

PACS numbers: 61.48.De, 71.20.Tx, 73.22.-f, 73.61.Wр, 78.30.Na, 78.40.Ri, 81.05.Na

## Влияние дефектов на электронную структуру углеродных нанотрубок

А. П. Попов, И. В. Бажин\*

*Педагогический институт ФГОУ ВПО «ЮФУ»,  
Ростов-на-Дону, Россия*

*\*Донской государственный технический университет,  
Ростов-на-Дону, Россия*

В работе исследуется влияние дефектов на равновесную конфигурацию и электронную структуру одностенных нанотрубок. Для фрагмента (12,0)-трубки  $C_{192}$  и этого же фрагмента с вакансиями простейшего типа и дефектом Уэлса–Стоуна в рамках полумпирического метода РМЗ рассчитаны спектры поглощения в инфракрасном и ультрафиолетовом диапазонах.

У роботі досліджено вплив дефектів на рівноважну конфігурацію та електронну структуру одностінних нанотрубок. Для фрагменту (12,0)-трубки  $C_{192}$  і цього ж фрагменту з вакансіями найпростішого типу та дефектом Уелса–Стоуна в рамках напівемпіричної методи РМЗ розраховано спектри вбирання в інфрачервоному та ультрафіолетовому діпазонах.

Influence of defects on equilibrium configuration and electronic structure of one-wall nanotubes is investigated. For (12,0)-fragment of  $C_{192}$  tube and the same fragment with vacancies of the simplest type and Wales–Stone defect, absorption spectra in infrared and ultraviolet bands are calculated within the scope of the РМЗ semi-empirical method.

**Ключевые слова:** нанотрубки, дефекты и вакансии, квантово-химические расчеты, ИК-спектры, УФ-спектры.

*(Получено 23 ноября 2007 г.)*

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе исследуется влияние дефектов на равновесную конфигурацию и электронную структуру одностенных нанотрубок. Косвенным подтверждением актуальности подобных исследований служит неумещающийся поток работ, связанных с этой темати-

кой [1–8].

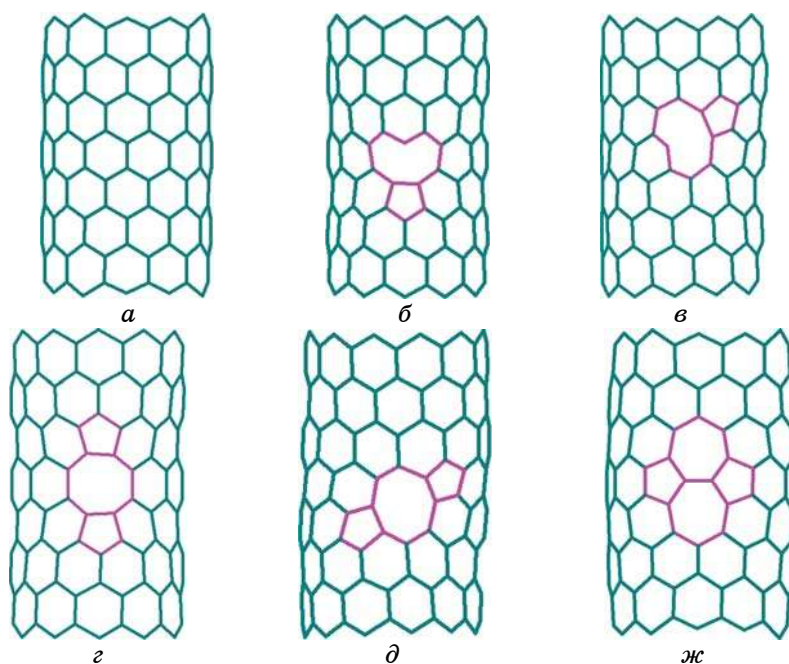
## 2. МЕТОД РАСЧЕТА И РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Для фрагмента (12,0)-трубки  $C_{192}$  и этого же фрагмента с вакансиями простейшего типа и дефектом Уэлса–Стоуна [9] в рамках полуэмпирического метода РМЗ [10–13] рассчитаны равновесная конфигурация, полная энергия, теплота образования, а также спектры поглощения в инфракрасном и ультрафиолетовом диапазонах. Для обозначения локальных дефектов в нанотрубках используется классификация, предложенная в нашей предыдущей работе [14].

На рисунке 1 изображены все возможные виды дефектов, возникающие в (12,0)-нанотрубке после удаления не более чем двух соседних атомов углерода.

Результаты вычисления полной энергии и теплоты образования приведены в табл. 1.

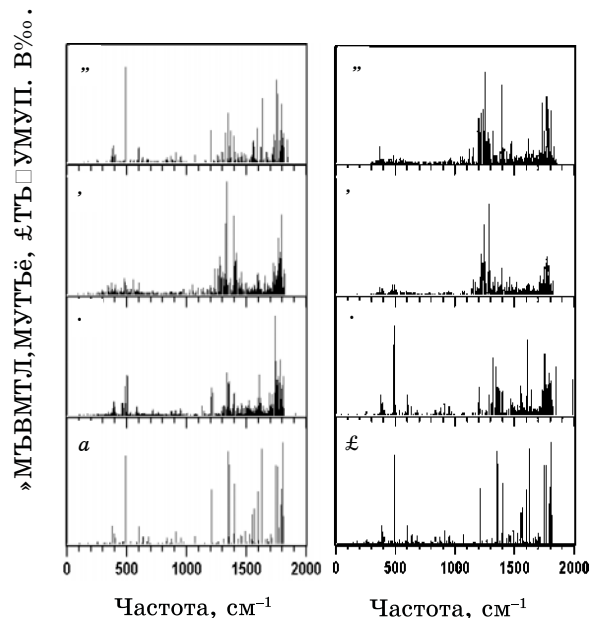
Чтобы получить возможность непосредственного сравнения с экспериментом, в данной статье приведены результаты — спектры поглощения в инфракрасном и ультрафиолетовом диапазонах (рис.



**Рис. 1.** *a* — фрагмент (12,0)-нанотрубки  $C_{192}$ ; тот же фрагмент с вакансиями: (*б*)  $V_{1,1}D_1\phi\alpha$ , (*в*)  $V_{1,1}D_1\beta$ , (*г*)  $V_{2,2}D_2\alpha$ , (*д*)  $V_{2,2}D_2\beta$  и (*ж*) дефектом Уэлса–Стоуна  $D_0D_2\alpha$ .

ТАБЛИЦА 1.

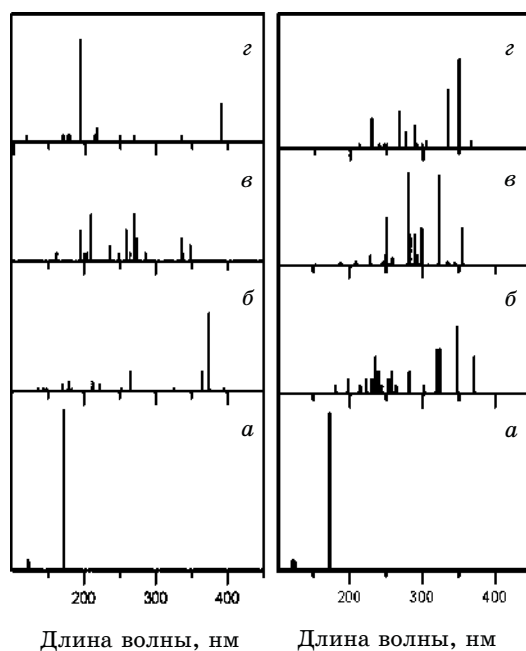
	$C_{192}$	$C_{191} V_{1,1} D_1 \alpha$	$C_{191} V_{1,1} D_1 \beta$	$C_{192} D_0 D_2 \alpha$	$C_{190} V_{2,2} D_2 \alpha$	$C_{190} V_{2,2} D_2 \beta$
$E, \text{эВ}$	-22655	-22529	-22528	-22651	-22413	-22412
$\Delta H,$ ккал/моль	2847,3	3025,4	3047,9	2928,5	2972,6	2990,1



**Рис. 2.** Слева показаны ИК-спектры поглощения: (а) фрагмента нанотрубки  $C_{192}$ ; этого же фрагмента с дефектами: (б)  $V_{1,1} D_1 \alpha$ , (в)  $V_{2,2} D_2 \alpha$ , (г)  $D_0 D_2 \alpha$ . Справа показаны ИК-спектры поглощения: (а) фрагмента нанотрубки  $C_{192}$ ; этого же фрагмента с дефектами: (б)  $V_{1,1} D_1 \beta$ , (в)  $V_{2,2} D_2 \beta$ , (г)  $D_0 D_2 \beta$ .

2, 3).

Относительно простую интерпретацию допускают изменения в спектрах поглощения в инфракрасном диапазоне, вызываемые появлением вакансий (дефектами). Как показывает анализ, они связаны, в первую очередь, с появлением колебательных мод, локализованных в основном вблизи области вакансии или дефекта. Изменениям подвергаются также и моды, соответствующие различным типам коллективных колебаний, при этом важную роль играет степень совместимости локальной симметрии вакансии (дефекта) с общей, в том числе и осевой, симметрией нанотрубки. К сожалению, вследствие низкой симметрии исследуемых объектов, сколько-нибудь полная классификация колебательных мод по типу симметрии не представляется возможной.



**Рис. 3.** Слева показаны УФ-спектры поглощения: (а) фрагмента нанотрубки  $C_{192}$ ; этого же фрагмента с дефектами: (б)  $V_{1,1}D_1\alpha$ , (в)  $V_{2,2}D_2\alpha$ , (г)  $D_0D_2\alpha$ . Справа показаны УФ-спектры поглощения: (а) фрагмента нанотрубки  $C_{192}$ ; этого же фрагмента с дефектами (б)  $V_{1,1}D_1\beta$ , (в)  $V_{2,2}D_2\beta$ , (г)  $D_0D_2\beta$ .

Еще сложнее оказывается задача интерпретации спектров поглощения нанотрубок с вакансиями (дефектами) в ультрафиолетовом диапазоне. В результате появления вакансии или дефекта спектры поглощения в ультрафиолетовом диапазоне становятся более богатыми. Из общих соображений ясно, что эти изменения вызваны сдвигом и расщеплением энергетических уровней, что связано с понижением симметрии нанотрубки, вызванной появлением вакансии или дефекта.

В любом случае, из результатов расчетов следует, что спектры поглощения в инфракрасном и ультрафиолетовом диапазоне могут быть использованы для идентификации простейших вакансий и дефектов в нанотрубках.

## ВЫВОДЫ

Характерные особенности (положения линий и их интенсивности), наблюдаемые в спектрах поглощения в инфракрасном и ультрафиолетовом диапазоне, могут быть использованы для идентификации локальных дефектов в одностенных нанотрубках.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. A. H. Nevidomskyy, G. Csanyi, and M. C. Payne, *Phys. Rev. Lett.*, **91**: 105502 (2003).
2. K. N. Nicolski, A. S. Baturin, V. S. Bormashov et al., *NATO Science Series. ICHMS'2003* (Eds. T. N. Veziroglu et al.) (2004), p. 123.
3. P. Ajayan, V. Ravikumar, and J. Charlier, *Phys. Rev. Lett.*, **81**: 1437 (1998).
4. D. Orlikowski, M. Nardelli, J. Bernholc, and C. Roland, *Phys. Rev. B*, **61**: 14194 (2000).
5. T. Belytschko, S. Xiao, G. Schatz, and R. Ruoff, *Phys. Rev. B*, **65**: 235430 (2002).
6. S. Mielke, D. Troya, S. Zhang, J. Li, S. Xiao et al., *Chem. Phys. Lett.*, **390**: 413 (2004).
7. C. Wei, K. Cho, and D. Srivastava, *Phys. Rev. B*, **67**: 15407 (2003).
8. A. Andriotis, M. Menon, and D. Srivastava, *J. Chem. Phys.*, **117**: 10245 (2002).
9. A. Stone and D. Wales, *Chem. Phys. Lett.*, **128**: 501 (1986).
10. M. J. S. Dewar and W. Thiel, *J. Am. Chem. Soc.*, **99**: 4899 (1977).
11. J. J. P. Stewart, *J. Comput. Chem.*, **10**: 209 (1989).
12. J. J. P. Stewart, *J. Comput. Chem.*, **10**: 221 (1989).
13. T. Clark, A. Breindl, and G. Rauhut, *J. Mol. Model.*, **1**: 22 (1995).
14. A. P. Popov and I. V. Bazhin, *NATO Science Series. ICHMS'2007* (Eds. T. N. Veziroglu et al.) (2007), p. 795.