

ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ НАНОТРУБОК, ФУНКЦИОналиЗИРОВАННЫХ КИСЛОРОДОМ

¹Тен Г.Н., ¹Кривда И.В., ¹Саяпин К.А., ²Баранов В.И.

¹ Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов
² Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН, Москва

¹Тен Г.Н.,
¹Кривда И.В.,
¹Саяпин К.А.,
²Баранов В.И.

¹Саратовский
государственный
университет им.
Н.Г. Чернышевского,
²Институт геохимии и
аналитической химии им.
В. И. Вернадского РАН

Известно, что появление в структуре нанотрубок топологических дефектов может привести к изменению физических, механических и оптических свойств нанотрубок. Например, дефект Стоуна-Велса, структура которого состоит из двух семи- и двух пяти- угольников, приводит к изменению проводимости нанотрубок [1]. Такие дефекты могут возникнуть в нанотрубке самопроизвольно, например, в процессе её роста. В то же время можно создавать искусственные дефекты, позволяющие управлять (усиливать или ослаблять) какими-либо (например, оптическими) характеристиками нанотрубок. В частности, к нанотрубкам можно присоединять атомы других веществ. Этот процесс называется функционализацией нанотрубки, а модифицированная таким образом трубка - функционализированной.

В данной работе изучено изменение оптических спектров поглощения однослойных нанотрубок при их функционализации атомами кислорода с целью применения в качестве узкополосного светодиода [2]. Расчёт был выполнен методом DFT с помощью программы Gaussian-09 и набора базисных функций 6-311++g(d,p) [3].

На рис. приведены молекулярные структуры фрагментов ОУНТ, функционализированных одним, двумя и шестью атомами кислорода.

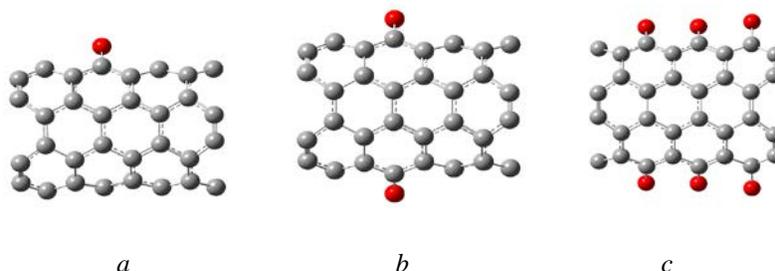


Рис. Молекулярные структуры фрагментов ОУНТ, функционализированных одним (a), двумя (b) и шестью (c) атомами кислорода

Литература

1. Тен Г.Н., Глухова О.Е., Слепченко М.М., Бобринецкий И.И., Ибрагимов Р.А., Фёдоров Г.Е., Баранов В.И. Влияние топологических дефектов на структуру G и D спектральных полос однослойной углеродной нанотрубки // Оптика и спектроскопия. 2016. Т. 120. № 5. С. 775-783.
2. Mueller T. et al. Efficient narrow-band light emission from a single carbon nanotube p-n diode // Nature Nanotechnology. 2009. V. 5. P. 27-31.
3. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009. 394 p.