

ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ПЕРСПЕКТИВЫ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

В.А. Лыках, Е.С. Сыркин
НТУ «ХПИ», Харьков, Украина

Углеродные нанотрубки имеют диаметр около 1 нм и длину около 1 мкм; носитель заряда квантован вдоль этих направлений [1]. Тип проводимости УНТ зависит от хиральности трубок. Функционализация - мощный метод управления физическими свойствами нанотрубок через их энергетические квантовые уровни путем присоединения молекул [2].

Авторами была создана самосогласованная квантовая теория энергетических спектров и локализации носителей в полупроводниковых нанотрубках, функционализированных молекулярными пленками. Молекулы обладают мягкими степенями свободы (радиальными, конформационными, дислокационными) см. [3-6] и ссылки в ней. Система уравнений включает в себя (I) уравнения Шредингера для носителей заряда в полупроводниковых нанотрубке, (II) нелинейное уравнение для собственных электрических дипольных моментов, (III) материальные уравнения для взаимодействия лишнего носителя в нанотрубке и молекулярных электрических диполей, (IV) условие нормировки волновой функции носителя. В полупроводниковых нанотрубке дырочные и электронные спектры симметричны. Показано, что слой адсорбированных молекул нарушает эту симметрию. Молекулярные диполи создают противоположные условия для локализации носителей или их туннелирования вдоль нанотрубке в зависимости от знака заряда и ориентация диполей. Спектр чрезвычайно чувствителен к состоянию молекулярной подсистемы. Возможна локализация носителей, которая проявляется в эксперименте как увеличение сопротивления.

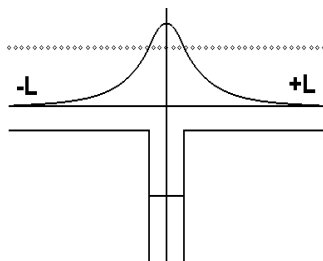


Рис.1. потенциальная яма, индуцированная конформационным переходом в поле носителя. Основной уровень энергии и волновая функция показаны сплошной линией. Ромбы показывают критическое значение волновой функции.

Обсуждается применение нанотрубок в качестве сенсоров [7], оптических переключателей, транзисторов, наноэлектромеханических устройств.

Список литературы:

1. Dekker C. Carbon nanotubes as molecular quantum wires, Phys. Today.-1999.-**52**, N 5, 22-28.
2. Strano M. S., Dyke C. A., Usrey M. L., Barone P. W., Allen M. J., Shan H., Kittrell C., Hauge R. H., Tour J. M., Smalley R. E. Electronic structure control of single-walled carbon nanotube functionalization. Science, 2003, 301(5639), 1519-1522.
3. Лыках В.А., Сыркин Е.С. Влияние адсорбированных молекул на спектр носителей в полупроводниковом нанопроводе. ФТП 2005, Т.39, №6, с.710-715
4. Lykah V.A., Syrkin E.S. Soft polar molecular layers on charged nanowire. // Condensed Matter Physics.// 2004, V.7, N4(10), P.805-812
5. Lykah V.A., Syrkin E.S. FUNCTIONALIZED SEMICONDUCTING CARBON NANOTUBES: THREE MODELS FOR CARRIER SPECTRA. Chemistry, Phys. and Technology of Surface. 2010. 1. № 3. p. 296-302
6. Lykah V. A., Syrkin E. S. Charge-carrier Spectra in Semiconducting Nanowire Functionalized by Incommensurate Molecular Structures. Advances in Optoelectronic Mat. (AOM) 2013, 1, N 2, 25-34.
7. Daniel S., Rao T.P., Rao K.S.. Sensors and Actuators B, 2007, 122, 672682.