

Задание

Построить структурную модель углеродной нанотрубки с металлическими и полупроводниковыми свойствами с заданными индексами хиральности (n,m).

Вариант	(n,m)
1	(9,0); (7,3)
2	(5,5); (8,1)
3	(11,0); (7,4)
4	(7,7); (6,4)
5	(12,0); (8,2)
6	(8,8); (5,4)
7	(13,0); (7,1)
8	(9,9); (7,2)
9	(14,0); (5,3)
10	(10,10); (6,2)
11	(15,0); (7,5)
12	(12,12); (6,3)
13	(16,0); (7,4)
14	(11,11); (8,5)
15	(17,0); (6,1)
16	(13,13); (6,5)
17	(10,1); (12,0)
18	(9,2); (7,7)
19	(8,4); (18,0)
20	(9,2); (8,8)

Порядок выполнения работы:

- 1) Рассчитать угол хиральности углеродных нанотрубок.
- 2) Рассчитать диаметр углеродных нанотрубок.
- 3) Определить структурный тип углеродных нанотрубок.
- 4) Рассчитать элементарную ячейку данной нанотрубки
- 5) Определить какими свойствами обладает данная нанотрубка .
- 6) На основе полученных результатов изготовить модель углеродной нанотрубки, используя бумажную модель графенового слоя.

Пример 1.

Модель кресельной нанотрубки

Индексы хиральности нанотрубки (6,6).

1) Угол хиральности рассчитываем по формуле:

$$\cos \alpha = \frac{(2n + m)}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}} = \frac{(2 \cdot 6 + 6)}{2\sqrt{6^2 + 6 \cdot 6 + 6^2}} = 0.86$$

$$\alpha = 30^\circ$$

2) Диаметр нанотрубки (6,6) рассчитываем по формуле:

$$D = 0.246\sqrt{(n^2 + nm + m^2)} / \pi = 0.246\sqrt{6^2 + 6 \cdot 6 + 6^2} / 3.14 = 0.81 \text{ нм}.$$

3) Данная нанотрубка имеет индексы хиральности (6,6), т.е. $n=m$, следовательно, она относится к кресельным.

4) Для кресельных нанотрубок ширина ячейки (рис. 1.1) равна величине элементарного вектора \mathbf{a} графитовой сетки - $|\mathbf{a}|=0.246$ нм. Величина вектора \mathbf{C} равна:

$$|\mathbf{C}| = 0.246\sqrt{n^2 + n \cdot m + m^2} = 0.246\sqrt{6^2 + 6 \cdot 6 + 6^2} = 2.56 \text{ нм}.$$

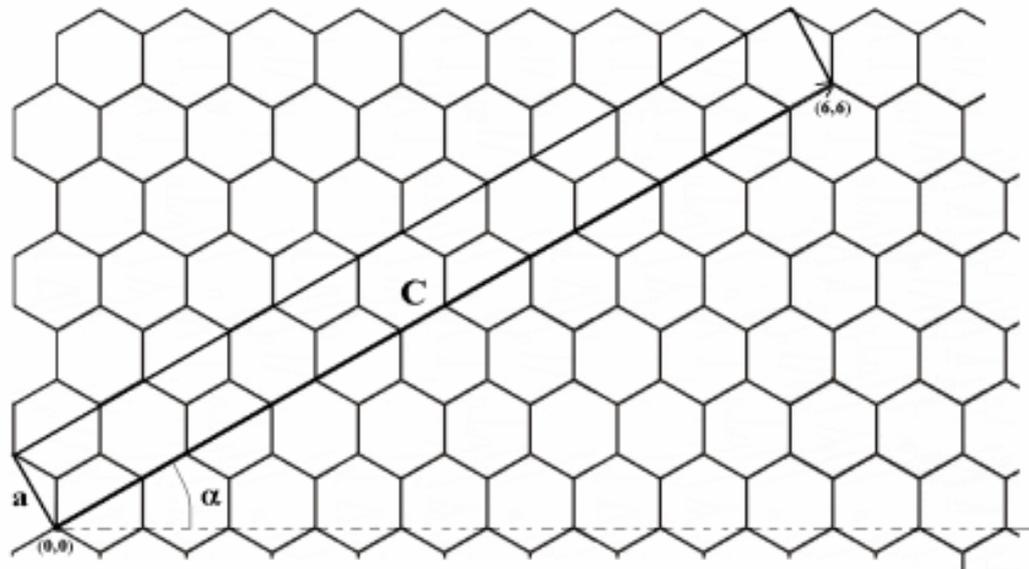


Рис. 1.1. Графеновый слой с элементарной ячейкой для кресельной трубки (6,6).

5) Все кресельные нанотрубки обладают металлическими свойствами.

Пример 2.

Модель зигзажной нанотрубки

Индексы хиральности нанотрубки (10,0).

1) Угол хиральности рассчитываем по формуле:

$$\cos \alpha = \frac{(2n + m)}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}} = \frac{(2 \cdot 10)}{2\sqrt{10^2}} = 1$$

$$\alpha = 0^\circ$$

2) Диаметр нанотрубки (10,0) рассчитываем по формуле:

$$D = 0.246\sqrt{(n^2 + nm + m^2)} / \pi = 0.246\sqrt{10^2} / 3.14 = 0.78 \text{ нм}.$$

3) Данная нанотрубка имеет индексы хиральности (10,0), т.е. $m=0$, следовательно, она относится к зигзажным.

4) Для зигзажных нанотрубок ширина ячейки (рис. 1.2) равна $a\sqrt{3} = 0.246\sqrt{3} = 0.43 \text{ нм}$. Величина вектора \mathbf{C} равна:

$$|\mathbf{C}| = 0.246\sqrt{n^2 + n \cdot m + m^2} = 0.246\sqrt{10^2} = 2.46 \text{ нм}.$$

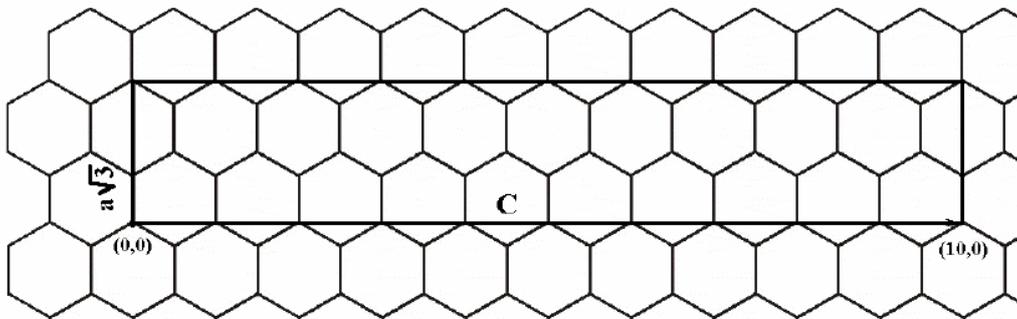


Рис. 1.2. Графеновый слой с элементарной ячейкой для зигзажной трубки (10,0).

Пример 3.
Модель хиральной нанотрубки

Индексы хиральности нанотрубки (5,1).

1) Угол хиральности рассчитываем по формуле:

$$\cos \alpha = \frac{(2n + m)}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}} = \frac{(2 \cdot 5 + 1)}{2\sqrt{5^2 + 5 \cdot 1 + 1^2}} = 0.99$$

$$\alpha = 8^\circ$$

2) Диаметр нанотрубки (5,1) рассчитываем по формуле:

$$D = 0.246\sqrt{(n^2 + nm + m^2)}/\pi = 0.246\sqrt{5^2 + 5 \cdot 1 + 1^2}/3.14 = 0.44 \text{ нм}.$$

3) Данная нанотрубка имеет индексы хиральности (5,1), следовательно, она относится к хиральным.

4) Для хиральной нанотрубки (5,1) ширина ячейки (рис. 1.3) определяется следующим образом: $n-m \neq 3d_H$, где d_H наибольший делитель для индексов n и m . В нашем случае $5-1 \neq 3$ (наибольший делитель для 5 и 1 будет 1). Ширина ячейки:

$$T = \frac{\sqrt{3} \cdot C}{d_H} = \frac{\sqrt{3} \cdot 0.246\sqrt{5^2 + 5 \cdot 1 + 1^2}}{1} = 2.37 \text{ нм}$$

Величина вектора C равна:

$$|C| = 0.246\sqrt{n^2 + n \cdot m + m^2} = 0.246\sqrt{5^2 + 5 \cdot 1 + 1^2} = 1.37 \text{ нм}$$

5) Разность индексов хиральности $n-m = 5-1 = 4$ не кратна 3, следовательно, данная нанотрубка обладает полупроводниковыми свойствами.

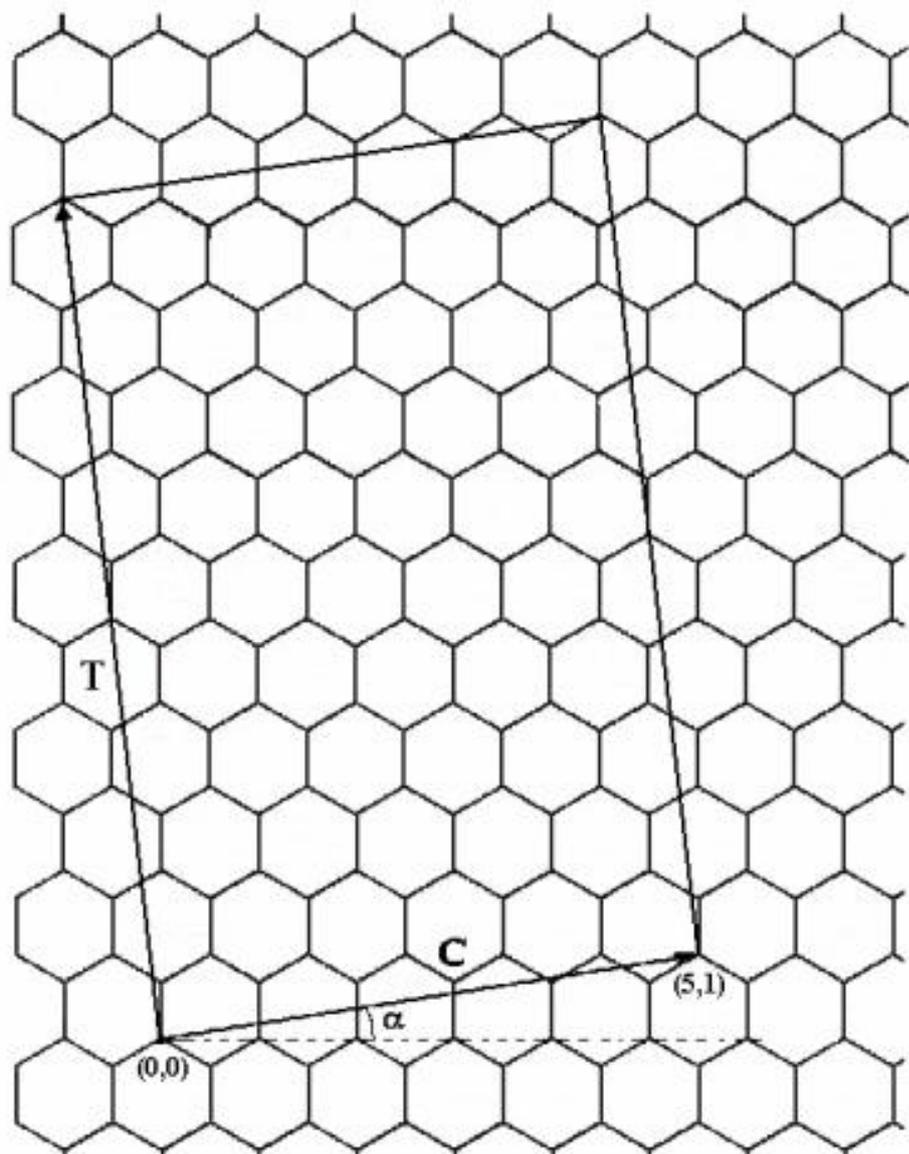


Рис. 1.3. Графеновый слой с элементарной ячейкой для хиральной трубки (5,1).