

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ УЛЬТРАКОРОТКОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ (0, 9) ЧИСЛЕННЫМИ МЕТОДАМИ

Боков А.В., Тучин А.В., Битюцкая Л.А.

Воронежский Государственный Университет, физический ф-т, каф. ФПП и МЭ
Россия, 394006, г. Воронеж, Университетская площадь, 1
Тел. 8(4732)2281160
E-mail: artyom-bokow@rambler.ru

Уникальные физико-химические, механические и электрические свойства одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) определяют к ним интерес для создания приборов наноэлектроники, характеризующихся низким электропотреблением, высоким быстродействием, стабильностью параметров [1]. В последние годы значительно возрос интерес к ультракоротким ОУНТ (ук-ОУНТ), что определяется разработкой методов их синтеза с контролем длины вплоть до единиц ангстрем [2]. Для практической реализации приборов наноэлектроники на основе ук-ОУНТ необходимы детальные теоретические исследования особенностей электронного строения ук-ОУНТ. Целью работы является теоретическое исследование перестройки электронной структуры ук-ОУНТ (0, 9) при дискретном изменении ее длины.

Объектами исследований являются закрытые зигзагообразные ук-ОУНТ (0, 9) симметрии D_{3h} , D_{3d} и D_3 в интервале длин 0.7–2.6 нм. С использованием программного комплекса Gaussian09 в Суперкомпьютерном центре ВГУ методом теории функционала плотности (DFT) в приближении LSDA исследованы зависимости зазора между граничными орбиталями (E_{LH}), сродства к электрону (EA), потенциала ионизации (IP) и работы выхода электронов (W) от длины и симметрии ук-ОУНТ.

Во всем исследуемом интервале длин ук-ОУНТ D_{3h} и D_{3d} симметрии стабильнее ук-ОУНТ D_3 симметрии. Исключением является нанотрубка C_{78} . Установлено, что с увеличением длины происходит монотонное уменьшение зазора E_{LH} с 1.58 эВ до 0.59 эВ (симметрия D_{3h}/D_{3d}) и с 0.81 эВ до 0.29 эВ (симметрия D_3), что совместно с термодинамической стабильностью ук-ОУНТ позволяет классифицировать их как семейство полупроводниковых наноматериалов. Зависимости IP, EA и W от длины монотонно убывающие. Значения находятся в интервале IP=6.49–7.30 эВ, EA=4.67–4.97 эВ, W=2.65–2.84 эВ для ук-ОУНТ D_{3h}/D_{3d} симметрии и IP=6.37–7.29 эВ, EA=4.69–5.37 эВ, W=3.02–3.44 эВ для ук-ОУНТ D_3 симметрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №14-02-31315 мол_a).

Литература

1. Michael L., et al. Nano Subnanowatt Carbon Nanotube Complementary Logic Enabled by Threshold Voltage Control // *NanoLetters*, **Vol. 13**, N 10, 2013, p. 4810–4814.
2. Sanchez-Valencia J. R., et al. Controlled synthesis of single-chirality carbon nanotubes // *Nature Letters*, **Vol. 512**, 2014, p. 61–64.