

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»  
Обнинский институт атомной энергетики

Факультет естественных наук  
Кафедра фармацевтической и радиофармацевтической химии



# **ОТЧЕТ**

## **по производственной практике**

Выполнила студентка группы ХФМ-М16: Фролова И.И.

Научный руководитель: Шахматов В.С.

### Цели практики:

- 1) Закрепление и расширение теоретических и практических знаний по специальности и применение этих знания для решения конкретных задач;
- 2) Изучение физико-химических свойств углеродных нанотрубок.
- 3) Расчет электронных дисперсионных кривых углеродных нанотрубок методом кратной зоны Бриллюэна и определение их симметричных свойств.

### Задачи:

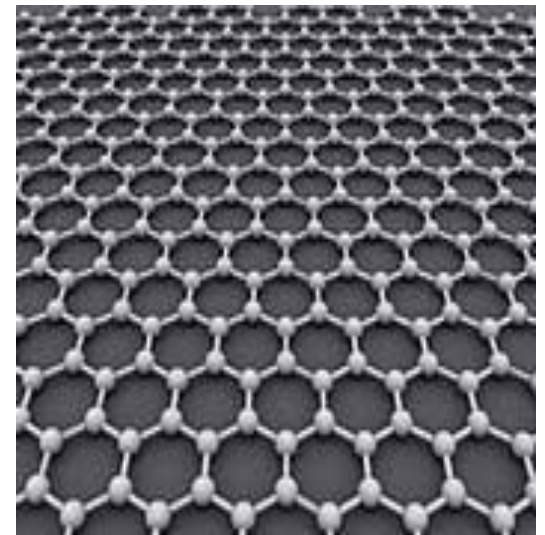
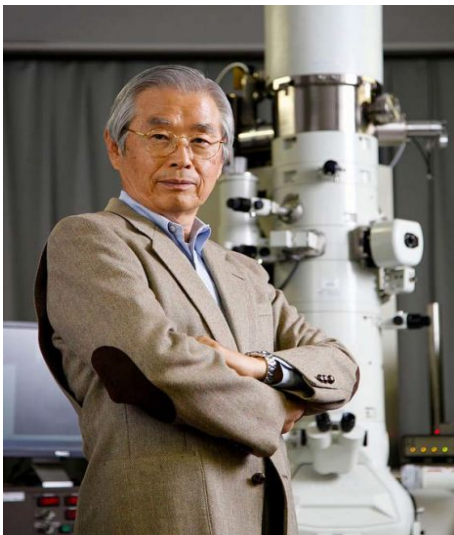
- 1) Изучить обзор литературы по физико-химическим свойствам графена и углеродных нанотрубок;
- 2) Рассмотреть структуру, симметрию графена и углеродных нанотрубок;
- 3) Описать квантово-механические электронные свойства углеродных соединений.
- 4) Рассмотреть симметричные свойства углеродных соединений и теорию симметрии.

### Методы исследования:

Для решения поставленных задач использованы методы современной математической и теоретической физики: теория групп, квантовой механики, статистической физики, кристаллографии и методы компьютерного моделирования.

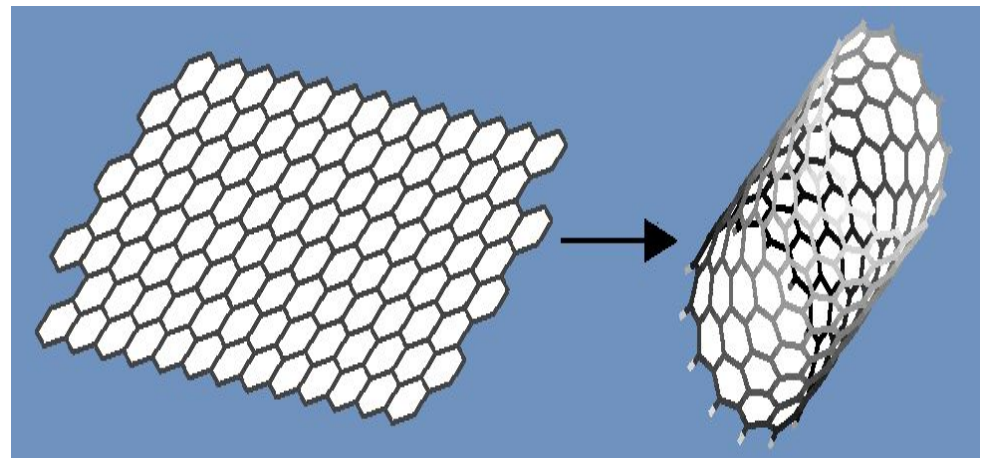
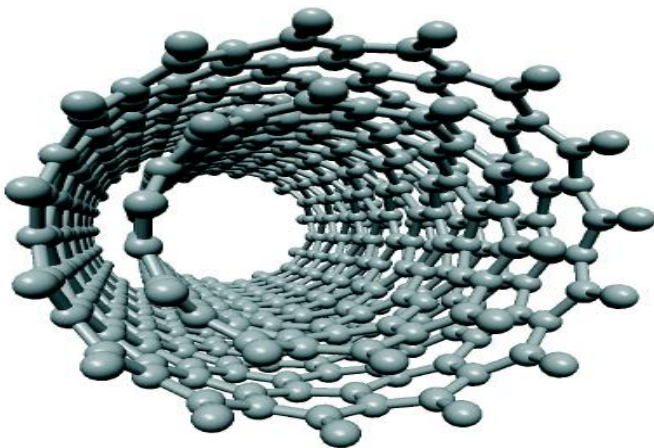
# Актуальность

Исследование нанотрубок имеет большие перспективы в развитии, так как они обладают уникальными комбинациями свойств. Такие свойства нанотрубок, как жёсткость, прочность и упругость в сочетании с интересными электродинамическими и теплопроводящими свойствами позволяют найти применение в микроэлектронике, медицине, биотехнологии, энергетике и других областях научного знания.



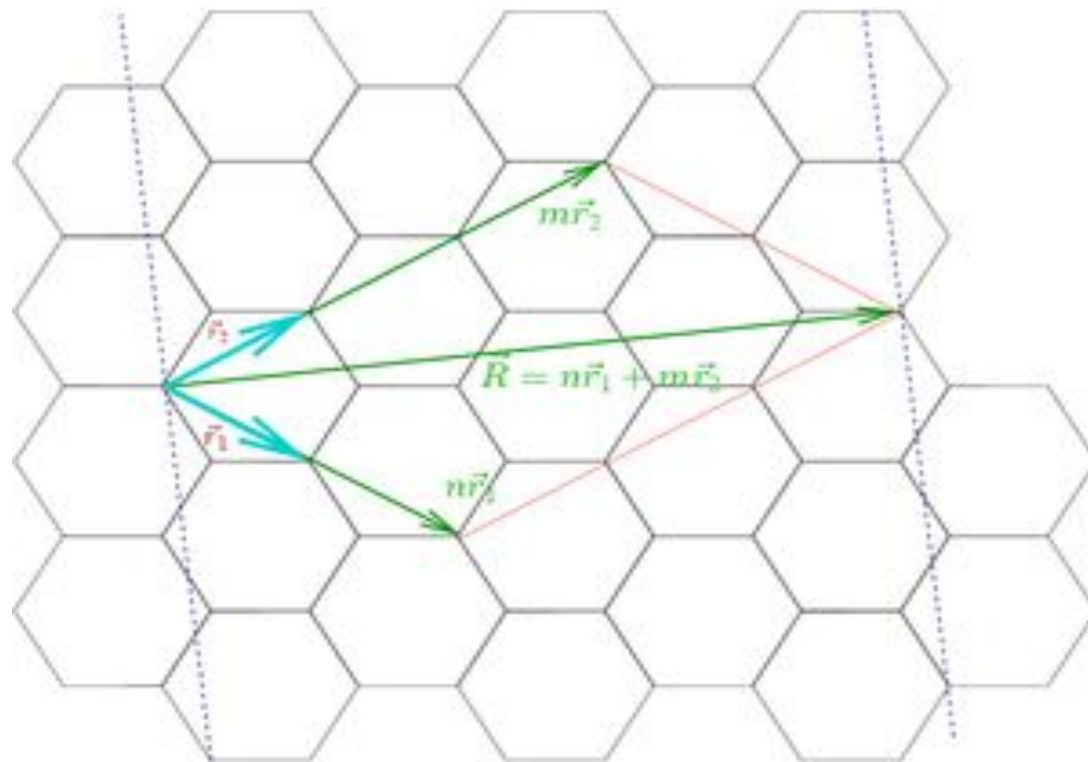
# Углеродные нанотрубки

- Углеродные нанотрубки были экспериментально получены в 1991г. японским физиком–исследователем Иджимой.
- Нанотрубки представляют собой цилиндрические макромолекулы диаметром порядка нанометра и длиной до нескольких микрон, состоящие из одного или нескольких свернутых в трубку гексагональных графитовых слоев обычно закрытых полусферой.
- Результат операции сворачивания зависит от угла ориентации графитовой плоскости относительно оси нанотрубки. Угол ориентации задает хиральность нанотрубки, которая определяет ее электрические характеристики.

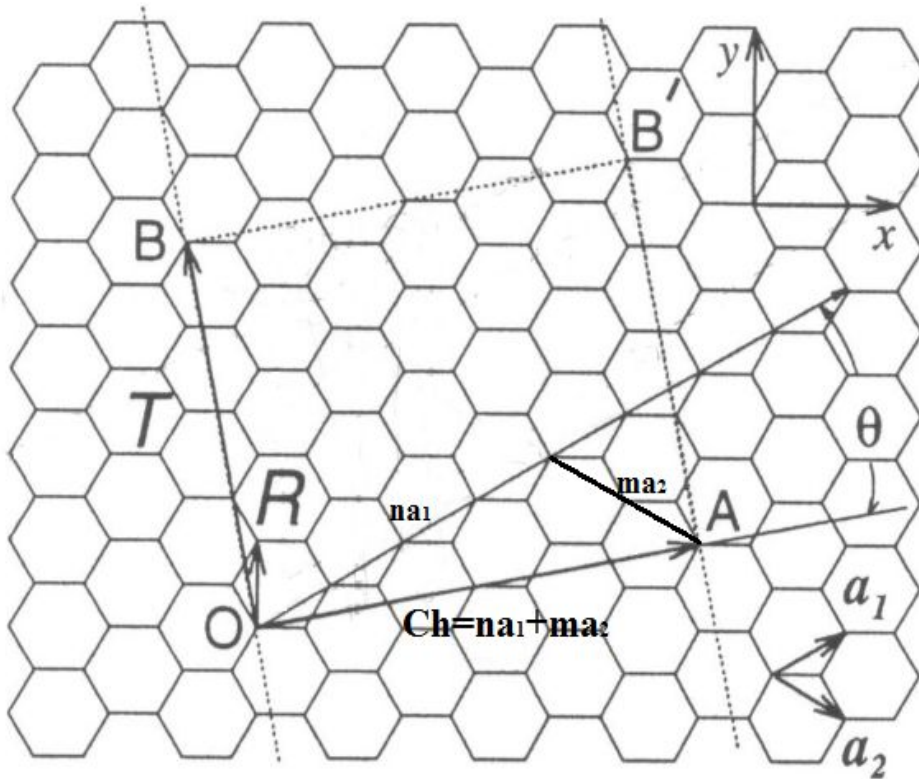


# Хиральность

Обозначается набором символов  $(m, n)$ , указывающих координаты шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости должен совпадать с шестиугольником, находящимся в начале координат.



# Структура углеродных нанотрубок



Диаметр нанотрубки

$$|a_1| = |a_2| = |a| = d_0\sqrt{3}$$

$$d = \sqrt{(n^2 + nm + m^2)} \frac{d_0\sqrt{3}}{\pi} = \frac{0,246\sqrt{(n^2 + nm + m^2)}}{\pi}$$

Хиральный угол  $\theta$  (угол между  $Ch$  и  $a_1$ )

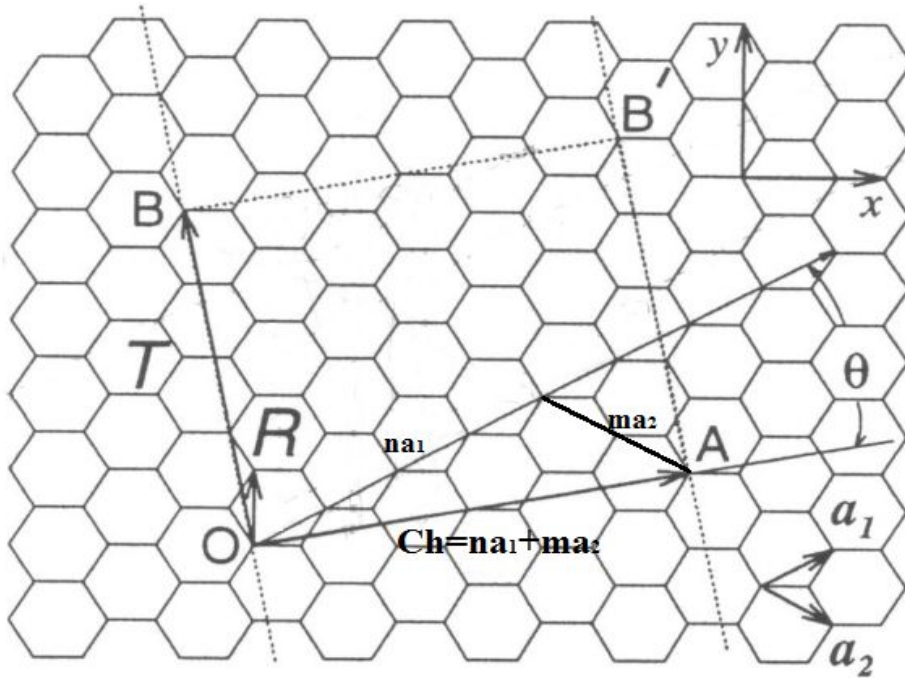
$$\cos \theta = \frac{Ch * a_1}{|Ch||a_1|} = \frac{2n + m}{2\sqrt{(n^2 + nm + m^2)}}$$

Вектор хиральности  $Ch = 4a_1 + 2a_2$  иллюстрирует возможное направление сворачивания двумерного графенового слоя в трубчатую структуру.

Хиральный угол лежит в пределах  $0^\circ \leq \theta \leq 30^\circ$

Зигзаг конфигурации соответствует  $\theta = 0^\circ$ , кресло конфигурации  $\theta = 30^\circ$

# Структура углеродных нанотрубок



Трансляционный вектор  $T$

$$T = \frac{\sqrt{3}Ch}{d_R}$$

Число гексанов в элементарной ячейке

$$N = \frac{2(n^2 + nm + m^2)}{d_R}$$

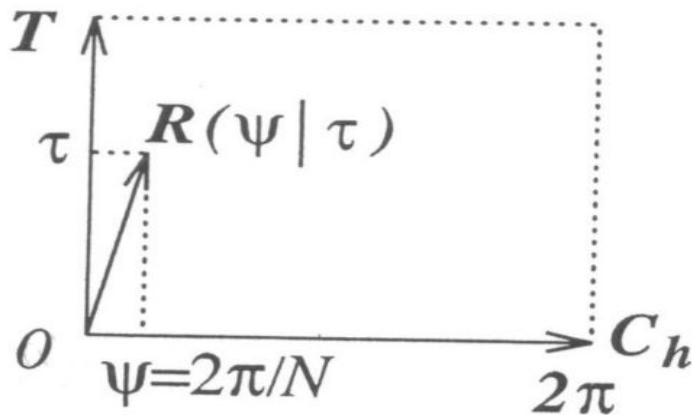
Число углеродных атомов  $= 2N$

Вектор симметрии

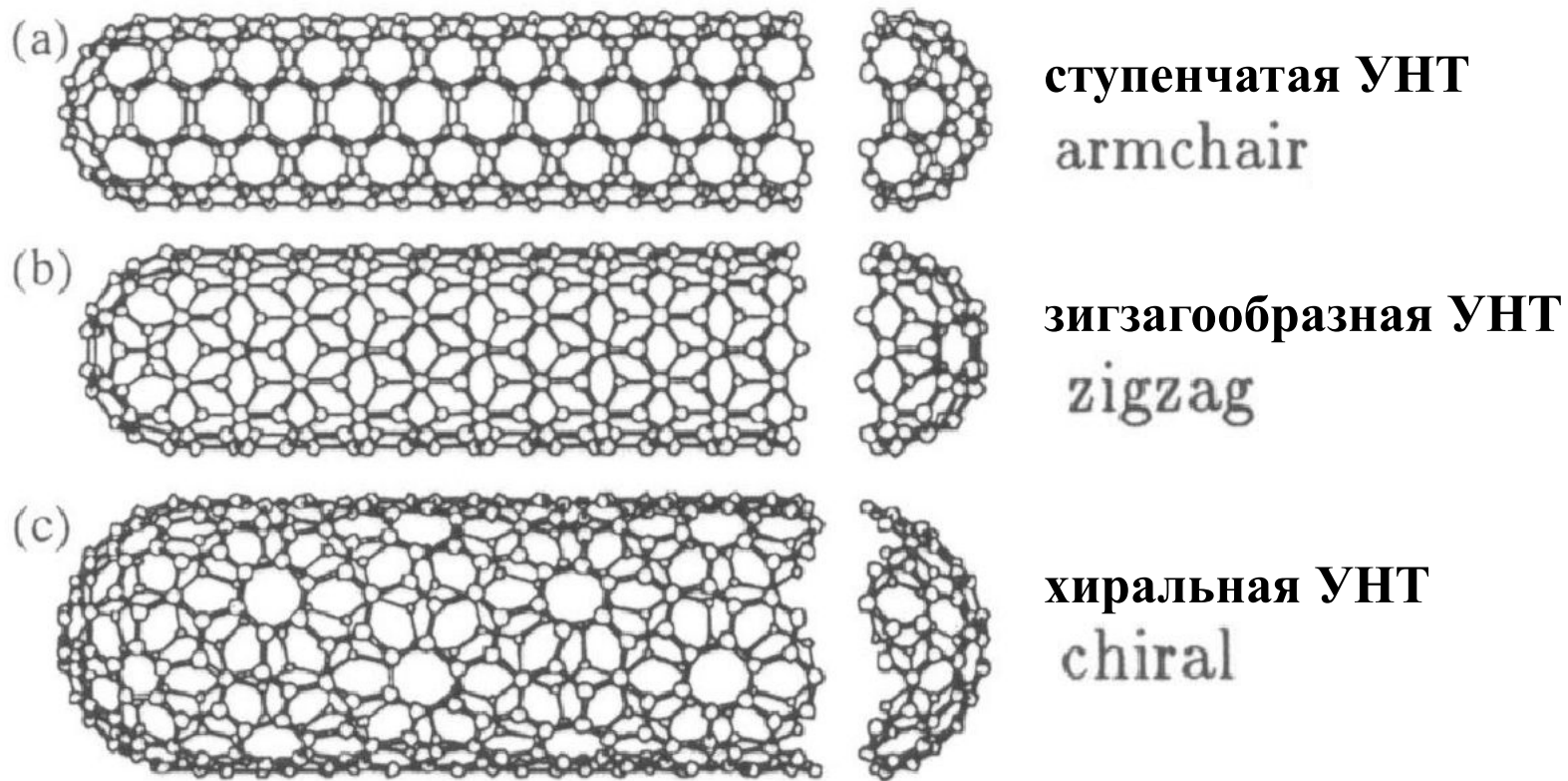
$$R = pa_1 + qa_2 \equiv (p, q)$$

$$r = \frac{|R * Ch|}{L} = \frac{(mp - nq)|a_1 * a_2|}{L} = \frac{(mp - nq)T}{N}$$

$$\psi = \frac{|T * R|}{T} \frac{2\pi}{L} = \frac{d_R(t_1q - t_2p)a_2\sqrt{3}}{\sqrt{3}L} \frac{2\pi}{2} = \frac{2\pi}{N}$$



# Структура углеродных нанотрубок



диаметры УНТ: 0.7 – 10.0 nm

(a)  $C_h = (5, 5)$

(b)  $C_h = (9, 0)$

(c)  $C_h = (10, 5)$



# Структура и симметрия графена

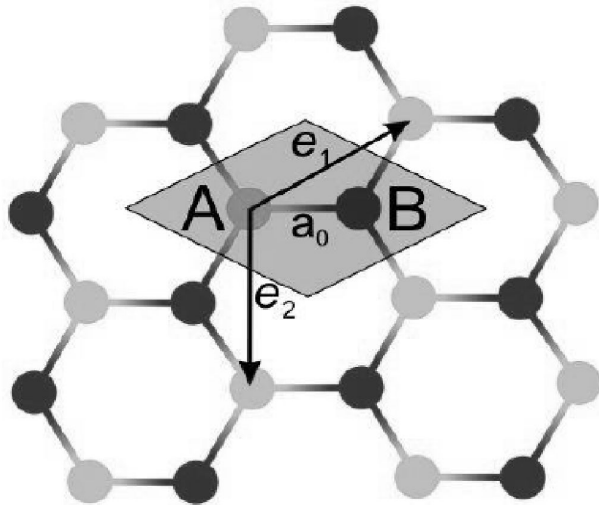
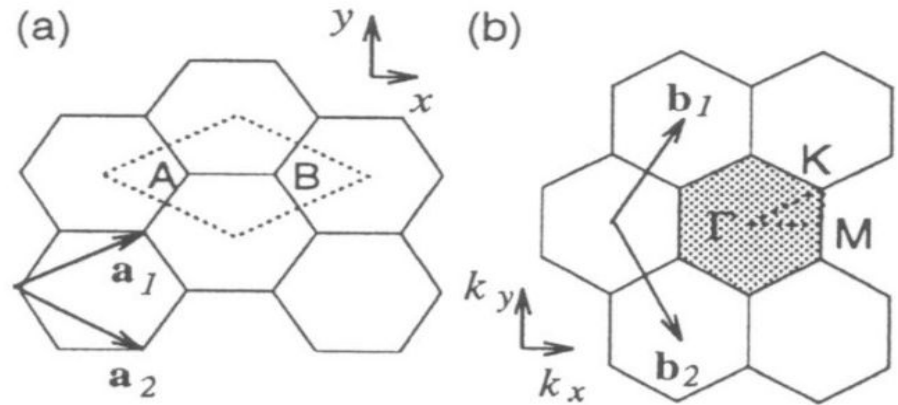


Рис. 1. Кристаллическая решетка графена. Элементарная ячейка выделена серым параллелограммом,  $e_1$  и  $e_2$  – вектора трансляции. Черным и серым цветами показаны неэквивалентные атомы, соответствующие разным подрешеткам графена.



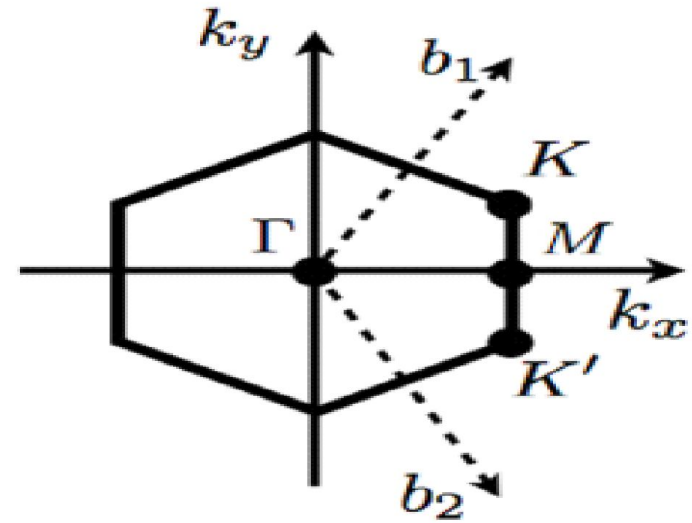
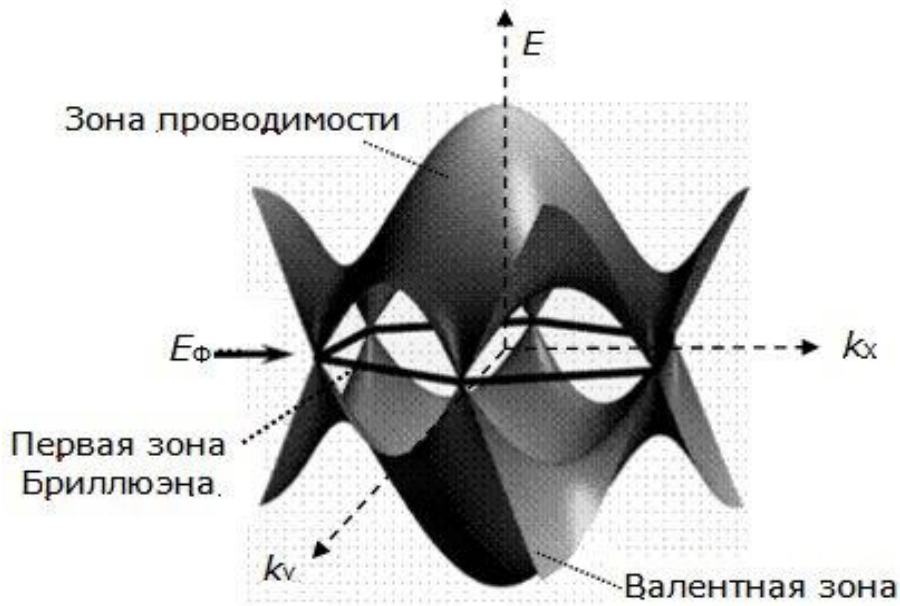
**Вектора прямой решетки графена  $a_1, a_2$**  (в координатах  $e_x, e_y$ )

$$\vec{a}_1 = \left( \frac{\sqrt{3}}{2} a, \frac{a}{2} \right) \quad \vec{a}_2 = \left( \frac{\sqrt{3}}{2} a, \frac{a}{2} \right)$$

**Вектора обратной решетки графена  $b_1, b_2$**  (в координатах  $k_x, k_y$ )

$$\vec{b}_1 = \left( \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{a} \right), \quad \vec{b}_2 = \left( \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, -\frac{2\pi}{a} \right)$$

# Зонная структура двумерного графенового листа



Зона Бриллюэна представлена на рис. показаны специальные высокосимметричные точки  $K$ ,  $K'$ ,  $M$ , с волновыми векторами:

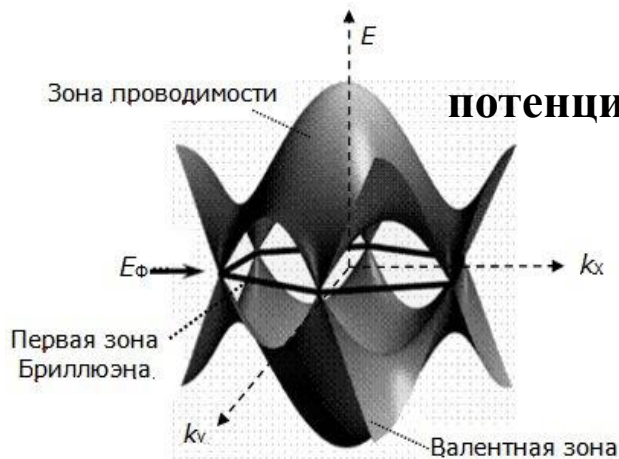
$$K = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3a\sqrt{3}} \right)$$

$$K = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3a\sqrt{3}} \right)$$

$$M = \left( \frac{2\pi}{3a}, 0 \right)$$

В рамках одноэлектронной модели движение электрона в кристалле описывается уравнением Шредингера:

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi = E\psi$$



потенциальная энергия кристалла  $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$

Волновая функция графена представляется в виде блоховских функций отдельных электронов в различных подрешётках кристалла:

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r}), \text{ где } u_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{nk}(\mathbf{r})$$

В приближении сильной связи одноэлектронные уровни энергии можно получить в аналитической форме в виде:

$$E(k_x, k_y) = \gamma_1 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{a_g r k_y \sqrt{3}}{2}\right) \cos\left(\frac{a_g r k_x}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{a_g r k_x}{2}\right)}$$

Линейный закон дисперсии

$$E = \hbar v_F k,$$

# Основные возможности биомедицинского применения углеродных нанотрубок

- диагностика раковых заболеваний

*Биосенсоры*

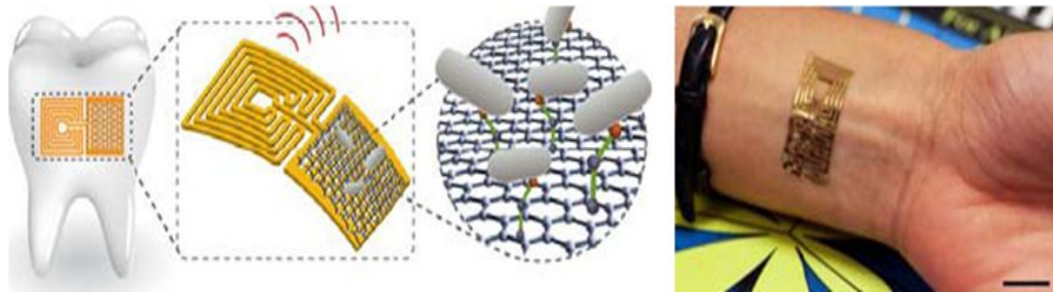


Рис. 1. Схема и фотография графенового беспроводного наносенсора. Шкала на фотографии 1 см.

- системы адресной доставки диагностических и лекарственных средств
- фототермическая терапия

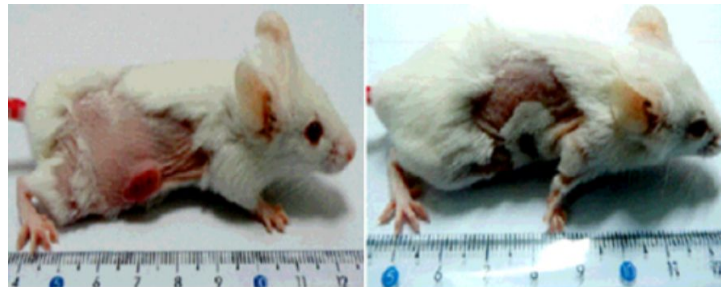
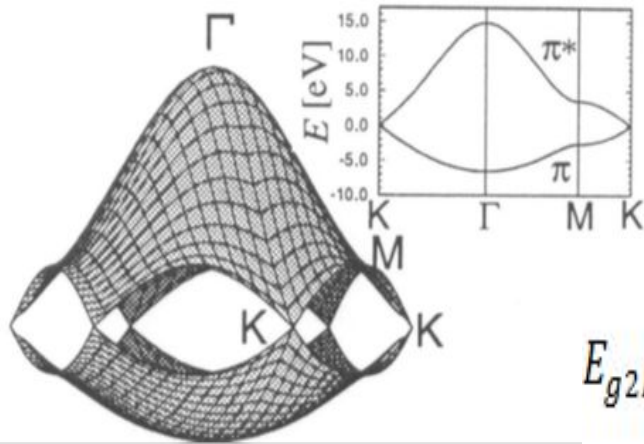


Рис. 2. Слева – мышь с опухолью. Справа – мышь после введения нанографена и облучения лазером.

# Расчеты зонной структуры графена ( $\pi$ зоны) методом сильной связи



В результате применения метода сильной связи к данной решетке при расчете  $\pi$  – связей было получено следующее выражение:

$$E_{g2D}(\vec{k}) = \frac{\epsilon_{2p} \pm t \omega(\vec{k})}{1 \pm s \omega(\vec{k})}, \text{ где } \omega(\vec{k}) = \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3} k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}}$$

$$s = 0.129$$

$$\epsilon_{2p} = 0, t = -3.033 \text{ eV}$$

Рис.2. Дисперсионное соотношение для графена во всей зоне Бриллюэна в модели сильной связи.

$\mathcal{H}$	value (eV)	$\mathcal{S}$	value
$\mathcal{H}_{ss}$	-6.769	$\mathcal{S}_{ss}$	0.212
$\mathcal{H}_{sp}$	-5.580	$\mathcal{S}_{sp}$	0.102
$\mathcal{H}_{\sigma}$	-5.037	$\mathcal{S}_{\sigma}$	0.146
$\mathcal{H}_{\pi} \equiv t$	-3.033	$\mathcal{S}_{\pi} \equiv s$	0.129
$\epsilon_{2s}^{(a)}$	-8.868		

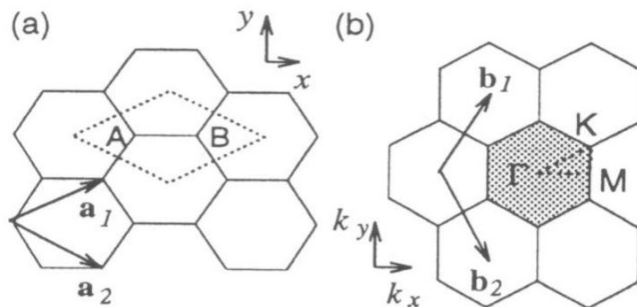


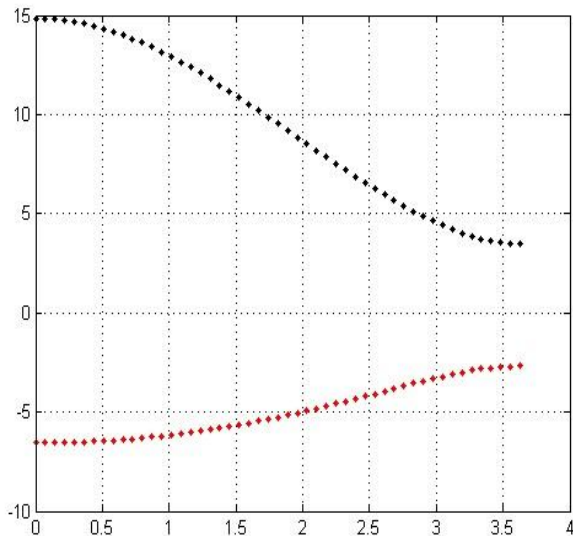
Табл.1. Значения параметров для соединений атомов углерода в Гамильтониане

# Расчеты зонной структуры графена ( $\pi$ зоны) методом сильной связи

В результате расчетов энергии для  $\pi$  –зоны графена были получены следующие графики выраженные в  $E(\text{eV})$  :

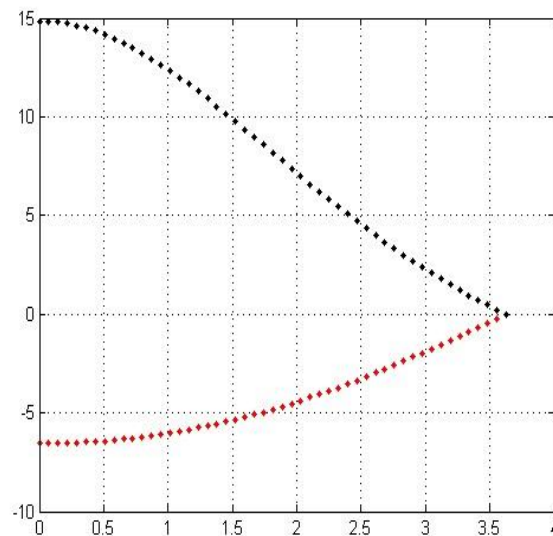
Для ГМ направления:

$$x_1=0; \quad x_2=\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}; \quad y_1=0; \quad y_2=0;$$



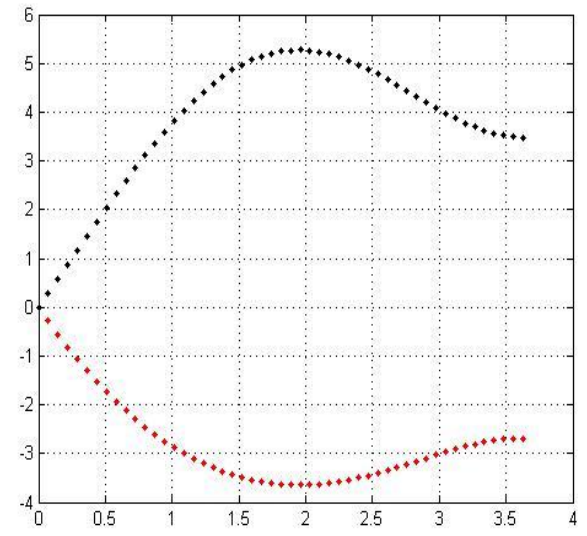
Для ГК направления:

$$x_1=0; \quad x_2=\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}; \quad y_1=0; \quad y_2=\frac{2\pi}{3};$$



Для МК1 направления:

$$x_1=\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}; \quad x_2=0; \quad y_1=0; \quad y_2=\frac{4\pi}{3};$$



# Выводы

1. Исследования дисперсионных свойств углеродных наноматериалов достаточно удобно проводить в рамках метода сильной связи.
2. Для расчета  $\pi$  – зоны графена по методу сильной связи были использованы значения параметров для соединений атомов углерода в Гамильтониане, плоская элементарная ячейка и соответствующая ей зона Бриллюэна.
3. В результате расчетов энергии для  $\pi$  – зоны графена были получены графики выраженные в  $E(\text{eV})$ .