

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Запорізький національний технічний університет

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
ДО ВИКОНАННЯ
РОЗРАХУНКОВО-ГРАФІЧНОГО ЗАВДАННЯ
З ДИСЦИПЛІНИ
„ХІМІЯ НАНОСТРУКТУРОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ“
для студентів спеціальності
6.050801 „Мікро- та наноелектроніка“
денної й заочної форм навчання

2013

Методичні вказівки до виконання розрахунково-графічного завдання з дисципліни „Хімія наноструктурованих матеріалів“ для студентів спеціальності 6.050801 „Мікро- та наноелектроніка“ денної й заочної форм навчання / Укл.: А. В. Коротун, А. В. Бабіч. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2013. – 30 с.

Укладачі: А. В. Коротун, доц., канд. фіз.-мат. наук,
А. В. Бабіч, доц., канд. фіз.-мат. наук

Рецензент: В. В. Погосов, проф., д-р фіз.-мат. наук

Відповідальний за випуск: Г.В.Сніжной, доц., канд.фіз.-мат.наук

Затверджено
на засіданні кафедри
мікро- та наноелектроніки

Протокол №9
від „17“ червня 20 13 р.

ЗМІСТ

Передмова	4
1 Загальні вказівки і рекомендації	5
1.1 Етапи виконання розрахунково-графічного завдання	5
1.2 Рекомендації до виконання розрахунково-графічного завдання	6
1.3 Вимоги до оформлення текстової версії розрахунково-графічного завдання	7
1.4 Вимоги до змісту та оформлення презентації	8
1.5 Найбільш поширені помилки студентів при написанні та оформленні розрахунково-графічного завдання	10
2 Розрахунок зонної структури нанотрубок методом ЛКАО	10
2.1 Коефіцієнти хіральності	10
2.2 Будова і електропровідність	12
2.3 Вступ до методу лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО)	13
2.4 Симетрія полімерів	15
2.5 Симетрія графітового шару	18
2.6 π -зони нанотрубок (n, n)	20
2.7 π -зони нанотрубок $(n, 0)$	23
2.8 π -зони нанотрубок (n, m)	25
3 Завдання до розрахунку	26
3.1 Перелік тем реферативної частини розрахунково-графічних завдань	26
3.2 Тематика типових розрахунково-графічних завдань	27
3.2.1 Дослідження нехіральних нанотрубок типу „крісло“	27
3.2.2 Дослідження нехіральних нанотрубок типу „зигзаг“	27
3.2.3. Обробка результатів	28
Рекомендована література	30
Додаток А Приклад оформлення титульної сторінки	31

ПЕРЕДМОВА

Розвиток фізики і технології матеріалів електронної техніки призвів на межі XX і XXI ст. до інтенсивного застосування наноматеріалів, які мають забезпечити нові функціональні властивості створюваним приладам збирання, зберігання й обробки інформації. Головною особливістю наноструктурованого стану є наявність розвиненої системи міжфазних границь. З одного боку, внесок цих границь у загальні властивості матеріалів може призводити до появи нових функціональних характеристик, недосяжних у масивних системах, з іншого – виникає проблема забезпечення стабільності і відтворюваності властивостей границь, які за своєю природою є нерівноважними.

Тому вивчення студентами технічних вузів дисциплін, пов'язаних із властивостями матеріалів і речовин, які перебувають у такому стані, є актуальним. Однією з таких дисциплін є «Хімія наноструктурованих матеріалів».

Метою вивчення даної дисципліни є ознайомлення студентів з основними проблемами і напрямками розвитку сучасного матеріалознавства і суміжних наук, таких, як хімія твердого тіла і неорганічних матеріалів, фізика конденсованого стану, електроніка, нанохімія тощо, а також технологій, імпульс розвитку яких стимулює ці дослідження.

1 ЗАГАЛЬНІ ВКАЗІВКИ І РЕКОМЕНДАЦІЇ

Розрахунково-графічне завдання (РГЗ) – це самостійне дослідження студента. Виконуючи РГЗ, студент удосконалює знання і вміння, отримані в процесі вивчення дисципліни „Хімія наноструктурованих матеріалів“, а саме: визначати мету, виділяти задачі, формувати проблеми і знаходити шляхи їх вирішення. Працюючи над РГЗ, студент отримує вміння і навички, які будуть корисні в майбутньому – при виконанні більш складних задач (курсовий проект, дипломна робота, дисертація, наукове дослідження).

Написання розрахунково-графічної роботи є одним із видів самостійної роботи з дисципліни „Хімія наноструктурованих матеріалів“.

Метою написання РГЗ є:

- ❖ систематизація, закріплення і розширення теоретичних знань та практичних вмінь студентів;
- ❖ набуття досвіду роботи з літературою та іншими джерелами інформації, вміння узагальнювати і аналізувати наукову інформацію, формувати власне ставлення до проблеми;
- ❖ набуття вміння застосовувати інформаційні та комп'ютерні технології для вирішення прикладних задач;
- ❖ розвиток навичок оволодіння спеціалізованим програмним забезпеченням;
- ❖ проведення глибокого аналізу результатів досліджень і формування змістовних висновків щодо якості отриманих результатів.

1.1 Етапи виконання розрахунково-графічного завдання

Розрахунково-графічне завдання виконується в два етапи відповідно до кредитно-модульної структури дисципліни.

Перший етап РГЗ виконується впродовж першого модуля і включає:

- ❖ вибір теми РГЗ;
- ❖ визначення актуальності та мети роботи;
- ❖ підбір літератури і джерел інформації згідно з обраною темою;

- ❖ збір даних, необхідних для розкриття обраної теми;
- ❖ систематизацію і структурування даних;
- ❖ оформлення результату виконання першого етапу в текстовому редакторі.

Результат виконання першого етапу надається в роздрукованому вигляді.

Другий етап РГЗ виконується впродовж другого модулю і включає:

- ❖ вибір методу обробки інформації;
- ❖ обґрунтування і опис обраного методу;
- ❖ обробку інформації;
- ❖ отримання результатів;
- ❖ інтерпретацію результатів;
- ❖ формулювання висновків;
- ❖ оформлення звіту;
- ❖ підготовка до публічного захисту виконаної роботи.

Звіт про виконання РГЗ оформлюється в електронному і друкованому вигляді. До звіту додаються електронні файли з результатами обробки інформації. Для захисту РГЗ створюється електронна презентація.

1.2 Рекомендації до виконання розрахунково-графічного завдання

Тема РГЗ обирається студентом відповідно до його варіанту.

Актуальність проблеми висвітлюється стисло. Достатньо декількома реченнями висловити головне – суть проблеми.

Мета РГЗ полягає в тому, щоб проаналізувати певну проблему. У ній сконцентрована головна ідея роботи, її кінцевий пізнавальний і практичний результат. Мета має носити практично-прикладний характер. Мета розкриває те, задля чого здійснюється дослідження, і повинна описувати конкретні кроки, які необхідно здійснити студенту для отримання результатів. Мета дослідження конкретизується в задачах, сукупність яких дає уявлення про те, що потрібно зробити для її досягнення. Задач не повинно бути багато, як правило, 4–5. Задачі формулюються дієсловами у формі переліку дій: „вивчити...“, „проаналізувати...“, „встановити...“, „побудувати модель...“, „з’ясувати...“, „оціни-

ти...“, „ідентифікувати...“, „порівняти...“, „обґрунтувати...“, „визначити чинники...“ тощо.

Анотація до кожного джерела інформації має бути обсягом не менше 10 друкованих рядків.

У кінці формулюються висновки. Вони по логіці і кількісно мають співпадати з поставленими в меті задачами, тобто одна задача – один висновок (!). Кожний з висновків повинний „перекликатися“ із задачами роботи. Отже, висновки повинні ґрунтуватися на проведенню студентом власному аналізі проблеми і відповідати задачам РГЗ.

Розрахунково-пояснювальна записка до РГЗ має містити:

- титульний лист (друкується у вигляді бланку (див. Додаток А);
- реферат обсягом 0,5–1 стор. (включає інформацію про обсяг РГЗ, ключові слова, короткий зміст роботи і методики проведення дослідження);
- зміст;
- вступ обсягом 1–2 стор. (відображає інформацію про актуальність дослідження, мету і задачі РГЗ);
- основний розділ, який включає детальний розв’язок задачі та фізичний аналіз отриманих результатів;
- перелік використаної літератури;
- додатки (за необхідності).

Розв’язок задачі має бути викладений зрозуміло і детально, з проведенням усіх проміжних викладок та перетворень. Основні формули повинні бути пронумеровані. У додатки включають допоміжний матеріал, який, на думку автора, необхідний для розуміння ходу розв’язку, але загромаджує основний текст роботи.

Слід мати на увазі, що оформлення РГЗ впливає на оцінку.

1.3 Вимоги до оформлення текстової версії розрахунково-графічного завдання

При оформленні текстової версії розрахунково-графічного завдання слід дотримуватися таких вимог:

- формат сторінок А4;
- шрифт Times New Roman;
- розмір шрифту 14;

- міжрядковий інтервал – полуторний;
- вирівнювання – за шириною сторінки;
- поля – 2 см;
- назви структурних частин і розділів – прописними літерами, напівжирним шрифтом, по центру, підрозділів – малими (крім першої букви), напівжирним шрифтом, по центру;
- відстань між заголовком та основним текстом – один рядок;
- кожен структурну частину (розділ) починати з нової сторінки;
- нумерація сторінок зверху, праворуч;
- номер на титульній сторінці, рефераті та змісті не ставиться, але враховується;
- таблиці повинні мати заголовки та нумеруватися;
- рисунки, графіки і діаграми повинні мати підписи та нумеруватися.

1.4 Вимоги до змісту та оформлення презентації

Вимоги до змісту та оформлення презентації наступні:

- презентація виконується в форматі Microsoft Power Point XP/2003 за темою РГЗ;
- презентація має бути розрахована на п'ятихвилинну доповідь за темою РГЗ;
- зміст презентації має бути чітко структурований. Кожний новий слайд має логічно впливати з попереднього й одночасно готувати появу наступного. Найкращий спосіб перевірити, чи вірно побудована презентація, – швидко прочитати лише заголовки. Якщо після цього стане зрозуміло, про що презентація – структура побудована вірно;
- оптимальним об'ємом презентації вважається не менше, ніж 15 традиційних слайдів;
- кількість тексту в презентаціях має складати не більше 35%, решта – ілюстративний матеріал (рисунки, графіки, діаграми, схеми тощо);
- слайд №1 повинний містити:
 - 1) назву навчального закладу і кафедру, де виконувалася робота (розмір шрифту – не менше 24);

- 2) дисципліну, тему (розмір шрифту – не менше 28, напівжирний);
- 3) прізвище, ім'я, по-батькові студента, факультет, групу (розмір шрифту – не менше 24);
- 4) прізвище, ім'я, по-батькові викладача (розмір шрифту – не менше 24);
- 5) рік створення презентації (розмір шрифту – не менше 24);

– слайди №2 – 3 повинні описувати актуальність теми і мету, яку необхідно досягти в ході виконання роботи (загальний обсяг одного слайду – не більше 15 рядків тексту);

– останній слайд (слайди) повинний містити висновки по роботі (не більше 15 рядків тексту на один слайд);

– усі слайди (крім першого) повинні містити порядковий номер, розташований в правому верхньому куті (розмір шрифту – не менше 20);

– кожен слайд (крім першого) повинний мати назву, набрану шрифтом не менше 24;

– оптимальне оформлення презентації – застосування кольорових схем „світлий текст на темному фоні“ або „темний текст на світлому фоні“. У випадку співпадиння кольорів фону і тексту рекомендується оформлювати текст із використанням ефекту „тіні“;

– фонові рисунки не повинні відволікати увагу від змісту слайда;

– припустимий розмір шрифту – не менше 20;

– рекомендований розмір шрифту – 24;

– максимальна кількість текстової інформації на одному слайді – 15 рядків тексту, набраних Arial або Verdana, розмір – 28;

– максимальна кількість графічної інформації на одному слайді – 2 рисунка (фотографії, схеми тощо) з текстовими коментарями (не більше 2-х рядків до кожного);

– бажано, щоб на слайдах залишалися поля, не менше 1 см з кожного боку;

– використовувати єдиний стиль оформлення;

– використовувати шрифти без засічок (їх легше читати) і не більше 2-х варіантів шрифту на одному слайді;

- використовувати не більше трьох кольорів на одному слайді (наприклад, один для фону, другий для заголовків, третій для тексту);
- використовувати ефекти анімації, звукові та відеофайли лише у разі, коли це виправдане і дійсно необхідне для покращення сприйняття матеріалу;
- файл презентації має бути записаний на CD-ROM або DVD-ROM.

1.5 Найбільш поширені помилки студентів при написанні та оформленні розрахунково-графічного завдання

- зміст роботи не відповідає темі або не розкриває її;
- мета не пов'язана з проблемою, що досліджується, сформульована абстрактно і не відображає специфіки предмету дослідження;
- не проведений глибокий та всебічний аналіз джерел, нової спеціальної літератури за темою дослідження;
- список джерел за темою роботи не анотований; не вказано, з яких саме джерел взяті вихідні дані;
- кінцевий результат не відповідає меті дослідження, висновки не відповідають поставленим задачам;
- об'єм і оформлення роботи не відповідають вимогам;
- РГЗ виконана неохайно, з граматичними й стилістичними помилками.

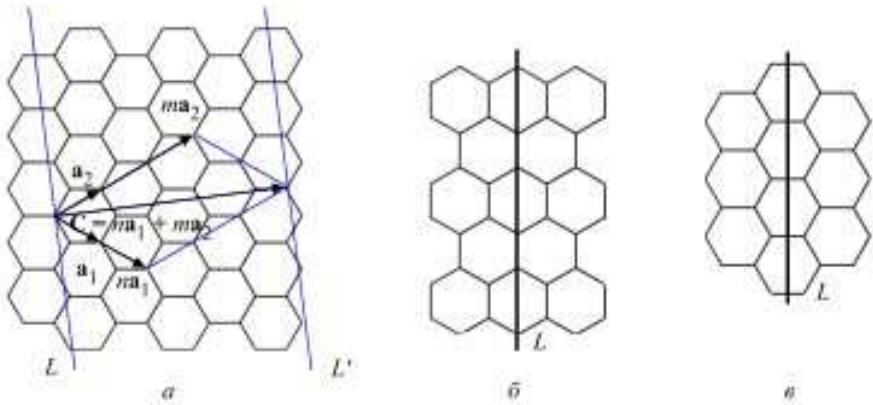
2 РОЗРАХУНОК ЗОННОЇ СТРУКТУРИ НАНОТРУБОК МЕТОДОМ ЛКАО

2.1 Коефіцієнти хіральності

Одностінна вуглецева нанотрубка представляє собою згорнуту у вигляді циліндра стрічку, яка не містить дефектів, із упаковкою атомів за типом графіту.

Для того, щоб представити просторове розташування атомів в ідеальній одношаровій нанотрубці, відкладемо на графітовому шарі

вектор $\mathbf{C} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$, де $\mathbf{a}_1$ і $\mathbf{a}_2$ – базисні вектори, а n і m – цілі числа (рис. 2.1). Через кінці вектора $\mathbf{C}$ проведемо перпендикулярно йому дві прямі – L і L' і виріжемо з шару нескінченну стрічку уздовж цих ліній (рис.2.1,а). Скрутимо стрічку в циліндр так, щоб прямі L і L' поєдналися. У цього циліндра L буде твірною, а довжина кола дорівнює модулю вектора $\mathbf{C}$. Так ми отримали структурну модель нанотрубки (n, m) . Така нанотрубка не утворює швів при згортанні.



а – частина графітового шару, з якого вирізується стрічка, що згортається в трубку;
б – фрагменти нанотрубок „зигзаг“; в – „крісло“ щодо твірної L

Рисунок 2.1 – Побудова структурної моделі

У загальному випадку нанотрубки володіють гвинтовою віссю симетрії (тоді говорять, що вони *хіральні*). *Нехіральними* називаються нанотрубки $(n, 0)$ і (n, n) , в яких вуглецеві шестикутники орієнтовані, відповідно, паралельно і перпендикулярно осі циліндра (рис. 2.1, б, в). За зовнішнім виглядом поперечного зрізу нанотрубки $(n, 0)$ називають нанотрубками „зигзаг“ (zigzag), а нанотрубки (n, n) – нанотрубками типу „крісло“ (armchair).

Індекси хіральності нанотрубки $((n, m))$ однозначно визначають її структуру, зокрема, діаметр d . Цей зв'язок має наступний вигляд:

$$d = \frac{d_0 \sqrt{3}}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + nm}, \quad (2.1)$$

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

2.2 Будова і електропровідність

Для створення електронних пристроїв та їх об'єднання в складні прилади потрібні напівпровідники і матеріали з високою електропровідністю. Нанотрубки з різними значеннями індексів (n, m) – це полімери різної будови, а тому вони повинні володіти різними електричними властивостями. Залежності електричних властивостей нанотрубок від геометричних параметрів були передбачені на основі квантово-хімічних розрахунків їх зонної структури незалежно і фактично ще до експериментального виявлення нанотрубок.

Відзначимо, що всі атоми вуглецю в нанотрубках мають потрібну координацію, три з чотирьох валентних електронів кожного вуглецю утворюють sp^2 -гібридні орбіталі і локалізовані σ -зв'язки C–C, а четвертий бере участь в утворенні делокалізованої π -системи (як у графіті або бензолі). Ці π -електрони слабо зв'язані зі своїми атомами, тому саме вони беруть участь у перенесенні заряду в системі. Висока провідність повинна з'явитися, якщо зайняті π -стани не відокремлені енергетичною щільною від вакантних π -станів. Інакше нанотрубка – напівпровідник, якщо щілина мала, або діелектрик, якщо велика.

Розрахунки показують, що металевим типом зонної структури володіють ті нанотрубки, для яких різниця $n - m$ кратна трьом. Решта нанотрубок має бути напівпровідниками з шириною забороненої зони від декількох десятих до приблизно одного електрон-вольта, що зростає зі зменшенням діаметру.

Як ілюстрація розрахунку електронної структури обрано *метод лінійної комбінації атомних орбіталей* (ЛКАО) в π -електронному наближенні і наближенні функціоналу густини. Позитивними рисами цього методу є його наочність і відносна простота. Ці якості втрача-

ються в складніших випадках (які тут не розглядаються), наприклад, метод ЛКАО не зовсім придатний для розрахунків електронної структури нанотрубок, інтеркальованих атомами важких елементів, наприклад, перехідних металів. Для таких випадків використовують складніші методи, наприклад, метод лінеаризованих приєднаних циліндричних хвиль (ЛПЦВ).

2.3 Вступ до методу лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО)

Згідно з положеннями квантової механіки, електронну будову молекули як системи електронів у кулонівському полі ядер, просторове розташування яких відоме, можна визначити з її багатоелектронної хвильової функції ψ_k , яка залежить від координат усіх електронів. Хвильові функції ψ_k дають максимально повну інформацію про електронну систему молекули, але розрахувати їх для складних систем, наприклад, нанотрубок, спираючись лише на рівняння Шредінгера, не використовуючи жодних фізично правдоподібних припущень про характер хвильової функції багатоелектронної системи, неможливо. Одна з найважливіших наближень, яке використовують у теорії будови багатоелектронних систем, що спрощує розв'язок рівняння Шредінгера, полягає в тому, що багатоелектронну хвильову функцію записують у вигляді детермінанта, побудованого з одноелектронних хвильових функцій:

$$\psi_k(q_1, q_2, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(q_1) & \phi_2(q_1) & \dots & \phi_N(q_1) \\ \phi_1(q_2) & \phi_2(q_2) & \dots & \phi_N(q_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_1(q_N) & \phi_2(q_N) & \dots & \phi_N(q_N) \end{vmatrix}. \quad (2.2)$$

Фізичний зміст запису багатоелектронної хвильової функції у вигляді антисиметризованого добутку одноелектронних хвильових функцій полягає в тому, що кожному електрону молекули приписується своя хвильова функція ϕ_μ , яку називають **спін-орбіталлю**. Кожна спін-орбіталь є добутком функції $\psi_\mu(x_i, y_i, z_i)$, що залежить ли-

ше від просторових координат електрона, на функцію спіна. Функцію ψ_μ називають **орбіталлю**. Для атомів це буде атомна орбіталь (АО), для молекул – молекулярна орбіталь (МО). У кристалах або полімерах із трансляційною симетрією функції ψ_μ називають **блехівськими функціями**. Функція спіну може набувати два значення, що відповідають проекції спіну на вісь z : $+\frac{1}{2}$ і $-\frac{1}{2}$. Представлення хвильової функції ψ у вигляді визначника (2.2) забезпечує виконання умови антисиметричності хвильової функції щодо перестановки електронів; перестановці електронів відповідає перестановка рядків у визначнику (2.2), при цьому він помножується на -1 .

Множник перед визначником необхідний для нормування багатеелектронної функції; при цьому орбіталі вважаються нормованими:

$$\int \phi_\mu \phi_\nu d\mathbf{v} = \delta_{\mu\nu}.$$

Явний вигляд орбіталі ψ_μ знаходиться з одноелектронного наближення рівняння Шредінгера:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} \psi_\mu &= E_\mu \psi_\mu, \quad \mu = 1, 2, 3, \dots; \\ \hat{\mathcal{H}} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Системи рівнянь Хартрі – Фока (2.3) розв’язують за допомогою методу послідовних наближень, оскільки явний вид гамільтоніана залежить від вигляду шуканих хвильових функцій ψ_μ . Суть цього методу полягає в тому, що для кожного електрона на першому етапі підбирається пробна хвильова функція, за допомогою якої розраховують оператор Хартрі – Фока (гамільтоніан) і розв’язують рівняння (2.3). Отримані точніші хвильові функції підставляються в систему рівнянь (2.3), і її вирішують наново. Цей процес продовжують до тих пір, поки енергії E_μ і вигляд орбіталей на попередньому і подальшому кроці не перестануть різнитися. Коли це досягнуто, отриманий розв’язок називають **самоузгодженням**.

За допомогою швидкодіючих ЕОМ рівняння Хартрі – Фока в чи-

сельній формі були розв'язані для всіх основних атомів і йонів, і в результаті визначений вигляд атомних орбіталей (АО) та їх енергії. Через більш низьку симетрію багатоатомних систем розрахунків орбіталей в цьому випадку безпосередньо з рівнянь Хартрі – Фока виявляється істотно більш трудомісткою задачею, ніж розрахунків АО атомів. Тому тут використовуються подальші наближення. Стандартний підхід полягає в тому, що шукані орбіталі розкладаються за базисом χ_i :

$$\Psi_\mu = \sum_{i=1}^n a_{\mu i} \chi_i, \quad (2.4)$$

де χ_i – функції, вигляд яких, взагалі кажучи, не тривіальний і в різних методах різний; n – загальне число включених в базис функцій; $a_{\mu i}$ – коефіцієнти, які визначають внесок базисної функції χ_i у власну функцію Ψ_μ .

У виразі (2.4) як базис для розрахунку орбіталей багатоатомної системи використовують атомні орбіталі. У теорії молекул такий підхід називають методом ЛКАО, а в теорії кристалів – методом сильно-го зв'язку. Спочатку теорія електронної будови нанотрубок розвивалася в рамках методу ЛКАО. З фізичної точки зору представлення МО у вигляді ЛКАО відповідає припущенню про те, що в околі кожного атома, де вплив потенціалу дальніх атомів слабшає, одноелектронна хвильова функція молекули має бути схожою на атомну. У розкладаннях (2.4) можна використовувати чисельні хартрі-фоківські АО або проводити обчислення з аналітичними функціями, що мають явний запис у вигляді формул, але які добре апроксимують хартрі-фоківські АО. Втім, конкретний вигляд АО нам тут не буде потрібний.

2.4 Симетрія полімерів

Відмінність нанотрубок від малих молекул, зазвичай, полягає в тому, що нанотрубка – це полімер, тобто система, що складається з дуже великої кількості атомів – порядку числа Авогадро. Розрахунки електронної структури полімерів зручно проводити в припущенні про те, що кількість атомів в полімері нескінченна і що вони утворюють структуру, яка повторюється в одному напрямку, – вздовж осі транс-

ляції. З такої точки зору, полімер – це одномірний кристал. Такий підхід дозволяє знизити розмірність секулярного рівняння методу ЛКАО від числа базисних атомних орбіталей в полімері до їх числа в елементарній комірці.

Елементарна комірка – це мінімальний фрагмент, трансляцією якого відтворюється вся структура полімеру. Як приклад найпростішого полімеру, уявимо собі лінійний ланцюжок із атомів Карбону з однаковими відстанями між атомами. Це буде полімер із одним атомом у кожній комірці. Розмір елементарної комірки і довжина вектора елементарної трансляції $\mathbf{c}$ тут дорівнюватимуть відстані між атомами. Сукупність векторів $\mathbf{l} = l\mathbf{c}$ ($l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) утворює пряму ґратку одновимірної періодичної системи. В елементарній комірці може бути декілька атомів. Наприклад, якщо в тільки що розглянутому ланцюжку чергуються довгі і короткі відстані між атомами, то це буде полімер з двома атомами в елементарній комірці. Таку структуру має *карбін* – простий чисто вуглецевий нанодріт. В елементарних комірках нанотрубок $(5, 5)$ і $(10, 0)$ міститься 20 і 40 атомів відповідно.

Для полімеру з трансляційною симетрією в напрямку z гамільтоніан інваріантний щодо трансляцій:

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r} + l\mathbf{c}) = \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}).$$

У цьому разі розв'язок рівняння Шредінґера (2.3) полегшується тим, що електронна густина $\varrho(\mathbf{r})$ також є періодичною функцією вектора трансляцій:

$$\varrho(\mathbf{r} + l\mathbf{c}) = \varrho(\mathbf{r}).$$

Як відомо, будь-яку періодичну функцію $f(z)$ можна розкласти в ряд Фур'є:

$$f(z) = \sum_n A_n e^{i \frac{2\pi}{c} n z}. \quad (2.5)$$

Визначимо одновимірну обернену ґратку g_n як сукупність точок на осі z із координатами

$$g_n = \frac{2\pi}{c} n$$

і відстанню між точками $\frac{2\pi}{c}$. Відповідно, в термінах оберненого простору розклад (2.5) можна переписати в більш компактній формі, яку називають розкладом у ряд за оберненою ґраткою:

$$f(z) = \sum_n A_n e^{ig_n z}.$$

Легко переконатися в трансляційній періодичності функцій, які описуються цим розкладом:

$$f(z + lc) = \sum_n A_n e^{ig_n z} e^{ig_n lc} = \sum_n A_n e^{ig_n z} e^{i2\pi nl} = \sum_n A_n e^{ig_n z} = f(z).$$

Коефіцієнти розкладу A_n дорівнюють

$$A_n = \frac{1}{c} \int_0^c f(z) e^{ig_n z} dz.$$

У загальному випадку, $\psi(\mathbf{r} + l\mathbf{c}) \neq \psi(\mathbf{r})$: хвильова функція полімеру не є періодичною функцією трансляцій. Проте з умов $\varrho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$ і періодичності розподілу електронної густини $\varrho(\mathbf{r})$ випливає, що квадрат хвильової функції є функцією періодичною, а значить $\psi(\mathbf{r} + l\mathbf{c}) = e^{i\alpha} \psi(\mathbf{r})$, тобто трансляція супроводжується множенням хвильової функції на фазовий множник, за модулем рівний одиниці. Цей множник зазвичай записують у вигляді $\alpha = klc$. Величина k є характеристикою властивостей симетрії хвильової функції, і цій функції можна приписати індекс k . Отже,

$$\psi(\mathbf{r} + l\mathbf{c}) = e^{iklc} \psi(\mathbf{r}).$$

Це рівняння називають **теоремою Блоха**. Величина k має розмірність, обернену довжині, і визначається з точністю до сталої оберненої ґратки g_n . Для визначеності, значення величини k обирають в

інтервалі $-\frac{\pi}{c} < k \leq \frac{\pi}{c}$ (у так званій першій зоні Бриллюена для одно-періодичної системи). Величину k називають хвильовим вектором або квазіімпульсом.

Іноді зручно вважати, що полімер складається з кінцевої, а не із нескінченної кількості L елементів, що повторюються, а щоб уникнути впливу кінцевих елементів, вважати, що полімер замкнутий у кільце так, що перша комірка з'єднана з останньою (у фізиці твердого тіла цей прийом відомий як циклічні граничні умови Борна – Кармана). Тоді в результаті L -трансляцій система переходить сама в себе:

$$\psi_k(\mathbf{r} + l\mathbf{c}) = e^{ikLc} \psi_k(\mathbf{r}) = \psi_k(\mathbf{r}).$$

З умов Борна – Кармана випливає, що k на інтервалі $-\frac{\pi}{c} < k \leq \frac{\pi}{c}$ приймає L дискретних значень, які відповідають умові:

$$k = \frac{2\pi}{cL} m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{L}{2}.$$

Якщо L достатньо велике, наприклад порядку числа Авогадро, то електронна будова нескінченного лінійного ланцюжка і замкнутого кільця не розрізнятимуться.

2.5 Симетрія графітового шару

Ідеальний графітовий шар, який не містить дефектів (графен), – приклад двовимірної системи з трансляційною симетрією (рис. 2.2). Він характеризується двома векторами трансляцій $\mathbf{c}_1$ і $\mathbf{c}_2$ довжиною $c = \sqrt{3}d_{\text{C-C}}$, де $d_{\text{C-C}} = 1,42 \text{ \AA}$ – довжина зв'язку між сусідніми атомами вуглецю:

$$\mathbf{c}_1 = c \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_x, \frac{1}{2} \mathbf{e}_y \right), \quad \mathbf{c}_2 = c \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_x, \frac{1}{2} \mathbf{e}_y \right),$$

де $\mathbf{e}_x$ та $\mathbf{e}_y$ – одиничні вектори.

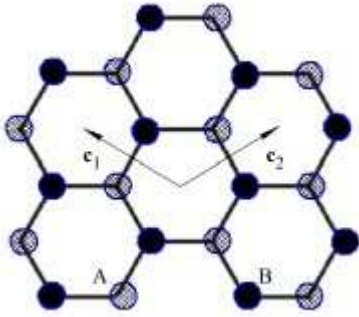


Рисунок 2.2 – Фрагмент графітового шару в площині xy

В елементарній комірці графена два атоми C . Вони належать підграткам A і B , кожний атом однієї підгратки оточений трьома атомами іншої підгратки. Атоми різних підграток не переходять один в один за допомогою трансляцій. Вектори $\mathbf{l} = l_1 \mathbf{e}_1 + l_2 \mathbf{e}_2$ з цілими l_1 і l_2 утворюють пряму ґратку графіту.

Щоб отримати для двовимірного випадку розкладання пе-

ріодичної функції $f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{l})$ в ряд Фур'є, визначимо базисні вектори $\mathbf{b}_1$ і $\mathbf{b}_2$ оберненої ґратки за допомогою рівняння:

$$\mathbf{b}_i \mathbf{c}_j = 2\pi \delta_{ij},$$

звідки

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{c} \left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{c} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y \right).$$

Модулі цих векторів рівні:

$$b = |\mathbf{b}_1| = |\mathbf{b}_2| = \frac{4\pi}{c\sqrt{3}}.$$

Вектори $\mathbf{g} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2$ визначають положення всіх вузлів оберненої ґратки. Легко переконатися, що для скалярних добутків векторів прямих і обернених ґраток справедливе співвідношення:

$$\mathbf{g} \mathbf{l} = 2\pi(n_1 l_1 + n_2 l_2),$$

а розклад за векторами оберненої ґратки з постійними коефіцієнтами A_g володіє періодичністю прямої ґратки:

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = \sum_g A_g e^{i\mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{l})} = \sum_g A_g e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{l}} = \sum_g A_g e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}} = f(\mathbf{r}).$$

Як і в одновимірній системі, оператор Гамільтона графіту інваріантний відносно трансляцій, тому електронна густина станів повинна бути періодичною функцією вектора трансляцій $\mathbf{g} = l_1 \mathbf{c}_1 + l_2 \mathbf{c}_2$, а його хвильова функція повинна задовольняти теоремі Блоха:

$$\psi_k(\mathbf{r} + l_1 \mathbf{c}_1 + l_2 \mathbf{c}_2) = e^{ik \cdot (l_1 \mathbf{c}_1 + l_2 \mathbf{c}_2)} \psi_k(\mathbf{r}).$$

Як і в одновимірному випадку, $|\mathbf{k}|$ має розмірність, обернену до довжини, і визначається з точністю до вектора оберненої ґратки, тому $\mathbf{k}$ обирають у першій зоні Бриллюена, яка для графітового шару має вигляд правильного шестикутника.

2.6 π -зони нанотрубок (n, n)

Почнемо обговорення з нехіральних нанотрубок (n, n) типу „крісло“. Елементарна трансляційна комірка таких нанотрубок містить $2n$ атомів С, p_π -орбіталей і π -електронів. Якщо використовувати лише трансляційну симетрію системи (як це описано вище на

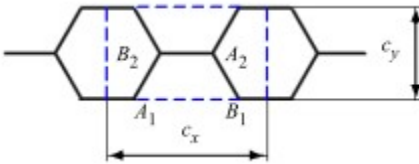


Рисунок 2.3 – Елементарна комірка нанотрубки (n, n) при врахуванні поворотів навколо осі нанотрубки (вісь y)

прикладі одноатомних ланцюжків), можна побудувати $2n$ базисних блохівських функцій, і тоді закони дисперсії π -електронів будуть розв'язками секулярного рівняння порядку $2n$, що залежить від кулонівського й резонансного інтегралів α і β . Проте для нанотрубки характерна не лише трансляційна симетрія, але

і симетрія відносно обертань навколо осі, що дозволяє істотно знизити розмірність секулярного рівняння.

Представимо нанотрубку як результат згортання стрічки, вирізаної з графітового шару, такого, що вісь трансляції нанотрубки збігається з віссю y графітового шару. Тоді трансляції графітового шару

уздовж осі x при переході до нанотрубки (n, n) перетворюються на n поворотів навколо її осі. Таким чином, нанотрубка виявляється циклічною для двох вимірів: для обертання навколо осі нанотрубки – через очевидні геометричні міркування, а для осі трансляцій – через граничні умови Борна – Кармана.

Елементарну комірку нанотрубки (n, n) можна представити як прямокутник із сторонами $c_y = c$ і $c_x = \sqrt{3}c$ (рис. 2.3). У комірниці містяться чотири атоми Карбону, два з яких належать підгратці А, а решта – підгратці В. Відповідно, можна побудувати чотири базисні блохівські функції:

$$\psi_{A_1}^{\pi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l_x, l_y} e^{i(k_x l_x c_x + k_y l_y c_y)} p_{A_1}^{\pi}(\mathbf{r} - l_x \mathbf{c}_x - l_y \mathbf{c}_y), \quad (2.6)$$

$$\psi_{B_1}^{\pi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l_x, l_y} e^{i(k_x l_x c_x + k_y l_y c_y)} p_{B_1}^{\pi}(\mathbf{r} - l_x \mathbf{c}_x - l_y \mathbf{c}_y), \quad (2.7)$$

$$\psi_{A_2}^{\pi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l_x, l_y} e^{i(k_x l_x c_x + k_y l_y c_y)} p_{A_2}^{\pi}(\mathbf{r} - l_x \mathbf{c}_x - l_y \mathbf{c}_y), \quad (2.8)$$

$$\psi_{B_2}^{\pi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l_x, l_y} e^{i(k_x l_x c_x + k_y l_y c_y)} p_{B_2}^{\pi}(\mathbf{r} - l_x \mathbf{c}_x - l_y \mathbf{c}_y), \quad (2.9)$$

і в цьому базисі в наближенні найближчих сусідів визначити секулярне рівняння четвертого порядку для законів дисперсії π -електронів:

$$\begin{vmatrix} \alpha_{\pi} - E & \langle \psi_{A_1}^{\pi} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{B_1}^{\pi} \rangle & 0 & \langle \psi_{A_1}^{\pi} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{B_2}^{\pi} \rangle \\ \langle \psi_{B_1}^{\pi} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{A_1}^{\pi} \rangle & \alpha_{\pi} - E & \langle \psi_{B_1}^{\pi} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{A_2}^{\pi} \rangle & 0 \\ 0 & \langle \psi_{A_2}^{\pi} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{B_1}^{\pi} \rangle & \alpha_{\pi} - E & \langle \psi_{A_2}^{\pi} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{B_2}^{\pi} \rangle \\ \langle \psi_{B_2}^{\pi} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{A_1}^{\pi} \rangle & 0 & \langle \psi_{B_2}^{\pi} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{A_2}^{\pi} \rangle & \alpha_{\pi} - E \end{vmatrix} = 0, \quad (2.10)$$

де ненульові недіагональні матричні елементи гамільтоніана в позна-

ченнях Дірака представляють собою такі величини:

$$\begin{aligned}\langle \psi_{A_1}^\pi | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{B_1}^\pi \rangle &= \beta_\pi e^{ik_x c_x}, \\ \langle \psi_{A_1}^\pi | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{B_2}^\pi \rangle &= \langle \psi_{B_1}^\pi | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{A_2}^\pi \rangle = \beta_\pi \left[1 + e^{ik_y c_y} \right], \\ \langle \psi_{A_2}^\pi | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{B_2}^\pi \rangle &= \beta_\pi.\end{aligned}$$

Розв'язки цього рівняння мають вигляд

$$E(k_x, k_y) = \alpha_\pi \pm |\beta_\pi| \sqrt{1 \pm 4 \cos \frac{k_y c_y}{2} \cos \frac{k_x c_x}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y c_y}{2}}. \quad (2.11)$$

Відмітимо, що проекція k_y хвильового вектора оберненої ґратки на вісь y збігається з єдиним вектором трансляції k нанотрубки, а проекції k_x відповідає набір n значень

$$\begin{aligned}k_x^m &= \frac{m}{n} \frac{2\pi}{\sqrt{3}c}, \\ (m &= 1, \dots, n).\end{aligned}$$

Тепер рівняння для розрахунку електронних рівнів нанотрубок (n, n) набувають вигляду

$$\begin{aligned}E_{n,m}(k) &= \alpha_\pi \pm |\beta_\pi| \sqrt{1 \pm 4 \cos \frac{kc}{2} \cos \frac{\pi m}{n} + 4 \cos^2 \frac{kc}{2}}, \\ -\frac{\pi}{c} &< k < \frac{\pi}{c}, \quad m = 1, \dots, n.\end{aligned}$$

Як і в графіті, всі рівні, розташовані нижче α , відповідають двічі заповненим станам валентної зони, а які лежать вище – вакантним рівням зони провідності. У рівнянні для $E_{n,m}(k)$ валентній зоні відповідає знак мінус, а зоні провідності – плюс перед інтегралом перестрибування. Положення рівня Фермі збігається з енергією p -орбіталі α_π у вільному атомі вуглецю.

При побудові зонної структури можна побачити, що дисперсійні криві валентної зони і зони провідності розташовані симетрично відносно рівня Фермі. Стани валентної зони і зони провідності перетинаються в точці $k = \frac{2\pi}{3c}$. Нанотрубіці властивий металевий тип зонної структури.

2.7 π -зони нанотрубок $(n, 0)$

Розрахуємо тепер закони дисперсії електронів для нехіральних нанотрубок $(n, 0)$ типу „зигзаг“. Елементарна трансляційна комірка таких нанотрубок містить $4n$ атомів С p_π -орбіталей і π -електронів. Проте і тут нанотрубка має не лише трансляційну симетрію, але й обертальну симетрію відносно осі нанотрубки. Знову представимо нанотрубку як результат такого згортання вирізаного з графітового шару стрічки, щоб трансляційна вісь нанотрубки збігалася з віссю y графітового шару. Тоді трансляції графітового шару уздовж осі x при переході до нанотрубки $(n, 0)$ перетворюються на n поворотів її осі.

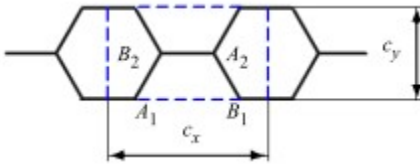


Рисунок 2.4 – Елементарна комірка нанотрубки $(n, 0)$ при врахуванні поворотів навколо осі нанотрубки (вісь y)

Елементарна комірка нанотрубки $(n, 0)$ – прямокутник із сторонами $c_y = \sqrt{3}c$ і $c_x = c$ (рис. 2.4). Чотири базисні блохівські функції (2.6) – (2.9) і секулярне рівняння четвертого порядку для $E(k_x, k_y)$ (2.10) мають попередній вигляд, але ненульові

недіагональні матричні елементи зміняться, і тепер виглядатимуть інакше:

$$\begin{aligned}\langle \psi_{A_1}^\pi | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{B_1}^\pi \rangle &= \beta_\pi, \\ \langle \psi_{A_1}^\pi | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{B_2}^\pi \rangle &= \langle \psi_{B_1}^\pi | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{A_2}^\pi \rangle = \beta_\pi \left[1 + e^{ik_x c_x} \right], \\ \langle \psi_{A_2}^\pi | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{B_2}^\pi \rangle &= \beta_\pi e^{ik_y c_y}.\end{aligned}$$

У результаті знаходимо:

$$E(k_x, k_y) = \alpha_\pi \pm |\beta_\pi| \sqrt{1 \pm 4 \cos \frac{k_y c_y}{2} \cos \frac{k_x c_x}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_x c_x}{2}}.$$

Як і раніше, k_y збігається з єдиним трансляційним хвильовим вектором $\mathbf{k}$ нанотрубок, але тепер $\mathbf{k}$ варіюється в інтервалі від $-\pi\sqrt{3}$ до $\pi\sqrt{3}$ через зростання в $\sqrt{3}$ разів розміру елементарної комірки c_y прямої ґратки $(n, 0)$ порівняно з (n, n) і, як наслідок, такого ж зменшення комірки оберненої ґратки. Проекції k_x відповідає дискретний набір n значень

$$k_x^m = \frac{m}{n} \frac{2\pi}{c},$$

$$(m = 1, \dots, n).$$

Зростання k_x^m у нанотрубі типу „зигзаг“ порівняно з нанотрубою типу „крісло“ в $\sqrt{3}$ разів відображає таке ж зменшення розміру елементарної комірки в напрямку x . Після спрощень рівняння для розрахунку електронних рівнів нанотрубок $(n, 0)$ набуває вигляду:

$$\begin{aligned}E_{n,m}(k) &= \alpha_\pi \pm |\beta_\pi| \sqrt{1 \pm 4 \cos \frac{k\sqrt{3}c}{2} \cos \frac{\pi m}{n} + 4 \cos^2 \frac{\pi m}{2}}, \\ -\frac{\pi}{\sqrt{3}c} &< k < \frac{\pi}{\sqrt{3}c}, \quad m = 1, \dots, n.\end{aligned}\tag{2.12}$$

Можна переконатися, що металевий характер зонної структури

повинен спостерігатися лише для нанотрубок $(n, 0)$, для яких n кратне трьом. Дійсно, в цьому разі при $k = 0$ для $m = \frac{n}{3}$ і $m = \frac{2n}{3}$ другий доданок у (2.12)

$$|\beta_{\pi}| \left(1 - 2 \cos \frac{\pi m}{n} \right)$$

обертається в нуль, і енергія стелі валентної зони збігається з енергією дна зони провідності.

2.8 π -зони нанотрубок (n, m)

Нарешті, без детального виводу дисперсійних кривих зупинимося на хіральних нанотрубках. У нанотрубках (n, m) щілини між валентною зоною і зоною провідності немає, якщо різниця $(n - m)$ кратна трьом. Щоб переконатися в цьому, можна скористатися аналітичним виразом для законів дисперсії графітового шару:

$$E_{\text{Gr}}^{\pm}(k_x, k_y) = \alpha_{\pi} \pm |\beta_{\pi}| \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3} k_x c}{2} \cos \frac{k_y c}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y c}{2}}. \quad (2.13)$$

Тут k_x і k_y змінюються неперервно в межах гексагональної зони Бриллюена графіту. Для переходу від електронної структури графіту до електронної структури нанотрубки необхідно перейти від векторів k_x і k_y до нових векторів, один із яких орієнтований вздовж осі нанотрубки і неперервно змінюється в одновимірній зоні Бриллюена, а другий – перпендикулярний до нього і приймає дискретні значення. Тоді щілини між валентною зоною і зоною провідності немає, якщо

$$n - m = 3q, \quad \text{де} \quad q = 0, 1, \dots$$

3 ЗАВДАННЯ ДО РОЗРАХУНКУ

3.1 Перелік тем реферативної частини розрахунково-графічних завдань

1. Алотропні форми вуглецю.
2. Одержання нанотрубок і фулеренів.
3. Хімія фулеренів.
4. Хімія вуглецевих нанотрубок.
5. Застосування нанотрубок в електроніці.
6. Механічні властивості нанотрубок.
7. Електричні властивості нанотрубок.
8. Адсорбційні властивості нанотрубок.
9. Емісійні властивості нанотрубок.
10. Графен, його структура та властивості. Одержання графенових шарів.
11. Фазовий розмірний ефект. Умови фазової рівноваги в нанодисперсних системах.
12. Властивості нанодисперсних систем.
13. Фазові перетворення в нанодисперсних системах.
14. Оптичні властивості металевих колоїдів.
15. Магнітні властивості нанорозмірних структур.
16. Зародкоутворення в низьковимірних системах.
17. Теплові властивості нанокластерів.
18. Органічні провідники і напівпровідники.
19. Нанокераміка.
20. Полімерні нанокompозити.
21. Синтез наноматеріалів золь-гель методом.
22. Одержання й використання пористих напівпровідників.
23. Синтез наноматеріалів в умовах «хімічного збирання» на поверхні.
24. Синтез наноматеріалів на межах поділу рідина – рідина і рідина – повітря.
25. Матричний (темплатний) синтез композитних наноматеріалів.
26. Розмірні ефекти в нанохімії.
27. Фізико-хімічні основи нанолітографії.
28. Молекулярно-променева епітаксія.
29. Епітаксія з газової фази.
30. Методи зондової нанотехнології.

3.2 Тематика типових розрахунково-графічних завдань

3.2.1 Дослідження нехіральних нанотрубок типу „крісло“

3.2.1.1 Дослідіть нанотрубку (n, n) згідно з номером варіанту (n співпадає з номером у журналі академічної групи)¹:

- знайдіть діаметр нанотрубки;
- побудуйте дисперсійні криві;
- визначте координату перетину станів валентної зони і зони провідності.

3.2.1.2 Повторюючи дії п. 3.2.1.1, вивчіть зонну структуру нанотрубок більшого діаметру $(2n, 2n)$, $(3n, 3n)$. Порівняйте координати перетину станів зон.

3.2.1.3 Вивчіть зонну структуру відносно великої нанотрубки, наприклад, $(10n, 10n)$.

3.2.2 Дослідження нехіральних нанотрубок типу „зигзаг“

3.2.2.1 Пам'ятайте, що для нанотрубок типу „зигзаг“ $m = 0$. Істотною відмінністю нанотрубок типу „зигзаг“ від нанотрубок типу „крісло“ є можливий напівпровідниковий характер зонної структури, такий, що виявляється у разі, коли n не ділиться на три. В іншому разі нанотрубки мають металевий тип зонної структури. Перевірте цей факт, вивчивши зонну структуру нанотрубок $(3n, 0)$, $(6n, 0)$, $(9n, 0)$.

3.2.2.2 Вивчіть нанотрубки, які мають у зонній структурі енергетичну щілину. Для побудови залежності забороненої зони від d буде потрібна більша кількість точок. Як приклад, можна взяти послідовність нанотрубок з геометричною прогресією n : $(2, 0)$, $(4, 0)$, $(8, 0)$, $(16, 0)$, $(32, 0)$, $(64, 0)$. Усі зображення, природно, зберігати не обов'язково, достатньо простежити зміну загальної картини станів зон із збільшенням n .

3.2.2.3 Вивчіть зонну структуру відносно великої нанотрубки, наприклад $(10n, 0)$.

3.2.2.4 Перенести отримані в ході роботи зображення і файли на зйомний носій, у робочій папці повинен залишитися лише вихідний

¹ При розрахунку використовуйте такі значення параметрів: $\alpha_{\pi} = -6,38$ еВ, $\beta_{\pi} = -2,79$ еВ.

файл програми.

3.2.3. Обробка результатів

3.2.3.1 Привести зображення отриманих зонних структур і пояснити згущення рівнів зі збільшенням коефіцієнтів хіральності нанотрубок різного типу.

3.2.3.2 За формулою (2.1) проаналізувати залежність діаметру нанотрубки від коефіцієнта хіральності n для нанотрубок типу „zigzag“ і „крісло“. Поясніть, чому для однакових n діаметр нанотрубок різного типу відрізняється в 3 рази.

3.2.3.3 Результати, отримані для вуглецевих нанотрубок типу „zigzag“, внести до таблиці за формою.

n	d , нм	ΔE_g , еВ

Побудувати і пояснити залежність ширини забороненої зони від d .

3.2.3.4 У 2003 р. в журналі «Science» була опублікована робота, в якій подібну напівпровідникову одностінну вуглецеву нанотрубку використовували як світлодіод. Спостерігалось світіння нанотрубки в інфрачервоній області з довжиною хвилі 1650 нм. Використовуючи результати попереднього пункту, визначте хіральний коефіцієнт n нанотрубки типу „zigzag“, яку ви б використовували для отримання того ж результату. Оцініть її діаметр.

3.2.3.5 Розрахуйте, виходячи з (2.12), число кривих, що описують електронну структуру нанотрубки $(4n, 4n)$. Порівняйте його з числом кривих, отриманих в ході роботи для цього виду нанотрубок.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. **Раков, Э. Г.** Нанотрубки и фуллерены [Текст] / Э. Г. Раков. – М.: Логос, 2006. – 376 с.
2. **Дьячков, П. Н.** Электронные свойства и применение нанотрубок [Текст] / П. Н. Дьячков. – М.: Бином, 2011. – 488 с.
3. **Заячук, Д. М.** Нанотехнології і наноструктури [Текст] / Д. М. Заячук. – Львів: Львівська політехніка, 2009. – 580 с.
4. **Рыжонков, Д. И.** Наноматериалы [Текст] / Д. И. Рыжонков, В. В. Лёвина, Э. Л. Дзидзигури. – М.: Бином, 2010. – 365 с.
5. **Старостин, В. В.** Материалы и методы нанотехнологий [Текст] / В. В. Старостин. – М.: Бином, 2010. – 431 с.
6. **Азаренков, Н. А.** Наноматериалы, нанопокрyтия, нанотехнологии [Текст] / Н. А. Азаренков, В. М. Береснев, А. Д. Погребняк, Л. В. Маликов, П. В. Турбин. – Х.: ХНУ им. В. Н. Каразина, 2009. – 209 с.

Додаток А
Приклад оформлення титульної сторінки

Міністерство освіти та науки України

Запорізький національний технічний університет

Кафедра МіНЕ

РОЗРАХУНКОВО-ГРАФІЧНЕ ЗАВДАННЯ

з дисципліни

„Хімія наноструктурованих матеріалів“

(тема роботи)

Виконав:

студент ____ курсу, група РТ–__

(Ініціали, Прізвище)

Прийняв:

(посада)

(Ініціали, Прізвище)

20__ р.