

07. Металлические нанотрубки (12 баллов)

Свернуть в трубку можно не только лист графена (рис. 1а), но и слой плотно упакованных шариков – атомов металла (рис. 1б). Несмотря на некоторую схожесть, атомы металла и углерода расположены по-разному относительно единой сетки шестиугольников, поэтому единичные радиус-векторы в слое металла выбираются иначе, чем в графене (рис. 1б).

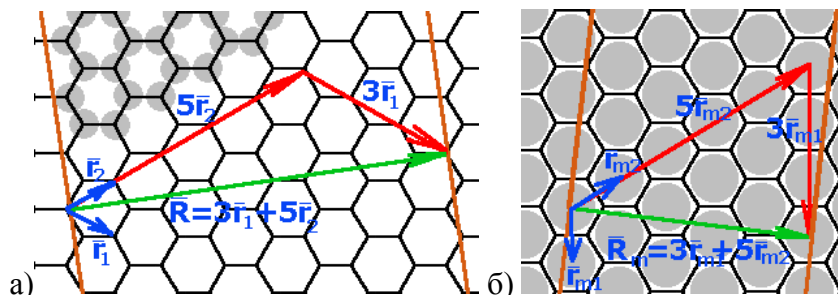


Рис. 1 Заполнение атомами единой сетки шестиугольников.

а) Пример развертки хиральной углеродной нанотрубки (УНТ) (3,5). Для произвольной хиральной УНТ (n,m) развертка задается вектором $\vec{R} = n\vec{r}_1 + m\vec{r}_2$.

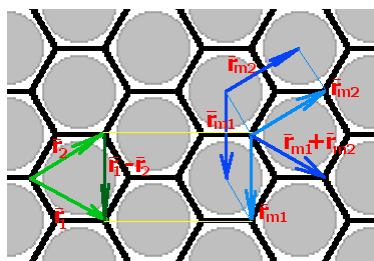
б) Пример развертки хиральной металлической нанотрубки (МНТ) (3,5). Для произвольной хиральной МНТ (x,y) развертка задается вектором $\vec{R}_m = x\vec{r}_{m1} + y\vec{r}_{m2}$.

1. Выразите радиус-векторы \vec{r}_{m1} , \vec{r}_{m2} через радиус-векторы \vec{r}_1 , \vec{r}_2 в единой сетке шестиугольников. (2 балла)

2. Выведите все условия для индексов хиральности (x,y) зигзагообразных и зубчатых МНТ, если из единой сетки шестиугольников их развертки получаются так же, как зигзагообразные и зубчатые УНТ, соответственно. (3,5 балла)

3. Выведите формулы для оценки диаметров УНТ и МНТ через индексы хиральности соответствующих трубок (n,m) и (x,y). Все атомы считать точечными, длину стороны правильного шестиугольника в единой сетке обозначить как a . (3 балла)

4. Какая из нанотрубок будет толще, медная или углеродная, при условии $x = n$ и $y = m = 0$? Диаметр атома углерода принять равным 0,142 нм, диаметр атома меди – 0,256 нм. (3,5 балла)



Ответ.

1. Радиус-векторы МНТ через радиус-векторы УНТ можно выразить как: $\vec{r}_{m1} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ и $\vec{r}_{m2} = \vec{r}_2$ (см. рис).

2. 1) Условие для зубчатых УНТ $n = m$. Так как способ сворачивания единого листа шестиугольников одинаков, то:

$$x\vec{r}_{m1} + y\vec{r}_{m2} = \vec{R}_m = \vec{R} = m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 = m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + (-m\vec{r}_2 + m\vec{r}_2) = m(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + 2m\vec{r}_2$$

То есть, $x = m$, $y = 2m$ (или $y = 2x$) – условие для зубчатых МНТ.

Условие 1 для зигзагообразных УНТ $\mathbf{n} = 0$. Так как способ сворачивания единого листа шестиугольников одинаков, то: $x\vec{r}_{m1} + y\vec{r}_{m2} = \mathbf{R}_m = \vec{R} = 0\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 = m\vec{r}_2$. То есть, $\mathbf{x} = 0$, $\mathbf{y} = \mathbf{m}$ (или $(0, y)$) – условие 1 для зигзагообразных МНТ.

Условие 2 для зигзагообразных УНТ $\mathbf{m} = 0$. Так как способ сворачивания единого листа шестиугольников одинаков, то: $x\vec{r}_{m1} + y\vec{r}_{m2} = \mathbf{R}_m = \vec{R} = n\vec{r}_1 + 0\vec{r}_2 = n\vec{r}_1 + (-n\vec{r}_2 + n\vec{r}_2) = n(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + n\vec{r}_2$. То есть, $\mathbf{x} = \mathbf{n}$, $\mathbf{y} = \mathbf{n}$ (или $\mathbf{x} = \mathbf{y}$) – условие 2 для зигзагообразных МНТ.

3. Учитывая, что $|\vec{r}_1| = |\vec{r}_2| = |\vec{r}_{m1}| = |\vec{r}_{m2}| = 2a \cos(30) = a\sqrt{3}$, получаем:

$$|\vec{R}|^2 = |n\vec{r}_1|^2 + |m\vec{r}_2|^2 - 2|n\vec{r}_1| \cdot |m\vec{r}_2| \cos(120) = 3n^2a^2 + 3m^2a^2 - 2 \cdot 3a^2nm \cdot (-0,5) = 3a^2(n^2 + nm + m^2)$$

$$\text{и } |\vec{R}_m|^2 = |x\vec{r}_{m1}|^2 + |y\vec{r}_{m2}|^2 - 2|x\vec{r}_{m1}| \cdot |y\vec{r}_{m2}| \cos(60) = 3x^2a^2 + 3y^2a^2 - 2 \cdot 3a^2xy \cdot (0,5) = 3a^2(x^2 - xy + y^2).$$

Поскольку длина вектора \vec{R} равна ширине развертки трубки, то есть, при достаточно больших размерах трубок, совпадает с длиной окружности, то диаметр трубки равен $D = |\vec{R}|/\pi$.

$$\text{Диаметр УНТ равен } D = a\sqrt{3}\sqrt{(n^2 + nm + m^2)}/\pi.$$

$$\text{Диаметр МНТ равен } D_m = a\sqrt{3}\sqrt{(x^2 - xy + y^2)}/\pi.$$

4. Найдем длину стороны шестиугольной сетки для каждой из нанотрубок:

$$a_c = d_c = 0,142 \text{ нм}, a_{Cu} = \frac{d_{Cu}}{\sqrt{3}} = \frac{0,256}{\sqrt{3}} \text{ нм}.$$

$$\text{Тогда } D_c = a_c\sqrt{3}\sqrt{(n^2 + nm + m^2)}/\pi = 0,142\sqrt{3}\sqrt{(n^2)}/\pi = 0,142\sqrt{3}n/\pi \text{ и}$$

$$D_{Cu} = a_{Cu}\sqrt{3}\sqrt{(x^2 - xy + y^2)}/\pi = 0,256\sqrt{(n^2)}/\pi = 0,256n/\pi.$$

$$\text{Найдем соотношение диаметров МНТ и УНТ: } \frac{D_{Cu}}{D_c} = \frac{0,256n\pi}{0,142\sqrt{3}n\pi} = 1,04.$$

То есть, медная нанотрубка будет толще (несмотря на то, что на рисунке в условии МНТ (3,5) выглядит тоньше УНТ (3,5)).