

УДК 514.18 + 517.958:531.12

ДОСЛІДЖЕННЯ ГЕОМЕТРИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК ЗА ДОПОМОГОЮ КОЕФІЦІЄНТІВ ХІРАЛЬНОСТІ

Гумен О.М., д.т.н.,

Григорчук Т.М.

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут»

Тел. (044) 401-08-45

Анотація – у статті розглянуто властивості коефіцієнтів хіральності (КХ) та їх практичне застосування. Проведено дослідницьку роботу, що вказує на доведену аналітичним методом залежність основних геометричних характеристик нанотрубок від значень хіральності. Підтверджено вірність формул, які дозволяють знайти міжатомні відстані нанотрубок, користуючись згаданими вище коефіцієнтами.

Ключові слова – нанотрубки, коефіцієнти хіральності, геометричні характеристики нанотрубок, методи прикладної геометрії.

Постановка проблеми. Систематизація розрізнених даних щодо геометрії нанотрубок, які зустрічаються у науковій літературі переважно лише у якості допоміжного елемента, на даний час видається надзвичайно актуальною. Також виникає необхідність проведення ознайомчих досліджень задля подальшого використання систематизованої інформації в області моделювання наноструктур.

Аналіз останніх досліджень. Практичне значення КХ докладно викладено у працях [1,2]. Праці [3,4] мають здебільшого прикладний характер. У джерелах [5,6] висвітлено фундаментальні знання про структуру нанотрубок, які стали першоосновою дослідницької частини нашої роботи. Якщо розглядати джерела [7–9], то варто зазначити ґрунтовно розглянуте практичне застосування вуглецевих структур, однак не було проведено важливу паралель стосовно залежності електричних та електрохімічних характеристик нанотрубок від їх геометричної будови.

Формулювання цілей статті. В даній роботі поставлена мета: з'ясувати сукупність геометричних характеристик вуглецевих нанотрубок, що безпосередньо залежать від КХ.

Основна частина. Розглянемо процес згортання графітової трубки в площину [1].

Нехай два ортогональних вектори C та L (рис. 1), виражені через базис $(\mathbf{a}_1; \mathbf{a}_2)$, задають на графітовій площині прямокутник, який переходить при згортанні в циліндричну поверхню. Тоді вектори \mathbf{a}_1 та \mathbf{a}_2 переходять в гвинтові повороти $S_1(\Delta\varphi_1; \Delta z_1)$ та $S_2(\Delta\varphi_2; \Delta z_2)$, які є твірними групи симетрії трубки радіусом $R = \frac{|C|}{2\pi}$.

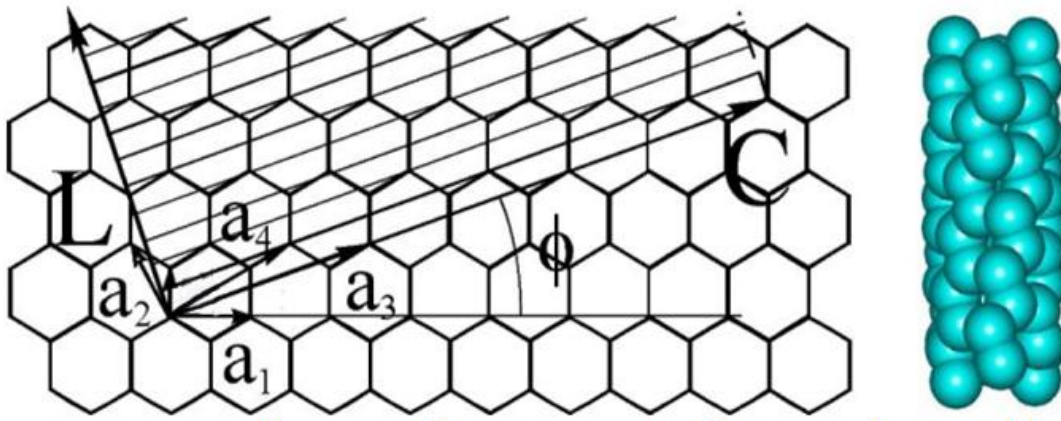


Рис. 1. Графітовий шар і вуглецева трубка з індексами хіральності (9,3), базисними векторами $(\mathbf{a}_1; \mathbf{a}_2)$, $(\mathbf{a}_3; \mathbf{a}_4)$, кутом хіральності φ .

Хіральність нанотрубок будемо позначати набором символів (i_1, i_2) , або, відповідно, (n, m) . Вони вказують координати шестикутника, який в результаті згортання площини повинен збігатися з шестикутником, що знаходиться на початку координат [5]. Легко прослідкувати прямий зв'язок коефіцієнтів хіральності з діаметром трубки:

$$D = \sqrt{m^2 + n^2 - n \cdot m} \cdot \frac{3d_0}{\pi}, \quad (1)$$

де $d_0 = 0,142$ нм - відстань між атомами вуглецю в гексагональній сітці графіту. Відомо про пряму залежність міцності одношарових нанотрубок від діаметру, який визначається формулою (1). Оскільки діаметр нанотрубки близький до поперечного розміру молекули полімерів, одношарові нанотрубки вважають найбільш міцними представниками останніх [7]. Отже, можна зазначити, що коефіцієнти хіральності широко використовуються для розв'язання прикладних задач, що і буде підтверджено далі. Дослідження групи симетрії трубки зручно розглянути за допомогою операторів гвинтових поворотів $S_3(\Delta\varphi_3; 0)$ та $S_4(\Delta\varphi_4; \Delta z_4)$ [1]. Число атомів вуглецю на кільцях, набір яких представляє трубку в даному базисі, залежить від

порядку осі симетрії S_3 і визначається параметром $\Delta\varphi_3$. Останній детермінує поворотну вісь нанотрубки:

$$\Delta\varphi_3 = \frac{2\pi}{n}, \quad (2)$$

де n – ціле число, що задає порядок осі симетрії і рівне НСД (i_1, i_2). Параметр Δz_4 еквівалентний величині зсуву атомів один щодо одного на найближчих кільцях. З одного боку, добуток $\Delta z_4 \Delta\varphi_3 R$ дорівнює площі елементарної комірки, з іншого – вона визначається через базис $(\mathbf{a}_1; \mathbf{a}_2)$. Звідси не важко виразити:

$$\Delta z_3 = \frac{3}{2} \frac{n \cdot a_0}{\sqrt{i_1^2 - i_1 i_2 + i_2^2}}, \quad (3)$$

де $a_0 = 1,42\text{\AA}$ відстань між найближчими атомами вуглецю графітової площини, $n = \text{НСД}(i_1, i_2)$. Дзеркальні площини трубок існують у разі, коли значення кута хіральності (рис. 2) вуглецевої трубки (кут між векторами \mathbf{C} і \mathbf{a}_1), залежне від індексів (i_1, i_2), кратне $\pi / 6$ [1]. Ці значення кутів відповідають трубкам конфігурації zigzag ($n, 0$) та armchair ($2n, n$).

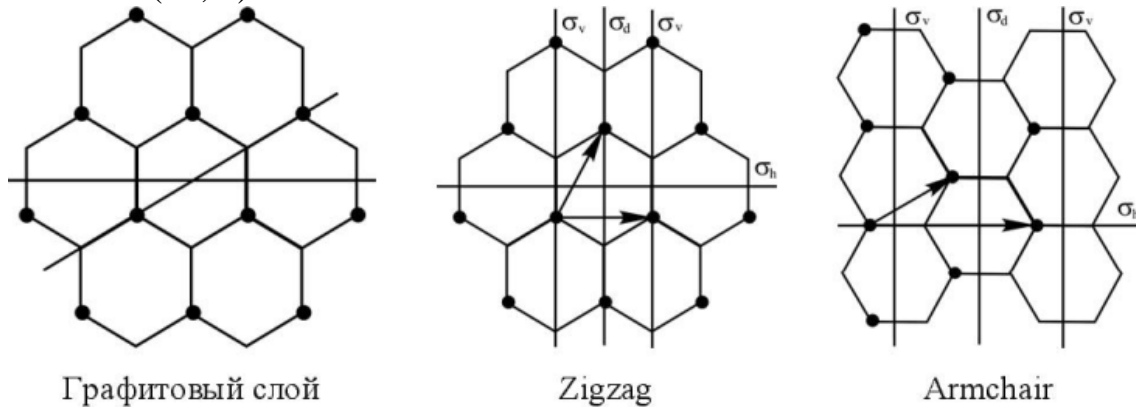


Рис. 2. Площини дзеркальних відображень для графітового шару з елементами симетрії σ_v і σ_d (успадковуються трубкою при згортанні).

Можливо вивести формули [2] через a (довжина зв'язку В-В (N-N)) і n (індекс хіральності) для визначення координат атомних вузлів і міжатомних відстаней в ідеальних нанотрубках нітриду бору. Ці співвідношення придатні для будь-якого структурного аналогу, зокрема, для вуглецевих нанотрубок.

Розглянемо знаходження міжатомних відстаней на прикладі структури zigzag (рис. 3). Темними та світлими точками показані відповідні атоми В та N.

Згідно з [2] елементарна комірка N-нанотрубки $(n, 0)$ складається з 4-х атомних кіл ортогональних осі трубки з n атомами кожна. Кола з різнойменними атомами розташовані почергово та утворюють пари на відстані $a/2\sqrt{3}$ (відстань між сусідніми парами із одноіменними атомами – $a/\sqrt{3}$).

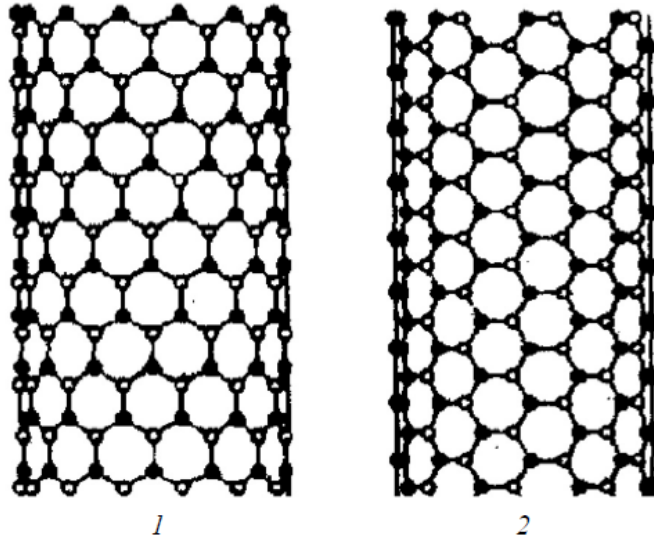


Рис. 3. Zigzag – 1 та armchair – 2 трубки нітриду бору.

Для того, щоб визначити координати, що необхідні для вирішення кристалографічної задачі на знаходження міжатомних відстаней, проводимо площину xOz по лінії зламу поверхні листа бору, а площину xOy – посередині одного з B-N-зв'язків, який лежить на цій лінії. Полярний кут та висота вузлів ${}^{lm}_{(n,0)}\text{B1}$ и ${}^{lm}_{(n,0)}\text{N1}$ в атомних околах, що еквівалентні околу центральної пари, будуть рівні:

$$\begin{aligned} \varphi &= 2l/\pi/n, \quad z = (6m+1)a/2\sqrt{3} \quad \text{и} \quad \varphi = 2l/\pi/n, \\ z &= (6m-1)a/2\sqrt{3}, \end{aligned} \quad (4)$$

де $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ і $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – індекси пар атомів бору та нітрогену. Для центральної пари $({}^{00}_{(n,0)}\text{B1}$ и ${}^{00}_{(n,0)}\text{N1}$) вони рівні нулю. Не важко підрахувати полярний радіус і висоту вузлів ${}^{lm}_{(n,0)}\text{B2}$ и ${}^{lm}_{(n,0)}\text{N2}$. Дійсно, провівши необхідні розрахунки та використавши знайдене в

[3] значення радіусу zigzag – нанотрубки $R_{(n,0)} = \frac{a}{4 \sin \pi/2n}$, можемо

знайти міжатомну відстань від центральної пари:

$$\begin{aligned}
\frac{({}_{(n,0)}^{lm}B1-{}_{(n,0)}^{00}B1)^2}{a^2} &= \frac{\sin^2 l\pi / n}{4\sin^2 \pi / 2n} + 3m^2, & \frac{({}_{(n,0)}^{lm}B1-{}_{(n,0)}^{00}N1)^2}{a^2} &= \frac{\sin^2 l\pi / n}{4\sin^2 \pi / 2n} + \frac{(3m+1)^2}{3}, \\
\frac{({}_{(n,0)}^{lm}B2-{}_{(n,0)}^{00}B1)^2}{a^2} &= \frac{\sin^2(2l+1)\pi / 2n}{4\sin^2 \pi / 2n} + \frac{3(2m-1)^2}{4}, & \frac{({}_{(n,0)}^{lm}B2-{}_{(n,0)}^{00}N1)^2}{a^2} &= \frac{\sin^2(2l+1)\pi / 2n}{4\sin^2 \pi / 2n} + \frac{(6m-1)^2}{12}, \\
\frac{({}_{(n,0)}^{lm}N1-{}_{(n,0)}^{00}B1)^2}{a^2} &= \frac{\sin^2 l\pi / n}{4\sin^2 \pi / 2n} + \frac{(3m-1)^2}{3}, & \frac{({}_{(n,0)}^{lm}N1-{}_{(n,0)}^{00}N1)^2}{a^2} &= \frac{\sin^2 l\pi / n}{4\sin^2 \pi / 2n} + 3m^2, \\
\frac{({}_{(n,0)}^{lm}N2-{}_{(n,0)}^{00}B1)^2}{a^2} &= \frac{\sin^2(2l+1)\pi / 2n}{4\sin^2 \pi / 2n} + \frac{(6m+1)^2}{12}, & \frac{({}_{(n,0)}^{lm}N2-{}_{(n,0)}^{00}N1)^2}{a^2} &= \frac{\sin^2(2l+1)\pi / 2n}{4\sin^2 \pi / 2n} + \frac{3(2m+1)^2}{4}
\end{aligned} \tag{5}$$

Висновки. Таким чином, у роботі висвітлено дослідження групи симетрії вуглецевої нанотрубки за допомогою операторів гвинтових поворотів S_3 та S_4 . Проаналізовано концептуальність кута хіральності для існування дзеркальних площин трубок. Розглянуто процес визначення координат атомних вузлів і міжатомних відстаней нанотрубок. Встановлено, що оскільки хіральність нанотрубок визначає їх електричні властивості, які використовуються, наприклад, при створенні напівпровідникових гетероструктур, актуальним є подальше вивчення моделювання наноструктур методами прикладної геометрії та комп'ютерної графіки на основі проведених досліджень.

Література

1. *Белослудцев А.В.* Симметрия и электронные свойства углеродных нанотрубок – Ижевск, 2007. – 108 с.
2. *Чхартішвили Л.С.* Равновесная геометрия трубок нитрида бора ультрамалого радиуса [Наноструктурное материаловедение № 1] – Тбилиси, ГТУ, 2009. – С. 46-57.
3. *Чхартішвили Л.С.* О размерах нанотрубок нитрида бора [Харьковская нанотехнологическая ассамблея. – Т.2. – Тонкие плёнки в оптике и нанoeлектронике] – Харьков, ННЦ ХФТИ, 2006. – С. 367-373.
4. *Гумен О.М.* Використання геометричних методів для візуалізації фізико-математичного моделювання прикладних процесів електродугового синтезу карбонових наночастинок / О.М. Гумен, Д.В. Ведель, Д.В. Румянцев // Матеріали II-ї Міжнародної науково-практичної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Прикладна геометрія, дизайн та об'єкти інтелектуальної власності». – Вип. 2. – К.: ДІЯ, 2013. – С. 51-54.
5. *Елецкий А. В.* Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства [УФН т. 172 № 4] – 2002. – 403 с.

6. Золотухин И.В. Углеродные нанотрубки [Соровский образовательный журнал №3] – ВГТУ, 1999 . – С. 111-115.
7. Елецкий А. В. Углеродные нанотрубки [УФН т. 167 № 9] – 1997. – 954 с.
8. Углерод ЧГ углеродные нанотрубки [Электронный ресурс] : Технологии: Углеродные нановолокна и нанотрубки. Краткие сведения – Режим доступа: <http://www.carbonchg.ru/technology/carbon-nanofibers-nanotubes/>.
9. Научная сеть Nature Web.Ru [Электронный ресурс] : Наука: Физика: Общая физика: Теплота и строение материи: Физика полимеров: Углеродные нанотрубки, их свойства и применение – Режим доступа: <http://nature.web.ru/db/msg.html?mid=1159181>.

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПРИ ПОМОЩИ КОЭФИЦИЕНТОВ ХИРАЛЬНОСТИ

Е.Н. Гумен, Т.Н. Григорчук

Аннотация – в статье рассмотрено свойства коэффициентов хиральности (КХ) и их практическое применение. Проведено исследовательскую работу, что указывает на доказанную аналитическим методом зависимость основных геометрических характеристик нанотрубок от значений хиральности. Подтверждено верность формул, которые позволяют найти межатомные расстояния нанотрубок, пользуясь упомянутыми выше коэффициентами.

THE RESEARCH OF GEOMETRICAL CHARACTERISTICS OF CARBON NANOTUBES BY THE COEFFICIENT OF CHIRALITY

O. Gumen, T. Grigortchuck

Summary

The article considers the properties of chirality coefficients (HF) and their practical application. The research indicates on a proven by analytical method dependence of basic geometric characteristics of nanotubes from chirality values. The article confirms loyalty of formulas that allow to find the interatomic distances of nanotubes by using of the above-mentioned coefficients.