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 симметрийных 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.

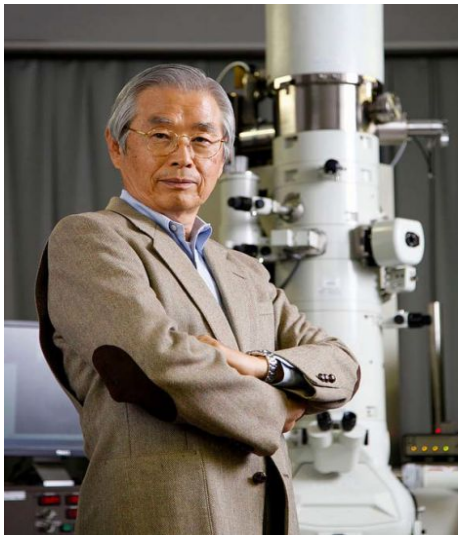
4) Рассмотреть симметрийные свойства углеродных соединений и теорию симметрии.

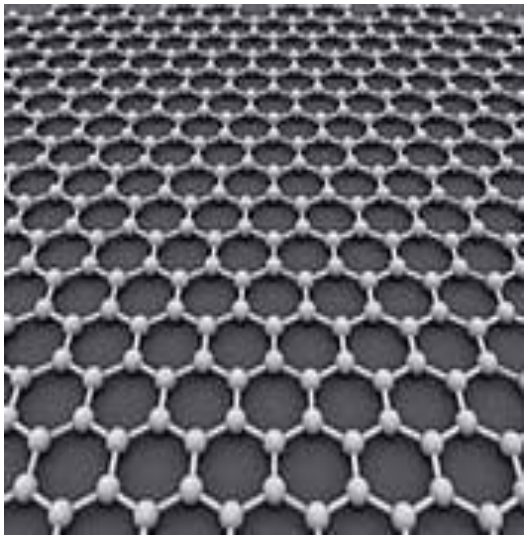
Методы исследования:

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.



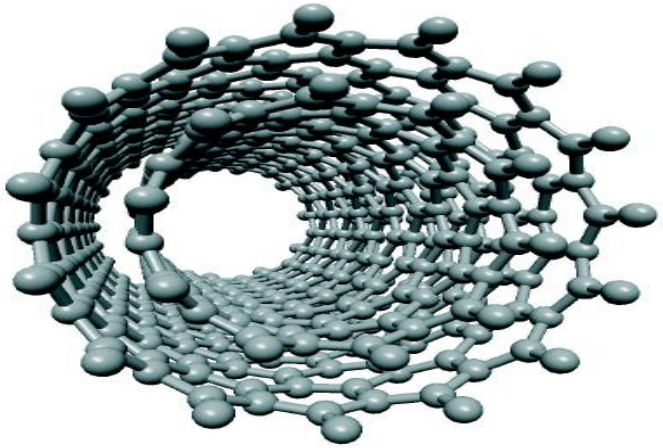


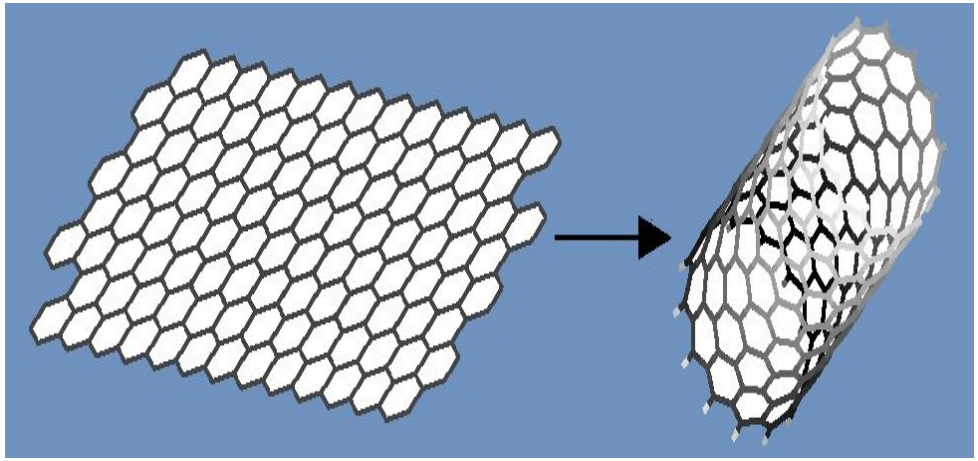
Углеродные нанотрубки

- 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.

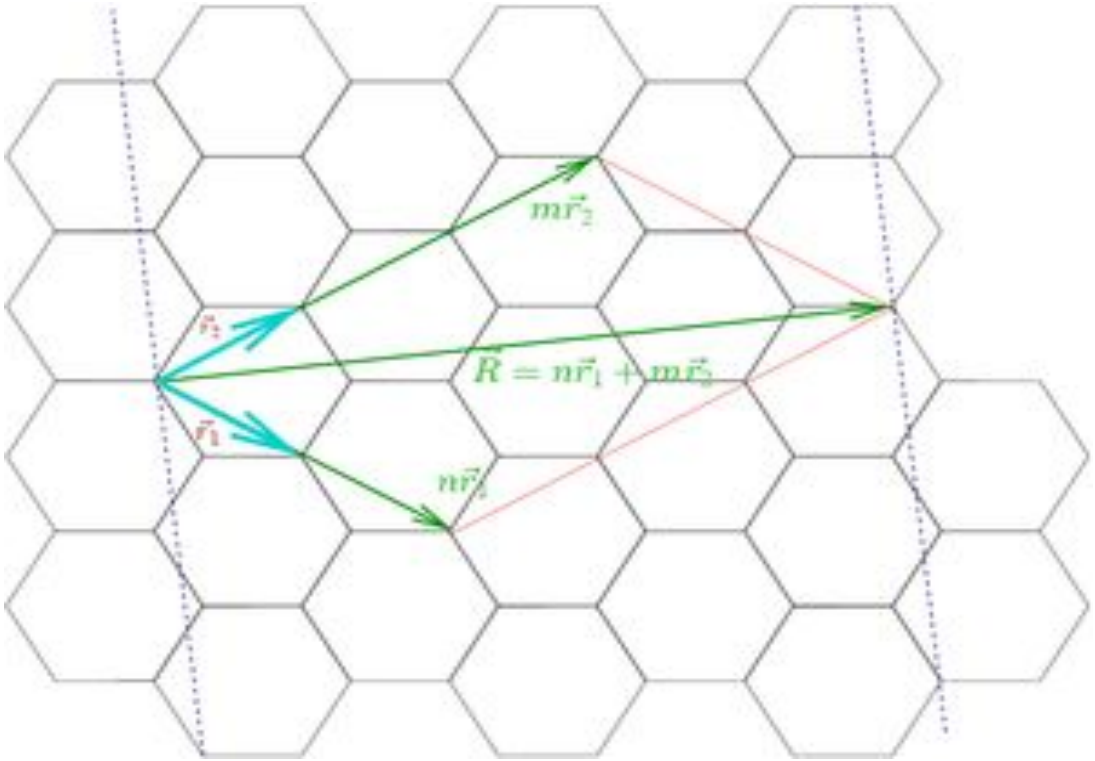
- Результат операции сворачивания зависит от угла ориентации графитовой плоскости относительно оси нанотрубки. Угол ориентации задает хиральность нанотрубки, которая определяет ее электрические характеристики.



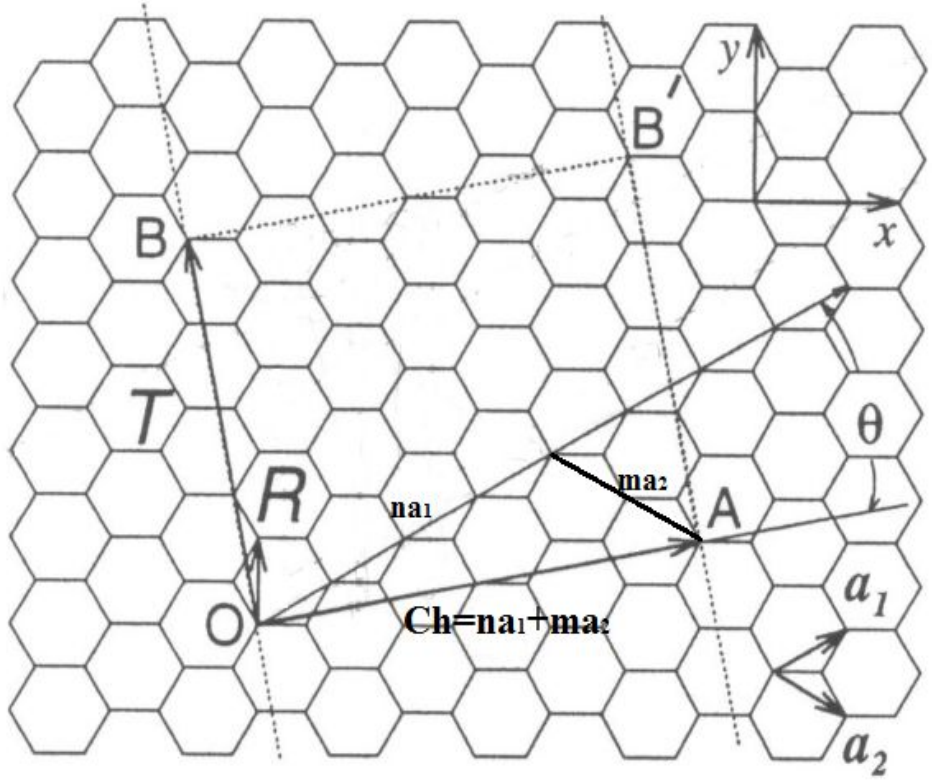


Хиральность

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 θ (угол между Ch и a_1)

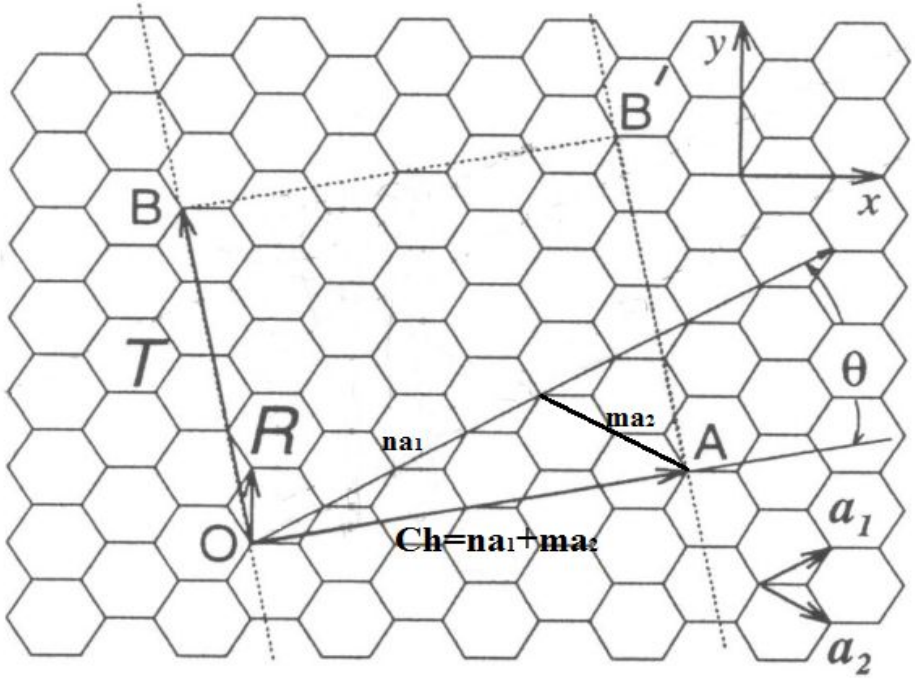
$$\cos\theta = \frac{Ch * a_1}{|Ch||a_1|} = \frac{2n + m}{2\sqrt{(n^2 + nm + m^2)}}$$

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

Хиральный угол лежит в пределах $0° \leq \theta \leq 30°$

Зигзаг конфигурации соответствует $\theta = 0°$, кресло конфигурации $\theta = 30°$

Структура углеродных нанотрубок



Трансляционный вектор T

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

Число гексанов в элементарной ячейке

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

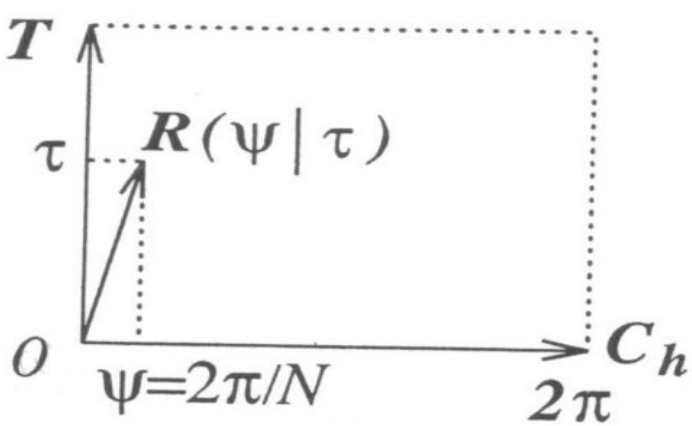
Число углеродных атомов $=2N$

Вектор симметрии

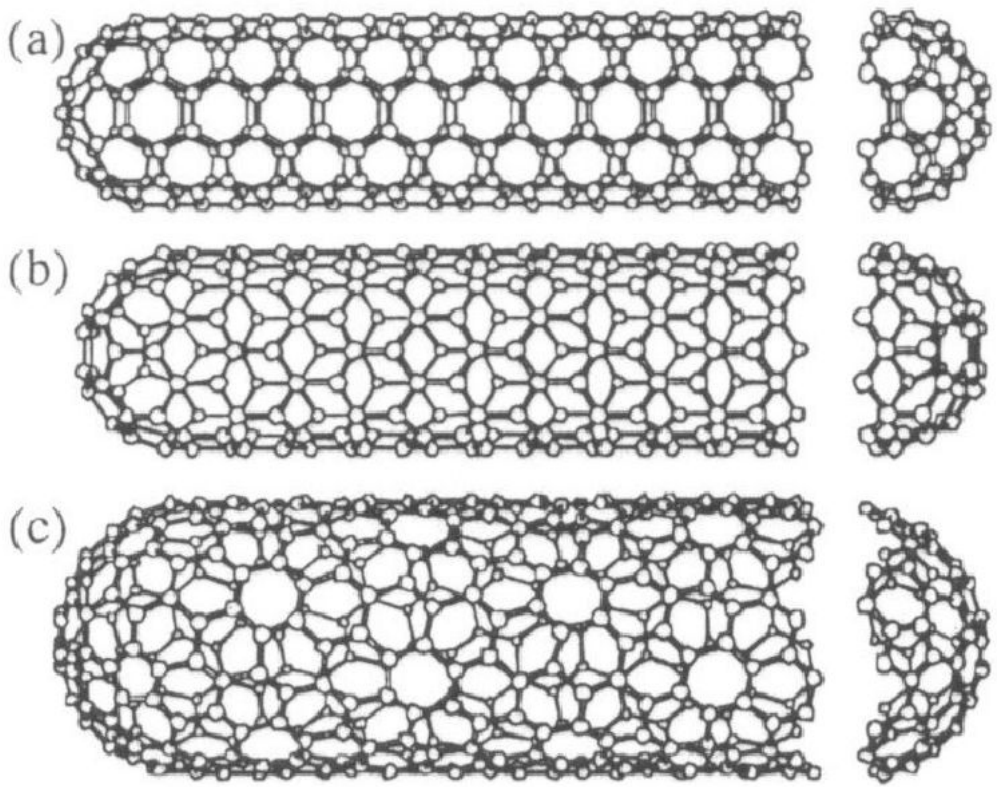
$$R = pa_1 + qa_2 \equiv (p,q)$$

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

$$\psi = \frac{|T * R|}{T}\frac{2\pi}{L} = \frac{d_R(t_1 q - t_2 p)}{\sqrt{3}L}\frac{a_2\sqrt{3}}{2} = \frac{2\pi}{N}$$



Структура углеродных нанотрубок



ступенчатая УНТ
armchair

зигзагообразная УНТ
zigzag

хиральная УНТ
chiral

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

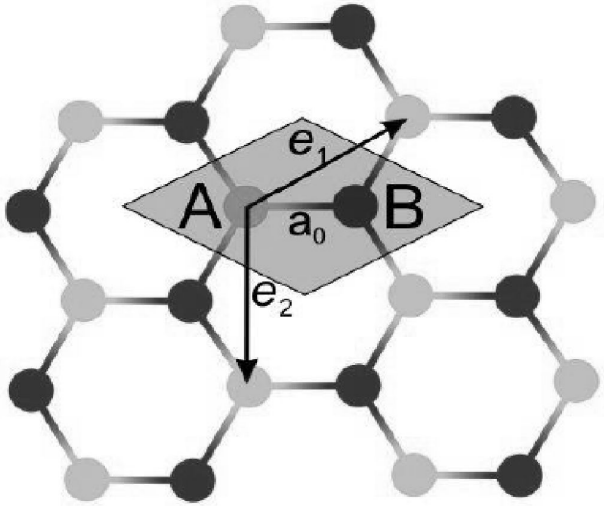
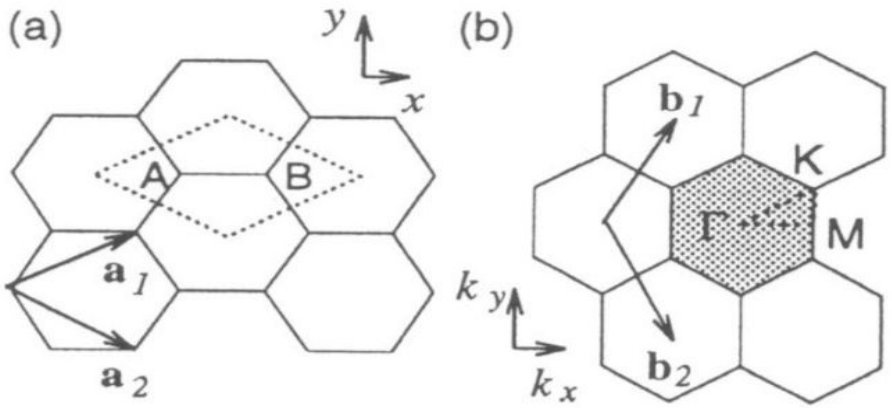


Рис. 1. Кристаллическая решетка графена. Элементарная ячейка выделена серым параллелограммом, e_1 и e_2 – вектора трансляции. Черным и серым цветами показаны неэквивалентные атомы, соответствующие разным подрешеткам графена.



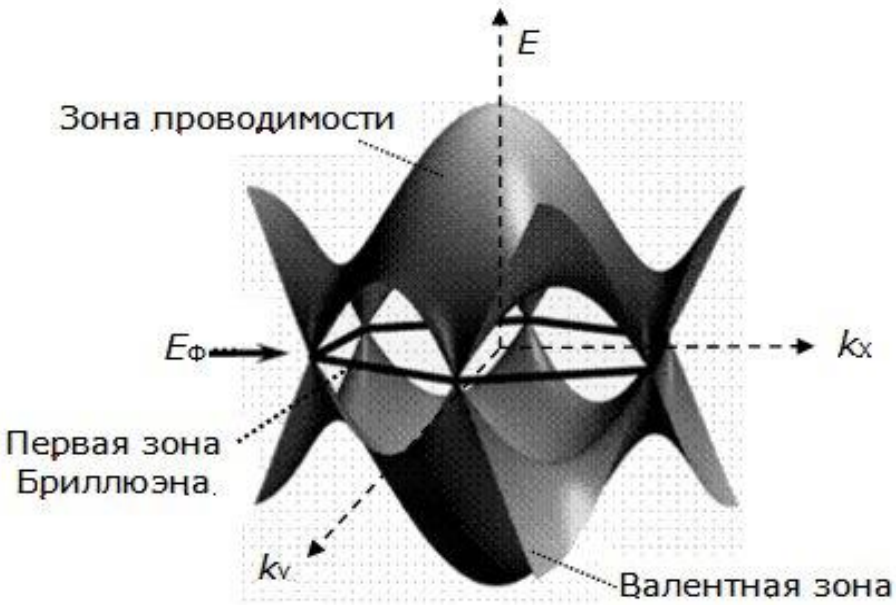
Вектора прямой решетки графена a_1, a_2 (в координатах ex, ey)

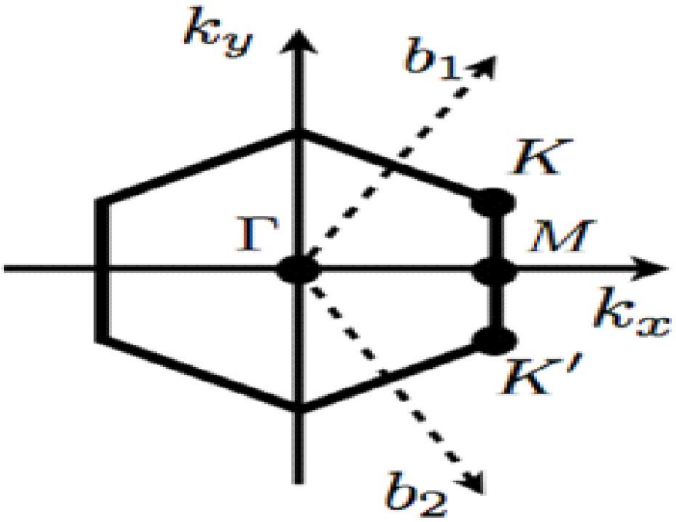
$$\vec{a}_1 = (\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2}) \qquad \vec{a}_2 = (\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2})$$

Вектора обратной решетки графена b_1, b_2 (в координатах kx, ky)

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

Зонная структура двумерного графенового листа





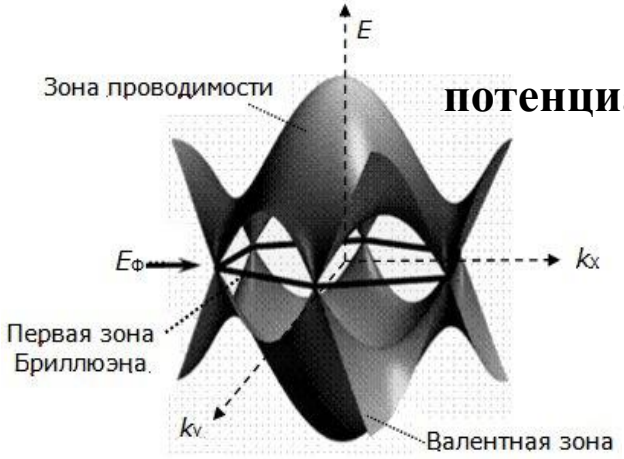
Зона Бриллюэна представлена на рис. показаны специальные высокосимметричные точки K, K' ,M , с волновыми векторами:

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

γ_1

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

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



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

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

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

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

$$E(k_x, k_y \quad \gamma_1\sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{a_{gr}k_y\sqrt{3}}{2}\right)\cos\left(\frac{a_{gr}k_x}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{a_{gr}k_x}{2}\right)}$$

Линейный закон дисперсии

$$E = \hbar v_F k,$$

Основные возможности биомедицинского применения углеродных нанотрубок

- **диагностика раковых заболеваний**

Биосенсоры

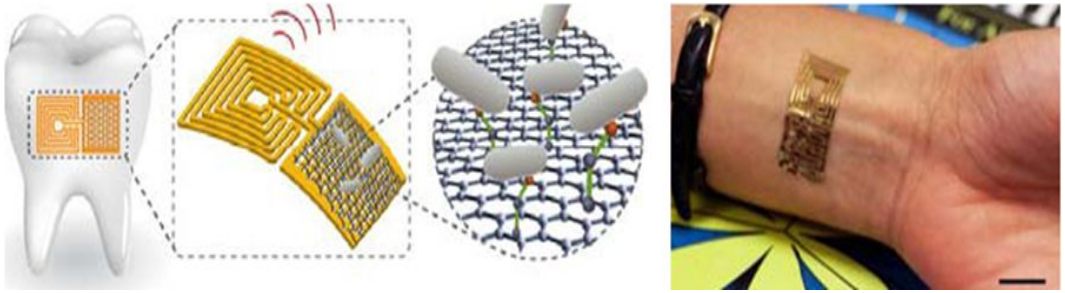


Рис. 1. Схема и фотография графенового беспроводного наносенсора. Шкала на фотографии 1 см.

- **системы адресной доставки диагностических и лекарственных средств**
- **фототермическая терапия**

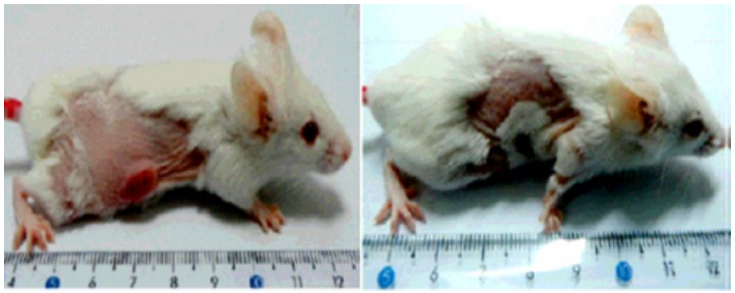
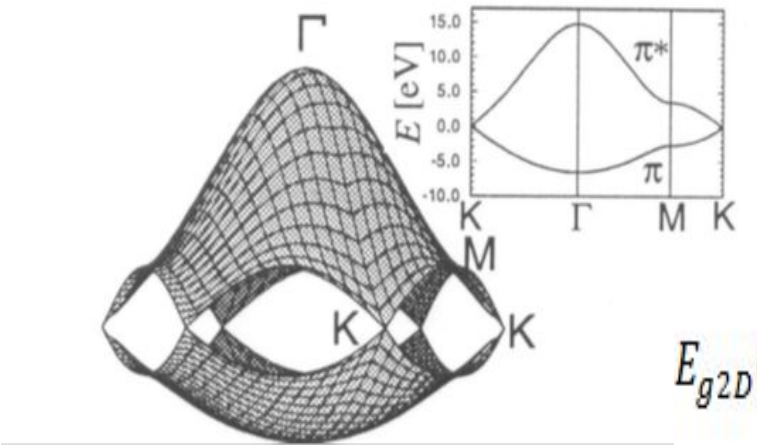


Рис. 2. Слева – мышь с опухолью. Справа – мышь после введения нанографена и облучения лазером.

Расчеты зонной структуры графена (π зоны) методом сильной связи



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

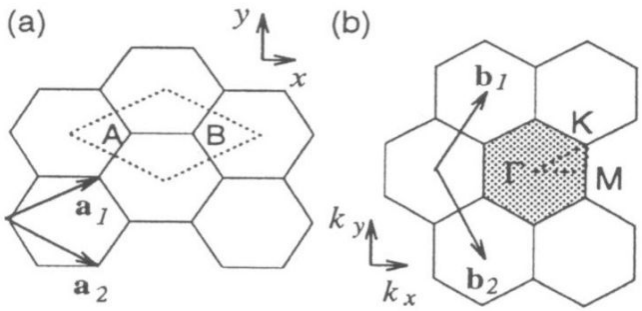
$$E_{g2D}(\vec{k}) = \frac{\epsilon_{2p} \pm t\omega(\vec{k})}{1 \pm s\omega(\vec{k})}, где\ \omega(\vec{k}) = \sqrt{1 + 4\cos\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\cos\frac{k_y a}{2} + 4\cos^2\frac{k_y a}{2}}$$

$$s = 0.129$$
$$\epsilon_{2p} = 0,\ t = -3.033\text{eV}$$

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 углер в Гамильтониане

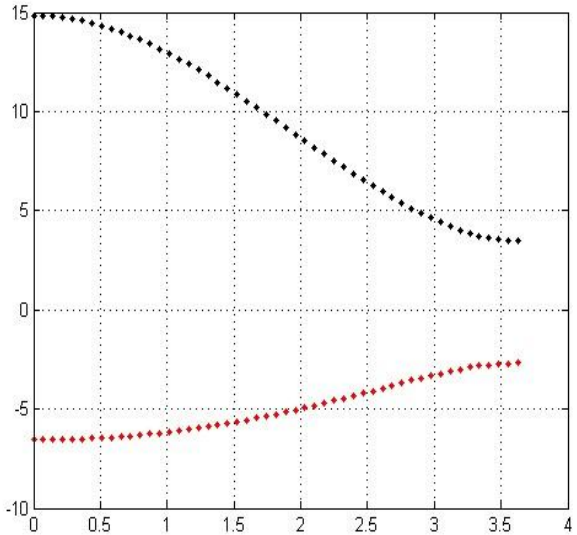


Расчеты зонной структуры графена (π зоны) методом сильной связи

В результате расчетов энергии для π –зоны графена были получены следующие графики выраженные в E(eV) :

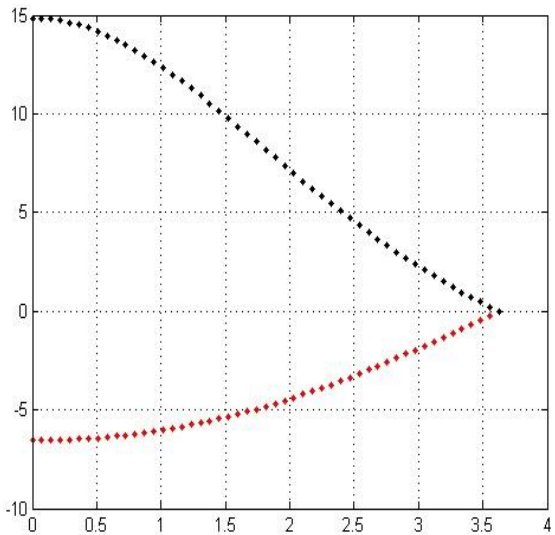
Для ГМ направления:

x1=0; x2=$\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}$; y1=0; y2=0;



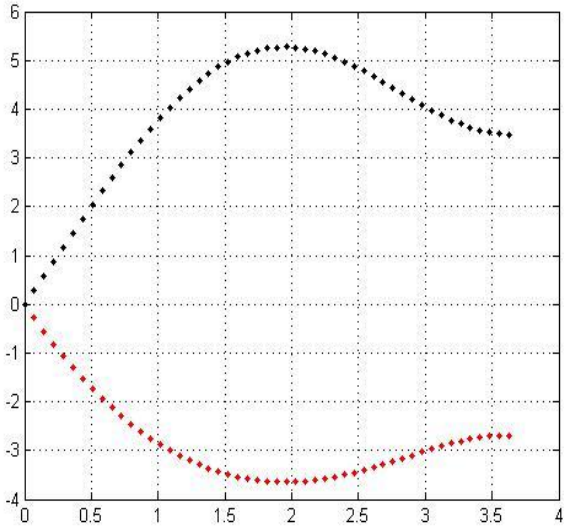
Для ГК направления:

x1=0; x2=$\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}$; y1=0; y2=$\frac{2\pi}{3}$;



Для МК1 направления:

x1=$\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}$; x2=0; y1=0; y2=$\frac{4\pi}{3}$;



Выводы

1. Исследования дисперсионных свойств углеродных наноматериалов достаточно удобно проводить в рамках метода сильной связи.

2. Для расчета π – 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 π – зоны графена были получены графики выраженные в E(eV).