

РОЗМІРНІ Й ЧАСТОТНІ ЗАЛЕЖНОСТІ ПОВЕРХНЕВОЇ ОПТИЧНОЇ ПРОВІДНОСТІ ОДНОСТІННИХ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК З МЕТАЛЕВИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ

А. В. Коротун¹, Я. В. Карандась¹, І. М. Тітов², В. І. Третяк¹

¹Національний університет "Запорізька політехніка",
вул. Жуковського, 64, Запоріжжя, 69063, Україна
e-mail: andko@zntu.edu.ua

²UAD Systems, вул. Александрівська, 84, Запоріжжя, 69002, Україна
(Отримано 12 жовтня 2018 р.; в остаточному вигляді — 15 липня 2019 р.)

В одноелектронному наближенні досліджено розмірні й частотні залежності дійсної та уявної частин поверхневої провідності одностінних вуглецевих нанотрубок zigzag- та armchair-конфігурацій. Одержано загальні формули для внутрішньозонної та міжзонної провідності акіральних нанотрубок указаних конфігурацій. Проведено порівняння результатів розрахунків поверхневої провідності вуглецевих нанотрубок різних конфігурацій і різних хіральностей. Обговорено особливості розмірних залежностей дійсної та уявної частин поверхневої провідності.

Ключові слова: одностінні вуглецеві нанотрубки, поверхнева оптична провідність, акіральні нанотрубки, внутрішньозонна провідність, міжзонна провідність, плоска електромагнітна хвиля, розмірна залежність.

DOI: <https://doi.org/10.30970/jps.23.4701>

PACS number(s): 73.25.+i, 73.63.Fg

І. ВСТУП

У наш час дослідженню вуглецевих нанотрубок (ВНТ) присвячено значну кількість робіт [1–7]. Насамперед це пов'язано з їхніми незвичайними електрофізичними властивостями. Залежно від розташування в них атомів вуглецю (спіральні або кільцями), ВНТ діють щодо струму як провідники або напівпровідники. Це робить їх одним з основних матеріалів наноелектроніки [8], прогрес у розвитку якої істотний. На основі нанотрубок уже створено практично всі базові пристрої, функціонально еквівалентні сучасним цифровим або аналоговим схемам. Продемонстровано експериментальні зразки елементарних логічних схем, модулів пам'яті на нанотрубках.

Перспективним також є застосування ВНТ як антенних систем, зокрема, для зв'язку між нанопристроями, пристроями волоконного зв'язку, використання їх для зв'язку між наноелектронними й макроскопічними пристроями. Крім того, композитні матеріали на основі ВНТ можна використати у пристроях мікрохвильового діапазону, зокрема, як частотно-селективні поверхні. Широке впровадження таких пристроїв у практику неможливе без знання електродинамічних характеристик ВНТ, зокрема, високо-частотної поверхневої провідності.

Дослідженню провідності ВНТ і графенових шарів присвячено низку теоретичних та експериментальних робіт. Так, у [9] розраховано частотні залежності внутрішньозонної і міжзонної поверхневої провідності моношару графена, що обчислюється формулою Кубо, та дійсної й уявної частин діелектричної функції,

в [10] визначено вплив класичних розмірних ефектів на внутрішньозонну інтегральну провідність прямолінійної смужки графену, у [11] методом матриці густини вивчено міжзонну провідність допованого графену за межами теорії лінійного відгуку, в [12] розраховано електронну провідність одностінних ВНТ за низьких температур у межах моделі Габбарда, у [13] з'ясовано вплив кривизни поверхні ВНТ на їхню питому поздовжню провідність у межах наближення Дірака, у [14] обчислено провідність одношарових ВНТ у межах моделі Габбарда із застосуванням методу функцій Гріна, у [15] вивчено дипольні міжзонні переходи в терагерцовому діапазоні частот у ВНТ із металевими властивостями, у [16] в межах класичної електродинаміки досліджено поширення поверхневих плазмон-поляритонних мод в одностінних ВНТ із металевим типом провідності, у [17] одержано аналітичні вирази для дипольних матричних елементів, що описують міжзонні оптичні переходи у ВНТ для довільної поляризації падаючої електромагнітної хвилі та хіральності нанотрубок, у [18] отримано аналітичний вираз для матричного елемента оптичного поглинання як функцію хвильового числа та індексу хіральності для лінійно поляризованої електромагнітної хвилі з поляризацією уздовж ВНТ. Результати експериментальних досліджень оптичних властивостей ВНТ викладені в [3–5, 7].

При цьому питання про поведінку поверхневої провідності акіральних ВНТ із металевим типом провідності за терагерцових частот є недостатньо вивченим. Тому метою роботи є дослідити розмірні й частотні залежності дійсної та уявної частин поверхневої провідності одношарових ВНТ конфігурацій zigzag та

armchair.

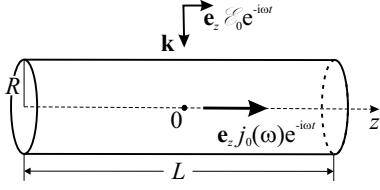


Рис. 1. Одношарова вуглецева нанотрубка, опромінена лінійно поляризованою плоскою електромагнітною хвилею.

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ТА ОСНОВНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Вважатимемо, що на нанотрубку падає плоска електромагнітна хвиля, лінійно поляризована уздовж

осі Oz , яка збігається з віссю одностінної ВНТ. При цьому хвильовий вектор електромагнітної хвилі перпендикулярний осі ВНТ (рис. 1). У цьому випадку в ній індукується електричний струм густиною $j(t) = e_z j_0(\omega) e^{-i\omega t}$. Коли довжина хвилі $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}|$ набагато більша за радіус ВНТ R , але менша за її довжину L , справедливий закон Ома

$$j_0(\omega) = \sigma_s(\omega) \mathcal{E}, \quad (1)$$

де \mathcal{E} — амплітуда падаючої електромагнітної хвилі; $\sigma_s(\omega)$ — високочастотна поверхнева провідність одностінних ВНТ zigzag ($n = 0$) і armchair ($n = m$) конфігурацій, яка в одноелектронному наближенні має вигляд [19]:

$$\sigma_s(\omega) = \sigma_s^{(1)}(\omega) + \sigma_s^{(2)}(\omega). \quad (2)$$

Тут

$$\sigma_s^{(1)}(\omega) = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar (i\omega - \nu) R} \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\partial \varepsilon_c(p)}{\partial p} \frac{\partial}{\partial p} \{f[\varepsilon_c(p)] - f[-\varepsilon_c(p)]\} dp; \quad (3)$$

$$\sigma_s^{(2)}(\omega) = \frac{i\omega e^2}{\pi^2 \hbar^2 R} \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\omega_{cv}(p) \mathcal{R}_{cv}^2(p) \{f[\varepsilon_c(p)] - f[-\varepsilon_c(p)]\}}{\omega_{cv}^2(p) - (\omega + i\nu)^2} dp \quad (4)$$

— компоненти поверхневої провідності, зумовлені внутрішньозонними й міжзонними переходами відповідно. У формулах (3)–(4): $\nu = \tau^{-1}$, τ — час релаксації (далі при розрахунках вважатимемо, що $\tau = 3 \cdot 10^{-13}$ с) [20]; $R = (\sqrt{3}b\sqrt{m^2 + mn + n^2})/2\pi$ — радіус одностінної ВНТ; $b = 0.142$ нм — міжатомна відстань у кристалічній ґратці графену; m, n — індекси хіральності; p — квазіімпульс електронів, який змінюється

в межах $-a \leq p \leq a$, де $a = 2\pi\hbar/3b$;

$$f[\varepsilon_c(p)] = \left\{ \exp\left(\frac{\varepsilon_c(p)}{k_B T}\right) + 1 \right\}^{-1} \quad (5)$$

— рівноважна функція розподілу Фермі–Дірака; T — температура електронної підсистеми ВНТ;

$$\mathcal{R}_{cv}(p) = \frac{b\gamma_0^2}{2\varepsilon_c^2(p)} \left(1 + \cos\frac{3bp_x}{2\hbar} \cos\frac{\sqrt{3}bp_y}{2\hbar} - 2\cos^2\frac{\sqrt{3}bp_y}{2\hbar} \right) \quad (6)$$

— матричний елемент оператора дипольного моменту ахіральних ВНТ у загальному вигляді [19];

$$\varepsilon_c(p) = \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos\frac{3bp_x}{2\hbar} \cos\frac{\sqrt{3}bp_y}{2\hbar} + 4 \cos^2\frac{\sqrt{3}bp_y}{2\hbar}} \quad (7)$$

— закон дисперсії π — електронів у зоні провідності ахіральних ВНТ; $\omega_{cv}(p) = 2\varepsilon_c(p)/\hbar$ — частота міжзонних переходів.

Співвідношення (6)–(7) можна конкретизувати для ВНТ типу “zigzag” та “armchair”, якщо скористатися відповідними підстановками: $\{p_x \rightarrow p_z, p_y \rightarrow p_\varphi\}$ та $\{p_x \rightarrow p_\varphi, p_y \rightarrow p_z\}$, де

$$p_\varphi = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{3}\beta b} \frac{m}{s}. \quad (8)$$

Тут $\beta = 1$ і $\sqrt{3}$ для ВНТ типу zigzag та armchair відповідно.

Підставляючи формули (3)–(4) у співвідношення (2), після деяких математичних перетворень отриму-

ємо для дійсної та уявної частин повної поверхневої провідності вирази:

$$\operatorname{Re} \sigma_s(\omega) = -\frac{e^2\nu}{2\pi^2\hbar R} \left(\frac{1}{\omega^2 + \nu^2} \mathcal{I}_1 + \frac{2\omega^2}{\hbar} \mathcal{I}_2 \right); \quad (9)$$

$$\operatorname{Im} \sigma_s(\omega) = -\frac{e^2\omega}{2\pi^2\hbar R} \left(\frac{1}{\omega^2 + \nu^2} \mathcal{I}_1 + \frac{2}{\hbar} \mathcal{I}_3 \right), \quad (10)$$

де введено такі позначення для інтегралів:

$$\mathcal{I}_1 = \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\partial \varepsilon_c(p, s)}{\partial p} \frac{\partial}{\partial p} \left(\operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon_c(p, s)}{2k_{\text{BT}}} \right) \right) dp; \quad (11)$$

$$\mathcal{I}_2 = \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\omega_{cv}(p, s) \mathcal{R}_{cv}^2(p, s)}{(\omega_{cv}^2(p, s) - \omega^2 + \nu^2)^2 + 4\omega^2\nu^2} \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon_c(p, s)}{2k_{\text{BT}}} \right) dp; \quad (12)$$

$$\mathcal{I}_3 = \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{[\omega_{cv}^2(p, s) - \omega^2 + \nu^2] \omega_{cv}(p, s) \mathcal{R}_{cv}^2(p, s)}{(\omega_{cv}^2(p, s) - \omega^2 + \nu^2)^2 + 4\omega^2\nu^2} \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon_c(p, s)}{2k_{\text{BT}}} \right) dp. \quad (13)$$

Співвідношення (9) і (10) з урахуванням інтегралів (11)–(13) використовуємо далі для розрахунку дійсної та уявної частин поверхневої провідності ахіральних одношарових ВНТ з різними хіральностями.

III. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки проводили для ВНТ типу zigzag і armchair з індексами хіральності $m = 6, 10, 12$ і 18 за $T = 300$ К за формулами (9)–(10) з урахуванням співвідношень (5)–(8) та (11)–(13).

На рис. 2 наведено частотні залежності дійсної та уявної частин міжзонної поверхневої провідності ВНТ типу zigzag і armchair з індексом хіральності $m = 6$. Залежності $\operatorname{Re} \sigma_s^{(2)}(\hbar\omega)$ (рис. 2, а) мають осцилюючий характер, причому “період” осциляцій для ВНТ zigzag-типу збільшується зі збільшенням частоти, тоді як для ВНТ armchair-типу він, навпаки, зменшується. Крім того, практично в усьому діапазоні частот $\operatorname{Re} \sigma_s^{(2)}$ для ВНТ armchair-конфігурації більше, ніж для ВНТ zigzag-конфігурації на 1–3 порядки. Це свідчить про те, що металеві властивості таких ВНТ проявляються сильніше. Осциляції $\operatorname{Im} \sigma_s^{(2)}(\hbar\omega)$ для ВНТ armchair-типу починаються за менших частот і мають більшу амплітуду, ніж у випадку ВНТ zigzag-типу.

Крім того, функція $\operatorname{Im} \sigma_s^{(2)}(\hbar\omega)$ є знакозмінною, на відміну від $\operatorname{Re} \sigma_s^{(2)}(\hbar\omega)$, яка є додатною за будь-яких значень частоти.

Порівняння результатів розрахунків для дійсної частини міжзонної провідності ВНТ різних конфігурацій з однаковим діаметром, що відповідає значенням індексів хіральності $m = 12$ і 18 для ВНТ типу zigzag і $m = 6$ і 10 — для ВНТ типу armchair відповідно, наведено на рис. 3. Зазначимо, що за відносно малих частот ці результати істотно відрізняються. Тоді як $\operatorname{Re} \sigma_s^{(2)}(\hbar\omega)$ для ВНТ armchair-типу осцилює з великою амплітудою, $\operatorname{Re} \sigma_s^{(2)}(\hbar\omega)$ для ВНТ zigzag-типу зростає практично монотонно (помітні лише дрібно-масштабні осциляції, які у випадку $m = 12$ мають більшу амплітуду). Зі збільшенням частоти результати розрахунків $\operatorname{Re} \sigma_s^{(2)}(\hbar\omega)$ для ВНТ обох типів стають близькими. Цей факт можна пояснити зростанням імовірності переходів електронів у зону провідності ВНТ zigzag-конфігурації зі збільшенням частоти падаючого випромінювання.

На рис. 4 і 5 наведено аналогічні залежності для повної поверхневої провідності σ_s . Ці результати якісно й кількісно близькі до результатів для міжзонної провідності, що свідчить про домінуючий внесок міжзонних переходів у височастотну провідність порівняно з внутрішньозонними переходами.

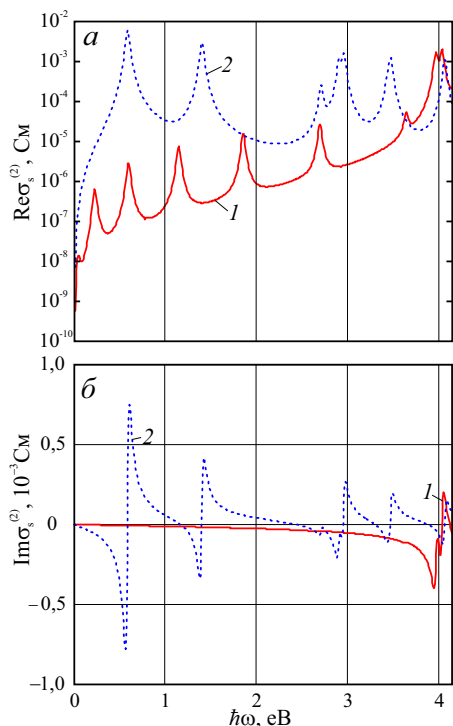


Рис. 2. Частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин міжзонної поверхневої провідності ВНТ конфігурацій zigzag (крива 1) і armchair (крива 2) з хіральністю $m = 6$.

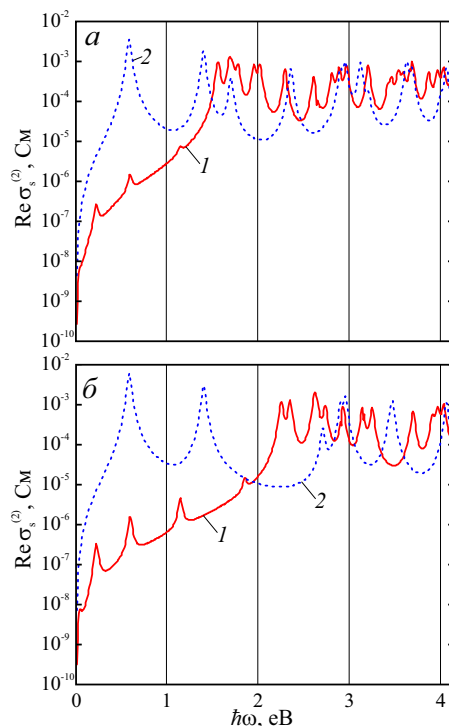


Рис. 3. Частотні залежності дійсної частини міжзонної поверхневої провідності для ВНТ різних конфігурацій однакового діаметра: а – хіральності $m = 18$ – zigzag (крива 1), $m = 10$ – armchair (крива 2); б – хіральності $m = 12$ – zigzag (крива 1), $m = 6$ – armchair (крива 2).

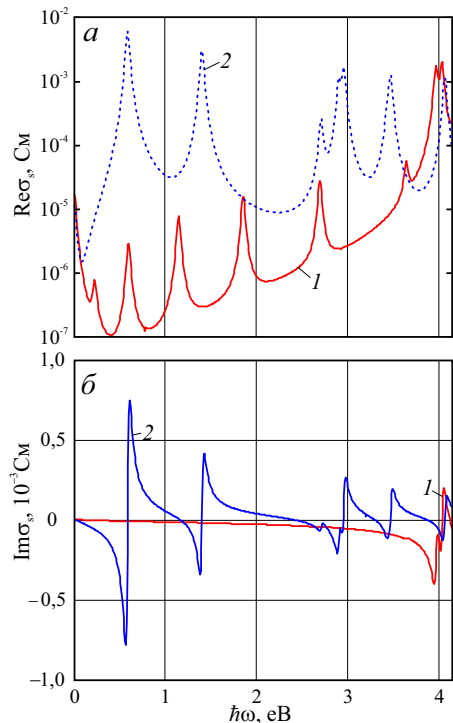


Рис. 4. Частотні залежності дійсної (а) та уявної (б) частин повної поверхневої провідності ВНТ типу zigzag (крива 1) та armchair (крива 2) з хіральністю $m = 6$.

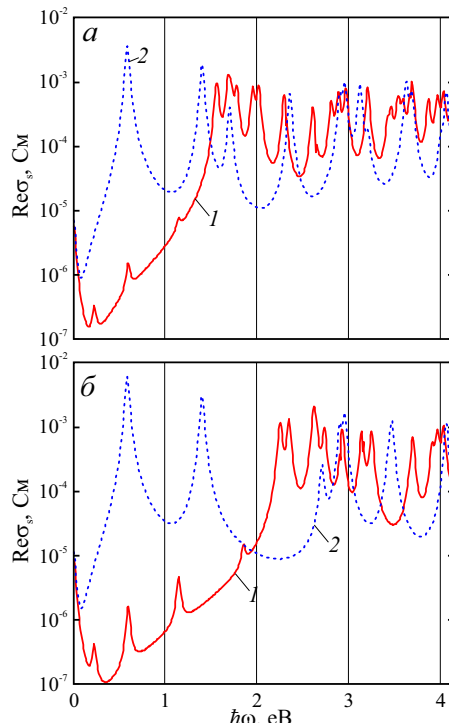


Рис. 5. Частотні залежності дійсної частини повної поверхневої провідності для ВНТ різних конфігурацій однакового діаметра: а – хіральності $m = 18$ – zigzag (крива 1), $m = 10$ – armchair (крива 2); б – хіральності $m = 12$ – zigzag (крива 1), $m = 6$ – armchair (крива 2).

За рис. 3 і 5 можна простежити основні особливості розмірної залежності дійсної частини міжзонної та повної поверхневих провідностей ахіральних ВНТ zigzag-типу (криві 1 на рис. 3 і 5). Зі зростанням хіральності m , а, відповідно, і радіуса ВНТ R , піки зміщуються ліворуч, причому, за аналогією з випадком суцільного металевого нанодоту [21], зміщення дорівнюють $\Delta\omega = \omega' - \omega = \omega((R^2/R'^2) - 1) = \omega((m^2/m'^2) - 1)$. Це означає, що більш віддалені піки з більшим значенням ω зміщуються сильніше від ближніх і інтервал частот, який вони займають, звужується. Водночас у всьому інтервалі частот з'являються нові піки внаслідок того, що зі збільшенням R збільшується кількість рівнів розмірного квантування, а отже, і кількість можливих переходів між ними. При цьому відстань між піками $\text{Re } \sigma_s^{(2)}(\hbar\omega)$ та $\text{Re } \sigma_s(\hbar\omega)$ зменшується зі збільшенням частоти падаючого випромінювання, і коли ця відстань наближується до величини \hbar/τ , то піки починають накладатися один на один.

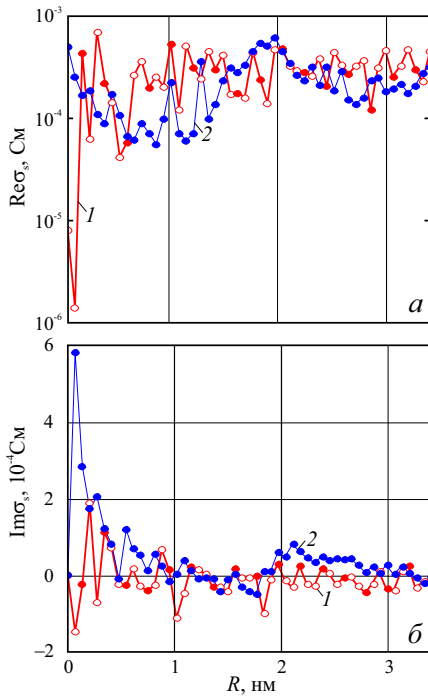


Рис. 6. Розмірна залежність дійсної (а) та уявної (б) частин повної поверхневої провідності при $\hbar\omega = 4.14$ eV ВНТ типу zigzag (крива 1) та armchair (крива 2).

Розмірні залежності (хіральність змінюється від 1 до 50) повної поверхневої провідності ахіральних ВНТ при $\hbar\omega = 4.14$ eV зображено на рис. 6. Незафарбовані точки на кривих 1 відповідають ВНТ типу “zigzag” із напівпровідниковою провідністю. Осциляції $\text{Re } \sigma_s(R)$ для ВНТ zigzag-типу мають велику амплітуду за значень хіральності $m = 1$ і 2, причому зі збільшенням хіральності амплітуда зменшується.

Для $\text{Im } \sigma_s(R)$ ситуація протилежна — за вказаних хіральностей великою є амплітуда осциляцій для ВНТ типу “armchair”, а зі збільшенням хіральності осциляції $\text{Im } \sigma_s(R)$ в околі нуля наявні для ахіральних ВНТ обох конфігурацій. Це пов'язане з різним типом провідності ВНТ цих конфігурацій за $m = 1$ і 2. Гострі піки на цих кривих зумовлені дискретністю зміни хіральності ($\Delta m \in N$, де N — множина цілих чисел).

IV. ВИСНОВКИ

У межах одноелектронного наближення одержано та досліджено частотні й розмірні залежності дійсної та уявної частин міжзонної та повної поверхневої провідності вуглецевих нанотрубок zigzag- і armchair-конфігурацій з різними хіральностями.

Зазначимо, що результати розрахунку частотних залежностей $\text{Re } \sigma_s(\hbar\omega)$ та $\text{Im } \sigma_s(\hbar\omega)$ для ВНТ типу “zigzag” з $m = 6$ і 12 якісно подібні до результатів, одержаних у [22] для $m = 9$.

Установлено, що у всьому досліджуваному діапазоні частот дійсна частина міжзонної поверхневої провідності ВНТ типу armchair на 1–3 порядки більша, ніж для ВНТ типу zigzag. Це, вочевидь, пов'язане зі значно більшою концентрацією електронів у зоні провідності таких нанотрубок. Проведено порівняння результатів розрахунків $\text{Re } \sigma_s^{(2)}(\hbar\omega)$ для ВНТ різних конфігурацій однакового діаметра. Ці результати суттєво відрізняються для відносно малих частот, а зі збільшенням частоти стають близькими. Таку поведінку дійсної частини міжзонної поверхневої провідності можна пояснити вирівнюванням концентрації електронів у зоні провідності ВНТ конфігурацій zigzag і armchair зі збільшенням частоти падаючої на нанотрубку електромагнітної хвилі.

З'ясовано, що результати аналогічних розрахунків міжзонної та повної поверхневої провідності для ахіральних ВНТ якісно й кількісно близькі внаслідок того, що внесок міжзонної провідності у височастотну провідність домінує над внеском внутрішньозонної провідності. Велика кількість переходів між рівнями розмірного квантування має наслідком зменшення відстані між максимумами дійсних частин міжзонної та повної поверхневої провідності ВНТ zigzag-конфігурації зі збільшенням частоти падаючого випромінювання і накладання цих піків один на один з наближенням відстані між ними до величини $\hbar\nu$.

Як і у випадку металевих низькорозмірних систем, $\text{Im } \sigma_s(\hbar\omega)$ є знакозмінною функцією, тоді як $\text{Re } \sigma_s(\hbar\omega)$ додатна за будь яких значень частоти.

Показано, що дискретність зміни хіральності призводить до формування гострих піків на розмірних залежностях дійсної і уявної частин повної поверхневої провідності.

- [1] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, Ph. Avouris, *Carbon nanotubes: Synthesis, Structure, Properties, and Application* (Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg, 2001); <https://doi.org/10.1007/3-540-39947-X>.
- [2] A. Maffucci, S. A. Maksimenko, *Fundamental and Applied Nano-Electromagnetics* (Springer Netherlands, 2016); <https://doi.org/10.1007/978-94-017-7478-9>.
- [3] P. Karlsen *et al.*, *J. Phys. D* **51**, 014003 (2018); <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aa96ef>.
- [4] R. R. Hartmann, J. Kono, M. E. Portnoi, *Nanotechnology* **25**, 322001 (2014); <https://doi.org/10.1088/0957-4484/25/32/322001>.
- [5] M. V. Shuba *et al.*, *J. Appl. Phys.* **119**, 104303 (2016); <https://doi.org/10.1063/1.4943499>.
- [6] I. S. Nefedov, S. A. Tretiyakov, *Photonics Nanostructures: Fundam. Appl.* **9**, 374 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.photonics.2011.04.005>.
- [7] T. Kampfrath *et al.*, *Phys. Stat. Solidi (b)* **244**, 3950 (2007); <https://doi.org/10.1002/pssb.200776112>.
- [8] П. Н. Дьячков, *Электронные свойства и применение нанотрубок* (Бином. Лаборатория знаний, Москва, 2015).
- [9] А. В. Голованов, Г. С. Макеева, В. В. Вареница, *Надежн. кач. сложн. сист.* **8**, 26 (2014).
- [10] М. А. Рувінський, Б. М. Рувінський, *Фіз. хім. тверд. тіла* **10**, 529 (2009).
- [11] Б. М. Рувінський, М. А. Рувінський, *Фіз. хім. тверд. тіла* **13**, 325 (2012).
- [12] А. В. Гец, В. П. Крайнов, *Журн. эксп. теор. физ.* **150**, 1246 (2016); <https://doi.org/10.7868/S0044451016120191>.
- [13] Д. В. Колесников, Г. С. Иванченко, Н. Г. Лебедев, *Физ. тверд. тела* **58**, 1168 (2016); <https://doi.org/10.1134/S1063783416060238>.
- [14] Г. С. Иванченко, Н. Г. Лебедев, *Физ. тверд. тела* **49**, 183 (2007); <https://doi.org/10.1134/S1063783407010301>.
- [15] M. V. Shuba *et al.*, *Phys. Rev. B* **96**, 205414 (2017); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.205414>.
- [16] A. Moradi, *Photonics Nanostructures: Fundam. Appl.* **11**, 85 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.photonics.2012.09.001>.
- [17] S. V. Goupalov, A. Zarifi, T. G. Pedersen. *Phys. Rev. B* **81**, 153402 (2010); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.153402>.
- [18] J. Jiang, R. Saito, A. Grüneis, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Carbon*. **42**, 3169 (2004); <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2004.07.028>.
- [19] А. М. Немиленцев, Г. Я. Слепян, С. А. Максименко, *Вест. Беларус. гос. ун-та. Сер. 1* **3**, 18 (2008).
- [20] S. J. Tans *et al.*, *Nature* **386**, 474 (1997); <https://doi.org/10.1038/386474a0>.
- [21] В. П. Курбацкий, А. В. Коротун, А. В. Бабич, В. В. Погосов, *Физ. тверд. тела* **51**, 2371 (2009); <https://doi.org/10.1134/S1063783409120154>.
- [22] G. Ya. Slepian, S. A. Maksimenko, A. Lakhtakia, O. Yevtushenko, A. V. Gusakov, *Phys. Rev. B* **60**, 17136 (1999); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.17136>.

SIZE AND FREQUENCY DEPENDENCES OF THE SURFACE OPTICAL CONDUCTIVITY OF SINGLE-WALL CARBON NANOTUBES WITH METALLIC PROPERTIES

A. V. Korotun¹, Ya. V. Karandas¹, I. M. Titov², V. I. Tretiak¹

¹ National University “Zaporizhzhia Politechnic”,

64, Zhukovsky St., Zaporizhzhya, UA-69063, Ukraine

² UAD Systems, 84, Alexandrovska St., Zaporizhzhya, UA-69002, Ukraine

e-mail: andko@zntu.edu.ua

In the one-electron approximation, the dimensional and frequency dependences of the real and imaginary parts of the surface conductivity of single-carbon nanotubes of zigzag and armchair configurations have been investigated. General formulas for the intraband and interband conductivity of the achiral nanotubes of the specified configurations have been obtained. A comparison of the results of the calculations of the surface conductivity of carbon nanotubes of different configurations and various chiralities has been carried out.

The features of dimensional dependencies of real and imaginary parts of surface conductivity are discussed. One of them is an increase in the number of the levels of dimensional quantization with an increase in the radius of achiral CNTs, and, consequently, the number of maxima of the real part of the interband and, respectively, of the total surface conductivity and their superimposition, one at a time when the incident radiation is approaching the inverse relaxation time. It has been found that the metallic properties of the CNTs of the armchair type are more pronounced than those of the zigzag type CNTs. This is due to the higher concentration of electrons in the conduction band for this type of nanotubes.

The results of numerical calculations indicate that the contribution of intraband conductivity to total surface conductivity is insignificant compared to the contribution of interband conductivity. It is established that the characteristic features of dimensional dependencies of surface conductivity of CNTs are determined by its type. An analogy is observed in the behavior of the maxima of the real part of the interband and of the total surface conductivity of zigzag type carbon nanotubes and of a continuous metal nanowire with increasing radius of CNTs. It is shown that, as in the case of metal low-dimensional systems, the imaginary part of the surface conductivity of the achiral CNT is alternating, while the real part is positive for any value of the frequency of the incident electromagnetic wave.