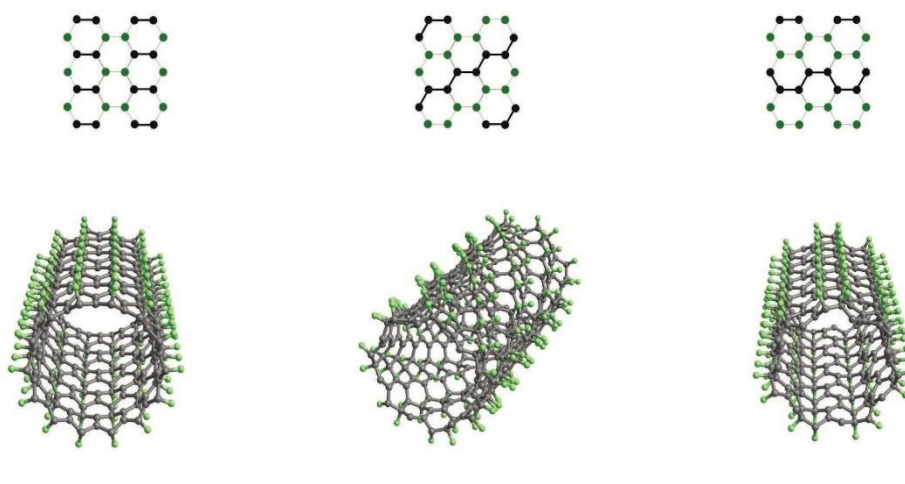


Роль одномерных пи-цепочек в температурной зависимости запрещенной зоны допированных углеродных нанотрубок

Катков В.Л., Осипов В.А.

Лаборатория теоретической физики имени Н. Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Уникальные свойства углеродных нанотрубок обуславливают возможности их широкого практического применения в нанoeлектронике, оптоэлектронике и других областях. В настоящее время наибольший интерес вызывает использование однослойных углеродных нанотрубок при создании инфракрасных сенсоров и биосенсоров, интегральных схем, полевых транзисторов, ячеек памяти, элементов солнечных батарей. Ключевую роль при проектировании таких устройств играет наличие энергетической щели в электронном спектре и возможность управления ее величиной. Также важной характеристикой для различных приложений в туннельной электронике, оптоэлектронике, исследовании оптических свойств (спектры пропускания и поглощения), люминесценции и т. д. является зависимость величины запрещенной зоны от температуры.



а

Рис. 1. Три варианта расположения примесных атомов, которые возникают при максимальном (50 %) заполнении в трубках типа «зигзаг»: «линия», «спираль» и «цепочка»

В работе теоретически исследована температурная зависимость величины запрещенной зоны $E_g(T)$ в одностенных углеродных нанотрубках типа «зигзаг» при максимальном (50 %) фторировании и гидрировании для трех вариантов покрытия. В качестве ковалентной примеси рассматривались фтор и водород, которые одновалентны и образуют схожие структуры. Показано, что характер покрытия критически влияет на зависимость $E_g(T)$, которая может меняться в широких пределах от очень слабой, характерной для чистых углеродных нанотрубок, до сильной, типичной для объемных полупроводников. Во всех случаях обнаружено поведение, характерное для объемных полупроводников, а именно, строгое уменьшение величины запрещенной зоны с ростом температуры. Характер температурного поведения $E_g(T)$ напрямую связан с формированием в трубках одномерных альтернированных цепочек. Основными факторами, определяющими данную зависимость, являются диаметр углеродных нанотрубок, способ расположения примеси и ее тип [1].

1. Катков В.Л. Осипов В.А. Температурная зависимость запрещенной зоны полностью фторированных/гидрированных углеродных нанотрубок: роль одномерных цепочек // Письма в ЖЭТФ. – 2023. – № 118. – С. 748–753.