

## СТРУКТУРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Хиральность (от греч. *Χειρ* — рука) — тип зеркальной симметрии, при котором левый и правый варианты фигуры не могут быть совмещены друг с другом (подобно симметрии кистей рук). Рассмотрим подробно как из графитового листа получаются нанотрубки (рис.1). Вектора  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$  являются базисными векторами элементарной ячейки графитового листа. Вектор  $\mathbf{C}$  является линейной комбинацией векторов  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$  и соединяет две эквивалентные точки на первичном графитовом листе:

$$\mathbf{C} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2,$$

где  $n, m$  — целые числа ( $n \geq m$ ), называемые индексами хиральности.

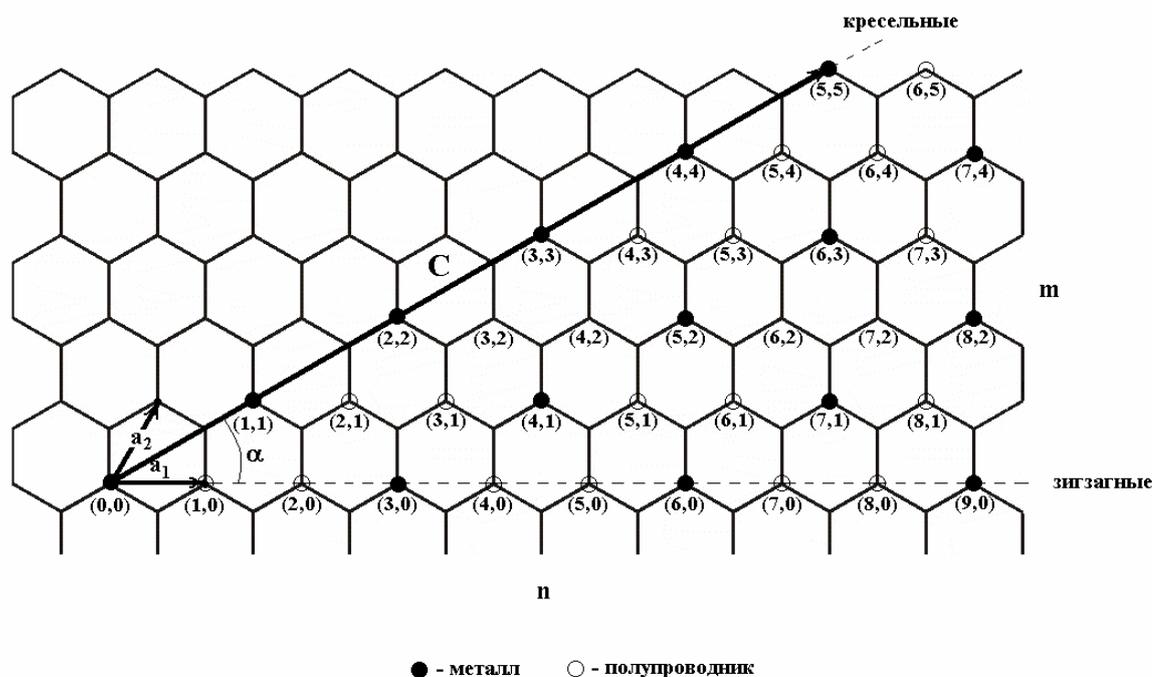


Рис.1. Графитовый лист с атомами, обозначенными с помощью индексов хиральности ( $n, m$ ).

Цилиндр получается при сворачивании графитового листа таким образом, чтобы две конечные точки вектора  $\mathbf{C}$  совмещались. Вследствие симметрии решетки пчелиных сот множество полученных таким образом цилиндров будут эквивалентными. Однако существует «неприводимый

клин», содержащий одну двенадцатую графеновой решетки, с помощью которого определяются элементарные структуры нанотрубок.

Каждая пара чисел  $(n,m)$  представляет возможную структуру нанотрубки.

Кресельные нанотрубки получаются при  $n=m$ , зигзажные – при  $m=0$ , все остальные нанотрубки являются хиральными.

Индексы хиральности однослойной нанотрубки определяют ее диаметр  $D$  и хиральный угол  $\alpha$  - угол между гранью и направлением сворачивания.

Так как

$|a_1| = |a_2| = |a| = d_0 \sqrt{3}$ , где  $d_0 = 0.142$  нм – расстояние между атомами углерода в гексагональной сетке графита, получим величину вектора  $C$  в нанометрах равную  $0.246\sqrt{(n^2 + nm + m^2)}$ .

Диаметр нанотрубки определяется как:

$$D = \frac{|C|}{\pi}$$

или

$$D = \sqrt{(n^2 + nm + m^2)} \cdot \frac{\sqrt{3} \cdot d_0}{\pi} = 0.246\sqrt{(n^2 + nm + m^2)}/\pi$$

Хиральный угол :

$$\cos \alpha = \frac{(2n + m)}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}}$$

Хиральный угол лежит в пределах  $0^\circ \leq \alpha \leq 30^\circ$ . Среди различных возможных направлений сворачивания нанотрубок выделяются направления, для которых совмещение шестиугольника  $(n,m)$  с началом координат не требует искажения в его структуре. Этим направлениям соответствуют углы  $\alpha = 0^\circ$  и  $\alpha = 30^\circ$ . Указанные конфигурации отвечают хиральностям  $(n,0)$  и  $(n,n)$  соответственно.

Если мы полагаем, что нанотрубка является одномерным кристаллом, то можно определить трансляционную элементарную ячейку вдоль оси

трубки. Для всех нанотрубок элементарная ячейка трансляции имеет форму цилиндра.

Для кресельной нанотрубки ширина ячейки равна величине элементарного вектора  $\mathbf{a}$  графитовой сетки (рис. 2).

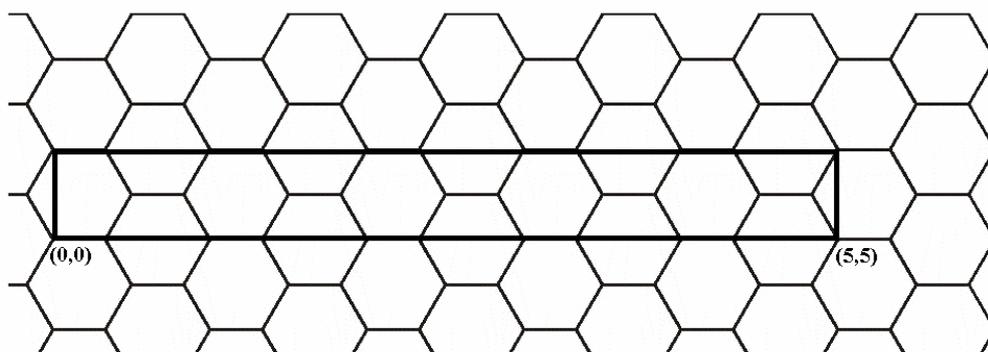


Рис. 2. Элементарная ячейка для кресельной нанотрубки (5,5).

Для зигзажной нанотрубки ширина ячейки составляет  $a\sqrt{3}$  (рис. 3). Кресельные и зигзажные нанотрубки с большим диаметром имеют элементарные ячейки, которые являются просто уширенной версией трубок (5,5) и (9,0) соответственно.

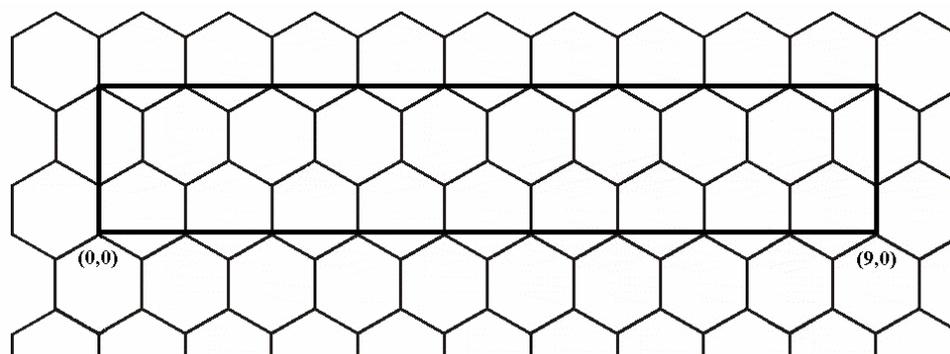


Рис.3. Элементарная ячейка для зигзажной нанотрубки (9,0).

Для хиральных нанотрубок более низкая симметрия приводит к увеличению элементарной ячейки. Рассмотрим метод построения элементарной ячейки для хиральных нанотрубок. Этот метод заключается в построении прямой линии, проходящей через начало неприводимого клина (0,0) нормально к вектору  $\mathbf{C}$  (рис.4). Длина элементарной ячейки в

направлении оси нанотрубки равна величине вектора  $T$ . Выражение для  $T$  может быть получено с помощью длины вектора  $C$  и наибольшего делителя для хиральных индексов  $n$  и  $m$ , который обозначается  $d_H$ .

Если  $n-m \neq 3rd_H$ , где  $r$  – некое целое число, то

$$T = \frac{\sqrt{3} \cdot C}{d_H}.$$

Если  $n - m = 3rd_H$ , то

$$T = \frac{\sqrt{3} \cdot C}{3d_H}$$

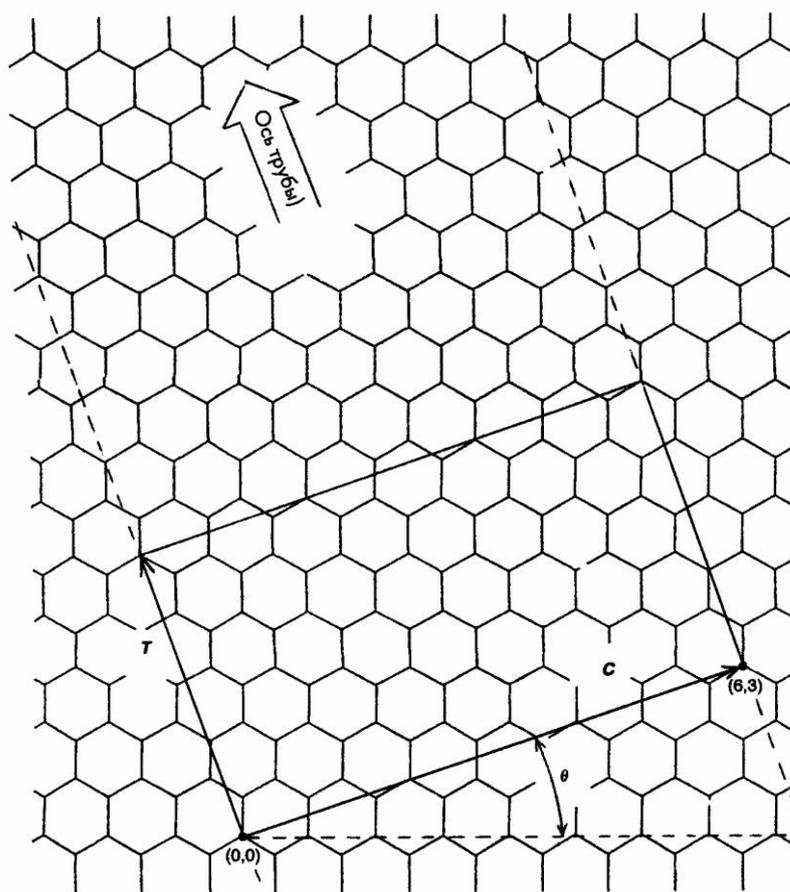


Рис. 4. Элементарная ячейка для хиральной нанотрубки (6,3).

От хиральности зависят свойства нанотрубок (рис. 1). Все кресельные нанотрубки являются металлическими, зигзажные и хиральные нанотрубки в зависимости от индексов хиральности могут обладать как металлическими, так и полупроводниковыми свойствами.

Металлическими свойствами обладает  $1/3$  зигзажных нанотрубок. В этом случае  $n$  должно быть кратно 3. Остальные  $2/3$  зигзажных нанотрубок являются полупроводниковыми.  $1/3$  хиральных нанотрубок является металлическими, если выполняется условие  $n-m=3q$ , где  $q$  – целое число. Остальные  $2/3$  хиральных нанотрубок, так же как и зигзажные, обладают полупроводниковыми свойствами.