

КРАТКОЕ СООБЩЕНИЕ

PACS: 73.22.-f

В.Г. Бутько, А.А. Гусев

ЗАПРЕЩЕННАЯ ЗОНА «УЗКИХ» УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Поступило в редакцию 12 августа 2019 года

*В рамках теории функционала плотности проведены неэмпирические расчеты электронных свойств «узких» полупроводниковых углеродных нанотрубок (НТ). Особое внимание уделено полученным значениям запрещенных щелей  $E_g$ .*

**Ключевые слова:** первопринципные расчеты, нанотрубка, хиральный угол, диаметр нанотрубки, запрещенная щель

В работах [1,2] методами теории функционала плотности были исследованы электронные свойства полупроводниковых углеродных НТ. Полученные расчетные значения ширины запрещенных щелей  $E_g$  удивительно точно описываются приведенным в [2] аналитическим выражением

$$E_g^f = 0.743 \left[ \frac{1}{D} + (-1)^k \cos 3\theta \frac{0.138}{kD^2} \right]. \quad (1)$$

Здесь  $D$  – диаметр НТ в нанометрах,  $\theta$  – хиральный угол,  $k = (m - n) \bmod 3$  (где  $m, n$  – хиральные индексы).

Формула (1) справедлива при  $D > 0.8$  nm. При меньших диаметрах эффекты кривизны поверхности кардинально влияют на результаты [1]. Такие НТ имеют общепринятое название «узкие» [3]. Для полноты общей картины необходимо провести неэмпирические расчеты электронных свойств и «узких» углеродных НТ. Эта задача и составляет цель настоящего краткого сообщения.

Небольшие размеры «узких» НТ позволили осуществить первопринципные расчеты зонной структуры некоторых из них [3–5]. В табл. 1 представлены значения  $E_g$  «узких» НТ, полученные различными методами расчетов как с привлечением параметров, так и из первых принципов.

Электронное строение одномерных наноструктур исследовано в рамках теории функционала плотности методом проекционных присоединенных волн [8]. В работе [1] подробно изложен этот метод и приведены параметры расчета. Результаты наших расчетов зонной структуры «узких» углеродных НТ отражены в табл. 2. Выделим важные особенности. Пять «узких» НТ имеют довольно большую ширину запрещенной зоны  $E_g > 1.0$  eV (максимум

Таблица 1

Запрещенные щели  $E_g$  (eV) в «узких» углеродных НТ

$(m,n)$	Полуэмпирические расчеты			Неэмпирические расчеты		
	TB			LDA		GGA [5]
	[4]	[6]	[7]	[4]	[3]	
(4,0)	2.52	2.49	–	0.0	0.0	0.0
(3,2)	2.41	2.38	–	0.39	0.46	–
(5,0)	2.32	2.30	–	0.0	0.0	0.0
(4,2)	2.11	2.09	2.15	0.25	0.34	–
(5,1)	1.87	1.85	–	0.13	0.0	–
(4,3)	1.76	–	–	1.31	1.28	–
(6,1)	1.74	1.72	–	0.41	–	–
(7,0)	1.50	1.48	–	0.21	–	0.24
(5,3)	1.59	–	–	1.18	–	–
(6,2)	1.47	1.45	–	0.67	–	–
(8,0)	1.42	1.41	–	0.59	–	0.64
(8,1)	–	1.23	–	–	–	–
(6,4)	1.27	1.25	–	1.09	–	–
(6,5)	–	–	1.00	–	–	–
(9,1)	–	1.17	–	–	–	–

Таблица 2

Структурные параметры и ширина запрещенной щели  $E_g$  «узких» углеродных НТ

$(m,n)$	$N$	$C$ , nm	$D$ , nm	$E_g$ , eV	$\theta$ , deg	$k$	$E_g^f$ , eV	$E_g^f - E_g$ , eV
(4,0)	16	0.423	0.338	0.0	0.00	1	1.30	1.30
(3,2)	76	1.871	0.357	0.35	23.4	1	1.81	1.46
(5,0)	20	0.434	0.412	0.0	0.00	2	2.11	2.11
(4,2)	56	1.129	0.428	0.26	19.1	2	1.99	1.73
(5,1)	124	2.381	0.450	0.0	8.95	1	1.20	1.20
(4,3)	148	2.603	0.488	1.31	25.3	1	1.40	0.09
(6,1)	172	2.797	0.526	0.40	7.59	2	1.58	1.18
(7,0)	28	0.427	0.559	0.20	0.00	1	1.00	0.80
(5,3)	196	2.990	0.560	1.17	21.8	2	1.39	0.22
(6,2)	104	1.541	0.575	0.66	13.9	1	1.02	0.36
(5,4)	244	3.340	0.622	1.10	26.3	1	1.14	0.04
(8,0)	32	0.427	0.637	0.58	0.00	2	1.59	0.71
(7,2)	268	3.396	0.652	0.84	12.2	2	1.24	0.40
(8,1)	292	3.652	0.679	0.77	5.82	1	0.88	0.11
(6,4)	152	1.862	0.692	1.08	23.4	2	1.11	0.03
(6,5)	364	4.072	0.756	0.92	27.0	1	0.95	0.03
(9,1)	364	4.064	0.759	1.05	5.21	2	1.07	0.02

Примечание:  $N$  – число атомов углерода в элементарной ячейке НТ;  $C$  – постоянная решетки вдоль оси НТ

1.31). Заметим, что для остальных НТ ширина запрещенной зоны  $E_g$  не превышает 0.9 eV как для неэмпирических расчетов, так и для экспериментальных данных [1,2]. Для сравнения в табл. 2 приведены значения ширины запрещенной щели  $E_g^f$  по формуле (1). Неожиданно, но для 6 из 17 НТ значения  $E_g$  и  $E_g^f$  довольно близки.

1. В.Г. Бутько, А.А. Гусев, ФТВД **28**, № 2, 90 (2018).
2. В.Г. Бутько, А.А. Гусев, ФТВД **28**, № 4, 122 (2018).
3. I. Cabria, J.W. Mintmire, C.T. While, Phys. Rev. **B67**, 121406(R) (2003).
4. V. Zólyomi, J. Kürti, Phys. Rev. **B70**, 085403 (2004).
5. O. Gülseren, T. Yildirim, S. Ciraci, Phys. Rev. **B65**, 153405 (2002).
6. R. Nizam, M.M. Sehban, IJSR **6**, № 1, 1565 (2017).
7. J. Sommer, A. Zienert, S. Gemming, H. Zentrum, J. Schuster, S.E. Schulz, T. Gessner, International Multi-Conference on Systems, Signals and Devices **9**, 1 (2012).
8. G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. **B48**, 13115 (1993).

*V.G. Boutko, A.A. Gusev*

#### BAND GAP OF «NARROW» CARBON NANOTUBES

In the framework of the density functional theory, non-empirical calculations of the electronic properties of «narrow» semiconductor carbon nanotubes (NT) are carried out. Special attention is paid to the obtained values of band gaps  $E_g$ .

**Keywords:** *ab initio* calculations, nanotube, chiral angle, nanotube diameter, band gap