

## ИЗМЕНЕНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК С ПОМОЩЬЮ ХИМИЧЕСКОЙ МОДИФИКАЦИИ

Цыкарева Ю.В.\* , Капустин С.Н.

Северный Арктический федеральный университет имени М.В. Ломоносова,  
Архангельск, Россия

\*E-mail: [hare22@yandex.ru](mailto:hare22@yandex.ru)

## ALTERATION OF CARBON NANOTUBES' BAND STRUCTURE THROUGH CHEMICAL MODIFICATION

Tsykareva Yu.V.\* , Kapustin S.N.

Northern Arctic Federal University, Arkhangelsk, Russia

Annotation. Carbon nanotubes are a promising material for nanoelectronics and conductive composites. The conductivity and the dead gap of a CNT are determined mainly by its chirality. The possibility of modifying these parameters by grafting functional groups is explored. Dependences of conductivity on the type, the degree of functionalization, and the temperature are given. An explanation of the dependence data is offered.

Углеродные нанотрубки (УНТ) – перспективный материал для наноэлектроники и проводящих композитов. Проводимость и ширина запрещённой зоны УНТ определяется в основном ее хиральностью. Исследована возможность модификации этих параметров путем прививки функциональных групп. Приведены зависимости проводимости от типа, степени функционализации и температуры. Предложено объяснение данным зависимостям.

В данной работе рассматривается перколяционная сеть УНТ, в которой одна треть трубок обладает металлической проводимостью, а остальные трубки являются широкозонными полупроводниками, через которые электрический ток не идет. Следовательно, для чистых трубок наблюдается чисто металлическая зависимость проводимости от температуры.

В случае гидроксильированных УНТ проводимость образца на порядок выше, чем у чистых УНТ. Вид зависимости схож с зависимостью для полупроводниковых образцов. На графике видны элементы, указывающие на наличие собственной и примесной проводимости. Это можно объяснить следующим образом: за счет присоединения -ОН групп увеличилось количество трубок с металлическим типом проводимости, а у остальных полупроводниковых трубок присоединение -ОН групп способствовало уменьшению величины запрещенной зоны за счет образования дополнительных уровней в электронной структуре. Из-за малой проводимости ток по ним не идет, но так как они подключены к перколяционной сети носители заряда с них переходят в общую сеть.

Для УНТ - NH<sub>2</sub> зависимость имеет ярко выраженный металлический характер, так как NH<sub>2</sub> более эффективный донор электронов. Резкое снижение

проводимости после 413 К связано с тем, что функциональные группы отщепляются от трубки.

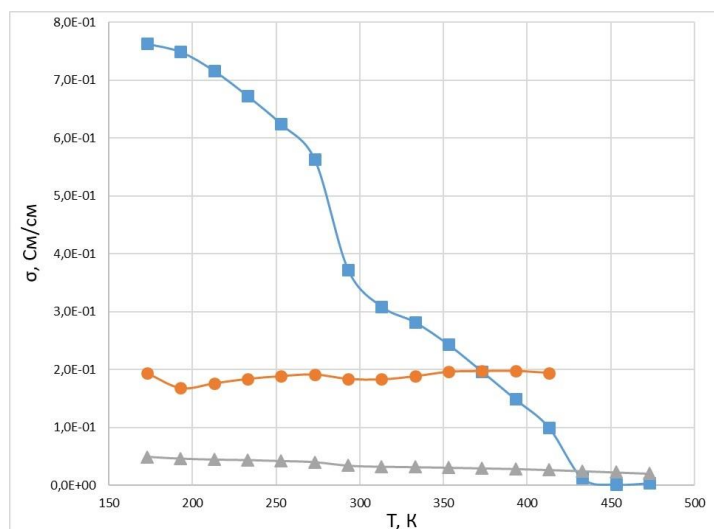


Рис. 1. Температурные зависимости электропроводности образцов различных типов УНТ от температуры: треугольники – чистые УНТ; круги – УНТ - OH; квадраты – УНТ - NH<sub>2</sub>.

Поскольку технологии синтеза трубок с заданной хиральностью не разработана, с помощью химической модификации можно скорректировать электрофизические свойства УНТ.

1. Капустин С. Н., Верещагина Ю.В. и др., Физ. вест. ВШЕНИТ САФУ,17,83-89 (2017).
2. Ketabi N., Tolhurst T.M. et al., Carbon, 123, 1-6 (2017).
3. Елецкий А. В., УФН, 167, 945–972 (1997).