

**Конкурс работ молодых ученых «Просто о сложном»
Научно-популярная статья призера III степени Ивлиева
Павла Алексеевича (аспирант 3 года обучения, ассистент,
МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва)**

Индуктивность углеродных нанотрубок¹

Физика углеродных наноструктур развивается стремительно. Известно, что углерод является веществом с наибольшим числом аллотропических модификаций, некоторые из них представлены на Рисунке 1. Приставка «нано-» происходит от греческого «*nano*», которая переводится как «карлик» и означает одну миллиардную часть чего-либо. Нанообъекты – объекты, размер которых порядка 10^{-9} м, хотя бы в одном пространственном измерении.

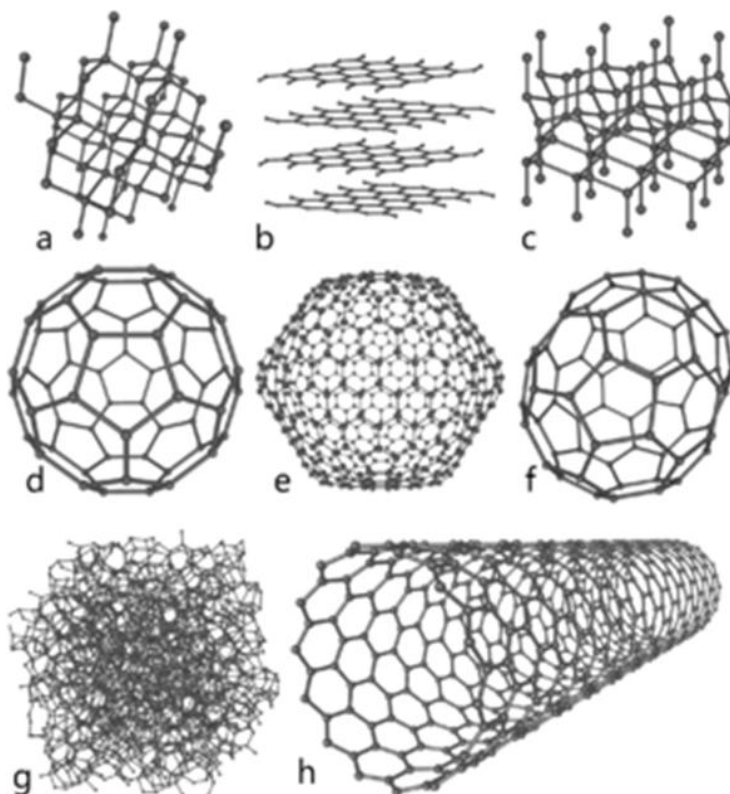


Рис. 1. Аллотропические модификации углерода:

a – алмаз, b – графит, c – лонсдейлит (гексагональный алмаз), d – C₆₀ (фуллерены), e – C₅₄₀, f – C₇₀, g – аморфный углерод, h – одностенная углеродная нанотрубка.

Интерес к этим структурам обусловлен, с одной стороны, необычными физико-химическими свойствами углеродных наноструктур, благодаря которым они являются привлекательным объектом фундаментальной науки, а с другой стороны – широкими перспективами прикладного использования. Это связано в первую очередь с тем, что наномасштабные объекты обладают рядом параметров, сильно отличающихся от параметров микрообъектов. Исключительное сочетание механических и электрических характеристик даёт надежду на разработку устройств, в основе которых лежат наноструктуры.

¹ Научно-популярная статья основана на материалах публикаций:

1. Еркович О.С., Ивлиев П.А. Расчет электронной плотности углеродных нанотрубок во внешнем электромагнитном поле // Наноматериалы и наноструктуры — XXI век. 2016. Т. 7. № 1. С. 8–13.
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. 55–63.

Обычными формами существования углерода в свободном состоянии являются алмаз и графит. Ключевое отличие в строении алмаза и графита – кристаллическая решетка. Элементарная ячейка кристалла алмаза является тетраэдром, в центре и всех вершинах которого расположены атомы углерода. Атомы, находящиеся в вершинах тетраэдра, образуют центр следующего тетраэдра, таким образом, каждый из них также окружен еще четырьмя атомами и т. д. Координационное число углерода в решетке алмаза равно четырем. Все атомы углерода в кристаллической решетке равноудалены от остальных на расстояние 1,54 Å. Каждый из них связан с другими атомами С ковалентной неполярной связью, и вместе они образуют в кристалле, каких бы размеров он ни был, единую молекулу.

Кристаллы графита состоят из параллельных друг другу плоскостей, в которых атомы углерода расположены в вершинах правильных шестиугольников. Межатомное расстояние (сторона каждого шестиугольника) – 1,42 Å, между ближайшими плоскостями – 3,35 Å. Каждая плоскость несколько смещена по отношению к окружающим плоскостям, а каждый атом углерода в плоскостях графита (в графеновых плоскостях) связан с тремя соседними атомами неполярными ковалентными связями. Связь между атомами углерода, расположенными в соседних плоскостях, очень слабая (межмолекулярная, обусловленная силами Ван–дер–Ваальса). В связи с указанными особенностями, кристаллы графита легко расслаиваются на отдельные чешуйки даже при сравнительно не больших нагрузках. Продольная теплопроводность графита, измеренная в направлении плоскости слоев, в пять раз больше теплопроводности, измеренной в поперечном направлении; электрическая проводимость в продольном направлении на четыре порядка превышает проводимость в поперечном направлении.

Фуллерен C_{60} представляет собой выпуклый замкнутый пространственный многогранник, составленный из шестидесяти атомов углерода. Еще в 1970 году японский ученый Осава предположил высокую стабильность молекулы C_{60} в виде усеченного икосаэдра, а в 1973 году советские химики Д. А. Бочвар и Е. Г. Гальперн провели первые квантово-химические расчеты такой гипотетической структуры – замкнутого полиэдра C_{60} . Расчет показал, что подобная модификация углерода имеет закрытую электронную оболочку и действительно должна обладать высокой энергетической стабильностью. Эти работы были малоизвестны вплоть до второй половины 1980–х годов, пока не получили неожиданного экспериментального подтверждения в астрономии. Мощным стимулом к синтезу и исследованию новых форм углерода стало выдвинутое предположение о том, что источником диффузных полос (известных еще с тридцатых годов двадцатого столетия), испускаемых межзвездной материей в ближнем инфракрасном диапазоне, являются молекулы со структурой усеченного икосаэдра C_{60} , названные в дальнейшем фуллеренами. Впервые в лабораторных условиях подобная молекула была обнаружена в масс-спектрах сажи как углеродный кластер с магическим числом 60, что послужило началом изучения различных физических свойств подобных кластеров. В результате была надежно идентифицирована замкнутая сферическая структура молекулы C_{60} , объясняющая ее повышенную стабильность.

Графен – один из наиболее перспективных материалов нанотехнологии XXI в. Такие свойства графена, как проводимость, механическая прочность и химическая стойкость, определяют перспективы его применения в различных устройствах: в качестве проводящих наноэлементов высокочастотных транзисторов, в солнечных батареях, сенсорах, суперконденсаторах, в различных композитных материалах. Графен – низкоразмерная структура, которая состоит из одного атомарного слоя графита и имеет в своей основе сетку sp^2 -гибридизованных атомов углерода.

Отметим, что задолго до основополагающих исследований группы ученых, в состав которой входили лауреаты Нобелевской премии по физике за 2010 г. А.К. Гейм и К.С. Новоселов, квазидвумерных (2D) материалов (к ним принадлежит графен) сообщалось о получении пленок толщиной от нескольких десятков до нескольких единиц графеновых монослоев. Однако исследователями этой группы не только был получен отдельный монослой графена, но и обнаружены, а также подробно изучены его физические и химические свойства.

Получение графена открыло новую область химии – химию 2D–материалов, которая включает, в частности, исследование функционализированного графена (с присоединенными функциональными группами), интересного для приложений в электронике, оптике, создания композитных материалов и катализаторов. По синтезу моно– и многослойных графеновых структур, а также их модифицированных вариантов опубликовано около десяти обзоров (см., например, работу и приведенную в ней библиографию). В одной из последних публикаций обобщены сведения по способам модифицирования углеродных материалов на основе графена за счет создания структурных дефектов путем введения примесей, адсорбции инородных атомов, механических деформаций, а также рассмотрены строение, свойства и результаты моделирования производных графена и родственных неуглеродных графеноподобных материалов – структурных аналогов графена.

Другой формой существования наноуглерода являются углеродные нанотрубки (УНТ). В 1991 году, в процессе изучения осадка, образующего на катоде при распылении графита в вольтовой дуге, внимание японского исследователя Сумио Иидзимы привлекла необычная структура, состоящая из мельчайших волокон. В процессе детального изучения методами электронной микроскопии было установлено, что эти диаметр этих волокон варьируется от 0,4 до нескольких десятков нанометров, а протяженность достигает нескольких микрон. Образованы волокна одним или несколькими слоями графена, свернутыми в трубку. Ввиду особенностей своего строения, а также характерного диаметра, эти структуры были названы углеродными нанотрубками. Примечательно, что в большинстве случаев синтезируются нанотрубки с закрытыми концами, представляющими собой половину молекулы фуллерена. На сегодняшний день развиты технологии получения открытых нанотрубок из материала на основе закрытых трубок.

Нанотрубки – это перспективный материал для разработки нанoeлектроники, сочетающий в себе высокую механическую прочность, большую теплопроводность и электропроводность, с плотностью тока до 10^9 А/см². Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) занимают особое место в ряду углеродных наноструктур. Важной отличительной особенностью ОУНТ является кардинальное отличие от электропроводности обычных проводников, из-за независимости её ни от длины, ни от толщины проводящей трубки. Первые свидетельства существования нанотрубок относятся ещё к 1952 году, они были описаны в статье советских учёных Радушкевича Л.В. и Лукьяновича В.М.

Далее ещё несколько групп исследователей сталкивались с этими увлекательными структурами, но не было представлено результатов по их описанию. Углеродные нанотрубки были открыты при исследовании продуктов, образующихся при разряде вольтовой дуги в атмосфере гелия. Исследователи заинтересовались отходом реакции, вырастающим на катоде, в котором с помощью электронной микроскопии они обнаружили протяженные полые объекты диаметром несколько десятков ангстрем.

Синтез углеродных нанотрубок

Получают нанотрубки с помощью электродугового синтеза. Первый синтез больших (граммовых) количеств УНТ был осуществлён в Японии в 1991 году. Электродуговой синтез проводился на графитовых электродах в атмосфере гелия. Диаметр анода составлял 8 мм, диаметр катода 12 мм, а расстояние между ними менее 1 мм. Сила тока в дуге достигала 100 А, напряжение 10 – 35 В. Скорость роста осадка составляла 1 мм в минуту. Максимальный выход УНТ достигался при давлении гелия в камере 67 кПа. Часть испаряющегося с анода графита превращалась в сажу, оседающую на стенках реакционной камеры, другая же часть оседала на катоде. При давлении гелия в реакционной камере 67 кПа, 75 % израсходованного материала анода осаждалось на катоде.

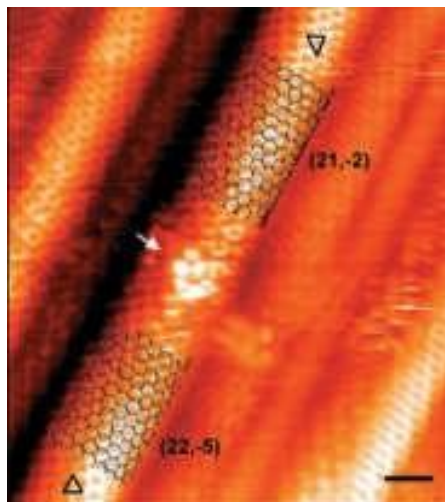


Рис.2. Изображение углеродной нанотрубки, полученное методом сканирующей туннельной микроскопии. Шкала 1 нм

Механизм образования углеродных нанотрубок в вольтовой дуге до сих пор однозначно не установлен. Существуют две основные модели. Согласно первой рост УНТ происходит за счёт соединения углеродных атомов или фрагментов из паровой фазы к висячим связям на концах открытых нанотрубок, согласно второй – за счёт их присоединения к топологическим дефектам на концах закрытых труб.

Введение в материал анода небольших (1 – 2 %) добавок таких металлов, как Fe, Co, Ni, сильно влияет на полезный выход УНТ в реакционной камере. Механизм каталитического действия металлов при образовании однослойных трубок предполагает адсорбцию атомов углерода на поверхности частиц металлов и их свободное перемещение по поверхности, к основанию растущей УНТ. Установлен факт, что при добавлении Fe образуются однослойные углеродные нанотрубки, диаметром 1,2 – 1,4 нм (Рисунок 2), объединяющиеся в упорядоченные сростки, причём концы УНТ закрыты и не содержат частиц металлов.

Очистка нанотрубок

Для исследования и практического применения необходимо иметь уединённые, однородные, беспримесные нанотрубки с открытыми концами. При дуговом разряде они обычно синтезируются сростками, состоящими из УНТ разной длины, причём с закрытыми концами, загрязнённые различными примесями. Поэтому чрезвычайно важны приёмы их очистки и раскрытия.

В отличие от фуллеренов, нанотрубки не растворяются ни в одном растворителе, что осложняет проблему их очистки. Типичными загрязнителями УНТ являются фуллерены, полиэдрические графитизированные частицы и аморфный углерод. Самый простой способ очистки – окисление с помощью O_2 . Максимальная скорость окисления воздухом достигается у C_{60} при $420^\circ C$, у графита – при $645^\circ C$, у нанотрубок – при $695^\circ C$. В результате окисления остаётся 10 – 20 % исходных трубок. Более ресурсозатратным методом очистки является кипячение в концентрированной HNO_3 . Убыль массы полученного дуговым синтезом продукта после 4.5 ч. кипячения составляет менее 2 %, при этом открытыми оказались 80 % всех УНТ. Углеродные нанотрубки, обработанные по описанной технологии, представлены на Рисунке 3.

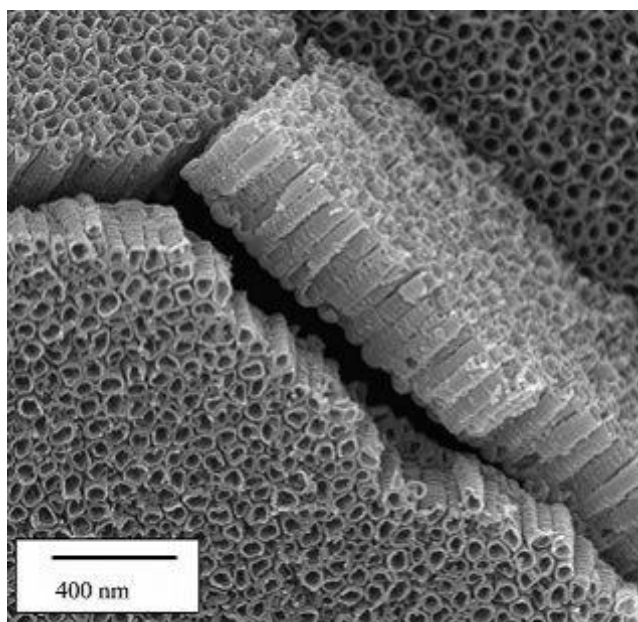


Рис. 3. Массивы очищенных нанотрубок с открытыми концами

Типы углеродных нанотрубок

Идеализированная нанотрубка представляет собой бесшовно свернутую в цилиндр графитовую плоскость, т.е. поверхность, выложенную правильными шестиугольниками, в вершинах которых расположены атомы углерода. Результат такой операции определяется углом ориентации графитовой плоскости относительно оси нанотрубки. Угол ориентации задает хиральность углеродной нанотрубки, определяющую, в частности, ее электрические характеристики. Хиральность нанотрубок определяется набором параметров (m, n) , указывающим координаты шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости должен совпасть с шестиугольником, находящимся в начале координат. Другим способом обозначения хиральности является указание угла между направлением, в котором соседние шестиугольники имеют общую сторону, и направлением сворачивания нанотрубки. Среди всех допустимых направлений сворачивания нанотрубок выделяются направления, для которых совмещение шестиугольника (m, n) с началом координат не требует искажения в его структуре. Этим направлениям соответствуют углы $\alpha = 0^\circ$ (armchair-конфигурация) и $\alpha = 30^\circ$ (zigzag-конфигурация), отвечающие хиральностям $(m, 0)$ и $(2n, n)$ соответственно.

Индексы хиральности однослойной нанотрубки (m, n) однозначным образом определяют ее диаметр D . На текущий момент основным способом определения хиральности нанотрубок связан с измерением их диаметра ввиду того, что разрешающая способность современных электронных микроскопов недостаточна для непосредственного различения нанотрубок с разной хиральностью.

В настоящее время на основе углеродных наноструктур создается элементная база наноэлектроники и наносистемной техники, появляются новые материалы и устройства. Уникальные физико–механические и электрические свойства делают возможным использование углеродных нанотрубок в качестве зондов сканирующей зондовой микроскопии, чувствительных элементов датчиков, проводящих каналов транзисторов, а также в качестве наполнителей композитных материалов. Углеродные нанотрубки являются молекулами с цилиндрической архитектурой расположения атомов и могут быть представлены сворачиванием листа графена. В зависимости от типа сворачивания эти молекулы бывают нескольких типов: «кресло», «зигзаг» и т.д. В последние годы проводятся активные исследования в области синтеза углеродных наноструктур, результаты которых приводят к систематическому снижению цены на эти продукты, а также к увеличению масштабов производства. Усовершенствование технологий синтеза и очистки нанотрубок ведет к постепенному замещению ими кремния в качестве базы для современной наноэлектроники. В то же самое время открытым и широко обсуждаемым остается вопрос о наличии магнитных свойств различных типов углеродных нанотрубок. На данный момент не существует единой теоретической модели для решения этой актуальной задачи.

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. В настоящей работе ОУНТ рассматривается как полый тонкостенный, равномерно заряженный цилиндр, причём, ввиду того, что её длина много больше диаметра, цилиндр является бесконечно длинным. Потенциал цилиндрического слоя считается периодическим в направлении оси цилиндра, с периодом, равным высоте ячейки Вигнера–Зейтца. Он настолько мал по своему значению, что может не учитываться. Ячейка Вигнера-Зейтца – область пространства, с центром в некоторой точке решётки, которая лежит ближе к этой точке, чем к какой–либо другой точке решётки. Для выбора ячейки выделяют область пространства "более приближенную" к данному узлу кристаллической решетки, чем к другим. Для этого соединяют выбранный узел с одним из ближайших (или иногда также и следующими за ближайшими) его соседей отрезком, находят его середину и через нее проводят перпендикулярную данному отрезку плоскость, делящую пространство на два полупространства. Выделяют полупространство, содержащее выбранный узел. Такую операцию повторяют со всеми соседями выбранного узла. Пересечение всех выделенных полупространств и даст ячейку Вигнера–Зейтца. Таким образом, нанотрубка рассматривается как цилиндрически симметричная потенциальная яма с конечной высотой стенок, в поле которой находятся взаимодействующие между собой электроны проводимости. В рамках этой модели может быть получена функция электронной плотности, в свою очередь позволяющая оценить величину индукции магнитного поля, создаваемого нанотрубкой. Учет электрон– электронного взаимодействия целесообразно осуществлять в рамках метода самосогласованного поля Хартри–Фока. Идея метода Хартри–Фока заключается в том, что многочастичная задача сводится к одночастичной в предположении, что каждая частица движется в некотором усреднённом самосогласованном поле, создаваемом всеми остальными частицами и зависящим от состояния каждой частицы системы.

Построение самосогласованного поля может осуществляться как методом последовательных приближений, так и прямым вариационным методом. В данной работе расчеты электронной плотности выполнены вариационным методом. Задача получения электронной структуры нанотрубки является многочастичной. Для расчёта характеристик многоэлектронных систем удобно пользоваться методами функционала плотности (ТФП). Формализм теории позволяет переходить от систем нескольких взаимодействующих фермионов к эффективным

одноэлектронным аналогам. Основная цель теории функционала плотности – при описании электронной подсистемы заменить многоэлектронную волновую функцию электронной плотностью. Это ведет к существенному упрощению задачи, поскольку многоэлектронная волновая функция зависит от $3N$ переменных – по 3 пространственных координаты на каждый из N электронов, в то время как плотность – функция лишь трёх пространственных координат. В рассматриваемой нами системе, электронная плотность является функцией лишь двух координат – радиальной и угловой. Справедливость результатов, получаемых при расчётах систем методом теории функционала, обоснована теоремами Кона–Хоэнберга. Теоремы гласят, что минимуму функционала $E[n]$ соответствует искомое пространственное распределение электронной плотности $n(\vec{r})$. Рассмотрим полную энергию нанотрубки, с учётом приближений, описанных выше, в зависимости от распределения электронной плотности.

С учётом конкретного вида каждого из функционалов, приходим к выражению для полной энергии нанотрубки в приближении равномерно заряженного, бесконечного прямого кругового цилиндра, с пространственно коррелированной плотностью сильно взаимодействующих электронов.

$$E[n] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int (n(\vec{r}))^{\frac{5}{3}} d\vec{r} + \int v(\vec{r})n(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + \frac{1}{7} \int \frac{1}{n(\vec{r})} (\nabla n(\vec{r}))^2 d\vec{r}.$$

Исходя из вариационного принципа, сделан вывод: минимуму функционала $E[n]$ соответствует искомая зависимость $n(\vec{r})$. Для поиска экстремума функционала был использован вариационный принцип. Условием минимума функционала в вариационном исчислении является равенство нулю его вариации $\delta E[n] - \mu \delta n = 0$, при дополнительном условии $\int n(\vec{r}) = N = const$, N – число свободных электронов на единицу длины нанотрубки. Таким образом, приходим к дифференциальному уравнению

$$-\frac{\partial^2}{\partial r^2} n(r, \varphi) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} n(r, \varphi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} n(r, \varphi) + \frac{\pi}{3r^2} n(r, \varphi). \quad (1)$$

Уравнение (1) является уравнением с разделяющимися переменными: $n(r, \varphi) = R(r)\Phi(\varphi)$. Дифференциальное уравнение для радиальной компоненты является модифицированным уравнением Куммера. В математической теории уравнения подобного вида широко исследовались в 19 веке Эрнстом Куммером и Бернхардом Риманом. Как правило, решение такого типа уравнений выражается комбинацией специальных функций Куммера U и M :

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

Радиальное распределение электронной плотности для металлических нанотрубок типа armchair и zigzag представлено на рисунке 4.

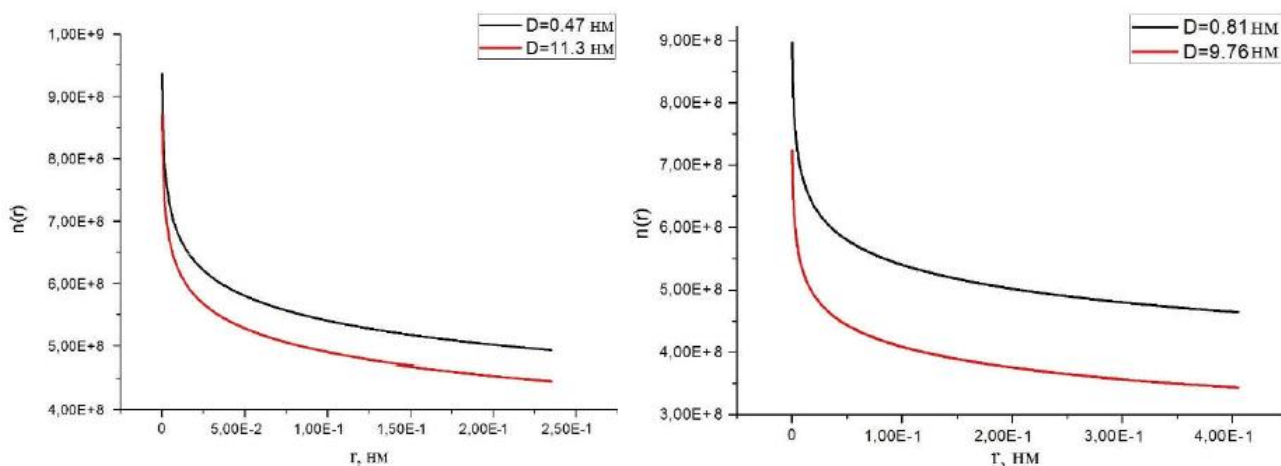


Рис. 4. Радиальное распределение электронной плотности ОУНТ металлического типа диаметром 0,47 нм и 11,3 нм (armchair – конфигурация) (слева). Радиальное распределение электронной плотности ОУНТ металлического типа диаметром 0,81 нм и 9,76 нм (zigzag – конфигурация) (справа).

Взаимодействие с внешним полем

Несмотря на интенсивные исследования ОУНТ, некоторые вопросы до сих пор остаются открытыми. К ним относится возможность разделения полупроводниковых и металлических нанотрубок, а также получение фракций ОУНТ с узким распределением по диаметрам. На данный момент существуют экспериментальные наблюдения резонансного характера рассеяния света углеродными нанотрубками. Подбор диаметра нанотрубок может легко обеспечить оптическое поглощение в широком спектральном диапазоне. Однослойные УНТ проявляют сильную нелинейность насыщающегося поглощения, т. е. они становятся прозрачными при достаточно интенсивном свете и могут быть использованы для различных приложений в области фотоники, например, в коммутаторах, маршрутизаторах и для регенерации оптических сигналов или формирования ультра–коротких лазерных импульсов. УНТ также имеют субпикосекундные времена релаксации и поэтому идеально подходят для сверхбыстрой фотоники. Техническое применение должно предваряться подробным теоретическим исследованием. Важным представляется изучение диэлектрической проницаемости одностенных углеродных нанотрубок при взаимодействии с внешними электромагнитными полями.

Первое применение теории функционала плотности к изучению поглощения света было осуществлено Иенсенем, для расчёта тормозной способности многоэлектронных атомов. Это была сильно упрощённая гидродинамическая модель, в которой атом рассматривался как малый металлический шар. Возбуждения, описываемые гидродинамическим приближением, попадают в спектральную область между далеким ультрафиолетовым и рентгеновским излучением. Широкий анализ сечения фотопоглощения атомов в далёкой ультрафиолетовой и мягкой рентгеновской областях провёл Уилер. Обе модели не учитывали возможное протекание радиальных токов. Чтобы развить теорию колебаний плотности, не ограниченную рамками гидродинамического приближения, необходимо использовать микроскопический подход для описания таких важных физических эффектов, как связь коллективных колебаний с одночастичными возбуждениями. При разработке такого подхода далеко не всегда оказывается результативным изучение собственных мод колебаний плотности, поскольку они часто имеют малое время жизни и сложный профиль линии. Более целесообразным обычно оказывается непосредственное изучение отклика на внешнее поле, что дает прямой метод вычисления истинного спектрального профиля.

Взаимодействие внешнего электромагнитного поля с углеродной нанотрубкой металлического типа рассмотрено в рамках модели отклика двумерного электронного, находящегося во внешнем цилиндрически симметричном потенциале. Рассматриваются 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 с внешним переменным полем.

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

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

Вариационное уравнение для определения отклика плотности рассматриваемой многоэлектронной системы на внешнее периодическое воздействие имеет следующий вид:

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

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

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

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 (характерных значений диаметров) экспоненциальный множитель не отличим от единицы, а функция Куммера M является пренебрежимо малой константой. На основании этих рассуждений можно написать с большой степенью точности приближённое выражение для отклика распределения электронной плотности на внешнее электромагнитное возмущение:

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

Электромагнитная волна, нормально падающая на ОУНТ, вызывает движение электронов этой трубки, описываемое, в рамках выбранной модели, вторым законом Ньютона:

$$m \frac{dV}{dt} = eE,$$

где m , e и V – масса, заряд и скорость электрона соответственно, E – напряженность электрического поля волны. Используя известное соотношение $j = enV$, связывающее плотность тока со скоростью и плотностью носителей заряда, перепишем закон Ньютона:

$$\left(\frac{m}{e^2 n}\right) \frac{dj}{dt} = E \quad (3)$$

Часть выражения (3), 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 (Рисунок 5), обладающего удельными активным R и реактивным X сопротивлениями, а полный импеданс записывается в виде

$$Z = R + iX,$$

где i – мнимая единица. Реактивное сопротивление связано с индуктивностью известным соотношением:

$$X = \omega L,$$

где ω – частота падающей волны, а L – удельная индуктивность рассматриваемой структуры. Таким образом, импеданс равен

$$Z = R + i\omega L.$$

Стоит отметить, что индуктивность электронного газа нанотрубки металлического типа обусловлена не магнитным потоком, пронизывающим поверхность трубки, а инертными свойствами электронов. Ввиду того, что электроны обладают конечной массой покоя и конечным значением подвижности, отклик газа, ими образованного, не носит мгновенного характера. Поэтому, при прохождении переменного сигнала, электронный газ нанотрубки откликается на внешнее возмущение с задержкой. Это явление было названо кинетической индуктивностью. В знак уникальности природы индуктивности электронного газа нанотрубок далее будем обозначать удельную индуктивность L_k . Примечательно, что в классических металлических макроскопических размерах, строго говоря, тоже имеет место эффект кинетической индуктивности. Но по причине его малости по сравнению с индуктивностью, обусловленной изменением магнитного потока через образец, не берется в расчет.

Исходя из (3), удельная кинетическая индуктивность равна

$$L_k = \frac{m}{e^2 n}.$$

Согласно результатам работы, электронная плотность ОУНТ металлического типа зависит от частоты падающей электромагнитной волны следующим образом:

$$n(r, \omega) = U\left(\frac{A-1}{A}, 1, \frac{rA}{2}\right),$$

где U – специальная функция Куммера,

$$A = 24 \sqrt{4,78 - E_m r \left\{ \cos\left(\frac{\omega}{c}(ct - r)\right) + \cos(\omega t) \right\} + 1}.$$

Электронная плотность содержит зависимость от пространственной переменной r , так как ее радиальное распределение неоднородно. Как было отмечено в, при преодолении порогового значения интенсивности электромагнитного излучения, возникает мнимая часть электронной плотности, которая и ответственна за наличие у электронного газа углеродной нанотрубки индуктивных свойств.

Таким образом, получен явный вид зависимости кинетической индуктивности ОУНТ металлического типа от диаметра объекта и частоты электромагнитной волны

$$L_k = \frac{m}{e^2 \cdot U\left(\frac{A-1}{A}, 1, \frac{rA}{2}\right)} \quad (4)$$



Рис.5. Эквивалентность углеродной нанотрубки активному двуполюснику

Формула (4) позволяет определить величину кинетической индуктивности для конкретной конфигурации углеродной при заданной частоте и интенсивности излучения. Проведенный анализ показывает, что величина L_k практически не зависит от ω . Для монохроматической линейно-поляризованной волны с амплитудой напряженности электрического поля E_m интенсивность равна

$$I = \frac{\varepsilon_0 c E_m^2}{8\pi}.$$

С ростом интенсивности падающего излучения I , происходит уменьшение удельной кинетической индуктивности ОУНТ. Результаты расчета этой величины по формуле (4) приведены в таблицах 2–4.

Таблица 2. Зависимость удельной кинетической индуктивности от интенсивности волны для нанотрубки диаметра 2 нм при частоте излучения $\nu = 550$ ТГц

$I, \text{ГВт/м}^2$	0,5	5	10	50	100
$L_k, \text{нГн/нм}$	20	11	10,5	10,2	10

Таблица 3. Зависимость удельной кинетической индуктивности от интенсивности волны для нанотрубки диаметром 20 нм при частоте излучения $\nu = 550 \text{ ТГц}$

$I, \text{ГВт/м}^2$	0,5	5	10	50	100
$L_k, \text{нГн/нм}$	1,77	1,06	1,04	1,01	1

Таблица 4. Зависимость удельной кинетической индуктивности от интенсивности волны для нанотрубки диаметром 40 нм при частоте излучения $\nu = 550 \text{ ТГц}$

$I, \text{ГВт/м}^2$	0,5	5	10	50	100
$L_k, \text{нГн/нм}$	6,82	4,23	4,15	4,04	4

Из таблиц 2–4 видно, что с ростом диаметра нанотрубки увеличивается значение удельной кинетической индуктивности. Это связано с уменьшением электронной плотности, что находится в соответствии с результатами.

Таким образом, 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, мы установили, что электронный газ проявляет индуктивные свойства, которые зависят от диаметра нанотрубки, частоты и интенсивности излучения. Дополнительно мы получены выражения для расчета величины кинетической индуктивности L_k и реактивной части импеданса X . Полученные результаты могут быть использованы при проектировании современных наномасштабных электронных устройств, при создании наноантенн, излучателей и поглотителей электромагнитного излучения широкого частотного диапазона.