

ОСЦИЛЛЯЦИИ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЁННОЙ ЗОНЫ ОУНТ СВЕРХМАЛЫХ ДИАМЕТРОВ

Ганин А.А., Бормонтон Е.Н., Битюцкая Л.А.¹

¹Воронежский государственный университет, Россия, 394006, Воронеж,
Университетская пл, 1, 208-481, E-mail:me144@phys.vsu.ru.

При исследовании электронных свойств углеродных нанотрубок с контролируемыми индексами хиральности методом DFT LSDA с использованием программных средств Gaussian, TubeGen в области сверхмалых диаметров (0.3 – 2 нм) у полупроводниковых ОУНТ выявлено немонотонное осциллирующее изменение ширины запрещённой зоны, связанное с малостью индексов хиральности, определяющих симметрию и кривизну нанотрубок.

Были рассмотрены три группы ОУНТ: для первой группы – $|n - m| = 3k$, для второй – $|n - m| = 3k + 1$ и для третьей – $|n - m| = 3k + 2$ (где k – целое). Каждая группа характеризуется своим видом симметрии (набором индексов хиральности) и энергетической структурой. Для каждой группы в области малых диаметров выделены наборы индексов, а расчет диаметра проводился по формуле [нм].

Так, для ОУНТ из первой группы симметрия двух графеновых подрешеток не нарушается при свертывании в трубку. Поэтому ширина запрещенной зоны нанотрубок из первой группы хиральностей ((0, 3), (2, 2), (1, 4), (3, 3), (0, 6), (2, 5), (4, 4), (1, 7), (3, 6), (5, 5) и (0, 9)) оказалась равна нулю.

Для второй группы рассчитывалась величина E_g для трубок со следующими значениями индексов хиральности: (0, 4), (2, 3), (1, 5), (3, 4), (0, 7), (4, 5), (1, 8), (3, 7). В соответствии с правилом $3k$ все рассмотренные трубки идентифицируются как полупроводниковые. Согласно полученным результатам для трубки со сверхмалым диаметром (0.31 нм) и хиральностью (0, 4) происходит нарушение правила $3k$.

Для третьей группы рассчитывалась величина E_g для трубок со следующими значениями индексов хиральности: (0, 5), (2, 4), (1, 6), (3, 5), (0, 8), (2, 7), (4, 6). В соответствии с правилом $3k$ все рассмотренные трубки идентифицируются как полупроводниковые. Для трубки со сверхмалым диаметром (0.39 нм) и хиральностью (0, 5) происходит нарушение правила $3k$.

Таким образом, в области сверхмалых диаметров (менее 0.7 нм) наблюдается немонотонное изменение ширины запрещенной зоны ОУНТ: появляются максимумы с аномально высокими значениями E_g : для группы с $|n - m| = 3k + 1$ – 1.35 эВ, 1.16эВ и 0.60 эВ, а для группы с $|n - m| = 3k + 2$ – 1.28 эВ и 1.17 эВ. Совокупное рассмотрение результатов расчета и литературных данных позволяет рассматривать наблюдаемую дискретность E_g как проявление осциллирующего характера изменения электронной структуры ОУНТ в области сверхмалых диаметров. Общим для обеих групп является обращение в ноль ширины запрещенной зоны при предельных значениях диаметра для каждой группы.