

УДК 0.5

ИЗМЕНЕНИЕ СВОЙСТВ УГЛЕРОДА ПРИ ПЕРЕХОДЕ ИЗ МАКРОСТРУКТУРЫ В НАНОСТРУКТУРУ

Чэнь шумэн, Лю чао, Чжу ибо

Научный руководитель:

Профессор кафедры общей физики ФТИ Ерофеева Г.В.

Томский политехнический университет (634050, г. Томск, пр. Ленина, 30)

E-mail: dreamfly93@qq.com

Аннотация: в процессе выполнения данной работы был проведен сравнительный анализ свойств углерода в нано- и макроструктурах. Изучение свойств углерода было проведено путем обзора литературных источников. Были рассмотрены следующие свойства: температуры плавления и плотность, температуры кипения, и удельное электрическое сопротивление. В результате сравнения установлено, что данные свойства у нано- и макроструктур у углерода имеют некоторые различия, только электрическое сопротивление сильно отличается, а у остальных незначительные. Для того, чтобы определить, какие размерные эффекты влияют на различия свойств углерода в нано- и макроструктурах, рассчитана длина волны де-Бройля, затем проведено сравнение получившегося значения с размером нанотрубок. В результате, было установлено, что отличие электрического сопротивления объясняется квантовыми размерными эффектами и точкой Дирака. Остальные отличия объясняются классическими размерными эффектами. Также приведены технологии производства нанотрубок углерода и сферы применения нанотрубок углерода.

Ключевые слова: связи, поверхность Ферми, наноструктура, размерный эффект, эффективная масса, точка Дирака.

CHANGES OF PROPERTIES OF CARBON IN THE TRANSITION FROM MARKOSTRUKTURU IN NANOSTRUKTURU

Chen Shumen C.S., Lyu C.C., Chzhu I.N.

Supervisor: Professor, Department of General Physics PTI Yerofeyev GV Tomsk
Polytechnic University (634050, Tomsk, Lenina ave., 30)

Abstract: comparative analysis of the copper properties in the nano- and macrostructures was carried out in this work. The study of the copper properties was carried out by reviewing the literature. We examined the following properties: melting and boiling points, density and electrical resistivity. The comparison found that these properties at nano- and macrostructures have some differences, but the electrical resistance is very different, and the remaining minor. To determine what size effects influence the differences in the properties of carbon nano- and microstructures, calculated wavelength de Broglie, then compared the resulting values to the size of particles in the nanostructure. As a result, it was found that the difference in electric resistance is explained by the quantum size effects and Dirac point. The remaining differences are explained by classical size effects. Technology of manufacture and application fields were also analyzed.

Keywords: bond, Fermi surface, nanostructure, size effect, effective mass, Dirac point.

Введение У наноматериалов имеются некоторые хорошие свойства и перспективное использование. Наноматериалы и нанотехника являются наиболее важными в современном обществе. Сейчас разделы, связанные с нанотехнологиями, входят в программы многих отечественных и международных конгрессов и конференций, как самостоятельные части.

Анализ свойств углерода в макро- и наноструктурах У графита смещенная решётка. Структура показана в рисунке 1. Каждый атом углерода ковалентно связан с тремя другими окружающими его атомами углерода и образуют гексагональную структуру в одном слое. Расстояние между атомами в одном слое – 0,142нм и $a=0,246$ нм $c=0,670$ нм.

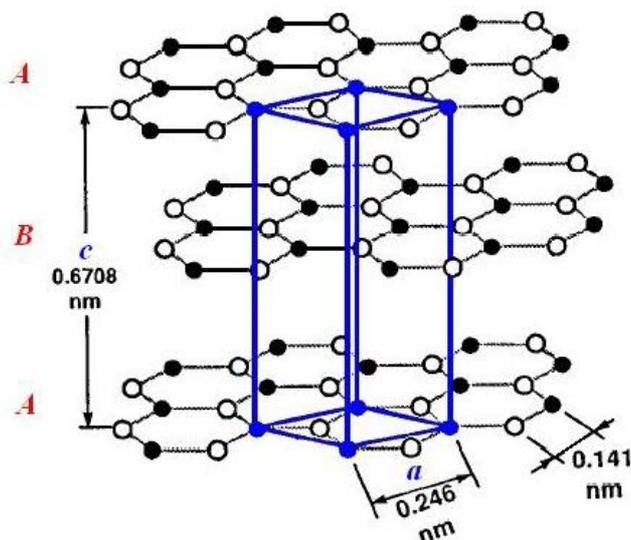


Рис. 1 Схема решётки графита [1].

Рассчитаны параметры обратной решётки. Пусть $d=0,142$ нм - расстояние между атомами в одном слое, то $a = \sqrt{3}d$, $c = \frac{3\sqrt{10}}{2}d$ и начальная точка совместится с узлом решётки, а две оси совместятся с ребрами решётки, получим базисы прямой решётки: $\vec{a}_1 = (\sqrt{3}d, 0, 0)$, $\vec{a}_2 = (\frac{\sqrt{3}}{2}d, \frac{3}{2}d, 0)$, $\vec{a}_3 = (0, 0, \frac{3\sqrt{10}}{2}d)$.

Зная базисы прямой решётки, получим базисы обратной решётки:

В таблице 1 представлено сравнение свойства графита в макро- и наноструктурах [2,3,7].

Таблица 1 Свойства в макро- и наноструктурах.

Свойства	Макроструктура	Наноструктура
Температура плавления, °С	3652	3652 - 3697
Плотность, г/см ³	2,25	2,1
Удельное электрическое сопротивление, мкОм·м	6,5	0.55
Размер, нм	-	2 - 100
Температура кипения, °С	4827	-

По данным таблицы видно, что температура плавления для макро- и наноструктуры почти не отличается; удельное сопротивление меняется значительно и уменьшается в 11,8 раза; плотность уменьшается на 6,7%.

Уменьшение плотности на 6,7% объясняется характером структуры графита: у графита смешанная структура, очень неплотная по сравнению с металлами. Расстояние между атомами графита, особенно между слоями, больше, чем расстояние между атомами плотноупакованной структуры. Из расчета получен коэффициент упаковки графита – 17,08%, который существенно меньше чем коэффициент упаковки плотноупакованной структуры (74%). Поэтому, когда разрывались связи между слоями и образовались нанотрубки (УНТ), коэффициент упаковки не существенно меняется. Это значит, что при определении плотности между нанотрубками существует пустые места, которые уменьшают плотность нанотрубки, но, в общем, по сравнению со структурой графита, эти пустые места являются незначительными. Поэтому получена такая плотность. А для металлов, имеющих плотноупакованную структуру, эти пустые места существенно влияют на плотность.

Изменение температуры плавления незначительное, тоже потому что у графита особая структура. Слои связаны силой Ван-дер-Ваальса, а это очень слабая связь. При получении из графита нанотрубок разрываются связи между слоями, поэтому температура плавления изменяется незначительно.

Для определения вклада в изменение свойств размерных эффектов необходимо рассчитать длину волны де Бройля или длину свободного пробега и сравнить полученное значение с размером нанотрубок графита.

Формула для расчета:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

где, $m = 9,11 \times 10^{-31}$ кг – масса электрона; $h = 6,63 \times 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, $v = 10^6$ м/с – скорость электрона.

Получено, что длина волны де Бройля $\lambda = 0,7$ нм, это сравнимо с наименьшим диаметром нанотрубки 2-100 нм., поэтому квантовые размерные эффекты влияют на изменение свойств нанотрубок из монослоя, имеющих малые диаметры. Одной из причин размерных эффектов является большая доля приповерхностных атомов, которая возникает вследствие ненасыщенности атомных связей у поверхности, другая причина - искажения решетки у поверхности, а также тонкие физические эффекты взаимодействия электронов со свободной поверхностью.

Особое свойство и причина Удельное сопротивление меняется значительно и уменьшается в 11,8 раза, такая большая разница объясняется с помощью квантовой механики. Нанотрубки графита очень похожи на графен, т.к. имеют монослойную структуру, (нанотрубки в виде цилиндра, а графен в виде пленки). Свойства удельного сопротивления очень похожи. Рассмотрим поведение электронов в графене.

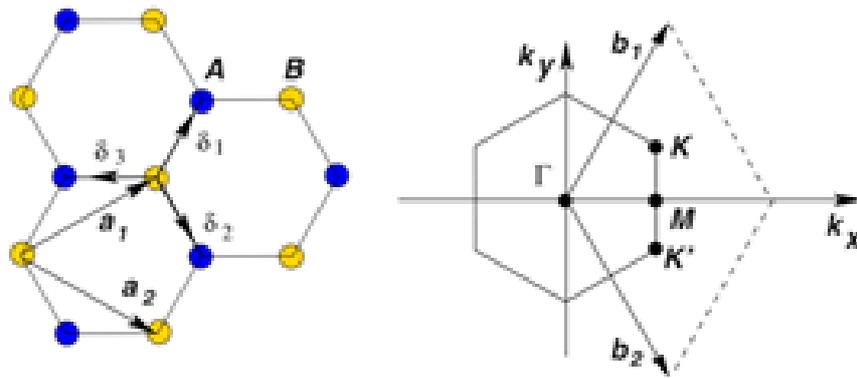


Рис. 4 Прямая и обратная решётки графена

По модели приближения сильно связанных электронов получено распределение энергии в пространстве импульса, это показано на рис. 5.

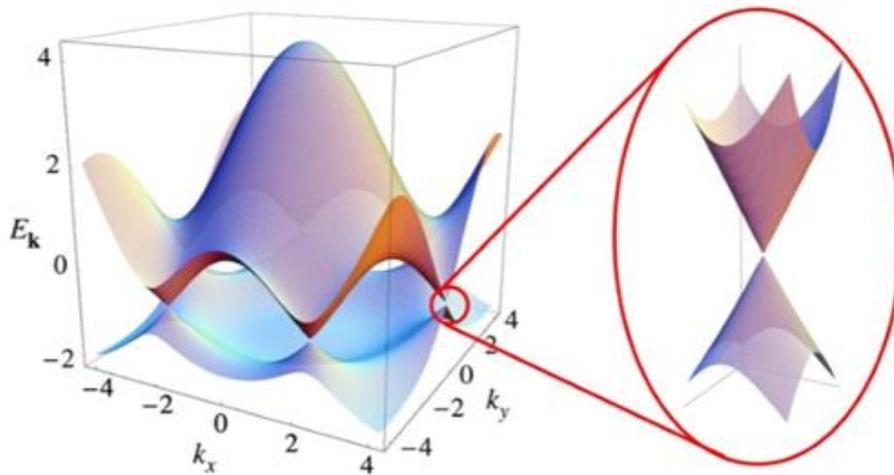


Рис. 5 Распределение энергии в пространстве импульса

В окрестности точки K получено, что эффективная масса электрона равна нулю из-за линейного соотношения дисперсии. В этом случае уравнение Шредингера уже не работает. Из преобразования Фурье для оператора энергии получим:

$$-i v_F \sigma \nabla \psi(r) = E \nabla \psi(r)$$

Получена компонента волновой функции в направлении K ,

$$\psi_{\pm, K}(k) = 1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} \\ \pm e^{i\theta/2} \end{pmatrix}$$

компонента волновой функции в направлении K' ,

$$\psi_{\pm, K'}(k) = 1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} e^{i\theta/2} \\ \pm e^{-i\theta/2} \end{pmatrix}$$

Эти две компоненты являются осесимметричными и фазы отличаются на π , то эти две компоненты можно рассматриваться как группу компонент спина и получим спиральности этих двух компонент: $\pm \frac{1}{2}$.

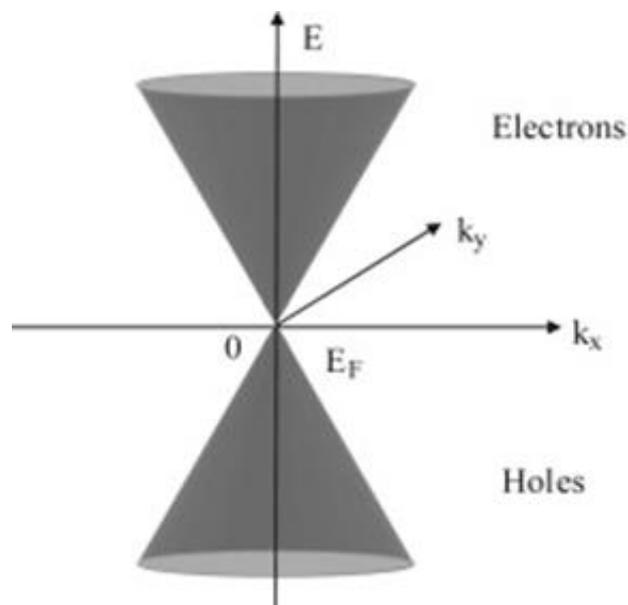


Рис. 6 Точка Дирака

Это очень похоже на электроны с нулевой массой и спином, ориентированным $\uparrow\downarrow$. Таким образом, электрон около точки K – это положительная частица, а дырка – это отрицательная частица. Электрон и дырка вместе называются Дирак фермионом. K – это точка Дирака (рис. 6).

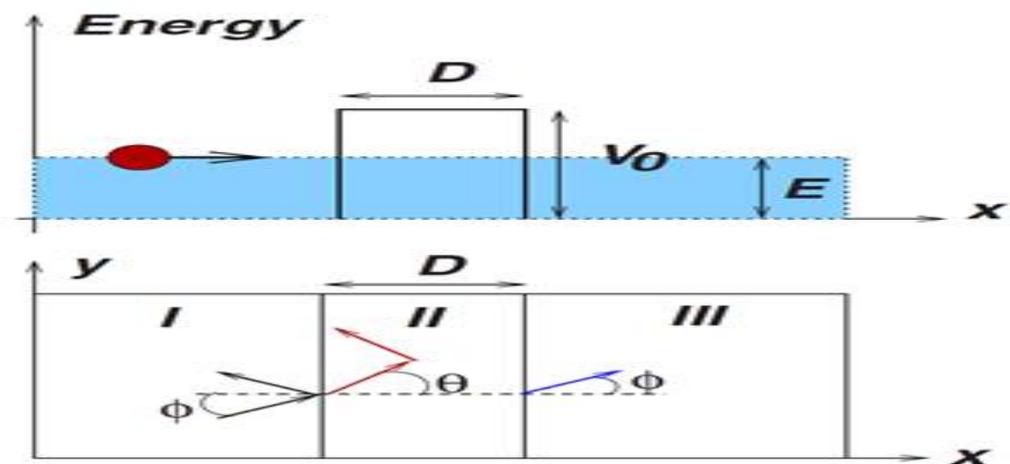


Рис. 7 Туннелирование электрона

Получим вероятность туннелирования:

$$T(\phi) = \frac{\cos^2 \phi}{(1 - \cos Dq_x \sin^2 \phi)}$$

При $\phi \rightarrow 0$, вероятность $T(\phi)$ приближается к 1, поэтому у электрона очень длинный свободный пробег и у нанотрубки и графена очень низкое удельное сопротивление.

Методы получения углеродных нанотрубок 1. Электродуговое распыление графита Самым распространенным методом является получение нанотрубок термическим распылением графитового анода в плазме дугового разряда [2] (рис. 8).

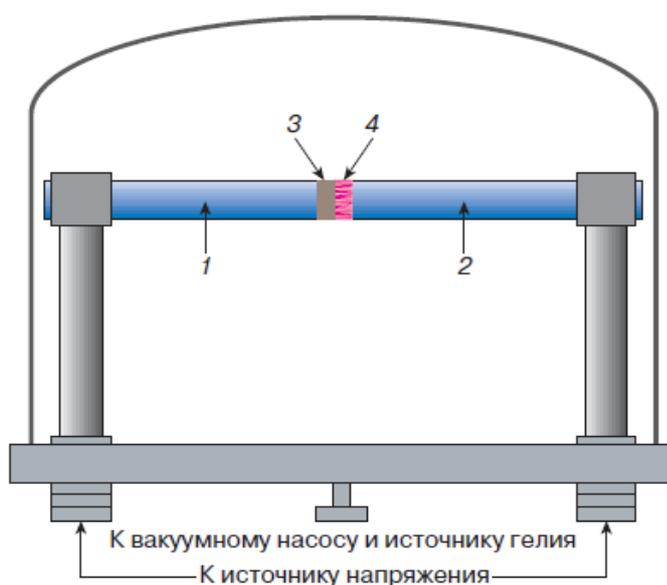


Рис. 8. Схема установки для получения нанотрубок: 1 – катод, 2 - анод, 3- углеродный осадок, содержащий нанотрубки, 4 – плазма дуги [2].

2. Метод при химическом осаждении из газовой фазы (CVD) или каталитическое разложение углеводородов. Существенные достижения в технологии получения нанотрубок связаны с использованием процесса каталитического разложения углеводородов. (На рис. 9 представлена схема проведения такого процесса [3].)



Рис. 9. Схема установки для получения нанотрубок методом химического осаждения [2].

Применение[1] Как было уже отмечено выше, в связи с наличием уникальных свойств углеродные нанотрубки могут применяться в различных областях науки и промышленности. Ниже представлены некоторые области их применения:

1 Механические применения: сверхпрочные нити, композитные материалы, нановесы.

2 Применения в микроэлектронике: транзисторы, нанопровода, прозрачные проводящие поверхности, топливные элементы.

3 Для создания соединений между биологическими нейронами и электронными устройствами в новейших нейрокомпьютерных разработках.

4 Капиллярные применения: капсулы для активных молекул, хранение металлов и газов, нанопипетки.

5 Оптические применения: дисплеи, светодиоды.

6 Медицина (в стадии активной разработки) [1].

Заключение Проведен сравнительный анализ свойств графита в макро- и наноструктурах. В процессе анализа литературных источников было обнаружено, что часть свойств наноструктуры графита отличаются от макроструктуры незначительно, а удельное электрическое сопротивление электрическое свойство очень сильно отличается. Показано, что основные причины изменения свойств графита из макро- в наноструктурах - это квантовые размерные эффекты, связи между атомами, и точка Дирака.

Список использованных источников

1 Елецкий А.В. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе // Успехи физических наук/ –2007. –Т.177, №3. –С.233-274;

2 Золотухин И.В. Углеродные нанотрубки// Соросовский образовательный журнал. Физика/ –1999. –№3. –С. 111–115;

3 Золотухин И.В., Калинин Ю.Е., Стогной О.В. Новые направления физического материаловедения: Учебное пособие – Воронеж: Издательство Воронежского государственного университета, –2000. –С. 360;

4 S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, Nature (London) 354, 56 (1991).

5 П.Н. Дьячков. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения. Москва, Издательство Бинум, Лаборатория знаний, 2006, 293 с.

6 Полякова А.А. Введение в масс-спектрометрию органических соединений. Влияние структуры и положения алкильного радикала на интенсивность образования ионов с массой 43

7 Гаврилов Ю.В. Переработка твердых природных энергоносителей. Примерный материальный баланс первичных продуктов синтеза углеводородов

