

УДК 621.383.4/5
EDN: QGQBYPPACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz,
07.57.Kp, 85.60.Dw**Сравнительный анализ рефрактивных и спектральных свойств
границы раздела бромида калия с бор-нитридными нанотрубками**© П. В. Кужаков^{1,2}, Н. В. Каманина^{1,2,3,*}¹ АО «Научно-производственное объединение Государственный оптический институт
им. С. И. Вавилова», Санкт-Петербург, 192171 Россия

* E-mail: nvkamanina@mail.ru

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, 188300 Россия³ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»,
Санкт-Петербург, 197022 РоссияСтатья поступила в редакцию 16.04.2024; после доработки 31.05.2024; принята к публикации 20.02.2026
Шифр научной специальности: 2.2.6, 2.2.7

Проведен анализ рефрактивных и спектральных свойств границы раздела бромида калия с бор-нитридными нанотрубками. Выполнены расчеты дисперсионных зависимостей показателя преломления бор – нитридных нанотрубок с разной хиральностью, а также дисперсионных зависимостей коэффициента отражения на границе раздела KBr-BNNT с разной хиральностью. Выявлен наиболее оптимальный тип хиральности бор-нитридной нанотрубки во всем исследованном спектральном диапазоне.

Ключевые слова: спектральный диапазон, показатель преломления, граница раздела, спектры отражения.

DOI: 10.51368/1996-0948-2026-1-66-71

Введение

В последние годы нанотрубки нитрида бора (BNNT) привлекли внимание исследователей из-за их существенной щели полупроводникового характера [1] и высокой структурной стабильности, которые делают этот материал пригодным для применения в фотoluminesцентных устройствах [2]. Электронные и структурные свойства BNNT были теоретически подробно исследованы. Зависимость ширины запрещенной зоны BNNT была изучена как функция внутреннего диаметра и хиральности нанотрубки [3]. Сильное уменьшение щели наблюдалось для диаметров нанотрубок менее примерно 1,3 нм. Расчеты минимальной энергии решетки, проведенные Эрнандесом и др., показывают, что наиболее благоприятной хиральностью для BNNT явля-

ется зигзаг [4]. Они также предсказали модуль Юнга около 300 ГПа как для зигзагообразных, так и для кресельных нанотрубок и некоторую степень изгиба перпендикулярно оси нанотрубки. Экспериментальных работ, выполненных с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) – много [5–14], гораздо меньше статей об электронных и оптических свойствах образцов BNNT. Это, например, ИК-ответ колебаний BN в BNNT, который может быть использован для характеристики образцов нанотрубок. BNNT были впервые получены методами дугового разряда и лазерной абляции. Большинство произведенных BNNT имеют зигзагообразную геометрию.

В наше время наблюдается большой интерес к нанотрубкам из нитрида бора за их электронные [15–17], тепловые [18–21] и ме-

ханические свойства [22, 23], которые во многих случаях отличаются или превосходят аналогичные параметры углеродных нанотрубок. Анализ инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье проводят с использованием анализатора инфракрасного спектра в диапазоне волновых чисел $4000\text{--}500\text{ см}^{-1}$, относительно к матрице кристалла KBr. Как показано на рис. 1а,б, при схожести кривых поглощения в BNNT наблюдаются характерные пики при 1380 см^{-1} и 800 см^{-1} , обусловленные колебаниями B–N связи, параллельными и перпендикулярными оси нанотрубки, соответственно [24]. Оба пика демонстрируют сильный ИК-ответ, что наблюдается в ИК-отражательной способности.

Спектр, представленный на рис. 1в, показывает сильные колебания при 1375 и 793 см^{-1} , которые являются характерными первичными и вторичными полосами поглощения BNNT, соответственно. Полоса погло-

щения при 1375 см^{-1} связана с хорошо известной плоскостной колебательной модой (E_{2g}) BNNT, тогда как слабые полосы поглощения при 793 см^{-1} соответствуют внеплоскостной вибрации [25]. И профиль спектра, и полосы поглощения аналогичны тем, которые сообщаются для BNNT, что дополнительно подтверждает, что необработанные продукты являются BNNT.

Спектры поглощения BNNT (рис. 1г), демонстрируют острый пик поглощения при 204 нм . Свойство поглощения света и ширина запрещенной зоны BNNT были исследованы с помощью спектроскопии, работающей в режиме отражения, как показано на рисунке 1д. Спектры отражения в УФ-видимом диапазоне демонстрирует две полосы поглощения при $266,4\text{ нм}$ ($4,65\text{ эВ}$) и $214,3\text{ нм}$ ($5,79\text{ эВ}$), соответствующие экситонному поглощению и оптическому поглощению на краю полосы BNNT [25].

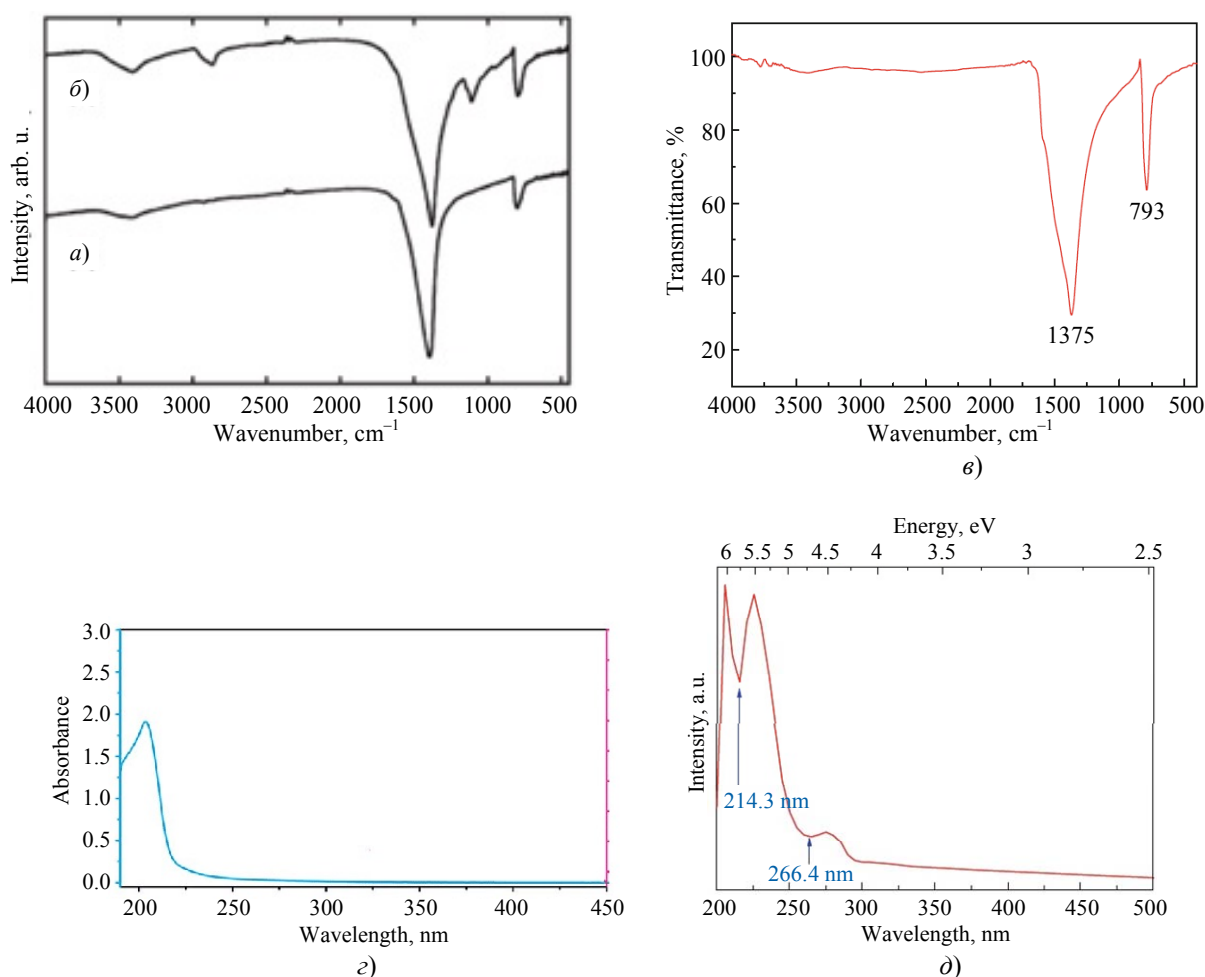


Рис. 1. Инфракрасные Фурье-спектры пропускания исходных (а) и восстановленных (б) бор-нитридных образцов в матрице KBr [26], (в) спектр пропускания BNNT (г) спектры поглощения в УФ-видимом диапазоне BNNT, (д) спектры отражения в УФ-видимом диапазоне BNNT [25]

Модели показателя преломления

Дисперсионная зависимость показателя преломления KBr хорошо известна и аппроксимируется следующим образом [27]:

$$n^2 = 1,39408 + \frac{0,79221\lambda^2}{\lambda^2 - (0,146)^2} + \frac{0,01981\lambda^2}{\lambda^2 - (0,173)^2} + \frac{0,15587\lambda^2}{\lambda^2 - (0,187)^2} + \frac{0,17673\lambda^2}{\lambda^2 - (60,61)^2} + \frac{2,06217}{\lambda^2 - (87,72)^2} \quad (1)$$

Здесь λ – длина волны, выраженная в мкм.

Используя вычислительный метод, представленный в работах [27–29], в настоящей работе выполнены следующие расчеты.

Показано (рис. 2), что показатель преломления нанотрубок на основе нитрида бора зависит от хиральности (кресельные, зигзагообразные, хиральные).

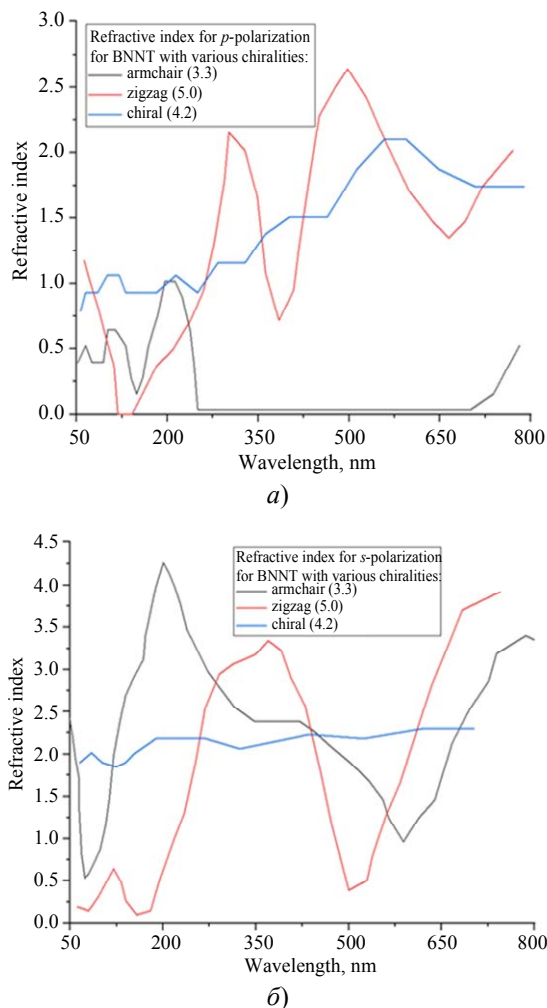


Рис. 2. Дисперсионные зависимости показателя преломления BNNT с разной хиральностью для р-поляризованного (а) и s-поляризованного (б) излучения в спектральном диапазоне 50–800 нм

Полученные рефрактивные свойства BNNT с разными видами хиральности не противоречат данным публикаций [30–34], где также были изучены оптические свойства таких структур.

Модели спектра отражения

Продолжая изучение спектральных параметров BNNT, нами также были рассчитаны потери на отражение на границе раздела KBr-BNNT (рис. 3), используя формулу Френеля (2) для нормального падения:

$$R(\lambda) = \left(\frac{n_{\text{KBr}}(\lambda) - n_{\text{BNNT}}(\lambda)}{n_{\text{KBr}}(\lambda) + n_{\text{BNNT}}(\lambda)} \right)^2 \quad (2)$$

Здесь n_{KBr} и n_{BNNT} – показатели преломления для KBr (см. выражение 1) и BNNT (из данных рис. 2), которые зависят от длины волны λ .

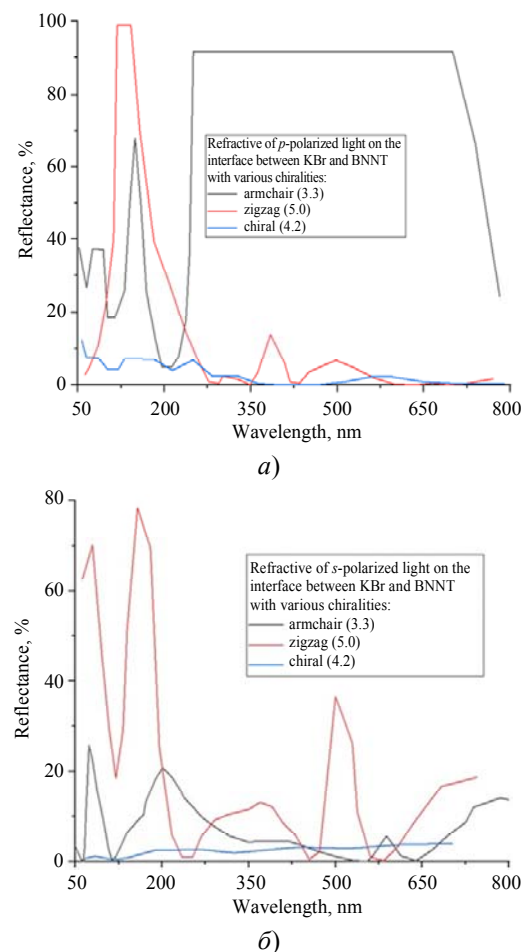


Рис. 3. Дисперсионные зависимости коэффициента отражения на границе раздела KBr-BNNT с разной хиральностью для р-поляризованного (а) и s-поляризованного (б) излучения в спектральном диапазоне 50–800 нм

Заметим, что при выборе хиральности нанотрубок были выбраны BNNT с хиральностью (4,2), аналогично [35]. Исходя из анализа публикаций [36–40] различных типов BNNT, данный тип нанотрубок обладает более оптимальной атомной конфигурацией.

Заключение

Из проведенных расчетов для дисперсионных зависимостей показателя преломления BNNT с разной хиральностью, а также из оценки дисперсионных зависимостей коэффициента отражения на границе раздела KBr-BNNT с разной хиральностью, установлено, что наиболее стабильными свойствами во всем исследованном спектральном диапазоне (от рентген до ближнего инфракрасного диапазона) являются бор – нитридные нанотрубки с хиральностью (4,2).

Показано, что для дальнейших расчетов энергий химических связей и оптимизации структур предпочтительнее использовать бор – нитридные нанотрубки с хиральностью (4,2), спектры отражения которых не более, чем на 10 % отличаются от расчетных и предсказуемы в обеих поляризациях в спектральном диапазоне от 50 до 800 нм.

Изученный наноструктурированный материал можно будет использовать в качестве нового конструкционного материала для спектроскопии например, при оптимизации поляризации плоскопараллельных пластин бромида калия в рентгеновских установках. Здесь приоритетом может стать невысокое отражение для выделенного спектрального диапазона. Проведенное исследование будет полезно в обучающем процессе при исследовании свойств наноструктурных композитов, функционирующих не только в видимом, но и в ИК-области спектра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Блейз Х., Рубио А., Луи С. Г., Коэн М. Л. / *Europhys. Lett.* 1994. Vol. 28. P. 335.
2. Bai X. D., Wang E. G., Yu J. / *Appl. Phys. Lett.* 2000. Vol. 77. P. 67.
3. Рубио А., Коркилл Дж. Л., Коэн М. Л. / *Phys. Rev. B.* 1994. Vol. 49. P. 5081.
4. Эрнандес Э., Гоце К., Бернье П., Рубио А. / *Phys. Lett.* 1998. Vol. 80. P. 4502.
5. Чонра Н. Г., Луйкен Р. Дж., Чеппи К., Крепни В. Х., Коэн М., Луи С. Г., Земтл А. / *Science.* 1995. Vol. 269. P. 966.
6. Loiseau A., Willaime F., Demoncy N., Hug G., Pascard H. / *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 76. P. 4737.
7. Terrones M., Hsu W., Terrones H., Zhang J., Ramos S., Hare J., Castollo R., Prassides K., Cheetham A., Kroto H., Walton D. / *Chem. Phys. Lett.* 1996. Vol. 259. P. 568.
8. Chen Y., Fitz Gerald J., Williams J., Bulcock S. / *Chem. Phys. Lett.* 1999. Vol. 299. P. 260.
9. Лу П., Гавилле Дж., Лами М., Шанель Д., Луазо А. / *Phys. Ред. Б.* 2001. Vol. 64. P. 121405.
10. Ма Р., Бандо Й., Камо Т. / *Письма по химии и физике.* 2001. Т. 337. С. 61.
11. Гольберг Д., Бандо Ю., Курашима К., Камо Т. / *Chem. Phys. Lett.* 2000. Т. 323. P. 185.
12. Гольберг Д., Бандо Ю., Буржуа Л., Курашима К., Камо Т. / *Carbon.* 2000. Т. 38. P. 2017.
13. Han W., Bando Y., Kurashima K., Sato T. / *Chem. Phys. Lett.* 1999. Vol. 299. P. 368.
14. Han W., Bando Y., Kurashima K., Sato T. / *Appl. Phys. Lett.* 1998. Vol. 73. P. 3085.
15. Rubio A., Corkill J., Cohen M. / *Phys. Rev. B.: Condens. Matter.* 1994. Vol. 49. P. 5081.
16. Radosavljevi M., Appenzeller J., Derycke V., Martel R., Avouris Ph., Loiseau A., Cochon J.-L., Pigache D. / *Appl. Phys. Lett.* 2003. Vol. 82. P. 4131.
17. Cumings J., Zettl A. / *Solid State Commun.* 2004. Vol. 129. P. 661.
18. Han W., Mickelson W., Cumings J., Zettl A. / *Appl. Phys. Lett.* 2002. Vol. 81. P. 1110.
19. Tang C., Bando Y. / *Appl. Phys. Lett.* 2003. Vol. 83. P. 659.
20. Xiao Y., Yan X., Xiang J., Mao Y., Zhang Y., Cao J., Ding J. / *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol. 84. P. 4626.
21. Chopra N., Zettl A. / *Solid State Commun.* 1998. Vol. 105. P. 297.
22. Bettinger H., Dumitrica T., Scuseria G., Yakobson B. / *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* 2002. Vol. 65. P. 41406.
23. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes.* Academic Press. – New York, 1996.
24. Jacoby M. *Chem. Eng. News.* 2004. Vol. 82 (35). P. 34.
25. Zhong B., Huang X., Wen G., Yu H., Zhang X., Zhang T., Bai H. *Large / Nanoscale Res Lett.* 2010. Vol. 26.6 (1). P. 36.
26. Xie S. et al. / *Chem. Commun.* 2005. P. 3670–3672.
27. Li H. H. / *Journal of Physical and Chemical Reference Data.* 1976. Vol. 5. № 329. P. 436–448.
28. Jain S. K., Srivastava P. / *Journal of Applied Physics.* 2013. Vol. 114. № 073514. P. 1–9.
29. Sotudeh M., Boochani A., Parhizgar S. S., Masharian S. R. / *International Nano Letters.* 2020. Vol. 10. P. 293–301.
30. Badehian H. A., Vatankhah C. / *Journal of Molecular Structure.* 2022. Vol. 1262. № 133069. P. 1–9.
31. Jain S. K., Srivastava P. / *Comp. Mater. Sci.* 2011. Vol. 50. P. 3038–3042.

32. Allard C., Nascimento R., Fossard F., Schu'e L., Flahaut E., Loiseau A. et al. / ChemRxiv. 2019. P. 171.
33. Kuzmany H., Shi L., Martinati M., Cambr'e S., Wenseleers W., K'urti J., Koltai J., Kukucska G., Cao K., Kaiser U., Saito T., Pichler T. / Carbon. 2021. Vol. 171. P. 221.
34. Borin B. G., Fairbrother A., Rotach L., Bayle M., Paillet M., Liang L., Meunier V., Hauert R., Dumsclaff T., Narita A., M'ullen K., Sahabudeen H., Berger R., Feng X., Fasel R., Ruffieux F. / ACS Appl. Nano Mater. 2019. Vol. 2. P. 2184.
35. Mutlu Z., Llinas J. P., Jacobse P. H., Piskun I., Blackwell R., Crommie M. F., Fischer F. R., Bokor J. / ACS Nano. 2021. Vol. 15. P. 2635.
36. Kayang K. W., Nyankson E., Efavi J. K., Abavare E. K. K., Garu G., Onwona-Agyeman B., Yaya A. / Results in Materials. 2019. Vol. 2. P. 100029.
37. Allard C., Schu'e L., Fossard F., Recher G., Nascimento R., Flahaut E., Loiseau A., Desjardins P., Martel R., Gaufr'es E. / Adv. Mater. 2020. Vol. 32. P. 202001429.
38. Cadena A., Botka B., Pekker A., Tschannen C. D., Lombardo C., Novotny L., Khlobystov A. N., Kamar'as K. Molecular encapsulation from the liquid phase and 6-armchair graphene nanoribbon growth in carbon nanotubes. June 2022. Vol. 2207. P. 09533.
39. Ciampalini G., Blaga C. V., Tappy N., Pezzini S., Watanabe K., Taniguchi T., Bianco F., Roddaro S., Fontcuberta A., Morral I., Fabbri F. / 2D Mater. 2022. Vol. 9. P. 035018.
40. Jordan J. W., Townsend W. J. V., Johnson L. R., Walsh D. A., Newton G. N., Khlobystov A. N. / Chem. Soc. Rev. 2021. Vol. 50. P. 10895.1.

PACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz, 07.57.Kp, 85.60.Dw

Comparative analysis of the refractive and spectral properties of the potassium bromide with boron-nitride nanotubes interface

P. V. Kuzhakov^{1,2} and N. V. Kamanina^{1,2,3,*}

¹ AO "Scientific and Production Corporation S. I. Vavilov State Optical Institute",
St. Petersburg, 192171 Russia

* E-mail: nvkamanina@mail.ru

² B. P. Konstantinov Peterburg Institute of Nuclear Physics – National Research Center
"Kurchatov Institute", Gatchina, 188300 Russia

³ St. Petersburg State Electrotechnical University "LETI", St. Petersburg, 197022 Russia

Received 16.04.2024; revised 31.05.2024; accepted 20.02.2026

The analysis of the refractive and spectral properties of the potassium bromide with the boron-nitride nanotubes interface is carried out. The most optimal type of the chirality of the boron-nitride nanotubes in the entire spectral range studied was revealed, which is established from the calculations performed for the dispersion dependences of the refractive index of the boron-nitride nanotubes with different chirality, as well as from the evaluation of the dispersion dependences of the reflection coefficient at the KBr-BNNT interface with different chirality.

Keywords: spectral range, refractive index, interface, reflection spectra.

REFERENCES

1. Blaze X., Rubio A., Louis S. G., and Cohen M. L., Europhys. Lett. **28**, 335 (1994).
2. Bai X. D., Wang E. G., and Yu J., Appl. Phys. Lett. **77**, 67 (2000).
3. Rubio A., Corkill J. L., and Cohen M. L., Phys. Rev. B **49**, 5081 (1994).
4. Erdinands E., Goze K., Bernier P., and Rubio A., Phys. Lett. **80**, 4502 (1998).
5. Chopra N. G., Luyken R. J., Cherry K., Crespi V. X., Cohen M., Louis C. G., and Zettl A., Science **269**, 966 (1995).
6. Loiseau A., Willaime F., Demoncy N., Hug G., and Pascard H., Phys. Rev. Lett. **76**, 4737 (1996).
7. Terrones M., Hsu W., Terrones H., Zhang J., Ramos S., Hare J., Castollo R., Prassides K., Cheetham A., Kroto H., and Walton D., Chem. Phys. Lett. **259**, 568 (1996).
8. Chen Y., Fitz Gerald J., Williams J., and Bulcock S., Chem. Phys. Lett. **299**, 260 (1999).
9. Lee R., Gaville J., Lamy M., Chapelle D., and Loiseau A., Phys. Ed. B **64**, 121405 (2001).
10. Ma R., Bando Y., and Sato T., Letters on Chemistry and Physics **337**, 61 (2001).

11. Golberg D., Bando Y., Kurashima K., and Sato T., *Chem. Phys. Lett.* **323**, 185 (2000).
12. Golberg D., Bando Y., Bourgeois L., Kurashima K., and Sato T., *Carbon* **38**, 2017 (2000).
13. Han W., Bando Y., Kurashima K., and Sato T., *Chem. Phys. Lett.* **299**, 368 (1999).
14. Han W., Bando Y., Kurashima K., and Sato T., *Appl. Phys. Lett.* **73**, 3085 (1998).
15. Rubio A., Corkill J., and Cohen M., *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* **49**, 5081 (1994).
16. Radosavljević M., Appenzeller J., Derycke V., Martel R., Avouris Ph., Loiseau A., Cochoy J.-L., and Pigache D., *Appl. Phys. Lett.* **82**, 4131 (2003).
17. Cumings J. and Zettl A., *Solid State Commun.* **129**, 661 (2004).
18. Han W., Mickelson W., Cumings J., and Zettl A., *Appl. Phys. Lett.* **81**, 1110 (2002).
19. Tang C. and Bando Y., *Appl. Phys. Lett.* **83**, 659 (2003).
20. Xiao Y., Yan X., Xiang J., Mao Y., Zhang Y., Cao J., and Ding J., *Appl. Phys. Lett.* **84**, 4626 (2004).
21. Chopra N. and Zettl A., *Solid State Commun.* **105**, 297 (1998).
22. Bettinger H., Dumitrica T., Scuseria G., and Yakobson B., *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* **65**, 41406 (2002).
23. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., and Eklund P. C., *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*. Academic Press. New York, 1996.
24. Jacoby M., *Chem., Eng. News.* **82** (35), 34 (2004).
25. Zhong B., Huang X., Wen G., Yu H., Zhang X., Zhang T., and Bai H. Large, *Nanoscale Res Lett.* **26.6** (1), 36 (2010).
26. Xie S. et al., *Chem. Commun.* 3670–3672 (2005).
27. Li H. H., *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **5** (329), 436–448 (1976).
28. Jain S. K. and Srivastava P., *Journal of Applied Physics* **114** (073514), 1–9 (2013).
29. Sotudeh M., Boochani A., Parhizgar S. S., and Masharian S. R., *International Nano Letters* **10**, 293–301 (2020).
30. Badehian H. A. and Vatankhah C., *Journal of Molecular Structure* **1262** (133069), 1–9 (2022).
31. Jain S. K. and Srivastava P., *Comp. Mater. Sci.* **50**, 3038–3042 (2011).
32. Allard C., Nascimento R., Fossard F., Schué L., Flahaut E., Loiseau A. et al., *ChemRxiv*, 171 (2019).
33. Kuzmany H., Shi L., Martinati M., Cambr'e S., Wenseleers W., K'urti J., Koltai J., Kukucska G., Cao K., Kaiser U., Saito T., and Pichler T., *Carbon* **171**, 221 (2021).
34. Borin B. G., Fairbrother A., Rotach L., Bayle M., Paillet M., Liang L., Meunier V., Hauert R., Dumschlaff T., Narita A., M'ullen K., Sahabudeen H., Berger R., Feng X., Fasel R., and Ruffieux F., *ACS Appl. Nano Mater.* **2**, 2184 (2019).
35. Mutlu Z., Llinas J. P., Jacobse P. H., Piskun I., Blackwell R., Crommie M. F., Fischer F. R., and Bokor J., *ACS Nano* **15**, 2635 (2021).
36. Kayang K. W., Nyankson E., Efavi J. K., Abavare E. K. K., Garu G., Onwona-Agyeman B., and Yaya A., *Results in Materials* **2**, 100029 (2019).
37. Allard C., Schué L., Fossard F., Recher G., Nascimento R., Flahaut E., Loiseau A., Desjardins P., Martel R., and Gaufr'es E., *Adv. Mater.* **322**, 202001429 (2020).
38. Cadena A., Botka B., Pekker A., Tschannen C. D., Lombardo C., Novotny L., Khlobystov A. N., and Kamar'as K., *Molecular encapsulation from the liquid phase and 6-armchair graphene nanoribbon growth in carbon nanotubes.* **2207**, 09533 (June 2022).
39. Ciampalini G., Blaga C. V., Tappy N., Pezzini S., Watanabe K., Taniguchi T., Bianco F., Roddaro S., Fontcuberta A., Morral I., and Fabbri F., *2D Mater.* **9**, 035018 (2022).
40. Jordan J. W., Townsend W. J. V., Johnson L. R., Walsh D. A., Newton G. N., and Khlobystov A. N., *Chem. Soc. Rev.* **50**, 10895.1 (2021).

Об авторах

Кужаков Павел Викторович, к.ф.-м.н., научный сотрудник, АО «Научно-производственное объединение Государственный оптический институт им. С. И. Вавилова» (192171, Россия, Санкт-Петербург, ул. Бабушкина, д. 36, корп. 1); Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (188300, Россия, Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1). E-mail: kpv_2002@mail.ru SPIN-код: 7178-5273, AuthorID: 977752

Каманина Наталия Владимировна, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник, начальник отдела, АО «Научно-производственное объединение Государственный оптический институт им. С. И. Вавилова» (192171, Россия, Санкт-Петербург, ул. Бабушкина, д. 36, корп. 1); Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (188300, Россия, Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1); Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» (197022, Россия, Санкт-Петербург, улица Профессора Попова, дом 5, литера Ф). E-mail: nvkamanina@mail.ru SPIN-код: 1231-5045, AuthorID: 40388