

Диэлектрическая проницаемость борных нанотрубок с дефектами замещения

Ю.М. Александров, В.В. Яцышен

Волгоградский государственный университет
400062, Российская Федерация, г. Волгоград
Университетский пр., 100

Из первых принципов произведен расчет частотной зависимости для действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости борных трубок без дефектов и с дефектами замещения атома бора атомами углерода и азота. Произведено сравнение и показана существенная роль данных дефектов в отклике структуры на электромагнитное воздействие. Симуляция взаимодействия света с веществом осуществлялась с помощью программы SIESTA.

Ключевые слова: abinitio, DFT, SIESTA, борные нанотрубки, диэлектрическая проницаемость, псевдопотенциал, частотный спектр.

Интерес к нанотрубкам с дефектами подтверждается рядом работ. Например, в работе [1] изучается магнетизм в дефектных одностенных боронитридных нанотрубках с помощью теории функционала плотности.

В работе [2] указывается на существенный характер влияния дефектов в нанотрубках (примеси, вакансии, топологические дефекты).

Важное приложение нашли дефектные боронитридные нанотрубки [3] и нанотрубки допированные кислородом [4] в области создания лазеров на нанотрубках. В работах указывается способ создания излучателя благодаря распаду экситона на дефекте с излучением света. Интенсивность излучения определяется качеством формирования дефекта.

В данной работе изучены оптические свойства нанотрубулярных форм бора. Получены энергетические зависимости мнимой и действительной части комплексной диэлектрической проницаемости для геометрии, представленной на рис. 1.

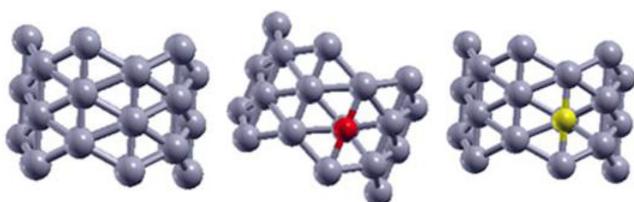


Рис. 1. Геометрия борных нанотрубок без дефектов (слева), с дефектом замещения азотом (в центре) и с дефектом замещения углеродом (справа)

Моделирование структуры борных трубок проводилось с использованием метода DFT, представленного в SIESTA. Эта программа сочетает в себе нормированные псевдопотенциалы с локальными базисными функциями. Расчеты велись в формализме обобщенного градиентного приближения (GGA, PBE) с использованием базиса орбиталей DZP с отсеканием энергий больших 300.0 ридберг. Для оптимизации структуры чисто борной трубки использовался метод молекулярной динамики сопряженных градиентов (CG). Оптимизация структур с дефектами не проводилась. Параметр сходимости самосоглазованного функционала E10-4. В моделировании взаимодействия электромагнитного излучения с веществом использовался р-поляризованный свет при нулевом угле падения по отношению к оси нанотрубки. Параметр уширения пиков – 0.1 эВ. Псевдопотенциалы были взяты с сайта [5].

Полученные зависимости позволяют сделать вывод о том, что введение примесей сильно влияет на спектр. В случае введения в качестве примеси атома углерода (один атом на 19 атомов бора), в действительной части наблюдается отрицательная область, а в случае введения атома азота – две отрицательные области. Отрицательные области отсутствуют в чисто борных нанотрубках.

Расчет производился, исходя из того, что нанотрубка является одномерным кристаллом, пространственной дисперсией пренебрегалось,

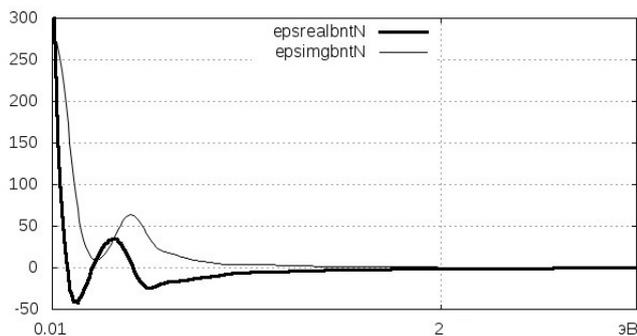


Рис. 2. Действительная и мнимая часть диэлектрической проницаемости борной нанотрубки с дефектом замещения азотом

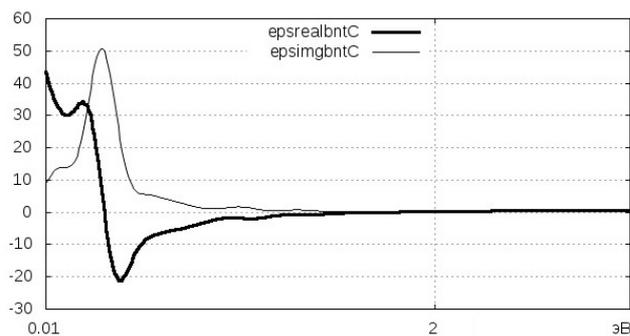


Рис. 3. Действительная и мнимая часть диэлектрической проницаемости борной нанотрубки с дефектом замещения углеродом

оценивался вклад состояний со всеми значениями волновых векторов зоны Бриллюэна. Ниже представлена формула мнимой части диэлектрической проницаемости, которой оперирует программа квантовомеханических расчетов SIESTA.

$$\text{Im}[\varepsilon^0(\vec{n}, \omega)] = 2 \frac{4\pi^2}{V_{\text{cell}}} \int dk^3 \sum_i \sum_j f_i(1 - f_j) \times \frac{\left| \langle \Psi_i(\vec{k}) | \vec{\nabla} \cdot \vec{n} | \Psi_j(\vec{k}) \rangle \right|^2}{(\varepsilon_j - \varepsilon_i)^2} \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_j \pm \omega).$$

Действительная часть вычислялась на основе мнимой с помощью соотношений Крамерса – Кронига.

На рис. 2 и 3 очевидно заметное изменение оптических постоянных при введении небольшого количества примесей азота. На рис. 2 наблюдается отрицательная область в действительной части диэлектрической проницаемости на энергиях от 0,3 до 1,78 эВ для борной нанотрубки с дефектом замещения углеродом, а также от 0,09 до 0,21 и 0,43 до конца расчетного промежутка для замещения атомом азота.

Список литературы

1. Moradian R., Azadi S. Magnetism in defected single-walled boron nitride nanotubes // EPL. 2008. № 83. P. 17007.
2. Кутлубаев Д.З. Электронная структура углеродных нанотрубок, карбина и металлических нанопроводов с точечными дефектами замещения: автореф. дис. ... канд. хим. наук. М., 2012.
3. Efficient Gate-tunable light-emitting device made of defective boron nitride nanotubes: from ultraviolet to the visible / C. Attaccalite [et al.] // Scientific Reports. 2013. № 3. P. 2698.
4. Brightening of excitons in carbon nanotubes on dimensionality modification / Y. Miyauchi [et al.] // Nature Photonics. 2013. № 7. P. 715–719.
5. SIESTA web page [Электронный ресурс] // URL: http://departments.icmab.es/leem/siesta/Databases/Pseudopotentials/Pseudos_GGA_Abinit/ (дата обращения: 02.02.2015).

Dielectric function of boron nanotubes with substitutional defects

Y.M. Aleksandrov, V.V. Yatsishen

The calculation of the real and imaginary part of complex dielectric function of boron nanotubes without defects and with substitutional defects was produced by the first principles. The comparison was produced and was shown the essential role of these defects in the response of the structure to electromagnetic field. Using the SIESTA program, the simulating of the interaction of light with substance is carried out.

Keywords: abinitio, DFT, SIESTA, boron nanotubes, dielectric function, pseudopotential, frequency spectra.