

剪切形变对硼氮掺杂碳纳米管超晶格电子结构和光学性能的影响

姜艳 刘贵立

Influences of shear deformation on electronic structure and optical properties of B, N doped carbon nanotube superlattices

Jiang Yan Liu Gui-Li

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 147304 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.147304

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.147304>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I14>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

α -碳锗炔稳定性及性质模拟

Molecular dynamics study on the stability and properties of α -Cgeyne

物理学报.2014, 63(20): 207303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.207303>

La Ce Nd 掺杂对单层 MoS₂ 电子结构的影响

Effects of La Ce and Nd doping on the electronic structure of monolayer MoS₂

物理学报.2014, 63(6): 067301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.067301>

Ag-ZnO 纳米复合热电材料的制备及其性能研究

Preparation and thermoelectric properties of Ag-ZnO nanocomposites synthesized by means of sol-gel

物理学报.2013, 62(9): 097301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.097301>

六角氮化硼片能带结构的应变调控

Modulation of the band structure of layered BN film with strain

物理学报.2013, 62(1): 017302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.017302>

Si 衬底上生长的 MnSi 薄膜和 MnSi_{1.7} 纳米线的 STM 和 XPS 分析

Scanning tunneling microscopy and X-ray photoelectron spectroscopy studies of MnSi film and MnSi_{1.7} nanowires grown on Si substrates

物理学报.2012, 61(22): 227301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.227301>

剪切形变对硼氮掺杂碳纳米管超晶格电子结构和光学性能的影响*

姜艳 刘贵立†

(沈阳工业大学建筑工程学院, 沈阳 110870)

(2014年12月31日收到; 2015年2月27日收到修改稿)

碳纳米管作为最先进的纳米材料之一, 在电子和光学器件领域有潜在的应用前景, 因此引起了广泛关注. 掺杂、变形及形成超晶格为调制纳米管电子、光学性质提供了有效途径. 为了理解相关机理, 利用第一性原理方法研究了不同剪切形变下扶手椅型硼氮交替环状掺杂碳纳米管超晶格的空间结构、电子结构和光学性质. 研究发现, 剪切形变会改变碳纳米管的几何结构, 当剪切形变大于12%后, 其几何结构有较大畸变. 结合能计算表明, 剪切形变改变了掺杂碳纳米管超晶格的稳定性, 剪切形变越大, 稳定性越低. 电荷布居分析表明, 硼氮掺杂碳纳米管超晶格中离子键和共价键共存. 能带和态密度分析发现硼氮交替环状掺杂使碳纳米管超晶格从金属转变为半导体. 随着剪切形变加剧, 纳米管超晶格能隙逐渐减小, 当剪切形变大于12%后, 碳纳米管又从半导体变为金属. 在光学性能中, 剪切形变的硼氮掺杂碳纳米管超晶格的光吸收系数及反射率峰值较未受剪切形变的均减小, 且均出现了红移.

关键词: 硼氮掺杂碳纳米管超晶格, 电子结构, 剪切形变, 光学性能

PACS: 73.22.-f, 62.25.-g, 78.67.-n

DOI: 10.7498/aps.64.147304

1 引言

自从碳纳米管发现以来, 其优越的物理化学性能引起了研究界的广泛关注, 特别是其在纳米电子器件领域中潜在的应用前景, 成为纳米电子学的研究热点之一, 如通过掺杂^[1-7]、形成缺陷^[8,9]、接枝^[10,11]、吸附^[12-14]、填充^[15-18]来研究碳纳米管性质的变化. 程承平等^[19]研究了单壁、双壁碳纳米管的扭转力学行为; 吴永东等^[20]与 Ghavamian 等^[21]分别利用能量方法和有限元法测量了单壁碳纳米管的剪切模量; Hilarius 等^[22]研究了剪切对含有多壁碳纳米管组合材料体系(MWNT)的影响. 韦建卫等^[23]发现单壁碳纳米管中进行硼氮共掺杂时, 硼氮原子更趋向于形成沿管轴方向的硼氮原子对; 白雪冬和王恩哥^[24]发现硼和氮共掺杂可使金属性单壁碳纳米管的能隙被打开从而转变为半导

体性纳米管. 而目前所获得的单壁碳纳米管多是金属型和半导体型的混合物, 实现单壁碳纳米管的金属型到半导体型的转换可有效解决纳米电子器件领域的研究困境. 首先, 掺杂会使扶手椅型单壁碳纳米管转变为半导体型单壁碳纳米管, 这方面的研究相对还较少; 此外对单壁碳纳米管进行剪切形变方面的研究主要集中在力学性能变化上, 对掺杂硼氮的碳纳米管超晶格施以剪切形变的电子结构和光学性能方面的研究鲜见报道. 本文尝试对(5, 5)型单壁碳纳米管进行硼氮交替环状掺杂, 形成碳纳米管超晶格, 从而使其能隙打开, 使体系由金属型转变为半导体型, 再通过不同程度的剪切变形研究碳纳米管超晶格的电子结构、光学性能、带隙变化及表现出的不同的半导体特性, 期望这些研究在纳米导电器件如场效应晶体管及发光器件等应用方面有指导作用.

* 国家自然科学基金(批准号: 51371049)和辽宁省自然科学基金(批准号: 20102173)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liuguili@sina.com

2 计算方法

本文应用MS6.0中CASTEP量子力学程序模块对不同剪切形变的氮硼掺杂碳纳米管超晶格进行优化模拟, CASTEP是基于密度泛函理论的平面波赝势方法^[25]. 交换关联函数采用广义梯度近似^[26]中的Perdew-Burke-Ernzerhof泛函. 在倒格子空间中, 平面波的截断能量设置为310 eV, 采用超软赝势^[27], *K*点网格设置为 $1 \times 1 \times 10$ Monkhorst-Pack形式的高对称特殊布里渊区的积分, 迭代精度收敛值为每个原子的总能量小于 1.0×10^{-6} eV/atom, 所有原子力小于0.001 eV/nm.

首先对模型进行几何优化, 再计算模型相应的电子结构和光学性能.

3 计算结果讨论

3.1 结构优化及其稳定性

图1为分别施加0%, 3%, 6%, 9%, 12%, 15%剪切形变的硼氮掺杂的碳纳米管超晶格优化几何结构, 发现当剪切形变小于9%时硼氮掺杂的碳纳米管超晶格几何结构未发生明显畸变, 仍是类似管状结构; 而当剪切形变大于12%后体系几何结构发生了较大畸变.

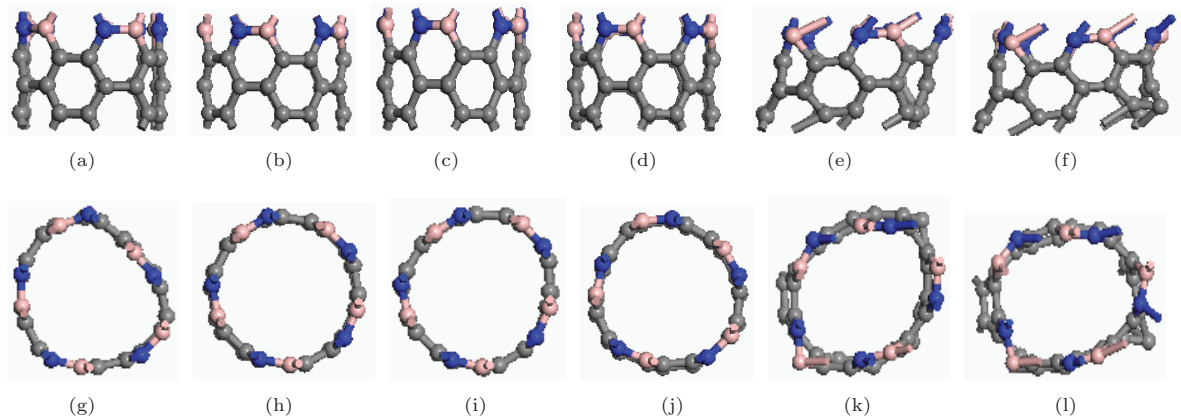


图1 (网刊彩色) 硼氮交替环状掺杂的碳纳米管超晶格优化几何结构 (a)–(f) 为侧视图; (g)–(l) 为俯视图; 它们的剪切形变分别为0%, 3%, 6%, 9%, 12%, 15%

Fig. 1. (color online) Geometry optimization structures of B and N-doped carbon nanotube super lattices: (a)–(f) for the side view; (g)–(l) for the top view; their shear deformations are 0%, 3%, 6%, 9%, 12%, 15%.

为研究受剪切形变的硼氮掺杂的碳纳米管超晶格的结构稳定性, 分别计算了不同剪切形变的体系的结合能. 纳米管结合能由下式定义

$$E_{\text{bind}} = E_{\text{stru}} - E_{\text{atom}}, \quad (1)$$

式中, E_{bind} 为纳米管结合能, E_{stru} 为纳米管总能量, E_{atom} 为组成纳米管各原子分立时的能量总和. 从能量角度看, 原子结合成晶体时, 晶体的总能量应当比原子在自由状态下的总能量低, 晶体才稳定.

按(1)式晶体的总能量与自由原子的总能量之差为晶体结合能, 显然结合能越低, 结构的稳定性越高.

表1所列不同剪切形变的硼氮掺杂碳纳米管超晶格的结合能, 可见各体系的结合能均为负值且数值不等, 即体系受剪切形变后硼氮掺杂碳纳米管超晶格的稳定性发生了改变, 稳定性随着剪切形变增大而逐渐降低. 稳定性由高到低为剪切形变3%, 6%, 9%, 12%, 15%的硼氮碳掺杂纳米管超晶格.

表1 不同剪切形变硼氮掺杂碳纳米管超晶格结合能

Table 1. Binding energy of B and N doped nanotubes superlattice in different shear deformation.

剪切形变量	3%	6%	9%	12%	15%
$E_{\text{bind}}/\text{eV}$	-325.6800	-318.1342	-318.1334	-303.1405	-302.4196

3.2 硼氮掺杂碳纳米管超晶格电子结构

3.2.1 电荷布居数

为分析原子间结合的成键类型及成键的强弱,表2给出了体系的电荷布居数.

表2 不同剪切形变硼氮掺杂碳纳米管超晶格电荷布居数
Table 2. Charge population of B and N-doped nanotube superlattices in different shear deformation.

剪切形变	0%	3%	6%	9%	12%	15%	
B原子	最大值	0.69	0.72	0.73	0.74	0.82	0.82
	最小值	0.68	0.72	0.70	0.70	0.64	0.49
C原子	最大值	0.15	0.16	0.16	0.16	0.16	0.17
	最小值	-0.26	-0.28	-0.28	-0.28	-0.29	-0.22
N原子	最大值	-0.42	-0.45	-0.44	-0.43	-0.41	-0.43
	最小值	-0.43	-0.45	-0.46	-0.46	-0.57	-0.51

本征碳纳米管中碳原子不带电荷. 对由硼氮交替环状掺杂形成的碳纳米管超晶格施加剪切形变后, N原子得到电子而带0.41—0.57的负电荷, B原

子失去电子带0.49—0.82的正电荷, C原子所带电荷既有正电荷又有负电荷, 即电子从B原子转移至C原子, 从C原子转移至N原子. 原子的核外电子排布分别为 $B1s^2 2s^2 2p^1$, $C1s^2 2s^2 2p^2$, $N1s^2 2s^2 2p^3$, 即原子为达到稳定的满壳层结构, B原子易失电子, N原子易得电子, 而C原子既可失电子又可得电子. 本征(5, 5)碳纳米管体系中只有碳原子之间的共价键, 而硼氮交替环状掺杂增加了碳纳米管各个原子间的电子转移, 使得体系中碳原子与掺杂原子间形成了离子键, 即硼氮掺杂碳纳米管超晶格中有共价键、离子键共存. 且受剪切形变后, 随着剪切程度的加剧电荷转移的范围逐步扩大, 进一步提升了电子转移, 这与前文计算的稳定性由剪切程度加大而降低的结论相一致.

3.2.2 不同长径比对氮硼掺杂扶手椅型硼氮碳纳米管超晶格带隙大小的影响

如图2(a)所示, 本征(5, 5)碳纳米管能隙为零, 属于金属型碳纳米管. 对(5, 5)碳纳米管进行硼氮交替环状掺杂形成硼氮碳纳米管超晶格, 使能隙被

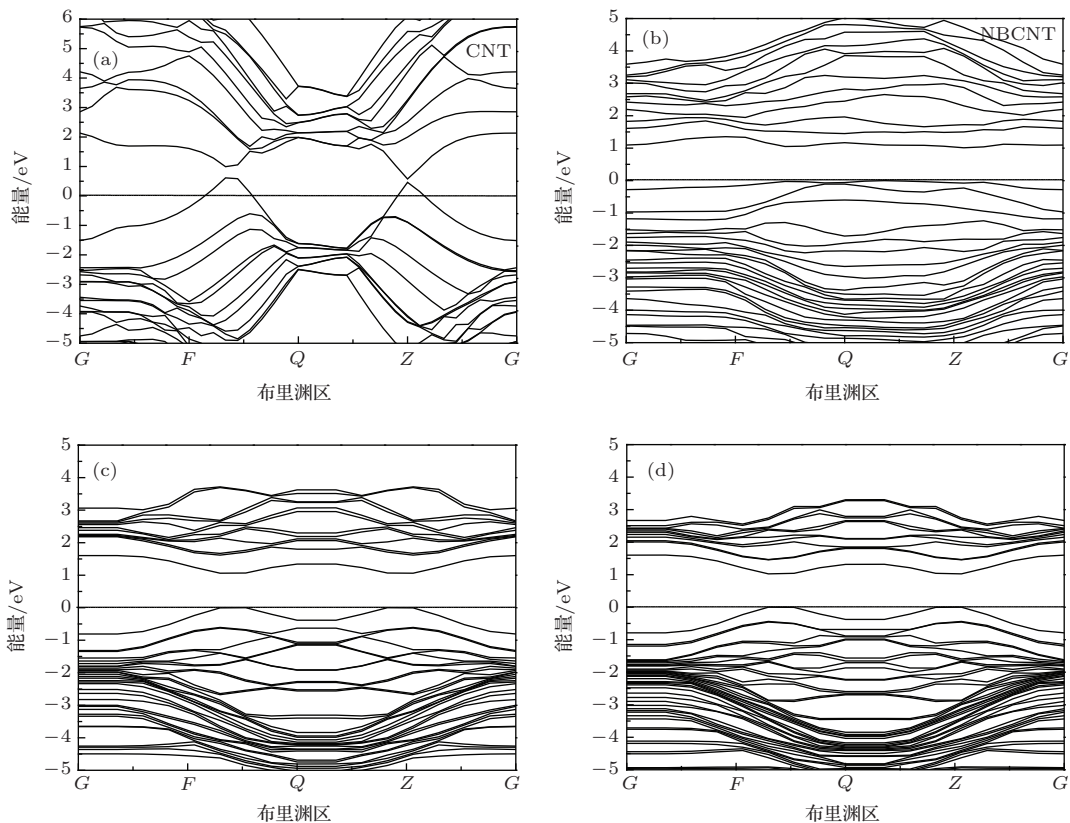


图2 碳纳米管超晶格的能带结构 (a) (5, 5) 本征碳纳米管超晶格; (b)—(d) (5, 5), (7, 7) 和 (9, 9) 硼氮交替环状掺杂碳纳米管超晶格

Fig. 2. Energy band structure of nanotube superlattice: (a) (5, 5) intrinsic nanotubes superlattice; (b)—(d) (5, 5), (7, 7), (9, 9) nanotube superlattices doped cyclic alternately with B and N.

打开, 增大为0.987 eV. 为进一步研究此掺杂方式的碳纳米管超晶格能隙的相关影响因素, 分别讨论了不同长径比和不同剪切程度对碳纳米管超晶格的能隙大小的影响. 本文分别计算了(5, 5), (7, 7), (9, 9)三种不同长径比的硼氮掺杂碳纳米管超晶格的能带结构, 见图2(b)—图2(d), 发现无论长径比是否相同, 只要通过硼氮交替环状掺杂, 均可使扶手椅型碳纳米管由金属型转变为半导体型, 超晶格的掺杂方式打破了本征碳纳米管的原始对称性, 使能隙打开. (5, 5), (7, 7), (9, 9)三种不同长径比的硼氮掺杂碳纳米管超晶格能隙值分别为0.987, 1.060, 1.025 eV, 可见长径比较小的(7, 7), (9, 9)较(5, 5)硼氮掺杂碳纳米管超晶格带隙均增大. (7, 7)硼氮掺杂碳纳米管超晶格能隙值最大为1.060 eV,

表现出良好的半导体性. 相比于本征(5, 5)碳纳米管, 硼氮掺杂碳纳米管超晶格能带图中的价带处能级变密集, 能带宽度变窄, 即能带图中起伏越小, 说明能带上的电子局域性越强, 有效质量越大, 与上文提到的原子间出现较多电子转移相一致.

3.2.3 不同剪切形变对(5, 5)硼氮掺杂碳纳米管超晶格能隙及费米能级处态密度大小的影响

能带论中每个电子的运动都可认为是单电子近似, 由于周期场的微扰, E 函数将在布里渊区边界处出现不连续, 能量的突变为能隙. 通过能带结构也能反映出体系的相关物理性质. 本文分别计算了受不同剪切形变硼氮掺杂碳纳米管超晶格的能带结构和态密度见图3和图4.

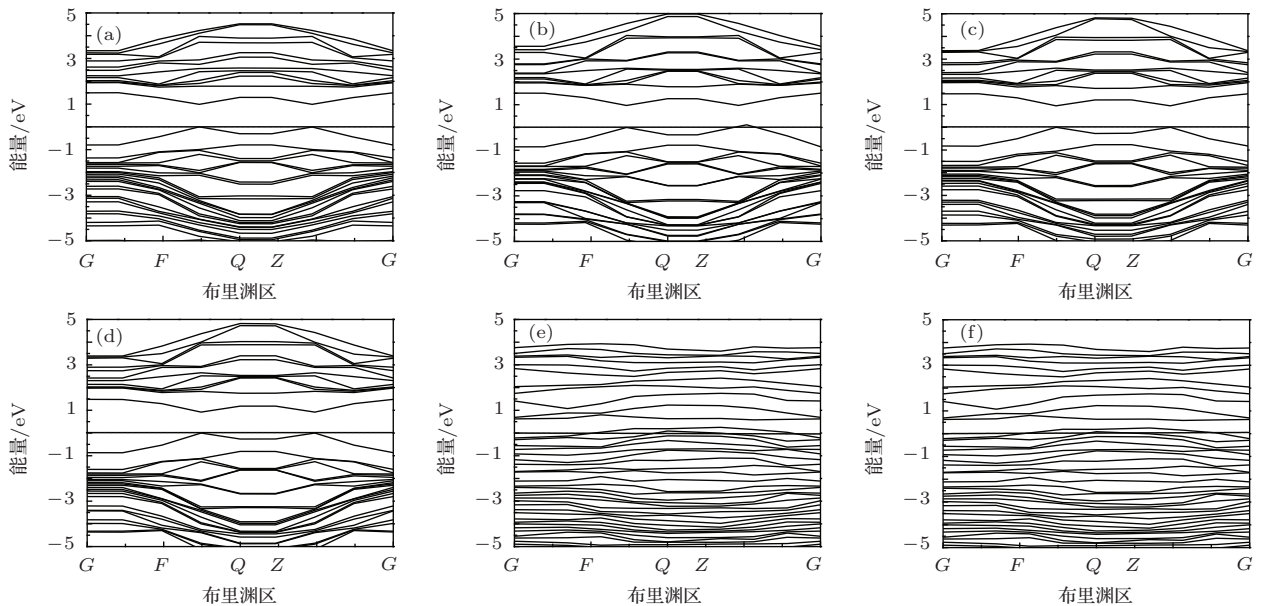


图3 (a)—(f) 剪切形变分别为0%, 3%, 6%, 9%, 12%, 15%的碳纳米管超晶格能带结构

Fig. 3. (a)–(f) Energy band structure of B and N doped carbon nanotube superlattice with 0%, 3%, 6%, 9%, 12%, 15% shear deformation.

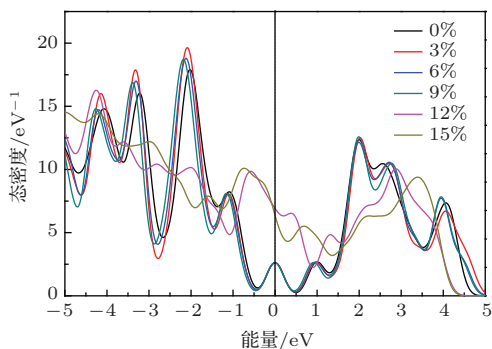


图4 (网刊彩色) 碳纳米管超晶格局部态密度

Fig. 4. (color online) Enlarged view of the density of states of the carbon nanotubes superlattice.

为清楚起见, 将带隙值和费米能级处态密度大小列于表3, 带隙值随剪切形变的变化见图5.

表3 不同剪切形变硼氮掺杂碳纳米管超晶格的能隙及费米能级处的态密度值

Table 3. The band gaps and the density of states of the B and N doped carbon nanotubes superlattice with shear different deformation.

剪切形变	0%	3%	6%	9%	12%	15%
能隙/eV	0.987	0.966	0.944	0.919	0	0
态密度/eV ⁻¹	2.083	2.083	2.083	2.083	5.566	5.072

从表3和图5可以看出, 硼氮掺杂碳纳米管的超晶格受到剪切形变后, 体系能隙均减小, 且剪切程度大于12%时, 能隙变为零, 又由半导体型转变为导体型. 而剪切形变在0%—9% 范围内, 能隙随着剪切形变的加剧而减小.

图4为经过不同剪切形变的硼氮掺杂碳纳米管超晶格的局部态密度, 在费米能级 E_F 处出现了杂质能带. 这是由于硼、氮原子得失电子, 形成施主和受主能级, 其共同作用而形成杂质能带. 剪切形变量不同, 费米能级附近的电子态密度值大小有所差别, 剪切形变0%—9%时, E_F 处的态密度值差别几乎为零, 而剪切形变为12%, 15%时费米能级处的态密度值明显升高(见表3, 态密度值由2.083增至5.566), 杂质能带变宽, 几乎充满整个带隙, 这将允许更多的电子迁移至导带, 从而提高了硼氮掺杂碳纳米管超晶格的导电能力, 使其表现出导体特性, 这与能带结构计算中的12%, 15%时能隙值为零相一致.

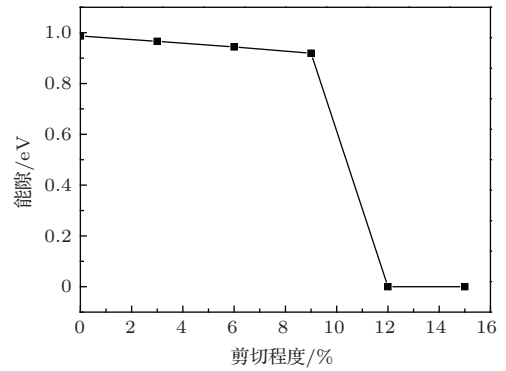


图5 能隙随剪切形变变化

Fig. 5. Band gap changes with shear deformation.

3.3 剪切对硼氮掺杂碳纳米管超晶格光学性能的影响

为研究不同剪切形变的硼氮掺杂碳纳米管超晶格的光学性能, 本文计算了体系的吸收系数和反射率. 图6为硼氮掺杂碳纳米管超晶格受不同剪切形变的氮硼碳纳米管的吸收系数和反射率.

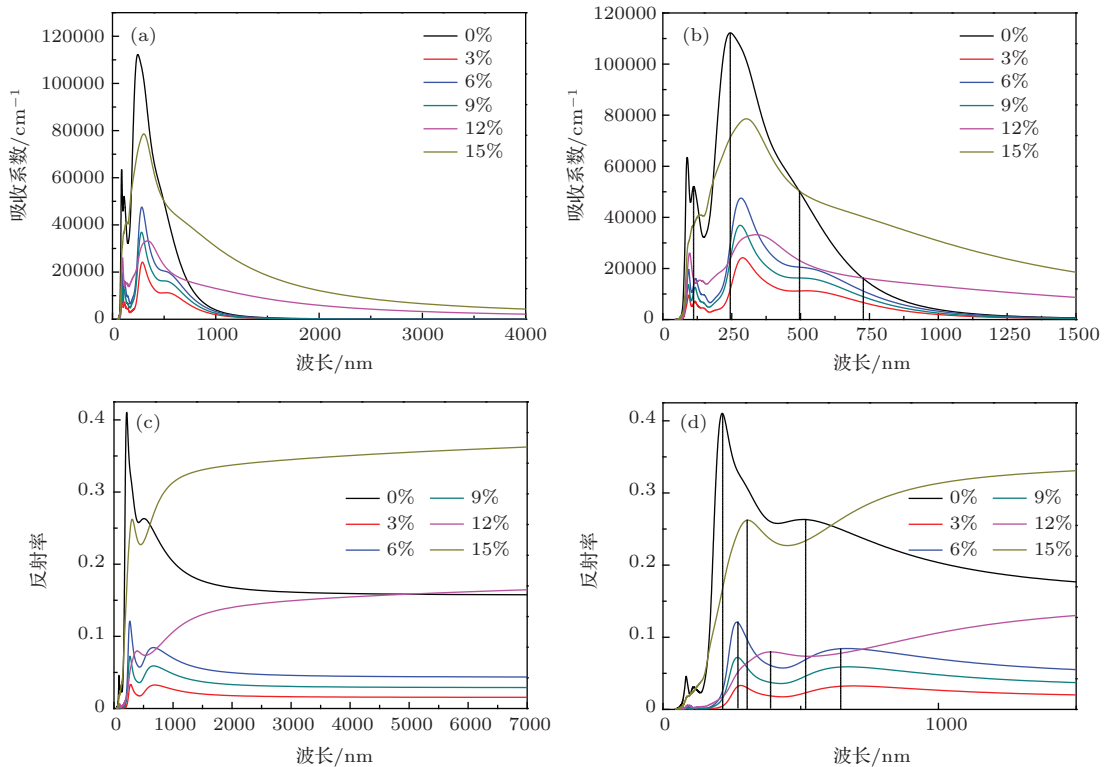


图6 (网刊彩色) 硼氮碳纳米管超晶格受不同剪切形变的光吸收系数和反射率 (b), (d) 为(a), (c) 的局部放大图
Fig. 6. (color online) Light absorption coefficient and reflectivity of B and N-doped carbon nanotube superlattice with 0%, 3%, 6%, 9%, 12%, 15% shear deformation, (b), (d) the enlarged view of (a), (c).

由图6(a)和图6(b)的吸收系数对比可知, 当波长小于50 nm时, 所有纳米管超晶格体系均对光无吸收; 波长大于1250 nm时, 剪切形变为3%,

6%, 9%的体系对光无吸收, 波长在50—1250 nm范围剪切形变为3%, 6%, 9%的体系整体的光吸收系数值相近, 但都小于未受剪切的硼氮掺杂碳纳

米管超晶格. 剪切形变为0%的碳纳米管超晶格, 在波长为244.83 nm处有最大吸收峰, 特征峰值为 112114.58 cm^{-1} ; 波长为496.24 nm时, 剪切形变为0%与15%的硼氮掺杂碳纳米管超晶格光吸收系数相交数值为 50278.01 cm^{-1} (见图中虚线位置), 波长变长时, 后者吸收系数明显高于前者. 而当波长大于730.09 nm时, 剪切形变为12%的硼氮掺杂碳纳米管超晶格的光吸收系数(730.09 nm时, 值为 16208.93 cm^{-1})大于0%的. 波长在50—150 nm、240—500 nm阶段剪切作用使体系光吸收峰出现红移. 图6(c)和图6(d)为光反射率图, 在波长为0—30 nm时, 硼氮掺杂碳纳米管超晶格对光没有任何反射. 波长大于550 nm、剪切形变为15%的硼氮掺杂碳纳米管超晶格反射率最大. 通过对比发现, 受到剪切形变较未受剪切形变的硼氮掺杂碳纳米管超晶格反射峰高度值均减小, 反射峰均出现红移.

4 结 论

应用第一原理方法对硼氮交替环状掺杂而形成的碳纳米管超晶格进行了相关计算, 分析了体系的结合能、电荷转移、能隙和费米能级处态密度与稳定性、键合性质及体系金属型与半导体型的转变关系, 分析了光吸收系数和反射率与形变的关系, 得出了不同长径比、掺杂和剪切形变对体系的电子结构和光学性质的影响. 研究发现, 剪切形变会改变碳纳米管的几何结构, 当剪切形变大于12%后, 其几何结构有较大畸变; 剪切形变改变了掺杂碳纳米管超晶格的稳定性, 剪切形变越大, 稳定性越低; 硼氮掺杂碳纳米管超晶格中离子键和共价键共存; 硼氮交替环状掺杂使碳纳米管超晶格从金属转变为半导体; 不同剪切形变能使扶手椅型碳纳米管在金属型与半导体型之间相互转变; 不同长径比体系中, (7, 7) 硼氮掺杂碳纳米管超晶格能隙值最大(1.060 eV), 是较为理想的半导体型碳纳米管; 受剪切形变的体系吸收系数和反射率峰值较未受形变的硼氮掺杂碳纳米管超晶格均减弱, 且均出现红移现象.

参考文献

- [1] Wei Y, Hu H F, Wang Z Y, Cheng C P, Chen N T, Xie N 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 027307 (in Chinese) [魏燕, 胡慧芳, 王志勇, 程彩萍, 陈南庭, 谢能 2011 物理学报 **60** 027307]
- [2] Jin L, Fu H G, Xie Y, Yu H T 2012 *Chin. Phys. B* **21** 057901
- [3] Kalbac M, Kavan L, Dunsch L, Dresselhaus M S 2008 *Nano Lett.* **8** 1257
- [4] Yin L C, Saito R, Dresselhaus M S 2010 *Nano Lett.* **10** 3290
- [5] Taheri S, Shadman M, Soltanabadi A, Ahadi Z 2014 *Int. Nano Lett.* **4** 81
- [6] Nawazish A K, Sadaf A 2012 *J. Alloys Compd.* **538** 183
- [7] Zhang L, Cao X W, Feng M, Wang Y F 2008 *J. Light Scatt.* **20** 295 (in Chinese) [张磊, 曹学伟, 冯敏, 王玉芳 2008 光散射学报 **20** 295]
- [8] Li R, Sun D H 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 056101 (in Chinese) [李瑞, 孙丹海 2014 物理学报 **63** 056101]
- [9] Wu H L, Qiu J S, Hao C, Tang Z A 2006 *J. Dalian Univ. Tech.* **46** 328 (in Chinese) [吴红丽, 邱介山, 郝策, 唐祯安 2006 大连理工大学学报 **46** 328]
- [10] Zhang H, Chen X H, Zhang Z H, Qiu M 2006 *Acta Phys. Chim. Sin.* **22** 1101 (in Chinese) [张华, 陈小华, 张振华, 邱明 2006 物理化学学报 **22** 1101]
- [11] Yuan J H, Cheng Y M 2007 *Acta Phys. Chim. Sin.* **23** 889 (in Chinese) [袁剑辉, 程玉民 2007 物理化学学报 **23** 889]
- [12] Zhang L J, Hu H F, Wang Z Y, Wei Y, Jia J F 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 527 (in Chinese) [张丽娟, 胡慧芳, 王志勇, 魏燕, 贾金凤 2010 物理学报 **59** 527]
- [13] Niu W X, Zhang H, Gong M, Cheng X L 2013 *Chin. Phys. B* **22** 066802
- [14] Barghi S H, Tsotsis T T, Sahimi M 2014 *Int. J. Hydrogen Energy* **39** 21107
- [15] Zheng Q S, Xu Z P, Wang L F 2004 *Adv. Mech.* **34** 97 (in Chinese) [郑泉水, 徐志平, 王立峰 2004 力学进展 **34** 97]
- [16] Sagara T, Kurumi S, Suzuki K 2014 *Appl. Surf. Sci.* **292** 39
- [17] Cui S W, Zhu R Z, Wang X S, Yang H X 2014 *Chin. Phys. B* **23** 106105
- [18] Shamsudin M S, Mohammad M, Zobir S A M, Asli N A, Bakar S A, Abdullah S, Yahya S Y S, Mahmood M R 2013 *J. Nanostruct. Chem.* **3** 13
- [19] Cheng C P, Chen G H, Li W H, Luo C L 2012 *J. Nanjing Norm. Univ. (Natural Science Edition)* **35** 30 (in Chinese) [程承平, 陈贵虎, 李伟红, 罗成林 2012 南京师大学报(自然科学版) **35** 30]
- [20] Wu Y D, Zhang X C, Zhong W F, Liang Y D 2006 *J. Huazhong Univ. Sci. Tech. (Nature Science Edition)* **34** 110 (in Chinese) [吴永东, 张小春, 钟伟芳, 梁以德 2006 华中科技大学学报(自然科学版) **34** 110]
- [21] Ghavamian A, Rahmandoust M, Öchsner A 2013 *Composites Part B* **44** 52
- [22] Hilarius K, Lellinger D, Alig I, Villmow T, Pegel S, Pötschke P 2013 *Polymer* **54** 5865
- [23] Wei J W, Pu L C, Hu N, Hu H F, Zeng H, Liang J W 2011 *J. Chongqing Univ. Tech. (Natural Science)* **35** 94 (in Chinese) [韦建卫, 蒲利春, 胡南, 胡慧芳, 曾晖, 梁君武 2011 重庆理工大学学报(自然科学) **35** 94]

- [24] Bai X D, Wang E G 2009 *Chin. Basic Sci.* **11** 28 (in Chinese) [白雪冬, 王恩哥 2009 中国基础科学 **11** 28]
- [25] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, Pickard C J, Hasnip P J, Clark S J, Payne M C 2002 *J. Phys. Condens. Matter* **14** 2717
- [26] Marlo M, Milman V 2000 *Phys. Rev. B* **62** 2899
- [27] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892

Influences of shear deformation on electronic structure and optical properties of B, N doped carbon nanotube superlattices*

Jiang Yan Liu Gui-Li[†]

(College of Constructional Engineering, Shenyang University of Technology, Shenyang 110870, China)

(Received 31 December 2014; revised manuscript received 27 February 2015)

Abstract

Carbon nanotubes, one of the most advanced nanoscale materials, have attracted much research attention since they exhibited semiconductor, metal or insulator properties depending on their geometric structures. Carbon nanotubes have great potential in various applications in electronic and optical device. Dopants to the carbon nanotubes intentionally could offer a possible route to change and tune their electronic, optical properties. Another important and effective method is to deform the carbon nanotubes structure. Superlattice structures can offer extra degrees of freedom in designing electronic, optical devices. To understand the involved mechanism, in this paper, the geometry structures, electronic structures and optical properties of the armchair carbon nanotube superlattices doped cyclic alternately with B and N under different shear deformations are investigated by the first-principles method through using the CASTEP code in MS 6.0. It is found that the structures of carbon nanotube superlattices can be dramatically changed by shear deformation. When the shear deformation is less than 9%, the optimization geometry structures of carbon nanotube superlattices are still similar to tubular structures, when the shear deformation is greater than 12%, the geometry structures of these systems have large distortions. The results about the binding energy show that the shear deformation changes the stability of the armchair doped carbon nanotube superlattice. The larger the shear deformation, the lower the stability of the doped carbon nanotube superlattices is. The analysis of charge population show that the covalent bond and ionic bond coexist in the armchair carbon nanotube superlattices doped cyclically alternately with B and N. The band gap of the carbon nanotube superlattice is affected by N, B dopants, as a result, the carbon nanotube superlattice changes from a metal to a semiconductor. Compared with the (5, 5) nanotube superlattices, the band gaps of the (7, 7), (9, 9) doped carbon nanotube superlattices increase. With increasing the shear deformation, the band gap of the doped carbon nanotube superlattices decreases gradually, when the shear deformation is greater than 12%, the band gap changes into 0 eV, the carbon nanotube superlattice changes back into a metal from a semiconductor. The analysis of density of states obtains the same conclusions as the energy band analysis. In optical properties, compared with the armchair carbon nanotube superlattices doped cyclically alternately with B and N without shear deformation, those systems under shear deformation have the peaks of the absorption coefficient and the reflectivity that are all reduced, and are all red-shifted.

Keywords: B and N-doped carbon nanotubes superlattices, electronic structure, shear deformation, optical properties

PACS: 73.22.-f, 62.25.-g, 78.67.-n

DOI: 10.7498/aps.64.147304

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51371049) and the Natural Science Foundation of Liaoning Province, China (Grant No. 20102173).

[†] Corresponding author. E-mail: liuguili@sina.com