

На правах рукописи

Ивлиев Павел Алексеевич

**Исследование магнитных и диэлектрических характеристик
одностенных углеродных нанотрубок металлического типа
методом функционалов плотности**

Специальность 01.04.07 — Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико–математических наук



Москва — 2018

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель: кандидат физико–математических наук,
доцент
Еркович Ольга Станиславовна

Официальные оппоненты: **Манько Ольга Владимировна**
доктор физико–математических наук,
ведущий научный сотрудник,
ФГБУН «Физический институт им.
П.Н. Лебедева Российской академии наук»,
сотрудник Сектора теоретической физики

Чаусов Денис Николаевич
кандидат физико–математических наук,
доцент, ГОУВО МО «Московский
государственный областной университет»,
заведующий учебно–научной лабораторией
теоретической и прикладной
нанотехнологии

Ведущая организация: Институт проблем машиностроения РАН –
филиал федерального государственного
бюджетного научного учреждения
«Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной физики Российской
академии наук»

Защита диссертации состоится «16» мая 2018 г. в 14 часов 30 минут на заседании диссертационного совета Д 212.141.17, созданного на базе ФГБОУ ВО «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» по адресу: 248000, г. Калуга, ул. Баженова, д. 2, МГТУ имени Н.Э. Баумана, Калужский филиал.
С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. Баумана и на сайтах <http://www.bmstu.ru>, <http://www.bmstu-kaluga.ru>

Автореферат разослан «___» 2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат технических наук,
доцент

Лоскутов Сергей Александрович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. В последние годы вопрос интерес к теоретическим исследованиям природы неорганических веществ в твёрдом состоянии, а также к изучению изменения их физических свойств при внешних электромагнитных воздействиях. Наибольший интерес исследователей сфокусирован на изучении свойств различных наноструктур, образованных аллотропическими модификациями углерода. Это связано в первую очередь с тем, что наномасштабные объекты обладают рядом параметров, сильно отличающихся от параметров микрообъектов, а уникальное сочетание механических и электрических характеристик дает надежду на разработку устройств, в основе которых лежат наноструктуры. Необычные физико-химические свойства углеродных наноструктур, делают их привлекательным объектом исследования фундаментальной науки. Одним из наиболее важных с практической точки зрения объектов исследования являются углеродные нанотрубки (УНТ). Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) занимают особое место в ряду углеродных наноструктур. Они представляют собой полые протяженные цилиндры диаметром от 0,4 нм до нескольких десятков нанометров и длиной от одного до сотен микрометров, состоящие из одной или нескольких свернутых в трубку гексагональных графитовых плоскостей. Нанотрубки демонстрируют спектр самых неожиданных электрических, магнитных, оптических свойств, которые наряду с геометрическими параметрами делают их перспективным конструкционным материалом для современной электроники в связи с тем, что миниатюризация электронных приборов непосредственно влечет за собой увеличение плотностей токов, и традиционные материалы более не могут использоваться.

Открытие С. Ииджимой технологии синтеза больших (граммовых) количеств углеродных нанотрубок в 1991 году, в качестве побочного продукта при синтезе фуллеренов, положило начало обширному числу исследований транспортных, механических, диэлектрических, магнитных свойств, а также теплопроводности этих перспективных объектов. Указанные особенности, представляющие значительный научный интерес, могут быть положены в основу прикладного использования нанотрубок в различных областях передовой наноэлектроники и фотоники.

В настоящее время проводятся исследования электронных характеристик нанотрубок. Также проведен анализ воздействия нестационарного электрического поля на углеродные нанотрубки.

Углеродные нанотрубки благодаря их хорошей электро- и теплопроводности, а также высокой химической, термической и механической стабильности рассматриваются как один из наиболее перспективных объектов наноэлектроники. Они уже сейчас хорошо себя зарекомендовали в качестве элементов таких электронных систем, как холодные полевые эмиттеры, суперконденсаторы, солнечные элементы, нано-электромеханические системы и сенсоры.

Несмотря на интенсивные исследования ОУНТ, некоторые вопросы до сих пор остаются открытыми. К ним относится механизм взаимодействия электромагнитных волн с электронным газом углеродных нанотрубок. Также не существует единой теории магнетизма углеродных нанотрубок. Для решения этой проблемы в настоящей работе методами теории функционалов плотности (ТФП) проведен расчет и анализ намагниченности одностенных углеродных нанотрубок металлического типа. Результаты исследования могут быть использованы при проектировании наноэлектронных устройств и компонентов различного функционального назначения, например, в качестве цифровых ячеек памяти.

Цель работы. Основной целью настоящей диссертационной работы является изучение магнитных и диэлектрических свойств одностенных углеродных нанотрубок металлического типа.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

- определение радиального и углового распределения электронной плотности методами теории функционалов плотности;
- оценка потенциальных магнитных свойств изучаемых нанообъектов, в зависимости от геометрических параметров;
- установление характера отклика электронного газа исследуемыхnanoструктур, на внешнее гармоническое возмущение;
- получение явного вида зависимости диэлектрической проницаемости от диаметра нанотрубок;
- получение зависимости кинетической индуктивности от электронной плотности одностенных нанотрубок.

Научная новизна работы заключается в том, что в ней впервые:

- методами теории функционалов плотности получено радиально-угловое распределение электронной плотности углеродных нанотрубок металлического типа;

- исходя из распределения электронной плотности произведена оценка и анализ намагниченности нанотрубок;
- ТФП–методами найдено аналитическое выражение, определяющее зависимость электронной плотности от параметров внешнего электромагнитного возмущения, а также установлен явный вид диэлектрической проницаемости, как функции геометрических параметров нанотрубок;
- получены аналитические выражения для зависимости кинетической индуктивности и толщины скин–слоя от диаметра углеродной нанотрубки.

Достоверность полученных результатов обеспечена надежностью применявшихся теоретических методов, большой степенью точности совпадения результатов аналитических расчетов с экспериментальными наблюдениями физических величин, полученных различными международными коллективами независимо, и подтверждается результатами апробации работы.

Теоретическая и практическая значимость работы определяется тем, что

- получено выражение для радиального распределения электронной плотности ОУНТ металлического типа в рамках приближения прямого кругового равномерно заряженного цилиндра с учётом межэлектронного взаимодействия;
- разработана методика оценки магнитных свойств нанотрубок, в рамках которой установлено отсутствие намагниченности углеродных нанотрубок с хиральным индексом более ста единиц;
- показано, что при взаимодействии со внешним электромагнитным излучением электронный газ нанотрубки металлического типа проявляет индуктивные свойства;
- согласно результатам расчета толщины скин–слоя, углеродные нанотрубки прозрачны в радиоволновой части спектра и абсолютно не прозрачны в оптическом и терагерцовом диапазоне.

Представленные в настоящем диссертационном исследовании методы расчета магнитных, индуктивных и диэлектрических свойств углеродных нанотрубок носят фундаментальный характер и могут быть применены при разработкеnanoэлектронных устройств с заданными характеристиками, в качестве элементной базы которых используются одностенные углеродные нанотрубки металлического типа.

Основные положения, выносимые на защиту:

- Постановка и результаты решения задачи поиска явного вида распределения электронной плотности ОУНТ металлического типа без внешних воздействий в рамках ТФП–методов.
- Результаты исследований намагниченности нанотрубок, проведённых на основе распределений электронной плотности, полученных ТФП–методами.
- Постановка и результаты решения задачи поиска аналитического выражения для распределения электронной плотности ОУНТ металлического типа при воздействии внешнего электромагнитного излучения в рамках ТФП–методов.
- Результаты теоретического исследования индуктивных свойств электронного газа одностенных углеродных нанотрубок металлического типа при взаимодействии с электромагнитными волнами терагерцового и оптического диапазонов.

Научная и практическая ценность. Диссертация носит теоретический характер. Исследование электронных характеристик важно для дальнейшего прогресса в области уменьшения размеров электронных систем. Выражения для радиального и углового распределений электронной плотности одностенных углеродных нанотрубок могут иметь самостоятельную ценность как аналитически точные результаты. Результаты исследования магнитных и диэлектрических характеристик нанотрубок могут быть использованы при проектировании элементной базы современной наноэлектроники и фотоники.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались: на «Международной конференции–конкурсе молодых физиков 2014», доклад был отмечен как лучший стендовый доклад (Москва, ФИАН им. П.Н. Лебедева); на восьмой всероссийской конференции «Необратимые процессы в природе и технике» (Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2015); на «17-й Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников иnanoструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике» (Санкт–Петербург, СПБГПУ Петра Великого — Санкт–Петербургский национальный исследовательский академический университет РАН, 2015); на «Международной конференции–конкурсе молодых физиков 2016», доклад был удостоен второго места в секции по фундаментальной физике; на «Басовских чтениях» (Москва, ФИАН—МИФИ, 2016). Результаты работы были отмечены дипломом первой степени за лучший проект, представленный на «Всероссийском конкурсе научно–исследовательских работ студентов в области нанотехнологий и наноматериалов — 2014». Присуждена премия на «Конкурсе молодежных

научных работ по оптике и лазерной физике» (Москва, Отделение квантовой радиофизики имени Н.Г. Басова ФИАН им. П.Н. Лебедева, 2016).

Публикации. Всего по тематике диссертации опубликовано 11 работ, в том числе 7 статей в журналах, включённых в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук, 2 статьи в электронных изданиях, 2 публикации в сборниках материалов всероссийских научных конференций. В опубликованных работах достаточно полно изложены материалы диссертации. Список статей приводится в конце авторефера.

Личный вклад соискателя. Автор работы принимал непосредственное участие на всех этапах исследования: в обсуждении постановки задач, поиске и разработке оптимальных методов решения, анализе и интерпретации результатов, написании статей, представлении результатов работы на всероссийских конференциях и конкурсах научных работ. Постановка задач и анализ результатов решения произведены совместно с научным руководителем. Основные результаты диссертационного исследования получены автором самостоятельно.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка публикаций по теме диссертационного исследования и списка литературы. Общий объем составляет 106 страниц, включая 31 рисунок, 7 таблиц и список литературы из 166 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационного исследования, а также сформулированы цели и приведены основные результаты работы. Аргументирована научная новизна полученных выводов.

В первой главе приведен анализ механических и электрофизических свойств аллотропных наномодификаций углерода. Также в главе 1 приведены сведения об основных и наиболее распространенных методах синтеза и очистки углеродных нанотрубок. Рассмотрены типы синтезируемых нанотрубок металлического типа. Проведен анализ перспектив применения углеродных нанотрубок в качестве элементной базы современной наноэлектроники.

Вторая глава посвящена изучению распределения электронной плотности одностенных углеродных нанотрубок металлического типа. Широко известно, что геометрия одностенной нанотрубки обладает цилиндрической симметрией.

Электронные свойства подобного рода структур в большей степени определяются не конкретным видом кристаллической решетки, а геометрическим строением, поэтому допустимо рассмотрение ОУНТ в приближении прямого кругового равномерно заряженного цилиндра. Задача получения электронной структуры нанотрубки является многочастичной. Для расчёта характеристик многоэлектронных систем удобно пользоваться методами функционала плотности. Формализм теории позволяет переходить от систем нескольких взаимодействующих фермионов к эффективным одноэлектронным аналогам. Поиск радиального и углового распределений электронной плотности осуществлен методами теории функционалов плотности (ТФП). Для этого сформулирован функционал полной энергии системы:

$$E[n(\vec{r})] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int n(\vec{r})^{\frac{5}{3}} d^3 \vec{r} + \int v(\vec{r}) n(\vec{r}) d^3 \vec{r} + \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}) n(\hat{\vec{r}})}{|\vec{r} - \hat{\vec{r}}|} d^3 \vec{r} d^3 \hat{\vec{r}} + \frac{1}{72} \int \frac{1}{n(r)} (\nabla n(\vec{r}))^2 d^3 \vec{r}. \quad (1)$$

В ТФП доказано, что минимуму функционала полной энергии системы соответствует искомое распределение электронной плотности. Трансляционная симметрия системы, при условии $z \gg r$ позволяет считать, что зависимость электронной плотности от продольной координаты z отсутствует. Таким образом, из формулы (1), путем решения соответствующего уравнения Лагранжа, получаем радиальное $\tilde{n}(r)$ и угловое $\Phi(\varphi)$ распределения, соответствующие минимуму функционала полной энергии системы. Решение для радиальной зависимости выражается с помощью комбинации двух линейно независимых функций Куммера: $U(a, b, z)$ и $M(a, b, z)$, которые по определению равны:

$$M(a; b; z) = 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \left\{ \prod_{i=0}^{k-1} \frac{(a+i)}{(1+i)(b+i)} \right\} z^j,$$

$$U(a; b; z) = \frac{\pi}{\sin \pi b} \left\{ \frac{M(a; b; z)}{\Gamma(1+a-b)\Gamma(b)} - z^{1-b} \frac{M(1+a-b, 2-b; z)}{\Gamma(a)\Gamma(2-b)} \right\}.$$

Для радиальной части уравнения $z = 2\sqrt{3\pi} r^2$, $a = \frac{1}{2} - \frac{9}{4} 3^{\frac{1}{6}} \pi^{\frac{5}{6}} = -6.51446$.

Решением радиальной части уравнения (1) является следующее выражение:

$$\tilde{n}(r) = \frac{e^{-2\sqrt{3\pi} r^2}}{M(a, 1, 2\sqrt{3\pi})^2} \{ U(a, 1, 2\sqrt{3\pi} r^2) M(a, 1, 2\sqrt{3\pi}) - M(a, 1, 2\sqrt{3\pi} r^2) U(a, 1, 2\sqrt{3\pi}) \}^2,$$

причем $M(a, 1, 2\sqrt{3\pi})$ и $U(a, 1, 2\sqrt{3\pi})$ являются константами, по величине равными: $M(a, 1, 2\sqrt{3\pi}) = 3.77$ и $U(a, 1, 2\sqrt{3\pi}) = -6757$. С учётом характерных

значений диаметров трубок, лежащих в нанометровом диапазоне, запишем упрощённое выражение для радиального $\tilde{n}(r)$ и углового $\Phi(\varphi)$ распределений

$$n(r) = \frac{1}{14.21} (6757 + 3.77U(a, 1.2\sqrt{3\pi} r^2))^2$$

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{3\pi} (\sin(\varphi) + 1).$$

Радиальное распределение электронной плотности для металлических нанотрубок типа armchair представлено на Рисунке 1.

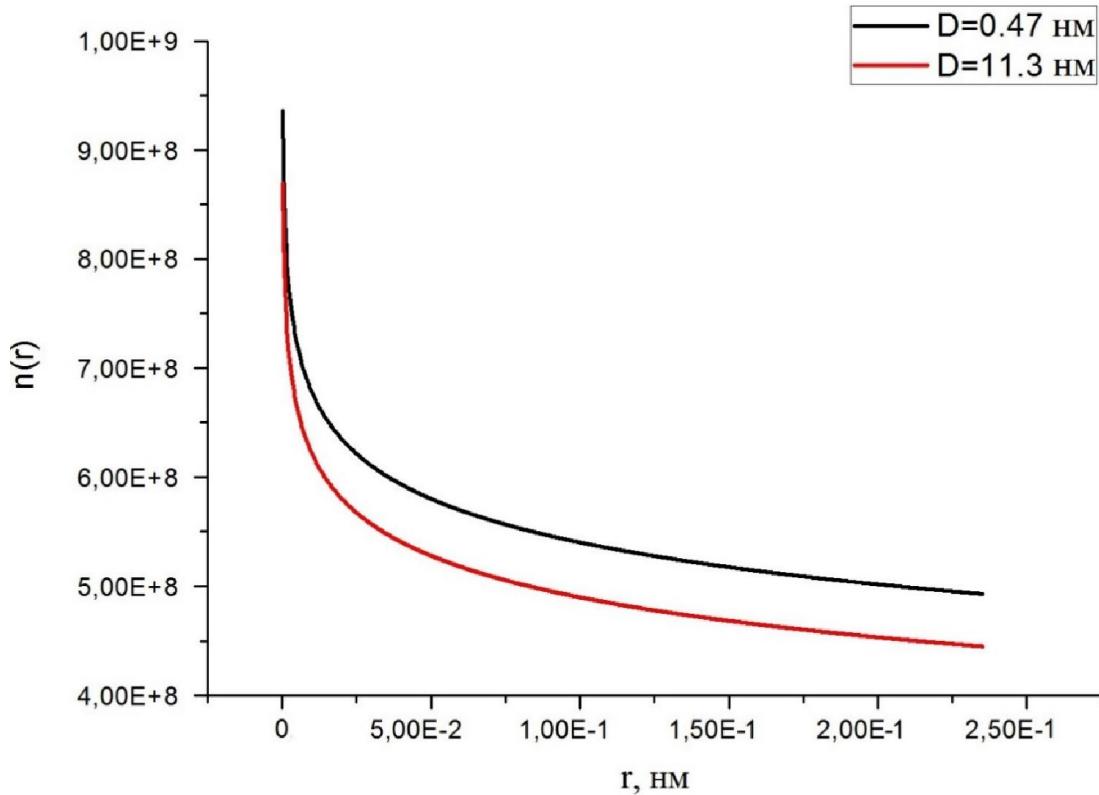


Рисунок 1. Радиальное распределение электронной плотности ОУНТ металлического типа диаметром 0,47 нм и 11,3 нм (armchair – конфигурация)

Пользуясь методами теории функционала плотности, базирующимися на теоремах Кона–Хоэнберга, а также на основании вариационных принципов, получено выражение для плотности вероятности нахождения электрона в точке, находящейся на расстоянии r от центра нанотрубки. Примечательным является тот факт, что характер распределения слабо зависит от радиуса рассматриваемого цилиндра. Анализ радиального распределения показывает: с уменьшением диаметра нанотрубки растёт плотность вероятности обнаружения частицы в \vec{r} . Установлено, что угловое распределение электронной плотности носит характер стоячей волны. Исходя из радиального распределения показано, что проводимость однослойных нанотрубок носит баллистический характер.

В третьей главе производится расчет намагниченности углеродных нанотрубок в рамках модели кругового молекулярного тока. По закону Био–Савара–Лапласа вектор индукции магнитного поля \vec{B} в точке \vec{r} определен выражением

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{[\vec{j}, \vec{r}]}{r^3} dv.$$

Химический потенциал чистого беспримесного графена μ равен нулю. Поэтому выражение для кольцевого тока одностенной углеродной нанотрубки имеет следующий вид

$$j = \sqrt{\frac{1}{8}} \frac{|e|}{m_e} kT \int_0^{2\pi} \int_0^R r n(r, \varphi) dr d\varphi. \quad (2)$$

Учитывая (2), запишем выражение для намагниченности нанотрубки

$$M = \sqrt{\frac{1}{8}} \frac{\mu_B}{h} kT \int_0^{2\pi} \int_0^R \frac{n(r, \varphi)}{r^2} dr d\varphi,$$

где μ_B — магнетон Бора, k — постоянная Больцмана, T — электронная температура, $n(r, \varphi)$ — радиально–угловое распределение электронной плотности.

На Рисунке 2 представлена зависимость намагниченности ОУНТ от хирального индекса. Исходя из результатов анализа зависимости намагниченности от индекса хиральности для нанотрубок двух типов: «кресло» и «зигзаг» установлено, что с ростом величины индекса хиральности уменьшается значение намагниченности нанотрубок обоих типов. Отмечено, что для кресельных структур спад намагниченности происходит плавнее, чем для зигзагообразных. При достижении величины сто единиц и более, можно с уверенностью полагать, что нанотрубки рассматриваемых типов не обладают намагниченностью.

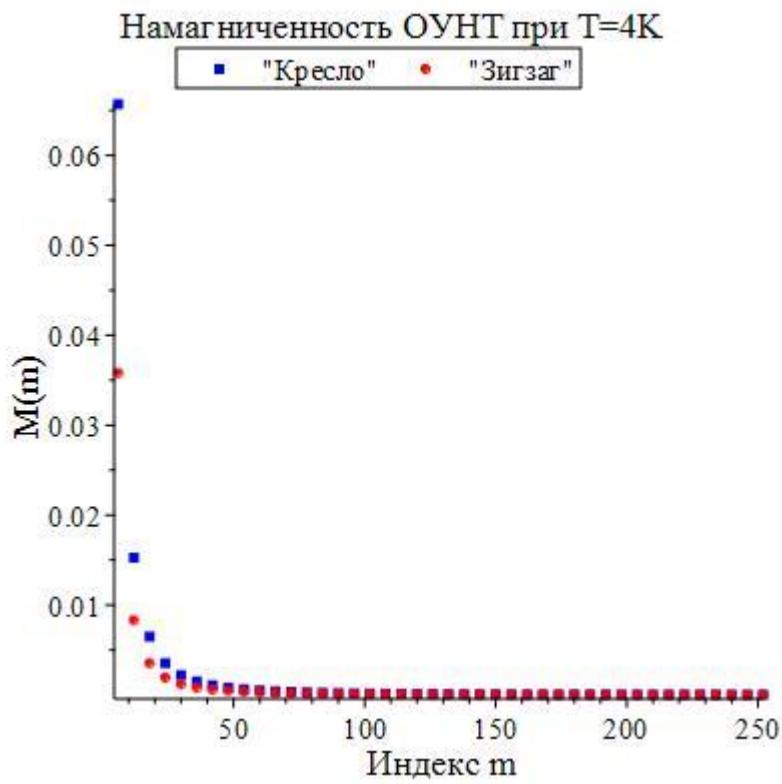


Рисунок 2. Тенденция спада намагниченности при увеличении хирального индекса

Полученные результаты соответствуют данным качественного эксперимента, описанного в работе Садыкова, а также экспериментальным результатам работы Бродниченко. В работе А.П. Рамиреза, посвященной изучению магнитной восприимчивости нанотрубок и фуллерита, исходя из квантово–химических расчетов было сделан вывод о том, что нанотрубки типа «зигзаг» могут обладать магнитными свойствами.

В главе 4 исследовано взаимодействие нанотрубок со внешним электромагнитным полем. Взаимодействие внешнего электромагнитного поля с нанотрубкой рассмотрено в рамках модели отклика двумерного электронного газа, находящегося во внешнем цилиндрически симметричном потенциале. Рассмотрены временные масштабы взаимодействия, на которых влияние на каркас нанотрубки, не успевает проявиться. В рамках теории функционала плотности полная энергия рассматриваемой системы в зависимости от электронной плотности может быть представлена в виде

$$E[n] = T[n] + V_{\text{пост}}[n] + V_{\text{пер}}[n] + W[n] + G[n],$$

где $T[n]$ — кинетическая энергия электронов, $W[n]$ — энергия их обменного взаимодействия, $G[n]$ — корреляционная энергия, связанная с взаимным расположением фермионов, $V_{\text{пост}}[n]$ — потенциальная энергия взаимодействия с

углеродным каркасом нанотрубки и $V_{\text{пер}}[n]$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц со внешним переменным полем.

Энергия взаимодействия электронного газа с внешним электромагнитным полем может быть записана в виде:

$$V_{\text{пер}}[n] = \int v_{\text{пер}}(\vec{r}, t) n(\vec{r}, t) d\vec{r}.$$

Таким образом, вариационное уравнение для определения отклика плотности рассматриваемой многоэлектронной системы на внешнее периодическое воздействие имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{2}{3}\pi r^3 n^3(r) + \frac{1}{2}(3\pi^2)^{\frac{2}{3}} n(r) - \frac{1}{36} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial n(r)}{\partial r} \right) \right\} + \frac{1}{72} \frac{\partial n(r)}{\partial r} + \\ + \left\{ \cos\left(\frac{\omega}{c}(ct - r)\right) - E_0 \cos(\omega t) \right\} n(r) = 0. \end{aligned}$$

Вариационное уравнение является дифференциальным уравнением Куммера, решение которого задаётся комбинацией двух вырожденных гипергеометрических функций:

$$n(r) = e^{-\frac{1}{4}r(X-1)} \left[M\left(\frac{X-1}{2X}, 1, \frac{rX}{2}\right) + U\left(\frac{X-1}{2X}, 1, \frac{rX}{2}\right) \right],$$

$$\text{где } X = 24 \sqrt{4.78 - E_0 \cos(\omega t) + \cos\left(\frac{\omega}{c}(ct - r)\right) + 1}.$$

С учётом геометрических размеров нанотрубок, можно написать с большой степенью точности приближённое выражение для отклика распределения электронной плотности на внешнее электромагнитное возмущение:

$$n(r) = U\left(\frac{X-1}{2X}, 1, \frac{rX}{2}\right). \quad (3)$$

Рассмотрим диэлектрическое поведение электронного газа при внешнем возмущении. Как было показано, при наличии внешнего электромагнитного поля, являющегося возмущением, возникают колебания электронной плотности. Проводимость, зависящую от частоты и волнового вектора можно непосредственно выразить через диэлектрическую проницаемость. Запишем вид выражения диэлектрической проницаемости в зависимости от электронной плотности нанотрубки:

$$\varepsilon(\omega, r) = 1 + \frac{4\pi e}{m\omega^2} n(r).$$

На основании полученной формулы произведен расчет комплексной диэлектрической проницаемости одностенных углеродных нанотрубок

металлического типа, а также действительной n' и мнимой n'' части показателя преломления и коэффициента отражения. Произведено сравнение соответствующих величин с экспериментальными данными в видимом, ультрафиолетовом и инфракрасном диапазоне спектра (Таблица 1). Отмечено, что результаты расчетов с большой степенью точности согласуются с экспериментальными данными. Это обстоятельство говорит в пользу справедливости изложенной в настоящей работе теории диэлектрического отклика одностенной углеродной нанотрубки металлического типа в приближении прямого кругового цилиндра.

Таблица 1.
Сравнение экспериментальных и расчетных данных

Рассчитанное значение	Экспериментальное значение в видимой и ультрафиолетовой части спектра	Экспериментальное значение в инфракрасной части спектра
$n' = 1,042$	$n' = 1,04$	$n' = 1,04$
$n'' = 0,014$	$n'' = 0,01$	$n'' = 0,012$
$R = 0,021$	$R = 0,005$	$R = 0,02$

Электромагнитная волна, нормально падающая на ОУНТ, вызывает движение электронов этой трубки, описываемое, в рамках выбранной модели, вторым законом Ньютона. Используя известное соотношение $j = enV$, связывающее плотность тока со скоростью и плотностью носителей заряда, запишем закон Ньютона:

$$\left(\frac{m}{e^2 n}\right) \frac{dj}{dt} = E, \quad (4)$$

где m , e — масса и заряд электрона соответственно, E — напряженность электрического поля волны. Часть выражения (4), заключенная в скобки, имеет размерность удельной индуктивности. Таким образом, при описании взаимодействия электромагнитной волны с электронным газом нанотрубки, последняя может быть рассмотрена в рамках модели пассивного двухполюсника, обладающего удельными активным R и реактивным X сопротивлениями. Пользуясь выражением для электронной плотности (3), получен явный вид

зависимости кинетической индуктивности L_k ОУНТ металлического типа от диаметра объекта и частоты электромагнитной волны

$$L_k = \frac{m}{e^2 \cdot U \left(\frac{A-1}{A}, 1, \frac{rA}{2} \right)}.$$

В ходе проведения теоретического исследования взаимодействия электромагнитных волн терагерцового и оптического диапазонов с углеродными нанотрубками металлического типа, в рамках приближения отклика двумерного электронного газа, находящегося в цилиндрически симметричной потенциальной яме, установлено, что электронный газ проявляет индуктивные свойства, которые зависят от диаметра нанотрубки, частоты и интенсивности излучения. Установлено, что с ростом диаметра нанотрубки увеличивается значение удельной кинетической индуктивности (Таблица 2).

Таблица 2.

Зависимость удельной кинетической индуктивности и реактивной компоненты импеданса от интенсивности волны для нанотрубки диаметра 2 нм при частоте излучения $\nu = 550$ ТГц

$I, \frac{\text{ГВт}}{\text{м}^2}$	0,5	5	10	50	100
$L_k, \text{нГн/нм}$	20	11	10,5	10,2	10
$X, 10^5$	3,20	1,71	1,65	1,6	1,58

Далее в четвертой главе исследуется глубина проникновения электромагнитного излучения в электронный газ углеродной нанотрубки металлического типа. Электромагнитная волна, продольно падающая на ОУНТ, приводит к возникновению токов в рассматриваемой системе, выражение для которых можно записать следующим образом

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \mu_0 \vec{j}, \quad (5)$$

где \vec{E} — вектор напряженности электрической компоненты волны, c — скорость света в вакууме, μ_0 — абсолютная магнитная проницаемость вакуума, \vec{j} — плотность токов, индуцированных в системе.

$$\vec{E} = \vec{E}_m e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}.$$

Рассмотрим приближение, в котором проводимость электронного газа углеродной нанотрубки не зависит от времени, тогда уравнение (5) приводит к дисперсионному соотношению:

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 + \frac{i}{\epsilon_0} \frac{e^2}{m} \frac{\omega \tau}{(1 - \omega^2 \tau^2)} \frac{\sigma_0}{\omega} n}. \quad (6)$$

На основании формулы (6) можно получить глубину проникновения волны в электронный газ, на которой амплитуда вектора напряженности электрического поля уменьшится в e раз. Это расстояние называют толщиной скин–слоя δ

$$\delta = \frac{\sqrt{2}c}{\omega \sqrt{1 + \frac{1}{\epsilon_0} \frac{e^2}{m} \frac{\omega \tau}{(1 - \omega^2 \tau^2)} \frac{\sigma_0}{\omega} n}}.$$

Результаты расчета толщины скин–слоя для нанотрубки диаметром 10 нм при различных длинах волн приведены в Таблице 3.

Таблица 3.

Зависимость толщины скин–слоя δ от частоты ν падающего излучения

ν , Гц	10^6	10^{10}	$3 \cdot 10^{11}$	$4 \cdot 10^{12}$	$4 \cdot 10^{14}$	$8 \cdot 10^{14}$
δ , мкм	$4,7 \cdot 10^7$	4775	159	12	0,119	0,059

По результатам исследования установлено, что излучение оптического и терагерцовового диапазона полностью поглощается рассматриваемыми структурами в результате скин–эффекта. Отмечено, что толщина скин–слоя для радиоволновой части спектра значительно превышает длину синтезируемых сегодня нанотрубок, что означает их свободное прохождение сквозь исследуемые объекты в случае нормального падения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ, ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы:

1. Методами теории функционалов плотности было получено радиальное и угловое распределения электронной плотности одностенной углеродной нанотрубки металлического типа в приближении прямого кругового равномерно заряженного цилиндра, с учетом межэлектронного взаимодействия.

2. Исходя из характера углового распределения произведен расчет намагнченности ОУНТ. В рамках приближения кругового молекулярного тока получены радиальная и температурная зависимости намагнченности. Показано, что при увеличении электронной температуры, намагнченность рассмотренной структуры возрастает. Установлено, что нанотрубки меньшего диаметра обладают более сильной намагнченностью. Исследована зависимость намагнченности от индекса хиральности ОУНТ. Имеющиеся данные качественного эксперимента по магнетизму нанотрубок согласуются с изложенным в настоящей работе теоретическим описанием. Используя зависимости, полученные в настоящей диссертации, можно оценить эту величину для ОУНТ с заданным значением диаметра и в интересующем диапазоне температур.
3. Методами теории функционалов плотности произведен расчет диэлектрической проницаемости и показателя преломления нанотрубки. Проведенный теоретический анализ взаимодействия одностенных углеродных нанотрубок со внешним электромагнитным полем показывает, что электронная плотность $n(r)$ слабо зависит от частоты падающего излучения. Основополагающую роль оказывает интенсивность электромагнитной волны. Поглощение энергии происходит равномерно по всему сечению нанотрубки.
4. Проведено теоретическое исследование взаимодействия электромагнитных волн терагерцевого и оптического диапазонов с углеродными нанотрубками металлического типа, в рамках приближения отклика двумерного электронного газа, находящегося в цилиндрически симметричной потенциальной яме. Установлено, что электронный газ проявляет индуктивные свойства, которые зависят от диаметра нанотрубки, частоты и интенсивности излучения. Получены выражения для расчета величины кинетической индуктивности L_k и реактивной части импеданса X . Установлено, что величина L_k растет с увеличением частоты, и уменьшается с ростом интенсивности излучения.
5. В настоящей работе получено аналитическое выражение для волнового числа при нормальном продольном падении линейно поляризованной монохроматической электромагнитной волны на одностенную углеродную нанотрубку металлического типа. Установлена явная зависимость волнового числа k от циклической частоты падающего излучения и электронной плотности, которая, в свою очередь, зависит от диаметра нанотрубки. Также получен явный вид выражения для толщины

скин–слоя δ углеродной нанотрубки металлического типа в зависимости от частоты падающего излучения. Установлено, что электромагнитное излучение терагерцового и видимого диапазона поглощается нанотрубками. Произведено оценочное сравнение результатов настоящего теоретического исследования с имеющимися в литературе экспериментальными данными по фотопоглощению углеродных нанотрубок. Установлено соответствие развитой в данной работе теории с экспериментальными наблюдениями. Отметим, что толщина скин–слоя для радиоволновой части спектра значительно превышает длину синтезируемых сегодня нанотрубок, что означает их свободное прохождение сквозь исследуемые объекты в случае нормального падения.

Список трудов по теме диссертационного исследования

Статьи в журналах, индексируемых в международной базе Scopus

1. Еркович О.С., Ивлиев П.А. Расчет магнитных свойств однослойных углеродных нанотрубок в рамках метода функционалов плотности // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2016. Т. 67. № 4. С. 55–63. (1,61 п.л. / 0,9 п.л.).
2. Еркович О.С., Ивлиев П.А. Кинетическая индуктивность однослойных углеродных нанотрубок металлического типа // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2017. Т. 75. № 6. С. 56–64. (1,6 п.л. / 0,8 п.л.).

Статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:

3. Ивлиев П.А., Еркович О.С. Углеродные нанотрубки: распределение электронной плотности, возможные применения // Физическое образование в ВУЗах. 2014. Т. 20. № 1С. С. 18–19. (0,15 п.л. / 0,15 п.л.).
4. Ивлиев П.А. Диэлектрические характеристики углеродных нанотрубок // Физическое образование в ВУЗах. 2016. Т. 22. № 1С. С. 13–15. (0,23 п.л. / 0,23 п.л.).
5. Еркович О.С., Ивлиев П.А. Расчет электронной плотности углеродных нанотрубок во внешнем электромагнитном поле // Наноматериалы иnanoструктуры — XXI век. 2016. Т. 7. № 1. С. 8–13. (1,27 п.л. / 0,7 п.л.).
6. Еркович О.С., Ивлиев П.А. Скин–эффект в углеродных нанотрубках металлического типа // Наноматериалы и nanoструктуры — XXI век. 2016. Т. 7. № 4. С. 3–7. (1,04 п.л. / 0,8 п.л.).

7. Ивлиев П.А. Анализ намагниченности углеродных нанотрубок // Наноматериалы и наноструктуры — XXI век. 2017. Т. 8. № 1. С. 8–13. (1,04 п.л. / 1,04 п.л.).

Статьи в электронных изданиях:

8. Ивлиев П.А. Радиальное распределение электронной плотности углеродной нанотрубки // Молодежный научно–технический вестник. 2014. № 9. Режим доступа: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/732012.html> (дата обращения 26.10.2017). (0,92 п.л. / 0,92 п.л.).
9. Ивлиев П.А. Зависимость электронной плотности и намагниченности от хиральности нанотрубок // Молодежный научно–технический вестник. 2016. Режим доступа: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/843577.html> (дата обращения: 26.10.2017). (1,1 п.л. / 1,1 п.л.).

Публикации в других научных изданиях:

10. Еркович О.С., Ивлиев П.А. Распределение электронной плотности нанотрубок при взаимодействии с электромагнитным полем // 17 Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто– и наноэлектронике: Тез. докл. Всерос. конф. Санкт–Петербург. 2015. С. 81. (0,11 п.л. / 0,11 п.л.).
11. Еркович О.С., Ивлиев П.А. Распределение электронной плотности однослойных углеродных нанотрубок металлического типа. Их проводимость, индукция магнитного поля // Необратимые процессы в природе и технике: Тез. докл. Всерос. конф. Москва. 2015. С. 226–229. (0,2 п.л. / 0,1 п.л.).

Пописано в печать 14.03.2018

Объем: 1 усл.п.л.

Тираж: 100 экз. Заказ № 970

Отпечатано в типографии «Реглет»

101000, г. Москва, ул. Новослободская, д.20, стр.4
(495)971-77-88 www.reglet.ru