

Министерство образования и науки Российской Федерации

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики

Расчёт ёмкости бислойных фуллеренов

Автореферат

ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ БАКАЛАВРА

студента(ки) 4 курса 421 группы

направления (специальности) Радиофизика

код и наименование направления (специальности)

физического факультета

наименование факультета, института, колледжа

Плужнов Вячеслав Алексеевич

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель,
старший преподаватель кафедры
радиотехники и электродинамики

должность, учёная степень, звание

подпись, дата

Шунаев В.В.

инициалы, фамилия

зав.кафедрой, д.ф.-м.н., проф.

должность, учёная степень, звание

подпись, дата

Глухова О.Е.

инициалы, фамилия

2018 год

Определение цели работы, методов и объектов исследования

Открытие фуллеренов - новой формы существования одного из самых распространенных элементов на Земле – углерода, признано одним из удивительных и важнейших открытий в науке XX столетия.

Фуллерен - молекулярное соединение, принадлежащее классу аллотропных форм углерода и представляющее собой выпуклые замкнутые многогранники, составленные из чётного числа трёхкоординированных атомов углерода.

В настоящее время наибольший интерес представляют бислойные фуллерены.

Бислойные фуллерены представляют собой концентрически вложенные друг в друга многослойные оболочки фуллеренов.

Изучение и получение бислойных фуллеренов в современной науке весьма актуально и в силу перспективности этого направления исследования, и в силу недостаточной изученности темы.

Целью данного исследования является расчет электроёмкости бислойных фуллеренов методами математического моделирования

Конкретные задачи определены следующим образом:

- 1) поиск энергетически стабильных бислойных фуллеренов
- 2) расчет электроёмкости одиночных фуллеренов
- 3) расчет электроёмкости бислойных фуллеренов.

В качестве инструментов исследования, использовались программные комплексы, разработанные на кафедре радиотехники и электродинамики физического факультета Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г.Чернышевского:

- 1) программа для моделирования наноструктур (Ring). Авторы: О.Е. Глухова, О.А. Терентьев;
- 2) «Многопроцессорный программно-информационный комплекс моделирования молекулярных систем для супер-ЭВМ «KVAZAR». Авторы: Глухова О.Е., Савостьянов Г.В., Сафонов Р.А.

Для расчета энергетического потенциала в данной работе был использован

метод молекулярного моделирования - SCC DFTB:

$$E_2^{TB} = \sum_i^{occ} \langle \Psi_i | \hat{H}_0 | \Psi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum \gamma_b^a \Delta q_a \Delta q_b + E_{rep}$$

\hat{H}_0 – невозмущенный гамильтониан, зависящий от плотности заряда n_0

Ψ_i – волновая функция

$\Delta q_a \Delta q_b$ – заряды на атомах, полученные в результате поправки

γ – параметр Хаббарда (химическая жесткость)

Для проведения исследования были взяты одиночные фуллерены с определенным количеством атомов: C20, C28, C32, C36, C60, C80, C240, C540.

Для расчета энергетического потенциала в данной работе был использован метод молекулярного моделирования - SCC DFTB:

$$E_2^{TB} = \sum_i^{occ} \langle \Psi_i | \hat{H}_0 | \Psi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum \gamma_b^a \Delta q_a \Delta q_b + E_{rep}$$

\hat{H}_0 – невозмущенный гамильтониан, зависящий от плотности заряда n_0

Ψ_i – волновая функция

$\Delta q_a \Delta q_b$ – заряды на атомах, полученные в результате поправки

γ – параметр Хаббарда (химическая жесткость)

Для проведения исследования были взяты одиночные фуллерены с определенным количеством атомов: C20, C28, C32, C36, C60, C80, C240, C540.

Основная часть

Расчет электроёмкости изолированных фуллеренов

Чтобы рассчитать электроёмкость бислойных фуллеренов, необходимо знать собственную ёмкость одиночного фуллерена, которая в работе определялась

по методу, основанному на зависимости энергии молекулы от ее электростатического заряда. В приближении доминирования квадратичного по заряду члена в этой зависимости собственная эффективная емкость C_i определяется по формуле:

$$C_{ind} = \frac{2e^2}{I - A}$$

Формула (1) - емкость изолированного фуллерена C_{ind} .

I – первый потенциал ионизации молекулы

A – энергия сродства к электрону. e - заряд электрона

Формула (1) показывает, что эффективная емкость атома, определенная таким образом, возрастает с уменьшением разности между значением потенциала ионизации атома и его сродства к электрону. Эта формула позволяет провести расчет собственной эффективной емкости любых изолированных атомов в квантовом приближении.

Задействованные одиночные фуллерены, емкость которых была посчитана по формуле (1), позволили получить следующие результаты:

C_i	$E_{total}(0)$	$E_{total}(+1e)$	$E_{total}(-1e)$	$I, \text{эВ}$	$A, \text{эВ}$	C, Φ
C20	922,82	915,61	924,56	1,74	7,21	5,85E-20
C28	1299,7	1292,2	1302,3	2,60	7,50	6,53E-20
C32	1484,2	1476,8	1486,2	2,00	7,40	5,93E-20
C36	1678,9	1671,7	1680,2	1,30	7,20	5,42E-20
C60	2817,7	2810,1	2820	2,29	7,65	5,97E-20
C80	3760,4	3753,9	3764,1	3,70	6,50	1,14E-19
C240	11330	11323	11333	3,34	6,56	9,94E-20
C540	25526,5	25520,4	25530,3	3,8	6,1	1,39E-20

Кроме того для нахождения I , εB - первого потенциала ионизации молекулы и A , εB - энергии сродства к электрону были заданы определенные заряды ($E_{total}(0)$, $E_{total}(+1e)$, $E_{total}(-1e)$) и высчитаны по формуле:

$$I = E_{tot}(0) - E_{tot}(-1)$$

$$A = E_{tot}(1) - E_{tot}(0)$$

Это взаимодействие обусловлено энергией ван-дер-Ваальса, а также энергией перекрытия электронных облаков [5-12]. Для описания взаимодействия несвязанных атомов нами использовался потенциал Леннарда-Джонса.

Для определения термодинамических стабильных фуллеренов, было посчитано межоболочечное взаимодействие между внешним и внутренним фуллереном.

Изложенный в работе метод определения собственной эффективной емкости применим для отдельных молекул, атомов, наночастиц и любых других объектов наномасштаба. При этом введенное выше определение охватывает все возможные типы нанообъектов с различными химическими и физическими свойствами: объекты могут иметь разный химический состав, а так же свойства как диэлектриков, так и проводников и, разумеется, полупроводников. Подробно рассмотрены особенности эффективной емкости для атомов и молекул.

Нахождение Коэффициента β

Аналогичным образом была определена электроемкость бислойных фуллеренов: за основу зависимость энергии взаимодействия двух молекулярных объектов от их зарядов и расстояния между ними. Данная зависимость заложена в коэффициент β из формулы:

$$\beta = \frac{Q_1^2 \times 1.6 \times 10^{-19}}{E_{el}}$$

Формула (2) - Коэффициент β зависит от размеров объектов и расстояния между ними и выражается через энергию взаимодействия E_{el} .

По формуле (2) – можно рассчитать взаимную емкость изолированной

C_{12}	Q	SCC	E_{el}	B
c28-80	0,4500	0,73	1,6E-19	4,44E-20
c80-240	0,2777	0,1382	1,6E-19	8,93E-20
c60-240	0,0191	0,0459	1,60E-19	1,27E-21
c240-540	0,1577	0,1139	1,60E-19	3,49E-20
c80-540	0,0149	0,1223	1,60E-19	2,90E-22

системы двух молекул. В этом случае коэффициенты C_1, C_2 являются собственными емкостями молекул.

Расчет электроемкости бислойных фуллеренов

Развитая в данной работе методика квантово-механического расчета характеристик молекулярного одноэлектронного транзистора может быть использована для выявления критериев отбора молекул или наночастиц при создании сложных одноэлектронных устройств с требуемыми рабочими характеристиками. Такой выбор можно сделать, исследовав особенности энергетических спектров молекулярного объекта в различных состояниях. Состояния молекулы определяются, в частности, ее зарядом и мультиплетностью. Поэтому построив адекватный энергетический спектр, зная только эти параметры (без учета всего набора квантовых чисел), можно упростить выявление влияния структурных особенностей молекул на

транспортные характеристики одноэлектронных устройств и открывает возможность быстрого отбора требуемых молекулярных соединений.

В радиотехнике чаще используют емкостный коэффициент, однако для дальнейших расчетов нам удобнее применять потенциальный. Связь между этими коэффициентами в случае двух проводников на расстоянии много больше их размера и имеет следующий вид:

$$C_{12} = \frac{C_1 C_2 B}{C_1 C_2 B^2}$$

Формула(3). - емкость бислойного фуллерена.

Где C_1, C_2 – собственные емкости первого и второго проводников.

C_{12}	C_1	C_2	β	C
c28-80	-6,53E-20	-1,14E-19	4,44E-22	4,44E-22
c60-240	-5,97E-20	-9,94E-20	1,23E-21	1,23E-21
c80-240	-1,14E-19	-9,94E-20	8,86E-20	2,88E-19
c240-540	-9,94E-20	1,39E-20	3,60E-20	1,86E-20
c80-540	-1,14E-19	1,39E-20	2,94358E-22	2,94E-22

Предложен и разработан метод определения взаимной емкости для объектов наномасштаба (молекул, молекулярных кластеров, квантовых точек/наночастиц), основанный на квантово_механическом расчете энергии электрического взаимодействия таких нанобъектов. Этот метод необходим для адекватного расчета взаимной емкости элементов в системах нанобъектов с четко выраженными квантовыми свойствами. Он позволяет найти более точное значение емкости молекул, чем полученное при помощи классической теории.

Сравнение изолированных фуллеренов с бислойным фуллереном

C60	5,97E-20
C240	9,94E-20
C60-240	1,23E-21

В равновесном состоянии частицы C60@C240, соответствующем температуре $T = 0$ К, фуллерен располагается в середине фуллерена C240, то есть внутренний фуллерен по центру внешней оболочки. Этой позиции C60 соответствует энергия взаимодействия E_1 между оболочками фуллеренов.

Заключение

Открытые сравнительно недавно фуллерены и углеродные нанотрубки обладают такими свойствами, которые позволят человечеству на их основе создать новые материалы и аппараты, и сделают нашу жизнь более приятной и защищённой. Многие ещё не исследованы, и сейчас трудно предвидеть все возможные применения этих необычных материалов в практической деятельности.

В данной работе было установлено, какие бислойные фуллерены могут существовать на практике.

Определены электроёмкости изолированных фуллеренов. Наибольшей электроёмкостью обладают фуллерены C80 и C240;

Рассчитаны электроёмкости для термодинамически стабильных фуллеренов C28@C80, C80@C240, C60@C240, C240@C540, C80@C540;

Установлено, что электроёмкость двухоболочечного фуллерена C80@C240 выше, чем ёмкость этих оболочек по отдельности

Некоторые значения имеют отрицательные значения – это говорит о том, что значение энергии LUMO-уровня внутреннего фуллерена меньше, чем значение HOMO-уровня внешнего. Полученная методика может быть использована для расчета энергетических щелей других вложенных друг в друга структур.

Список использованной литературы

1. Mochalin, V. N., Shenderova, O., Ho, D. and Gogotsi, Y. (2012) *The Properties and Applications of Nanodiamonds*, *Nature Nanotechnol.*, 7: 11-23.
doi:10.1038/nnano.2011.209.
2. *Electronic Properties of Bilayer Fullerene Onions*. R. Pincak, J. Smotlacha, M.M. Slepchenkov and O. E. Glukhova
3. **РАСЧЕТ ВЗАИМНОЙ ЕМКОСТИ НАНООБЪЕКТОВ**
© 2011 г. Я. С. Герасимов, В. В. Шорохов, А. Г. Маресов, Е. С. Солдатов, О. В. Снигирев.
4. Новоселова Е. Ф. Фуллерены - новая аллотропная форма углерода -
Новосибирский государственный университет экономики и управления
Новосибирск, Россия.
5. Е. А. Кац. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры, М. 2009.
6. Аверин Д.В., Коротков А.Н. // *ЖЭТФ*. 1990. Т. 97. №5. С. 1661.
7. Gerasimov Y.S., Shorokhov V.V., Soldatov E.S., Snigirev O.V. // *Proc. SPIE*. 2009. V. 7521. P. 75210U.
8. Shorokhov V.V., Soldatov E.S., Elenskiy V.G. // *Proc. SPIE*. 2008. V. 7025. P. 70250N.
9. Шорохов В.В. // *РЭ*. 2011. Т. 56. № 3. С. 352.