

# Углеродные нанотрубки и наноструктуры – многофункциональный материал эмиссионной электроники

Ю.В. Гуляев<sup>1</sup>, А.Н. Сауров<sup>2</sup>, Н.И. Синицын<sup>3</sup>,  
О.Е. Глухова<sup>4</sup>, Б.И. Горфинкель<sup>5</sup>, Благов Е.В.<sup>2</sup>,  
Г.В. Торгашов<sup>4</sup>, В.П. Кудряшов<sup>6</sup>

<sup>1</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН (ИРЭ РАН),

<sup>2</sup>Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН,

<sup>3</sup>Саратовский филиал ИРЭ РАН (СФ ИРЭ РАН),

<sup>4</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,

<sup>5</sup>ООО «Волга Свет» (г. Саратов)

<sup>6</sup>ОАО «Алмаз» (г. Саратов)

# Квантовая модель углеродных нанотрубок

Полная энергия системы

$$E = E_{bond} + E_{rep}$$

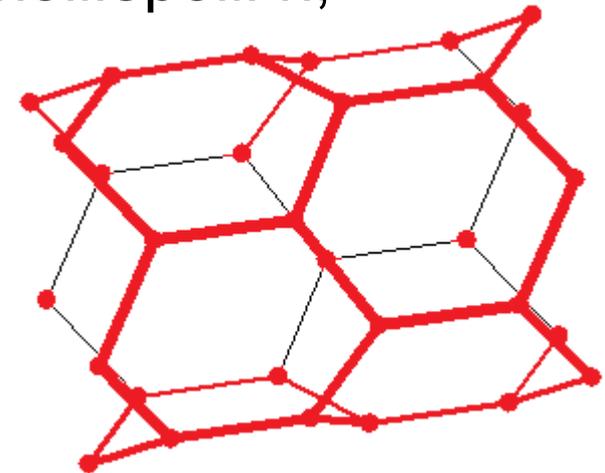
Энергия занятых одноэлектронных уровней

$$E_{bond} = 2 \sum_n \varepsilon_n$$

$\varepsilon_n$  - Энергия заполненного состояния с номером  $n$ ,  
собственное значение Гамильтониана

Феноменологическая энергия  
системы

$$E_{rep} = \sum_{i < j} V_{rep}(|r_i - r_j|)$$



$$V_{rep} = V_{rep}^0 \left( \frac{1.54}{r} \right)^{4.455} - \mathbf{exp} \left\{ 4.455 \left[ - \left( \frac{r}{2.32} \right)^{22} + \left( \frac{1.54}{2.32} \right)^{22} \right] \right\} \quad V_{rep}^0 = 10.92 \text{ эВ}$$

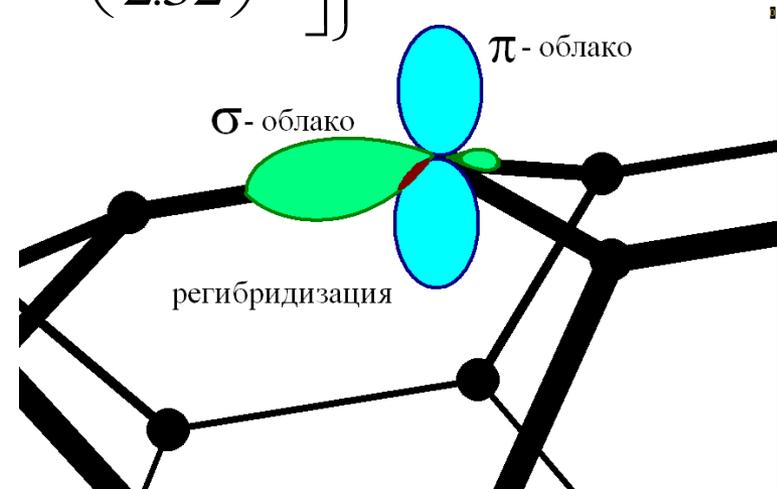
## Межатомные матричные элементы гамильтониана

$r$  - расстояние между атомами

$i, j$  – орбитальные моменты

волновых функций

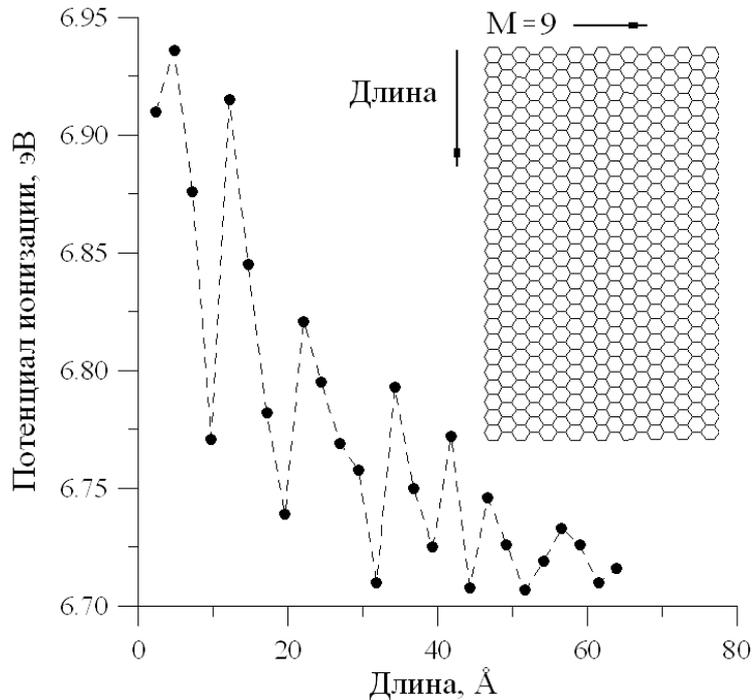
$\alpha$ -индекс, указывающий тип связи ( $\sigma$  или  $\pi$ )



$$V_{ij\alpha}(r) = V_{ij\alpha}^0 \left( \frac{1.54}{r} \right)^{2.796} \mathbf{exp} \left\{ 2.796 \left[ - \left( \frac{r}{2.32} \right)^{22} + \left( \frac{1.54}{2.32} \right)^{22} \right] \right\}$$

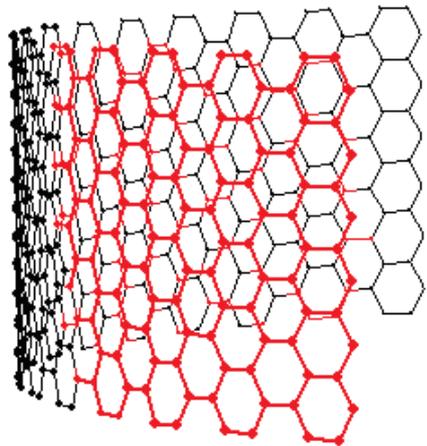
$\varepsilon_s$	$\varepsilon_p$	$V_{ss\sigma}^0$	$V_{sp\sigma}^0$	$V_{pp\sigma}^0$	$V_{pp\pi}^0$
-10.932	-5.991	-4.344	3.969	5.457	-1.938

# Эмиссионные свойства графена

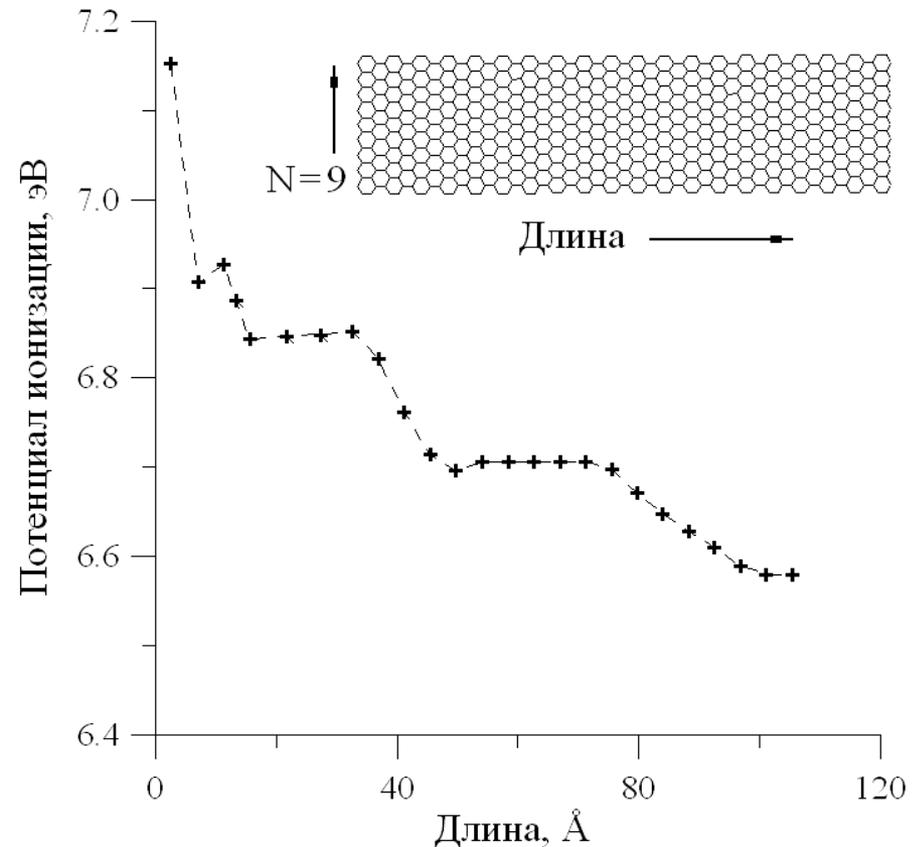


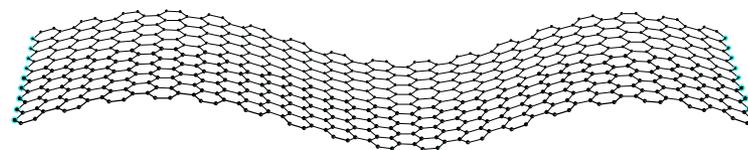
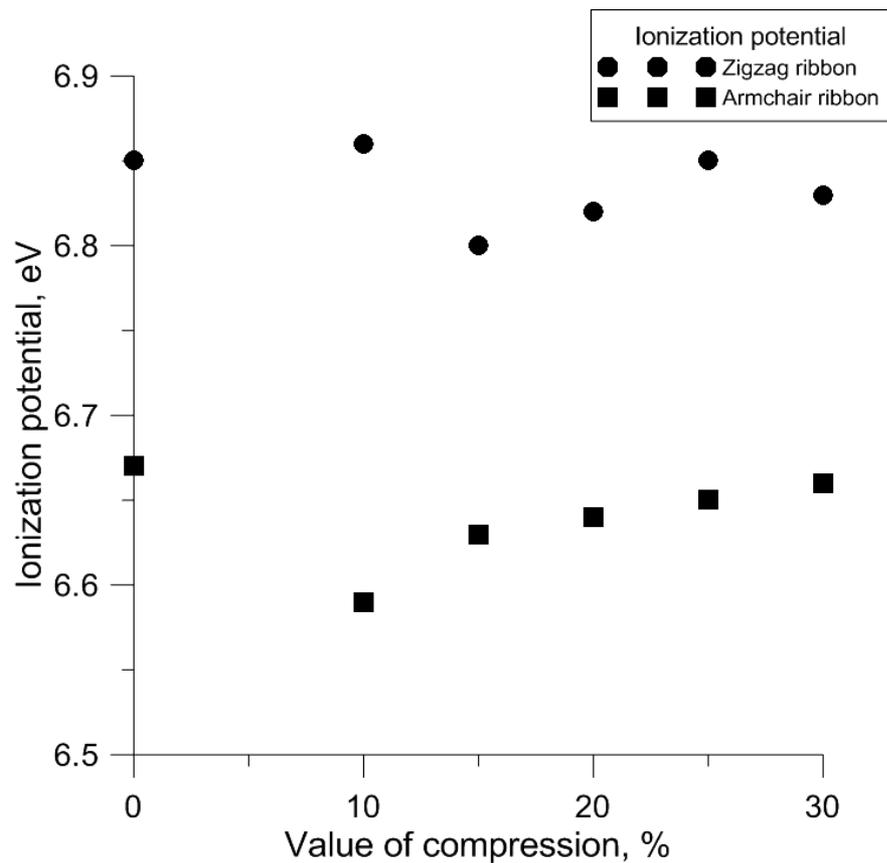
Зависимость потенциала ионизации графена от длины при увеличении длины в направлении параметра  $N$  – количества гексагонов в направлении оси  $Y$

Зависимость потенциала ионизации графена от длины при увеличении длины в направлении параметра  $M$  – количества гексагонов в направлении оси  $x$



Графеновая лента





Потенциал ионизации графеновых нанолент armchair (длина 71Å, ширина 22Å) и zigzag (длина 65Å, ширина 19Å) с различной степенью кривизны поверхности.

# Энергетическая щель спектра сжатого графена

Сжатие, %	Энергетическая щель спектра, эВ
0	0.074
2	0.036
10	0.007
15	0.032
20	0.031
25	0.068
30	0.038

Таблица 1. Зависимость энергетической щели спектра от величины сжатия, выраженного в процентах, для графеновой наноленты armchair (длина 71Å, ширина 22Å)

<b>Сжатие, %</b>	<b>Энергетическая щель спектра, эВ</b>
0	0.036
2	0.040
10	0.065
15	0.051
20	0.053
25	0.053
30	0.038

Таблица 2. Зависимость энергетической щели спектра от величины сжатия, выраженного в процентах, для графеновой наноленты zigzag (длина 65Å, ширина 19Å)

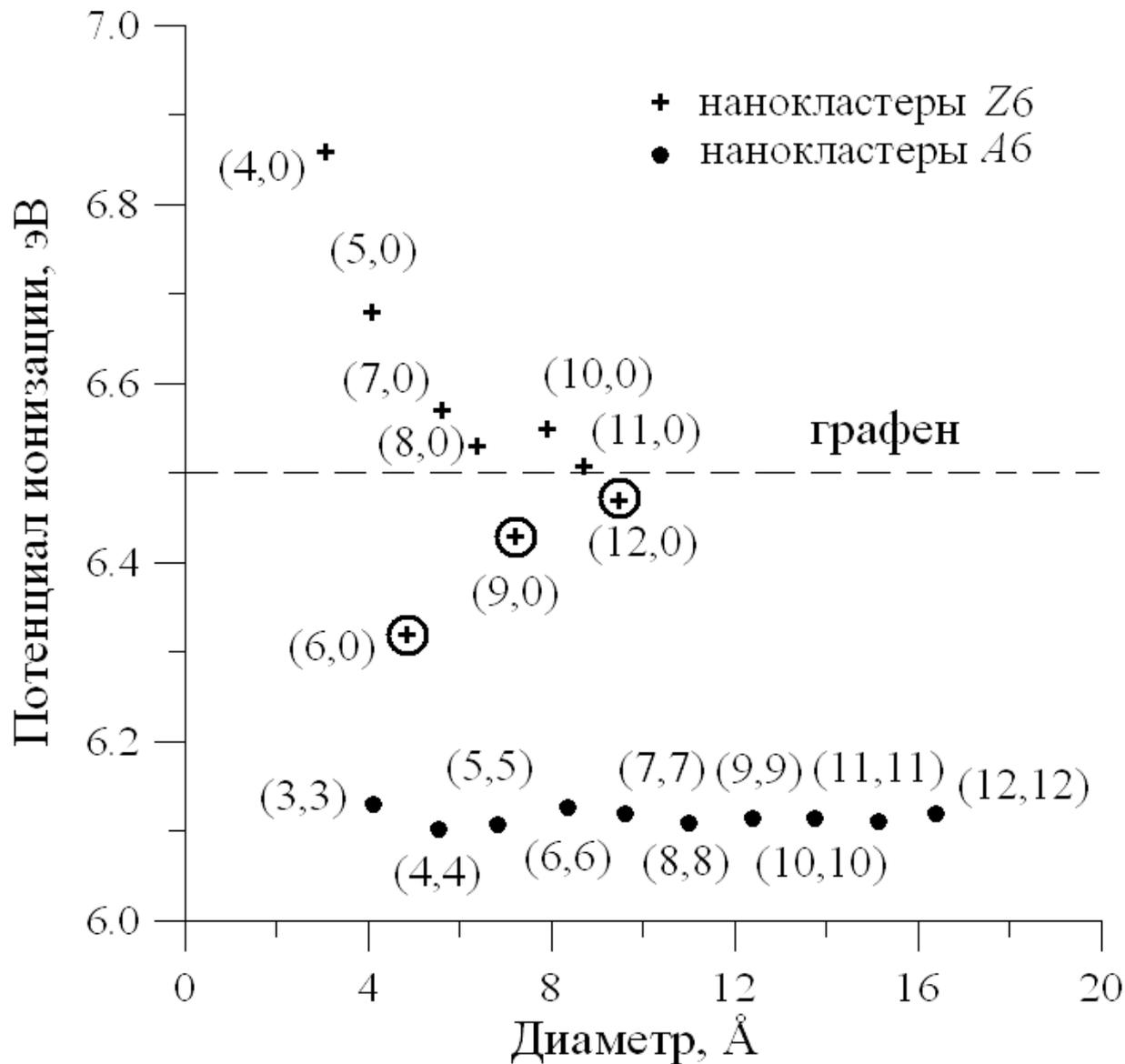
# Эмиссионные свойства углеродных нанотрубок

Тип трубки	Диаметр, Å	Работа выхода, эВ
(3,3)	4.10	4.43
(4,4)	5.52	4.5
(5,5)	6.84	4.52
(6,6)	8.36	4.5
(12,12)	16.30	4.5

Таблица 3. Работа выхода углеродных нанотрубок armchair различной длины и диаметра

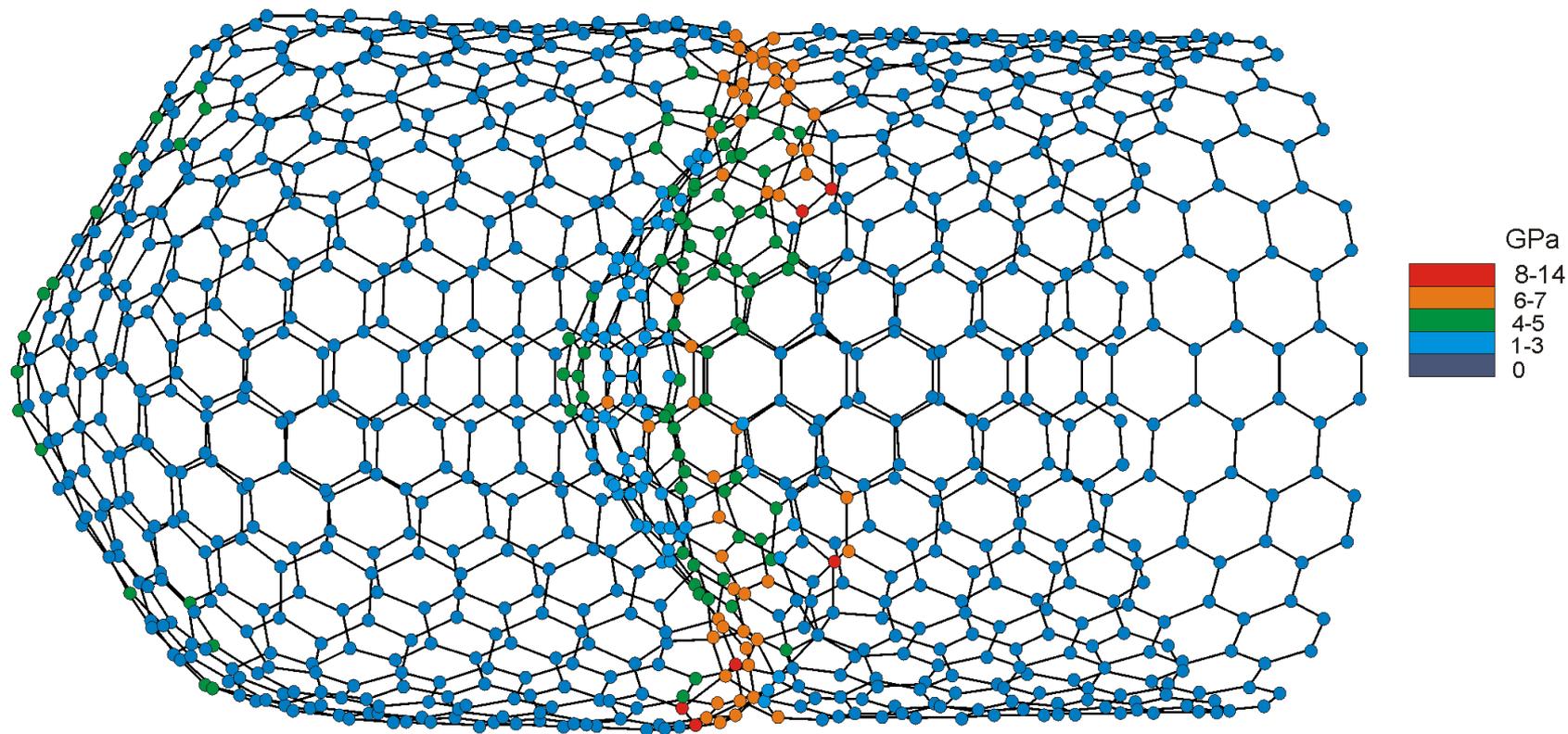
Тип трубки	Диаметр, Å	Работа выхода, эВ
(4,0)	3.34	5.25
(5,0)	4.14	4.97
(6,0)	4.84	4.63
(7,0)	8.36	4,83
(8,0)	6.42	4.85
(9,0)	7.20	4.73
(10,0)	8.00	4.81
(12,0)	9.52	4.77

Таблица 4. Работа выхода углеродных нанотрубок zigzag различной длины и диаметра

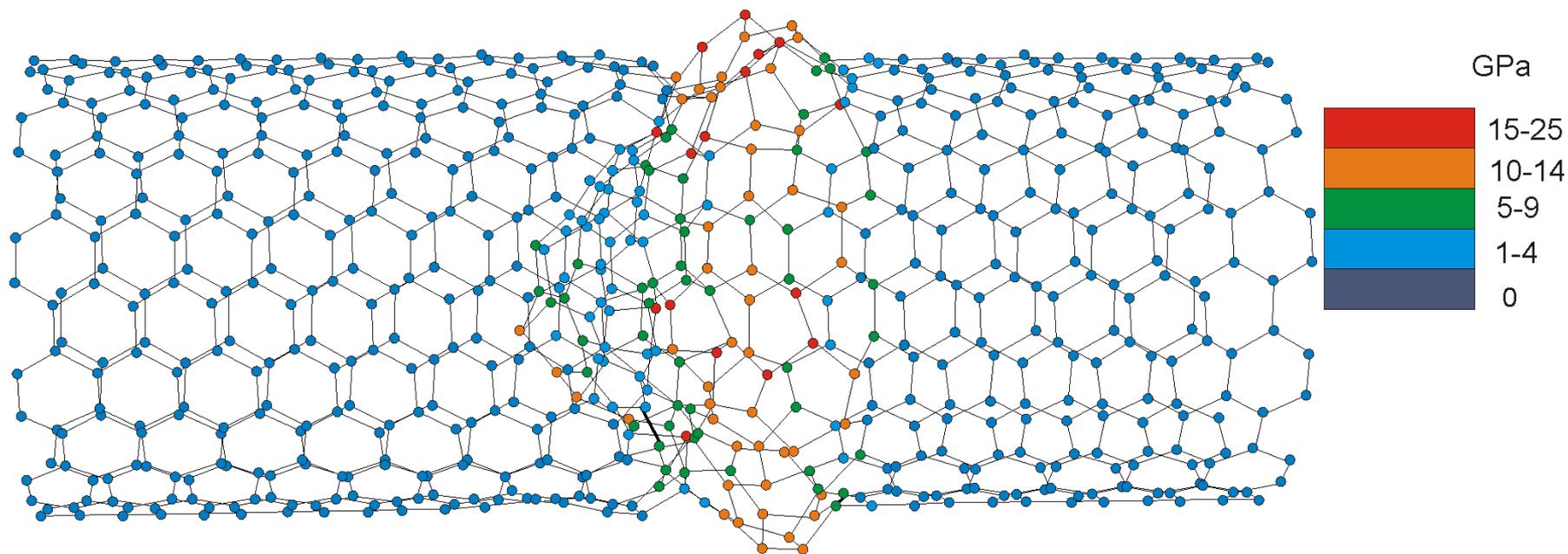


Потенциал ионизации тубулярных нанокластеров длиной  $\sim 100$  Å и индивидуального графитового листа (параметр  $N=9$ , протяженность края вида armchair  $\sim 100$  Å)

# Эмиссионные свойства бамбукоподобных нанотрубок



Атомная структура бамбукоподобной нанотрубки на основе трубки (15,15), имеющей длину 36.96 Å, с указанием шкалы локальных напряжений на атомах нанотрубки



Атомная структура бамбукоподобной нанотрубки на основе трубки (10,10), имеющей длину 36.96 Å, с указанием шкалы локальных напряжений на атомах нанотрубки

Число перемычек	Радиус нанотрубки, Å	Длина нанотрубки, Å	Потенциал ионизации, эВ	Энергетиче ская щель, эВ
1	6.81	37.28	6.3	0.12
2	6.79	37.05	6.1	0.63
3	6.90	37.28	6.23	0.12
4	6.78	37.05	6.69	0.63

Таблица 5. Геометрические и энергетические параметры углеродной бамбукоподобной нанотрубки (10,10)

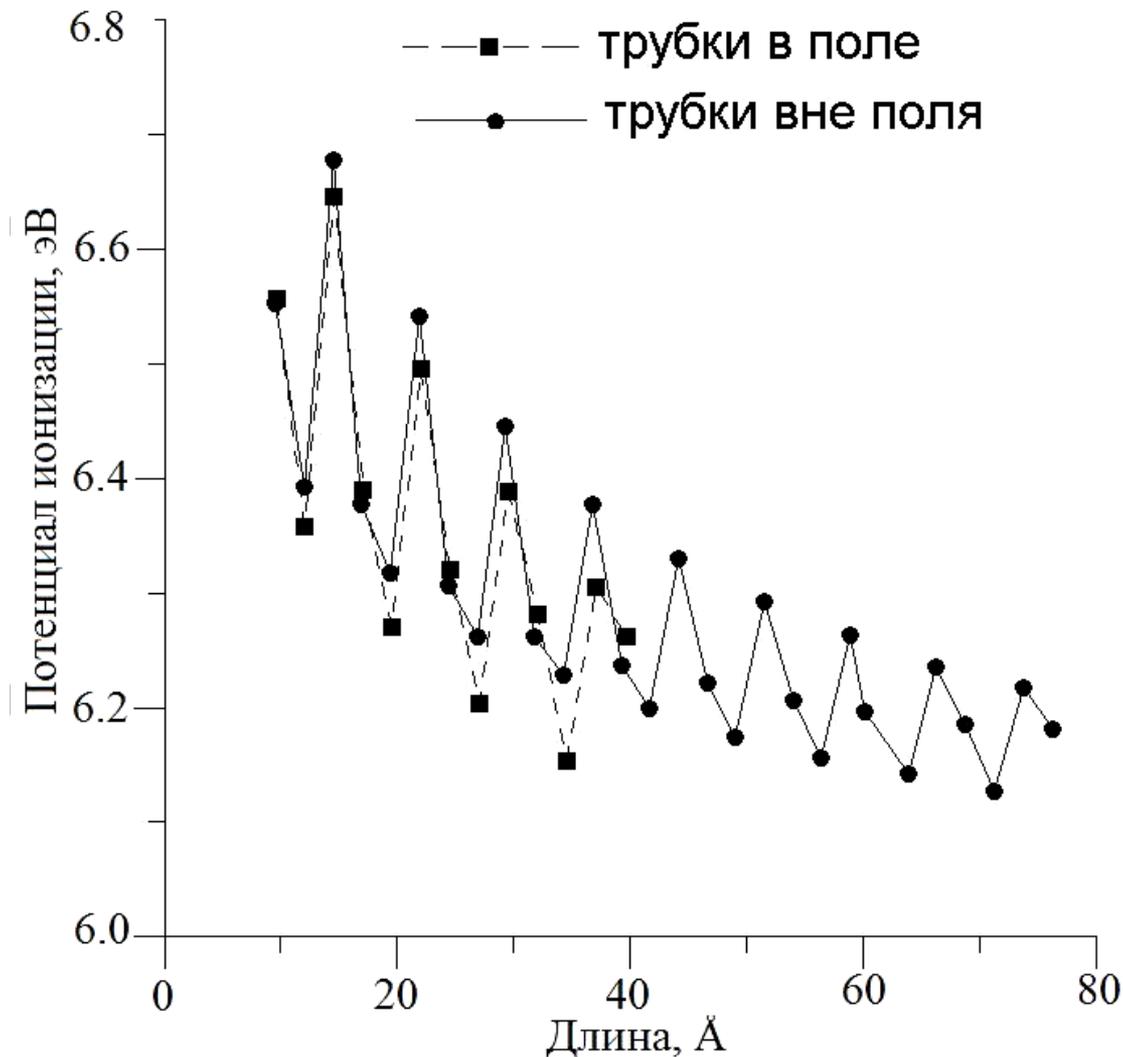
Число перемычек	Радиус нанотрубки, Å	Длина нанотрубки, Å	Модуль Юнга, ТПа	Модуль кручения, кэВ·рад <sup>-2</sup>
0	6.74	40.05	2.25	0.12
1	6.74	37.72	2.59	0.63
2	6.74	37.52	2.71	0.12
3	6.74	39.61	2.86	0.63

Таблица 6. Геометрические и механические характеристики бамбукоподобной углеродной нанотрубки на основе трубки (10,10).

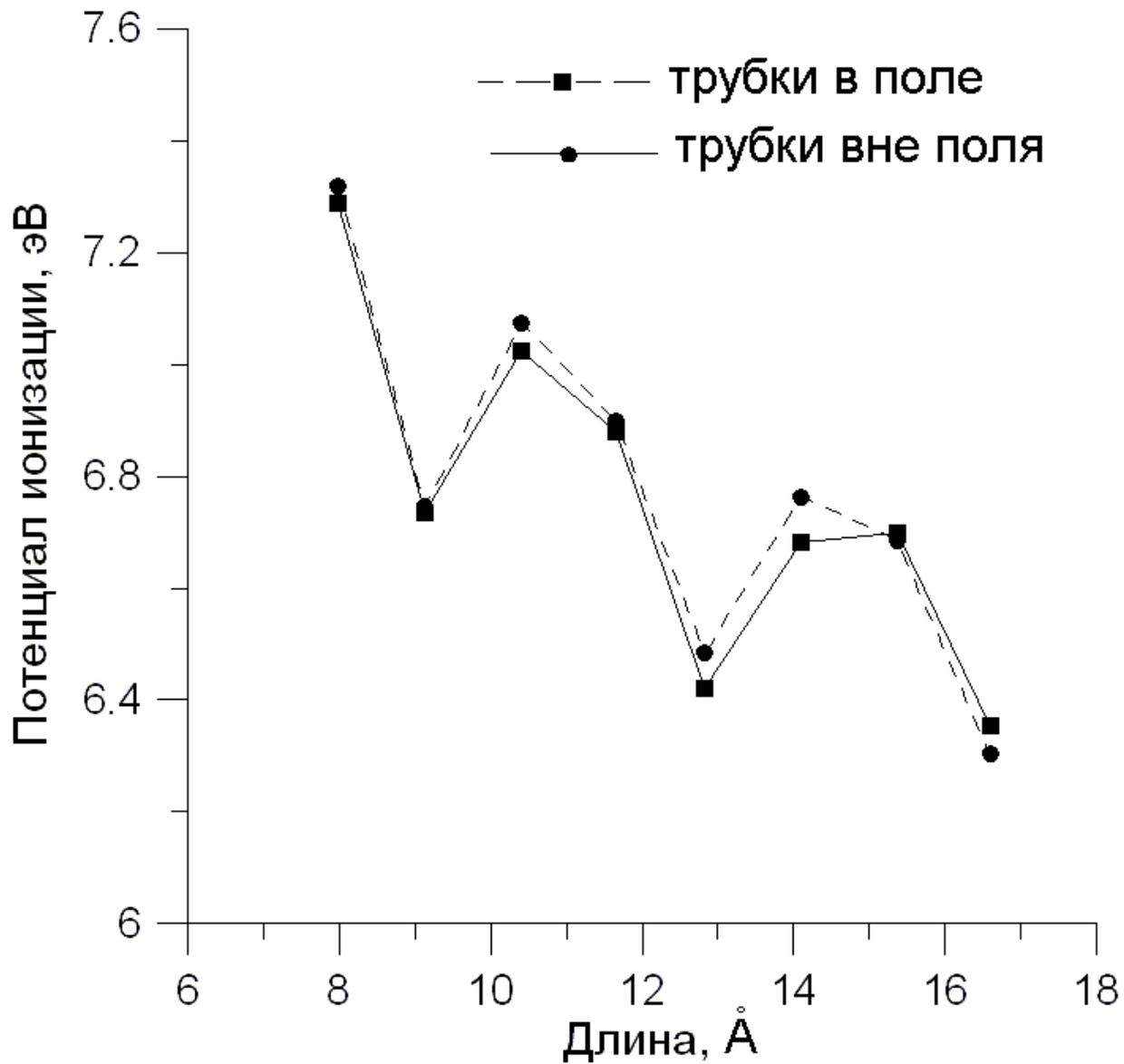
Число перемычек	Дипольный момент $\mu \cdot 10^{30}$ , Кл $\cdot$ м	$\mu_x \cdot 10^{30}$ , Кл $\cdot$ м	$\mu_y \cdot 10^{30}$ , Кл $\cdot$ м	$\mu_z \cdot 10^{30}$ , Кл $\cdot$ м
0	0	0	0	0
1	96.97	-0.33	0.22	96.94
2	489.51	0.24	-0.24	489.21
3	80.70	-2.61	0.78	80.67
4	87.20	-1.70	1.20	87.18

Таблица 7. Дипольный момент бамбукоподобной углеродной нанотрубки на основе трубки (10,10).

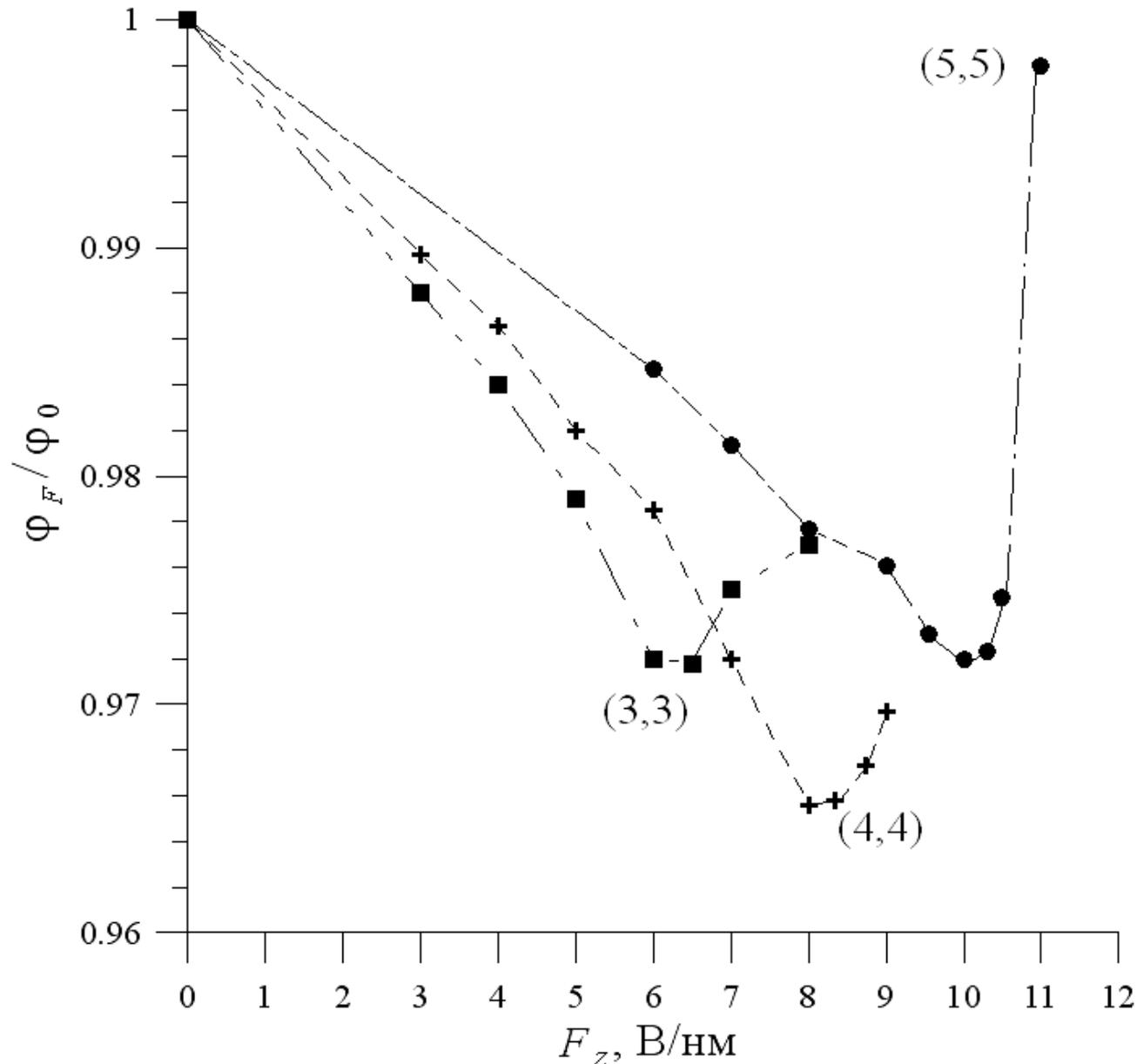
# Влияние поля на электронные свойства углеродных нанотрубок



Изменение потенциала ионизации в зависимости от длины для трубки armchair (5,5) с открытыми концами



Изменение потенциала ионизации в зависимости от длины для трубки armchair (5,5) с закрытыми концами



Зависимости относительной величины работы выхода ( $\varphi_0$  – работа выхода вне поля,  $\varphi_F$  – в поле с напряженностью  $F$ ) нанотрубок (3,3), (4,4), (5,5) от напряженности электростатического поля.

Параметры	Углеродная нанотрубка (3,3)	Углеродная нанотрубка (4,4)	Углеродная нанотрубка (5,5)
$\Delta L/L, \%$	1.22	1.43	1.55
Пондермоторная сила, нН	6.6	6.0	4.7

Таблица 8. Значения удлинения нанотрубки и пондермоторной силы в случае ориентации оси трубки/графена вдоль силовых линий