

УДК 53:621.315.59
PACS number(s): 62.20.Dc; 62.20.Dc; 79.60.Jv

ДОСЛІДЖЕННЯ ПРУЖНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОТРУБОК

Ю. Лісунова, М. Лісунова, Н. Головіна

*Волинський державний університет імені Лесі Українки,
пр.Волі,13, 43025 Луцьк, Україна
e-mail:post@univer.lutsk.ua*

Дослідження карбонових напівпровідникових нанотрубок як самостійний науковий напрям відносно швидко й легко увійшов до числа національних наукових пріоритетів провідних країн світу. Це пояснюють – фундаментальним значенням науки про наноструктури – природні об'єкти, які займають граничне положення між окремими атомами і твердим тілом. Відкриття останніми десятиліттями дивовижних форм карбону змушує по-новому поглянути на процеси, які відбуваються з участю карбону в неживій і живій природі. Водночас досвід світової науки свідчить, що властивості нового класу об'єктів часто відкриває абсолютно неочікувані можливості для їх практичного використання. З метою створення приладів, які базуються на напівпровідникових нанотрубках, потрібні знання їх фізичних параметрів.

У статті зроблено теоретичний та комп'ютерний розрахунки на відшукання коефіцієнтів пружності, модуля Юнга та фазової швидкості повздовжньої хвилі напівпровідникових нанотрубок.

Ключові слова: напівпровідникова нанотрубка, коефіцієнт пружності, модуль Юнга, фазова швидкість, хиральність.

Більшість перспективних напрямів у фізиці напівпровідників та діелектриків, у нанотехнології [2, 5], в наноелектроніці [4], у прикладній хімії пов'язують останнім часом з карбовими нанотрубками. В чому унікальність цих молекул?

По-перше, це різноманітність форм: нанотрубки можуть бути великими й малими, одношаровими та багатошаровими, прямими й спіральними [3].

По-друге, нанотрубки є на рідкість міцним матеріалом як на розтяг, так і на згин. Під дією механічних напруг, що перевищують критичні, нанотрубки не “ламаються” і не “рвуться”, а лише перебудовуються [4].

Нанотрубки мають цілий спектр найнеочікуваніших електричних, магнітних, оптичних властивостей [1, 6].

Що ж таке карбонова нанотрубка?

Ідеалізована нанотрубка – це згорнута в циліндр графітова площина, тобто поверхня, викладена правильними шестикутниками, у вершинах яких розташовані атоми карбону. Результат такої операції залежить від кута орієнтації графітової

площини щодо осі нанотрубки рис. 1. Кут орієнтації задає хиральність нанотрубки, що визначає її механічні та електричні характеристики. Цю властивість нанотрубок показано на рис. 1, де видно частину графітової площини і відзначено можливі напрями її згортання. Хиральність нанотрубок позначається деякими символами (m, n) , що вказують координати шестикутника, який в результаті згортання площини має збігтися із шестикутником, що міститься в початку координат [3].

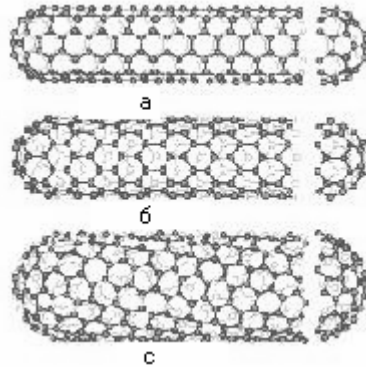


Рис. 1. Різні форми напівпровідникових нанотрубок: *a* – нанотрубка, утворена згортанням графітової площини в напрямі осі ОХ; *b* – нанотрубка, утворена згортанням графітової площини в напрямі осі ОУ; *c* – нанотрубка, утворена згортанням графітової площини під кутом

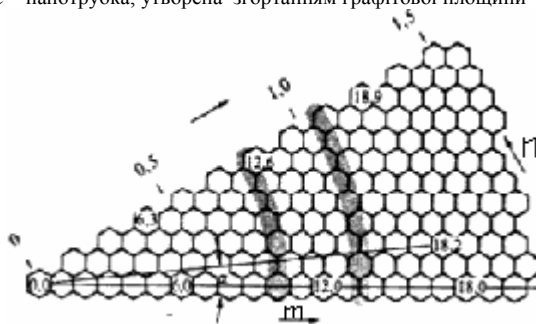


Рис. 2. Коефіцієнти хиральності графітової площини

Як видно з розрахунків, коефіцієнти пружностей карбонових нанотрубок залежать від їх хиральності, тобто при однакових геометричних розмірах нанотрубок, але при різних напрямках згортання графітової площини ми отримаємо різні коефіцієнти пружності.

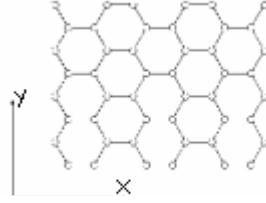


Рис. 3. Графітова площина

Нанотрубки типу рис. 1, *a* та рис. 1, *б* можна отримати з графітової площини (рис. 3) шляхом згортання її в напрямі осі *OX* або *OY*, відповідно. При невеликих силах розтягу кожний міжатомний зв'язок поводить себе як мікропружинка з цілком визначеною жорсткістю k_0 . Якщо замінити карбонову атомну ґратку на ґратку з однакових пружинок, ми отримаємо механічну модель. (Умовно розбиваємо всю нанотрубку на смужки, які моделюємо пружинками і помічаємо, що кожна смужка складається з тих самих ланок). У праці [7] були розглянуті задачі: паралельне та послідовне сполучення пружинок та “задача про намистинку”.

Роздивимось ґратку, згорнуту в напрямі осі *OX*. На підставі аналізу цих допоміжних задач можна визначити, що жорсткість однієї і тієї ж ланки становить $3k_0/8$. Якщо довжина нанотрубки L , а довжина кожного зв'язку в графітовій ґратці дорівнює a , то в кожній смужці перебуває $L/(3^{1/2}a)$ ланок, а отже, жорсткість всієї смужки становить $(3k_0/8)(3^{1/2}a/L)$. Якщо радіус нанотрубки дорівнює R , то вся нанотрубка складається з $2\pi R/(3a/2)$ вертикальних смужок.

Отже, розв'язок цих задач приводить до такого результату:

$$k_1 = \frac{2\pi R}{4L} k_0 3^{\frac{1}{2}}. \quad (1)$$

Той самий підхід застосуємо до нанотрубки, що одержується шляхом згортання в напрямі осі *OY*. Знову умовно розбиваємо всю нанотрубку на смужки, тепер вже горизонтальні, й помічаємо, що кожна смужка складається з тих же ланок. Різниця лише в тому, що ці ланки розтягуються вже в напрямі осі *OX*. Жорсткість ланки в цьому напрямі дорівнює $k_0/3$. У такій нанотрубі довжиною L та радіуса R маємо $L/(3a/2)$ кільцевих смужок, а в кожній смужці – по $2\pi R/(3^{1/2}a)$ ланок. Тому повна жорсткість всієї нанотрубки, що згорнута в напрямі осі *OY*, дорівнює

$$k_2 = \frac{2\pi R}{L} k_0 \frac{1}{2 \cdot 3^{\frac{1}{2}}}, \quad (2)$$

де k_1, k_2 – коефіцієнти пружностей карбонових нанотрубок, утворених згортанням графітової площини в напрямі осі *OX, OY*, відповідно; R – радіус, L – довжина нанотрубки, k_0 – коефіцієнт пружності однієї ланки.

Порівнюючи k_1 й k_2 , отримуємо такий результат:

$$k_1 = \frac{3}{2} k_2. \quad (3)$$

Радіус нанотрубки залежить від коефіцієнтів хиральності, а саме:

$$R = d_0 \frac{\sqrt{3(m^2 + n^2 - mn)}}{4\pi}, \quad (4)$$

де $d_0 = 0,142$ нм – відстань між сусідніми атомами карбону в графітовій площині.

Якщо ми розглядаємо нанотрубку в напрямі отриманому згортанням в напрямі ОХ, хиральність її має коефіцієнти $(m, 0)$. Отже, радіус нанотрубки

$$R = d_0 \frac{\sqrt{3}m}{4\pi}. \quad (5)$$

Підставляючи це значення радіуса в формулу для коефіцієнта пружності, отримуємо

$$k_1 = \frac{3k_0}{8L} d_0 m. \quad (6)$$

Аналогічні розрахунки проводимо і для нанотрубки, що отримана згортанням в напрямі ОУ, хиральністю $(0, n)$

$$k_2 = \frac{k_0}{4L} d_0 n. \quad (7)$$

З формул видно, що при однакових розмірах, нанотрубка отримана згортанням графітової ґратки в напрямі осі ОХ, є міцнішою у півтора раза за нанотрубку, отриману згортанням графітової ґратки в напрямі осі ОУ.

Крім того, з формул робимо висновок, що чим більше радіус нанотрубки, тобто чим більший коефіцієнт хиральності, тим вона міцніша.

Підставляючи значення k_0 , d_0 та L , можна визначити коефіцієнти пружностей нанотрубок.

Знайшовши коефіцієнти пружності, можна легко відшукати напругу на розтяг, тобто модуль Юнга, що становить

$$E = \frac{kL}{2\pi R^2}, \quad (8)$$

$$E = \frac{\pi k_0}{d_0 \sqrt{m^2 + n^2 - mn}}. \quad (9)$$

Ці розрахунки можна застосувати для визначення фазової швидкості поширення повздовжніх хвиль в нанотрубці:

$$v(E, \rho) = \sqrt{\frac{E}{\rho}}; \quad (10)$$

$$E(m, n, d_0, k_0) = \frac{\pi \cdot k_0}{d_0 \cdot \sqrt{m^2 + n^2 - mn}}; \quad (11)$$

$$v(E, \rho) = \sqrt{\pi \cdot \frac{k_0}{d_0 \cdot (m^2 + n^2 - mn)}}. \quad (12)$$

Отже, щоб визначити фазову швидкість, достатньо знати коефіцієнти хиральності для нанотрубки, утвореної під час згортання графітової площини в напрямі осі ОХ або ОУ, та густину нанотрубки або нанотрубної речовини. Для знаходження густини ми пропонуємо використовувати комп'ютерні розрахунки – створення нанотрубки в хімічній програмі NupurChim. Програма дає змогу розраховувати не тільки механічні параметри: об'єм, масу, кількість атомів карбону, але й інші характеристики, які в цій програмі не розглядаються.

Ми змодельовали в NuregChim напівпровідникові нанотрубки з хиральністю (17,0) та (0,17), утворені згортанням графітової площини відповідно в напрямі осей OX та OY. Отримані результати наведені в таблиці 1.

Таблиця 1

Механічні параметри нанотрубок (17,0) і (0,17)

Кількість атомів	370
Маса	$7110,512 \cdot 10^{-27}$ кг
Об'єм	$6165,79 \cdot 10^{-30}$ м ³
Площа поверхні	$124,47 \cdot 10^{-20}$ м ²

Густина нанотрубки (17,0) і (0,17) – 1153 кг/м³.

Підставляючи коефіцієнти хиральності та густину у формули (11), (12) визначимо модуль Юнга та фазову швидкість для нанотрубок (17,0) та (0,17):

Таблиця 2

Модуль Юнга, фазова швидкість нанотрубок (17,0) і (0,17)

нанотрубка (17,0)	нанотрубка (0,17)
Модуль Юнга	
$E_1 = \frac{\pi}{d_0 m} \cdot k_0$	$E_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}d_0 n} \cdot k_0$
Фазова швидкість	
$v_1(E, \rho) = \sqrt{\frac{\pi k_0}{d_0 m}}$	$v_2(E, \rho) = \sqrt{\frac{2\pi k_0}{\sqrt{3}d_0 n}}$

На підставі теоретичних та комп'ютерних розрахунків були знайдені коефіцієнти пружності, модуль Юнга та фазова швидкість повздовжньої хвилі напівпровідникових нанотрубок залежно від способу їхнього утворення.

Одержані формули приводять до таких висновків:

- за однакових розмірів нанотрубка, отримана згортанням графітової ґратки в напрямі осі OX, є міцнішою в півтора раза за нанотрубку, отриману згортанням графітової ґратки в напрямі осі OY;
- чим більший радіус нанотрубки, тобто чим більший коефіцієнт хиральності, тим міцнішою є нанотрубка;
- фазова швидкість визначається густиною, коефіцієнтами хиральності та напрямом згортання графітової площини.

Можливий розгляд зворотної задачі, вимірюючи фазову швидкість у напівпровідниковій нанотрубі, при відомій густині визначаємо модуль Юнга, коефіцієнти хиральності, коефіцієнт пружності.

1. *Гвозденко А.* Транзисторы на углеродных нанотрубках – очередной рывок IBM на полупроводниковом рынке? // Компьютерное обозрение. 2001. №17. 46 с.
2. *Курик М.В., Цмоць В.М.* Фізика твердого тіла. К.: Вища школа, 1985. 246 с.
3. *Уайтсайде Дж., Эйглер Д., Андерс Р.* Нанотехнология в ближайшем десятилетии: Прогноз направления исследований / Пер. с англ. М.:Мир, 2002. 292 с.
4. *Кречмер В.* Новые формы углерода // Природа. 1992. Ч. 1. 30 с.
5. *Ходаковський О.* Нанотехнології та утвердження суспільства знань // Фізика та астронімія в школі. 2004. № 1. 24 с.
6. *Dresselhaus M.S., Dresselhaus G.* Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. SanDiego:Academic, 1996.

THE INVESTIGATION OF THE FLEXIBLE FEATURES OF SEMICONDUCTOR NANOTUBERS

Y. Lisunova, M. Lisunova, N. Golovina

*Volyn State University named after Lesya Ukrainka,
pr. Voli 13, 43025 Lutsk, Ukraine
e-mail:post@univer.lutsk.ua*

The Investigation of the carbon semiconductor nanotubes, as an independent scientific direction has entered relatively fast and easily to the list of national scientific priorities of the leading countries of the world. The explanation of this is the fundamental meaning of the science about nanotubes, natural objects that take the bordering position between separate atoms and a solid state. The discoveries of the extraordinary forms of carbon made during the last decade's faces us to make a new glance on fundamental processes that take place along with a participation of carbon in an alive and non-alive nature. At the same time the experience of the world science witnesses that fundamental features of the new class of objects often opens the absolutely unexpected possibilities for practice use.

To create the sets based on semiconductor nanotubes the knowledge of physical parameters is necessary. in this work the theoretical and computer calculations on the flexibility coefficient. Where made, as well as the module of Yung and the phase speed of a horizontal wave Semiconductor nanotubes.

Key words: Semiconductor nanotube, flexibility, coefficient, and module of Yung, phase speed, chiral.

Стаття надійшла до редколегії 19.05.2004
Прийнята до друку 21.11.2005