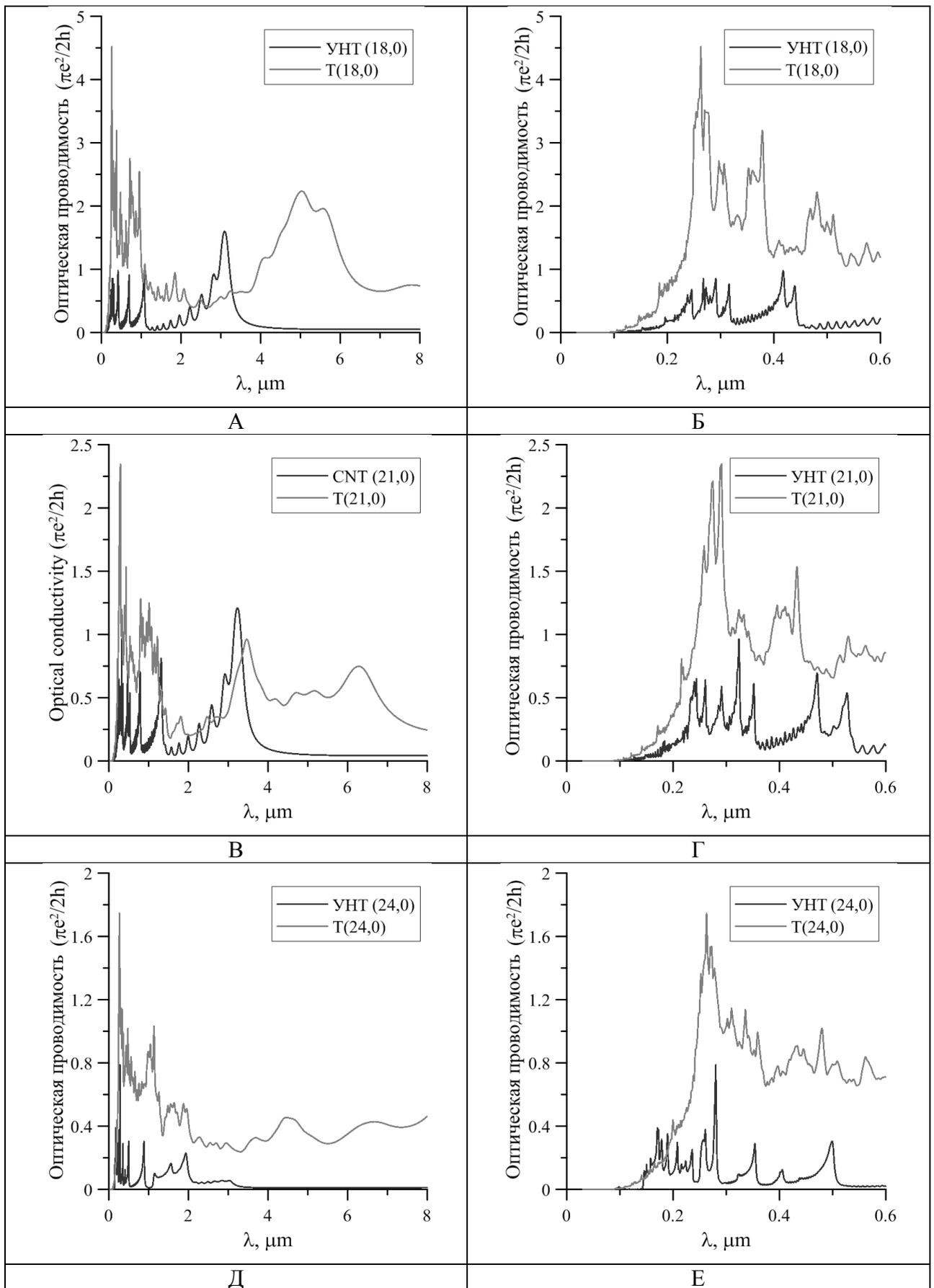


Рис. 3. Зависимость оптической проводимости от длины волны для УНТ типа zigzag и Т-соединений, составленных из этих трубок.

В ходе исследования установлено, что в диапазоне электромагнитной волны 0.1-0.46 мкм действительная часть оптической проводимости для Т-соединений из УНТ типа armchair увеличивает в 2.5-5 раз, при этом пики, на которых наблюдается оптическая проводимость в этом диапазоне, сохраняются. В отличие от УНТ Т-соединения демонстрируют оптическую проводимость также и в ближнем и среднем инфракрасном диапазонах. Действительная часть оптической проводимости для Т-соединений из УНТ типа armchair увеличивается в 3-7 раз в диапазоне электромагнитной волны 0.1-0.6 мкм. Полученные результаты подтверждают целесообразность использования Т-соединений из УНТ в качестве чувствительных элементов для фотодетекторов.

#### Список используемой литературы

- 1) X. He, F. Léonard, J. Kono. Uncooled Carbon Nanotube Photodetectors // *Advanced Optical Materials*, 2015, Vol. 3, №8, P. 989-1011
- 2) S. Nanot, A. W. Cummings, C. L. Pint, A. Ikeuchi, T. Akiho, K. Sueoka, R. H. Hauge, F. Léonard & J. Kono. Broadband, Polarization-Sensitive Photodetector Based on Optically-Thick Films of Macroscopically Long, Dense, and Aligned Carbon Nanotubes // *Scientific Reports*, 2013, Vol. 3: 1335.
- 3) P.-W.Chiu. Carbon Nanotube Nanocontact in T-junction Structures // *Applied Physics Letters*, 2007, Vol. 91, P. 102109.
- 4) P.-W.Chiu. Carbon Nanotube T Junctions: Formation and Properties // *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 2008, Vol. 8, P. 88–98.
- 5) О.Е. Глухова, Г.В. Савостьянов, М.М. Слепченков. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2018661600 «Программный генератор атомной структуры графеновых наноблистеров Blistmaker». Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 03.09.2018.
- 6) Elstner M., Porezag D., Jungnickel G. Self-consistent-charge Density-functional Tight-Binding Method for Simulations of Complex Materials Properties // *Physical Review B*, 1998, Vol. 56, P.72607.
- 7) Marder M. P. *Condensed Matter Physics*, Second Edition, John Wiley & Sons, 952 pp. DOI:10.1002/9780470949955