

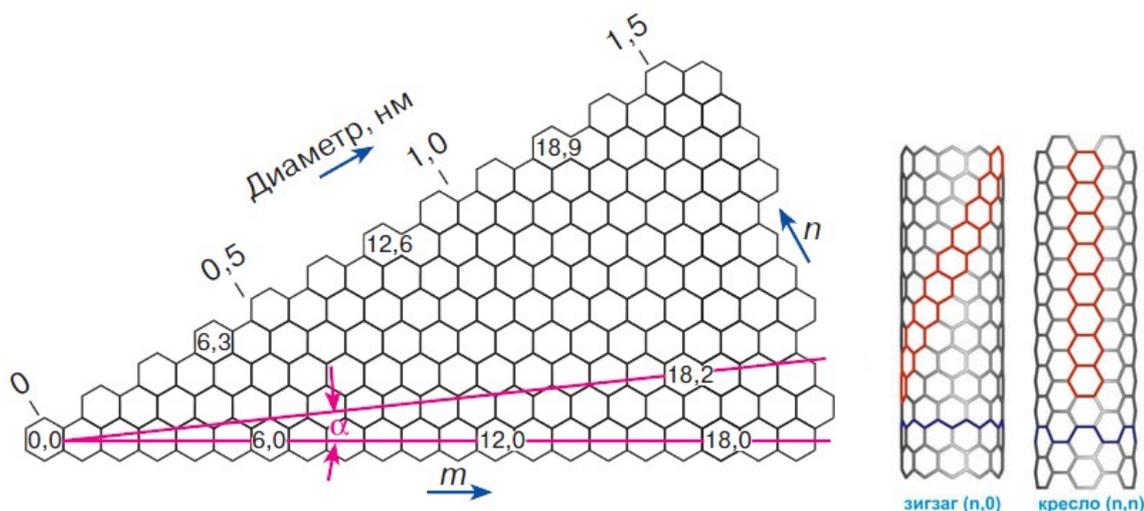
## Нанoeлектроника: квантово-химические вычисления.

### 3. Моделирование углеродных наноструктур (часть 2).

#### 6. Углеродные нанотрубки.

Нанотрубки представляют собой полые квазиодномерные наноструктуры, цилиндрическая оболочка которых образована шестичленными углеродными кольцами. Идеальную углеродную нанотрубку можно получить путем свертывания в цилиндр графенового листа без швов. Углеродные нанотрубки бывают одностенные и многостенные.

Хиральность является важной структурной характеристикой нанотрубок. Она задается двумя целыми числами  $n$  и  $m$ , которые определяют местоположение шестиугольника сетки (рис. 5), который должен совпасть с шестиугольником, расположенным в начале координат, в результате свертывания графитового слоя. Кроме того, хиральность нанотрубок может быть определена углом  $\alpha$  между направлением сворачивания гексагональной сетки графита и направлением, в котором соседние шестиугольники имеют общую сторону.



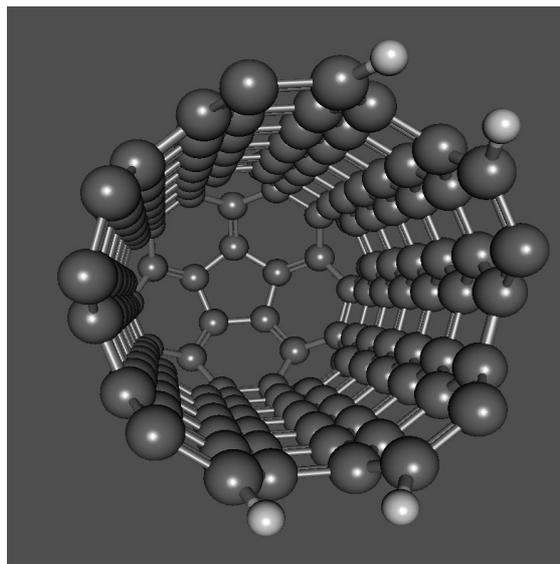
В зависимости от величины угла хиральности можно получить разные типы нанотрубок: нехиральные типа «кресло» (armchair,  $\alpha=0^\circ$ ) и типа «зигзаг» (zigzag,  $\alpha=30^\circ$ ), и хиральные с произвольным углом  $\alpha$  от  $0^\circ$  до  $30^\circ$ . Известно, что металлическими однослойными углеродными нанотрубками являются такие, для которых выполняется условие по индексам хиральности  $(n-m)/3 = s$ , где  $s$  – целое число. В противном случае нанотрубка будет являться полупроводником. Согласно теоретическим расчетам, все нанотрубки типа «кресло» обладают металлическим типом проводимости, углеродные трубки типа «зигзаг»  $(n, 0)$  при  $n=3k$  ( $k$  – целое число) – металлическим типом, при  $n \neq 3k$  – полупроводниковым [1].

Создайте в программе GabEdit две нанотрубки (каждую сохраните в своём файле) длиной порядка 6 нм и диаметром, соответствующим диаметру молекулы фуллерена  $C_{60}$ , обладающих металлической и полупроводниковой проводимостью. Для этого воспользуйтесь командой  $M > Build > Nanotube$ . Проведите геометрическую оптимизацию нанотрубок, измерьте длину, диаметр, сохраните файл. Соответствует ли измеренный диаметр выражению:  $D = \frac{a_0}{\pi} \sqrt{3(m^2 + n^2 + mn)}$ , где  $a_0 = 0.142$  нм – расстояние между соседними атомами углерода в графитовой плоскости. Определите аспектное отношение углеродной

нанотрубки, т.е. найдите отношение длины нанотрубки к ее радиусу. Занесите в отчёт полученные результаты, в том числе индексы хиральности ( $n$ ,  $m$ ) соответствующих нанотрубок.

### 7. Эксперименты с нанотрубками.

Оставьте для экспериментов нанотрубку, близкую к типу «зигзаг». Введите молекулу фуллерена  $C_{60}$  и удалите её половину. Полученную «крышку» присоедините к концу нанотрубки. Таким же способом закройте второй конец нанотрубки. Проверьте чередование двойных и одинарных связей, так чтобы нанотрубка не имела (или имела как можно меньше) оборванных связей, пассивированных водородом.



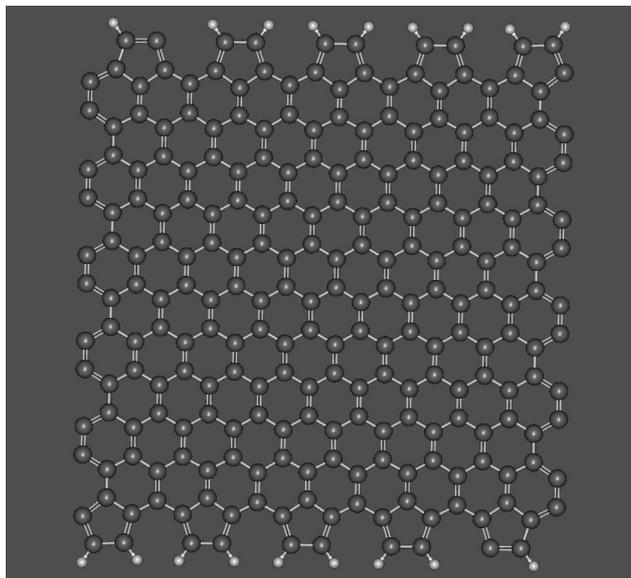
Интересным способом создания новых нанокompозитов на основе углеродных нанотрубок является интеркаляция различных проводящих, оптически активных или магнитных веществ во внутреннюю полость нанотрубки. Таким образом могут быть получены наноразмерные активные элементы электронных устройств и цепей. Введите в нанотрубку две-три молекулы глицерола ( $M > Add > Add a fragment > Miscellaneous$ ) и проведите геометрическую оптимизацию. Посмотрите молекулярную динамику при 300К, моделирование для 5 пс: сохраняется ли форма и целостность нанотрубки. Результаты (в т.ч. кинетическую и потенциальную энергию системы) отразите в отчёте.

Структурные дефекты углеродных нанотрубок серьезным образом влияют на их свойства. Так, например, существует однозначная связь между структурой и проводящими свойствами [2]. В частности, дефект связывания углеродных атомов (пара пентагональный-гептагональный фрагмент), возникший в нанотрубке, приводит к изгибу нанотрубки (угол изгиба от 0 до 15), изменению вектора хиральности с (8, 0) на (7, 1) в области дефекта. В результате изменяется тип нанотрубки: из конфигурации типа «зигзаг» она переходит в хиральную [1]. Попробуйте внести в структуру нанотрубки какой-либо дефект (это может быть как нарушение симметрии в углеродных связях, так и инородный атом), оптимизируйте геометрию. В этом случае для более корректных вычислений вам потребуется провести оптимизацию в программе Gamess. Полученные результаты представьте в отчёте.

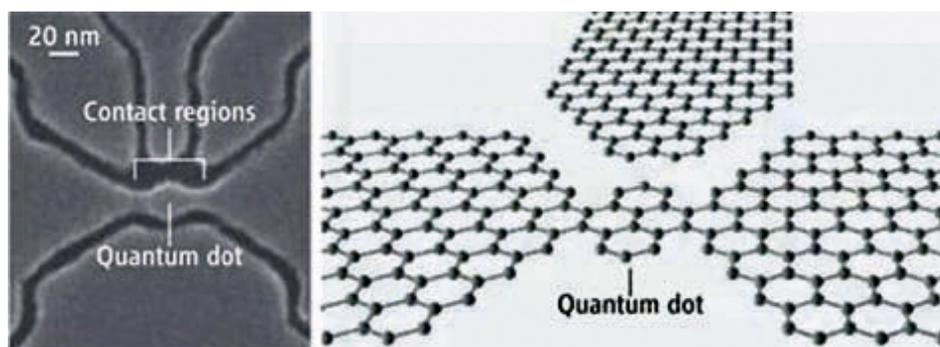
### 8. Эксперименты с графеном.

Откройте в программе GabEdit файл со второй нанотрубкой, созданной вами. «Разрежьте» её вдоль оси, оптимизируйте геометрию. Из нанотрубки должен получиться идеально плоский лист графена. Сохраните результат в новом файле. Подправьте связи на краях слоя, введите

недостающие атомы водорода, вновь проведите оптимизацию. Если она оказалась удачной, измерьте размеры полученного листа графена и сохраните результат. Добавьте полученный графеновый лист в список фрагментов, используя команду *M > Edit > Personal fragment > Add group*. В появившемся окне указываете имя собственной группы, где будут храниться добавляемые фрагменты. Затем выполняете команду *M > Edit > Personal fragment > Add this molecule to personnal fragments*. Указываете имя только что созданной группы, остальные параметры можно оставить по умолчанию.



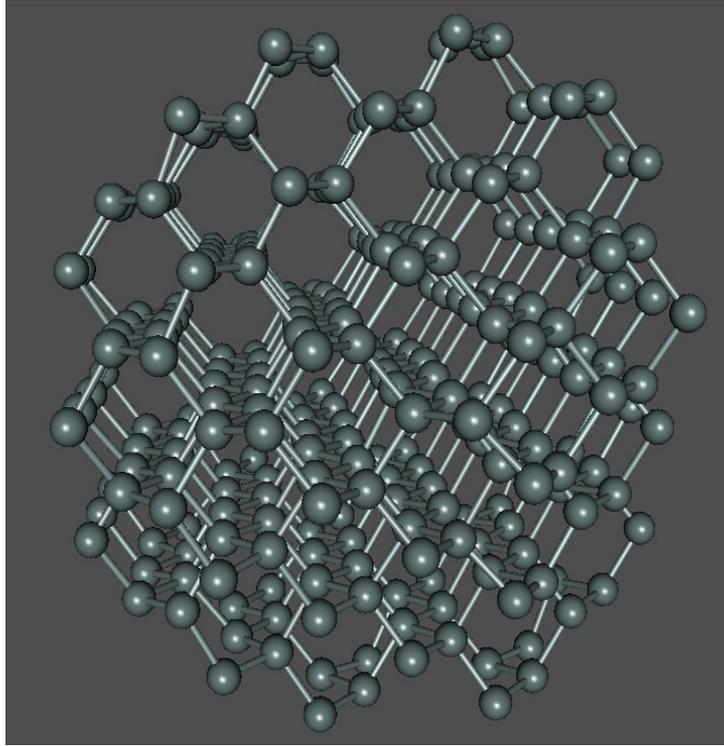
Вырежьте из графенового листа одноэлектронный транзистор, в соответствии с идеей, представленной на рисунке. Можете добавить к электродам атомы золота. Проведите оптимизацию геометрии такого транзистора. Полученный результат проинтерпретируйте в отчёте.



Добавьте к вашей молекуле, созданной на первом занятии, лист графена (из группы персональных фрагментов). Расположите их на близком расстоянии (порядка величины межатомной связи) и проведите оптимизацию геометрии. Полученные результаты занесите в отчёт.

Загрузите с сайта файл *Si\_3a.mol2*. Этот файл содержит наночастицу кремния. Создайте графеновый слой, который мог бы покрыть эту наночастицу. Возможно, это будут два графеновых слоя, между которыми будет находиться наночастица. Провести оптимизацию геометрии GabEdit не сможет, так как данные о кремниевых кластерах в параметрах оптимизации отсутствуют. Поэтому потребуется сформулировать задание на оптимизацию геометрии для Gamess. Поскольку атомов будет много, оптимизация займёт длительное

время даже в случае использования полуэмпирических методов. Опишите полученный результат. Измерьте среднее расстояние между атомами углерода и атомами кремния.



---

**Цитированная литература:**

1. Елисеев А.А., Лукашин А.В. Функциональные наноматериалы. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 456 с.
2. Суздалев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. – М.: КомКнига, 2006. – 592 с.