

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики
наименование кафедры

**ВЛИЯНИЕ КОВАЛЕНТНОГО И НЕКОВАЛЕНТНОГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОТРУБОК С ВЕЩЕСТВОМ НА
ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ОУНТ**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 2 курса 242 группы

направления 03.04.03 «Радиофизика»

код и наименование направления

физического факультета

наименование факультета

Кривды Ильи Владимировича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор
должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

Тен Г. Н.

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор
должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Саратов 2019 г.

Введение

Специфика электронных свойств углеродных нанотрубок делает очень перспективным их применение в качестве различных устройств в наноэлектронике.

Многообразие свойств нанотрубок обусловлено не только числом слоёв (однослойные или многослойные – ОУНТ и МУНТ), их геометрическими параметрами (хиральность, диаметр, длина элементарной ячейки и др), но и характером взаимодействия с другими молекулами.

Известно, что изолированные ОУНТ обладают стабильной флуоресценцией, узкой однородной шириной линий, и излучением при низких температурах.

Флуоресценция, наблюдаемая от отдельных полупроводниковых ОУНТ, делает эти материалы исключительными для применения при создании наноразмерных оптоэлектронных компонентов.

Углеродные нанотрубки способны исполнять функции источника светового излучения, который можно использовать в различных областях, в том числе электронике, нанофотонике, а также для создания крошечных микроэлектромеханических устройств.

Однако широкому использованию этого важнейшего свойства ОУНТ препятствует низкая эффективность флуоресценции.

Цель данной работы – рассмотреть различные способы усиления интенсивности электронных спектров углеродных нанотрубок.

Для этого необходимо решить следующие **задачи**:

1. изучить литературные данные о флуоресцентных свойствах углеродных нанотрубок;
2. провести расчёты электронных спектров чистой (бездефектной) нанотрубки;
3. определить влияние функционализации атомами кислорода ОУНТ на спектр поглощения нанотрубки;

4. определить влияние фуллерена, расположенного внутри нанотрубки, на спектр поглощения ОУНТ.

В первом разделе ВКР представлен литературный обзор по различным типам взаимодействия углеродных нанотрубок с веществом.

Углеродные нанотрубки (УНТ) вследствие особенности их геометрического строения обладают хорошей химической восприимчивостью с другими веществами. Как следует из литературного обзора, возможно нековалентное и ковалентное взаимодействие УНТ с веществом (75 литературных источников). Недавно проведённые исследования по функционализации УНТ органическими макромолекулами и олигомерами позволили получить новые светоизлучающие, фотоэлектрические или фотопреобразовательные материалы.

Ниже представлены некоторые модифицированные структуры УНТ, перспективные для построения оптоэлектронных и фотонных устройств с заданными функциональными свойствами. Это полимерное обёртывание молекулами ДНК (рис. 1а) и соединение алкоксиаминовых концевых полимеров с УНТ (рис. 1б).

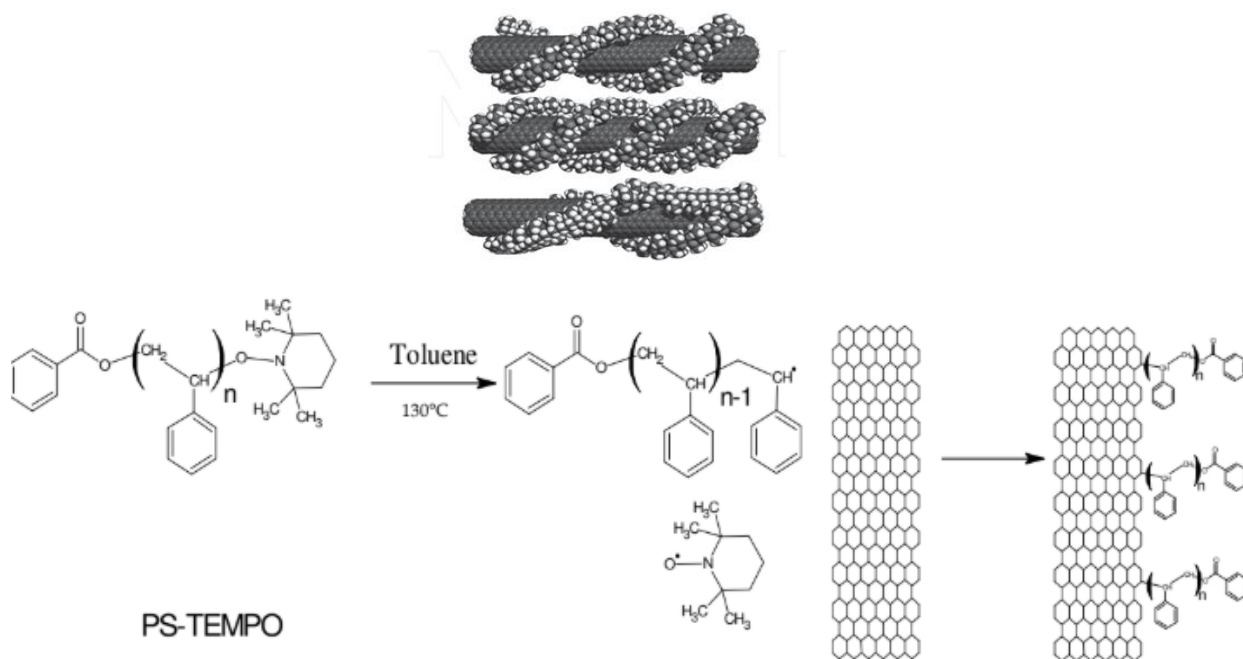
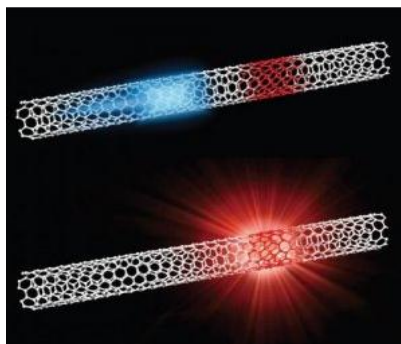


Рис. 1. Примеры нековалентного и ковалентного взаимодействия вещества с УНТ [1, 2]

В результате такого взаимодействия может происходить как усиление, так и ослабление интенсивности флуоресценции УНТ.

Во **втором разделе** рассмотрено влияние функционализации УНТ атомами кислорода на интенсивность нанотрубок. Новые исследования, проведенные учеными, позволили найти способ, с помощью которого яркость свечения углеродных нанотрубок была увеличена на 18 процентов, что позволяет создать на их основе различные элементы нанопотонных устройств, таких, как источник единственных фотонов инфракрасного света, функционирующий при комнатной температуре.



Углеродные материалы, такие как графен и нанотрубки, на сегодняшний день привлекают всё большее и большее внимания исследователей, благодаря своим поистине уникальным физико-химическим свойствам. Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) являются практически идеальной моделью одномерных структур. ОУНТ могут быть преобразованы, например, в квантовые колодцы путём внедрения в нанотрубку металлофуллеренов. При этом интенсивность флуоресценции таких модифицированных нанотрубок сильно возрастает [3].

В **третьем разделе** с целью исследования влияния ковалентного и нековалентного взаимодействия на электронные спектры ОУНТ были выполнены расчёты электронных спектров.

Прежде всего, был выполнен расчёт спектра поглощения «чистой» нанотрубки (рис. 2).

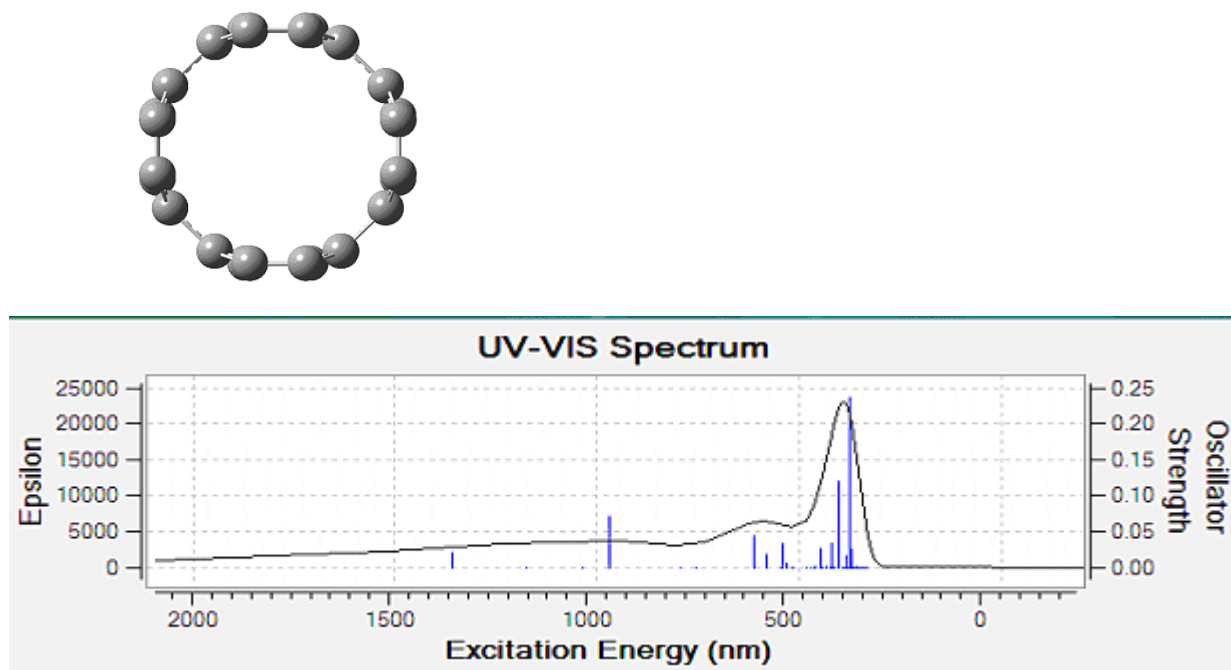


Рис. 2. Молекулярная диаграмма и электронный спектр поглощения «чистой» ОУНТ

Можно выделить три области, в которых электронный спектр нанотрубки имеет наиболее интенсивные полосы поглощения: это области ~ 1000 , ~ 700 и ~ 300 нм. Все три области могут быть использованы для решения практических задач:

1. Известно, что большинство веществ, используемых, например, для доставки лекарственных препаратов до мишени с целью тестирования, флуоресцируют на длине волны меньше 900 нм. Но в этой же области флуоресцируют и белки, что существенно затрудняет диагностику. Свечение нанотрубок в области ~ 1000 и более (до 1400) нм даёт возможность получить чёткие изображения доставки лекарства;
2. Область ~ 700 нм может быть использована для технических применений нанотрубки, например, при создании светодиодов;

3. Область ~300 нм, в которой полосы поглощения нанотрубки имеют наибольшую интенсивность, может быть при определённых условиях использована, например, для усиления флуоресценции белков (Фёрстеровский перенос энергии).

Сравнение максимумов полос поглощения функционализированных атомами кислорода нанотрубок в области 450-700 нм показывает, что:

А) наиболее сильное увеличение интенсивности в области ~600-700 нм наблюдается в случае функционализации трубки 1-2 атомами кислорода. Дальнейшее увеличение атомов кислорода приводит к существенному уменьшению интенсивности полос поглощения в этой области;

Б) В области ~500-600 нм, напротив, увеличение интенсивности происходит при увеличении числа атомов кислорода, образующих ковалентную связь с нанотрубкой;

В) В области ~400-500 нм находятся две полосы поглощения, интенсивность одной из которых увеличивается (~450 нм), а второй (405 нм) – уменьшается с увеличением атомов кислорода.

Таким образом, увеличение атомов кислорода, участвующих в функционализации, может привести к увеличению интенсивности свечения нанотрубки в области ~600-700 нм. Изменение максимума полосы поглощения приводит к изменению цвета свечения нанотрубки, что может быть использовано для создания светодиодов.

Далее были выполнены расчёты электронных спектров поглощения УНТ с расположенными внутри нанотрубки фуллеренами. Ниже приведены электронные спектры фуллерена C₂₀ (рис. 3) и электронный спектр фрагмента нанотрубки, внутри которой расположен фуллерен (рис. 4)

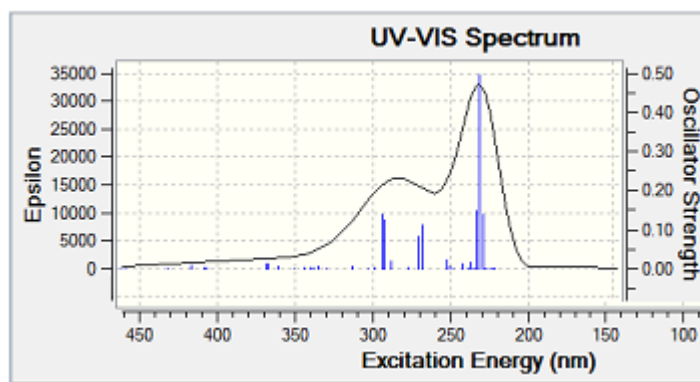
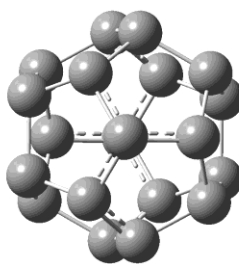
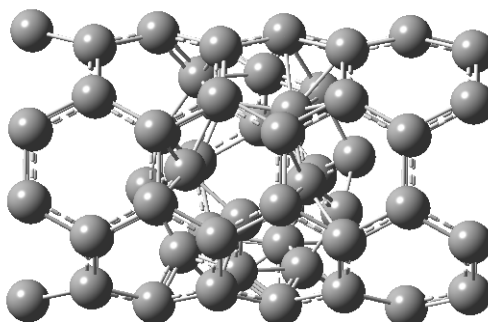


Рис. 3. Электронный спектр фуллерена C₂₀



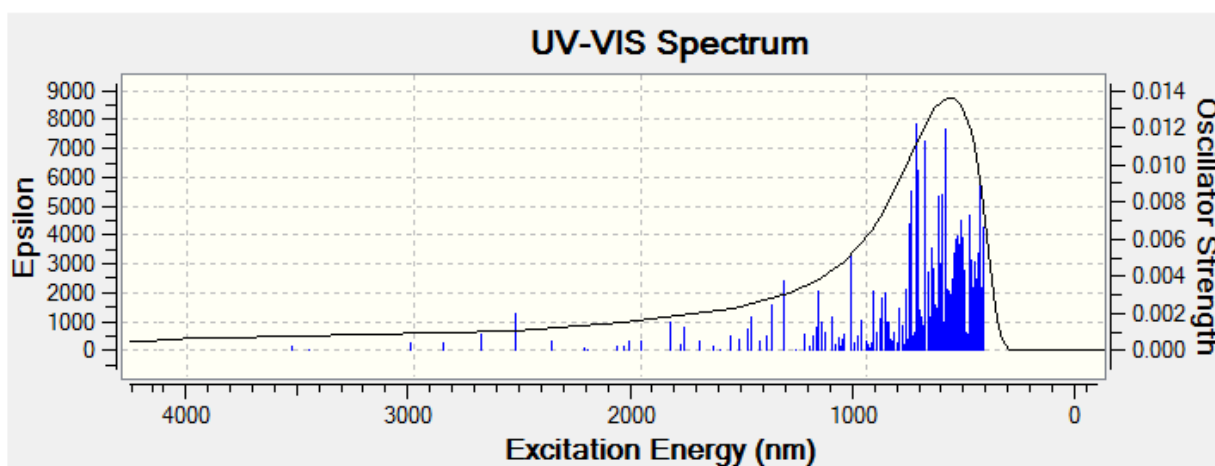


Рис. 4. Электронный спектр фрагмента нанотрубки с фуллереном C20, расположенным внутри ОУНТ

Сравнение спектров поглощения показывает, что внедрение фуллерена внутрь ОУНТ приводит к усилению интенсивности полосы поглощения ОУНТ в интервале 500-1000 нм в ~ 2 раза.

Заключение

1. В данной работе представлен обзор работ, позволяющий понять современное состояние исследований в области такого важнейшего свойства нанотрубок, как флуоресценция, и способах увеличения эффективности флуоресценции отдельных ОУНТ.

2. Вычислены электронные спектры бездефектной ОУНТ, обладающей полупроводниковыми свойствами, а также спектры ОУНТ, функционализированных разным количеством атомов кислорода.

3. Функционализация трубки одной или двумя атомами кислорода приводит к увеличению интенсивности (до 30%) свечения нанотрубки в области $\sim 600-700$ нм.

4. Увеличение числа атомов кислорода, участвующих в функционализации трубки, приводит не только к увеличению его светоизлучающей способности, но и изменению максимума полосы

поглощения приводит, т.е. к изменению цвета свечения нанотрубки. Этот эффект может быть использован для создания светодиодов различного цвета свечения.

5. Внедрение фуллерена внутрь ОУНТ приводит к усилению интенсивности полосы поглощения в интервале 500-1000 нм в ~ 2 раза.

Расчёты были выполнены методом DFT на уровне B3LYP/6-31g(d,p) по программе Gaussian-09 [4].

Список использованной литературы

1. Tang, Q. Xu. Organically Structured Carbon Nanotubes for Fluorescence / Chapter from the book Carbon Nanotubes - Growth and Applications. 2011)
2. A. J. Lee, X. Wang, L. J. Carlson, J. A. Smyder, B. Loesch, X. Tu, M. Zheng, T. D. Krauss. Bright Fluorescence from Individual Single-Walled Carbon Nanotubes // Nano Lett. 2011, 11, 1636–1640
3. Shin H.-J., Clair S., Kim Y., Kawai M. // Nature nanotechnology. 2009. V. 4. P. 567. DOI:10.1038/NNANO.2009.182).
4. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. Gaussian 09. Gaussian Inc., Wallingford CT. 2009. 394 p.