

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н. Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра радиотехники и электродинамики

наименование кафедры

**Закономерности удельной электропроводности проводников из углеродных
протяженных нанотрубок различной хиральности**

АВТОРЕФЕРАТ ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Студента 4 курса 421 группы

направления

03.03.03

Радиофизика

код и наименование направления

физического факультета

наименование факультета

Миненкова Кирилла Александровича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

О. Е. Глухова

инициалы, имя

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

О. Е. Глухова

инициалы, имя

Саратов 2019

Введение

Изучение наноструктур благодаря своим уникальным свойствам является одним из наиболее перспективных научных направлений на рубеже 20 — 21 столетий.

Углеродные нанотрубки (УНТ) применяются в оптике, медицине, электронике и других отраслях современной техники. Их свойства были во многом изучены благодаря современным методам компьютерного моделирования.

На текущий момент особый интерес представляет изучение вторичной УНТ структуры, а именно жгутов из УНТ. Актуальность данной работы заключается в использовании преимуществ УНТ жгутов над одиночными УНТ и традиционными проводниковыми элементами.

Целью данной работы является расчет электропроводности жгутов из УНТ различной хиральности. Для достижения этой цели были решены следующие задачи:

1. Обзор теоретических методов изучения электронных свойств УНТ
2. Построение и описание атомистических моделей УНТ типа Armchair и Zigzag
3. Построение и описание атомистических моделей жгутов из УНТ различной хиральности
4. Сравнение электропроводных свойств УНТ жгутов с одиночными УНТ и классическими проводниковыми элементами

Описание работы

Данная работа состоит из 2 частей, теоретической и практической. В первой части рассматриваются методы расчета и построения структур, во второй — результаты исследования. В конце работы делаются выводы и заключение.

Краткий обзор методов исследования

Для нахождения энергии системы с большим количеством ядер используется метод сильной связи, основанный на решении стационарного уравнения Шредингера. Волновая функция в данном методе представлена в виде линейной комбинации атомных орбиталей.

Метод функционала электронной плотности в приближении сильной связи, или метод DFTB, может быть выведен из разложения в ряд Тейлора полной энергии функционала плотности на базе уравнений Кона — Шэма. Данный метод подходит для описания систем, в которых можно пренебречь смещением электронной плотности между атомами.

Согласно теории квантового транспорта, чем сильнее контакт между электродами и проводящей структурой, тем выше протекающий ток. Поскольку проводимость является фундаментально ограниченной величиной, необходимо ввести параметр, отвечающий за уширение энергетического уровня, рассмотренный при изучении формализма Ландауэра — Буттикера.

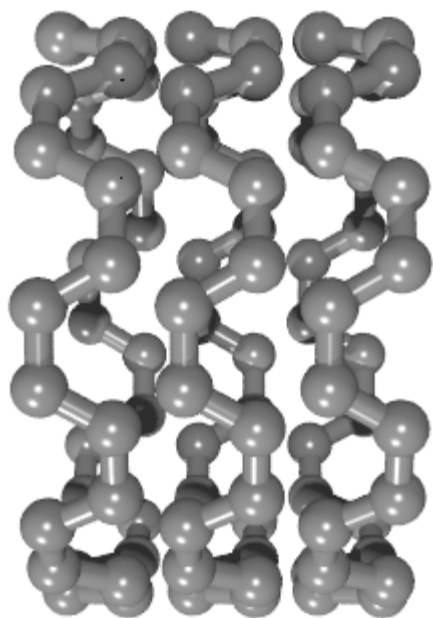
Для реализации цели, поставленной в выпускной квалификационной работе, будет использован метод функционала электронной плотности в приближении сильной связи, помимо этого необходимо воспользоваться формализмом Ландауэра — Буттикера, поскольку в нем наиболее подробно описаны этапы расчета электропроводности.

Выбор используемого метода исследования обусловлен спецификой решаемых в работе научных задач и особенностями атомного строения объектов исследования.

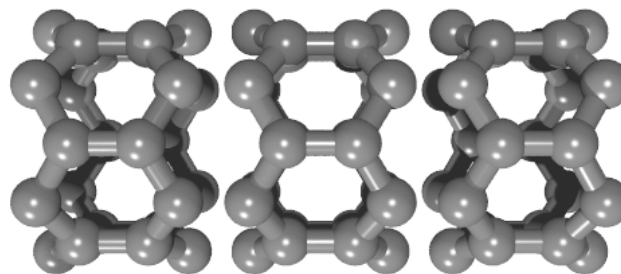
Объекты исследования

Для построения нанотрубок различной хиральности была использована программа KVAZAR, а для расчета их параметров — программа MIZAR.

В ходе исследования были построены атомистические модели УНТ типа Armchair с хиральностью (9; 9) и диаметром 10.9 Å и модель УНТ типа Zigzag с хиральностью (6;0) и диаметром 4.7 Å.



а)



б)

Рисунок 1. Атомистические модели УНТ:

а) УНТ типа Armchair; б) УНТ типа Zigzag

Результаты исследований

Для дальнейших исследований были рассчитаны сопротивления одиночных УНТ: 6.4 кОм для УНТ типа Armchair и 22.4 кОм для УНТ типа Zigzag.

Для составления жгута необходимо выбрать наиболее оптимальное расстояние между трубками. Для этого было рассчитано сопротивление для 2 трубок разной хиральности при изменяющемся расстоянии.

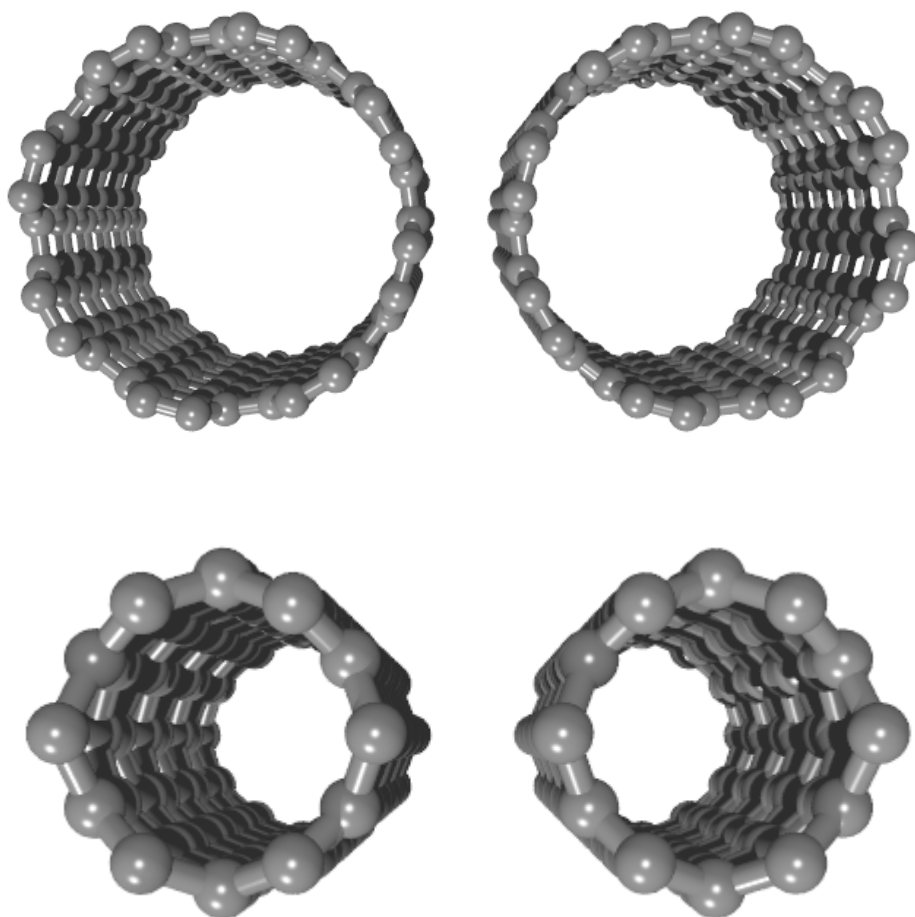


Рисунок 2. 2 трубки типа Armchair и Zigzag, $D = 3 \text{ \AA}$

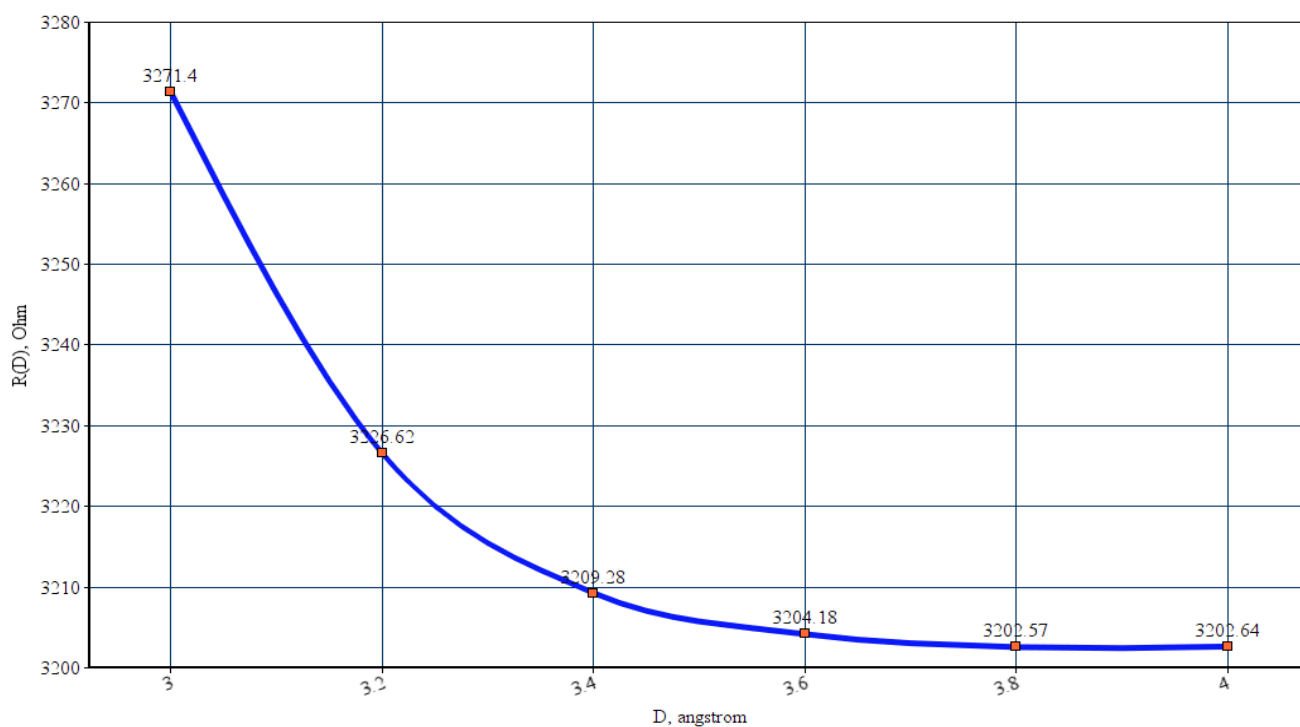


Рисунок 3. График зависимости сопротивления 2 трубок типа Armchair от расстояния между ними

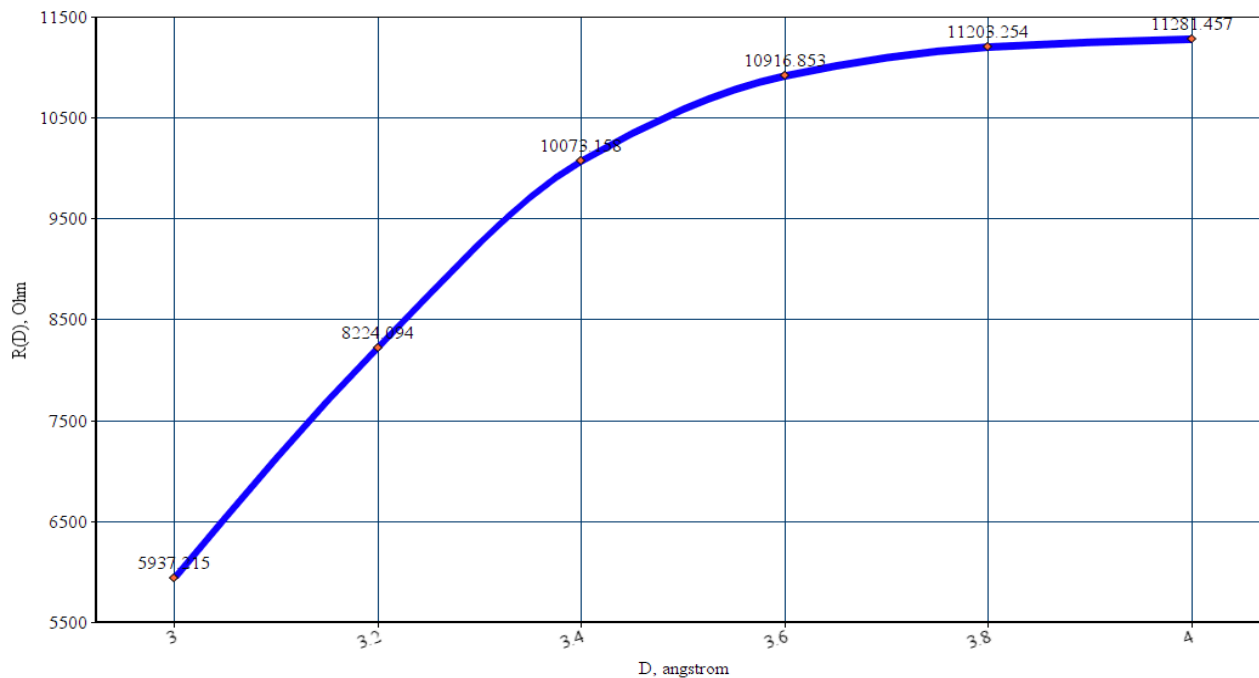


Рисунок 4. График зависимости сопротивления 2 трубок типа Zigzag от расстояния между ними

Как видно из графиков, при расстоянии между трубками $3.4 \text{ \AA}$ изменение сопротивления переходит от экспоненциального к линейному. Это расстояние и было выбрано в качестве определяющего при составлении жгутов.

Следующим шагом исследования были собраны жгуты из нанотрубок, а именно 6 нанотрубок расположены вокруг центральной.

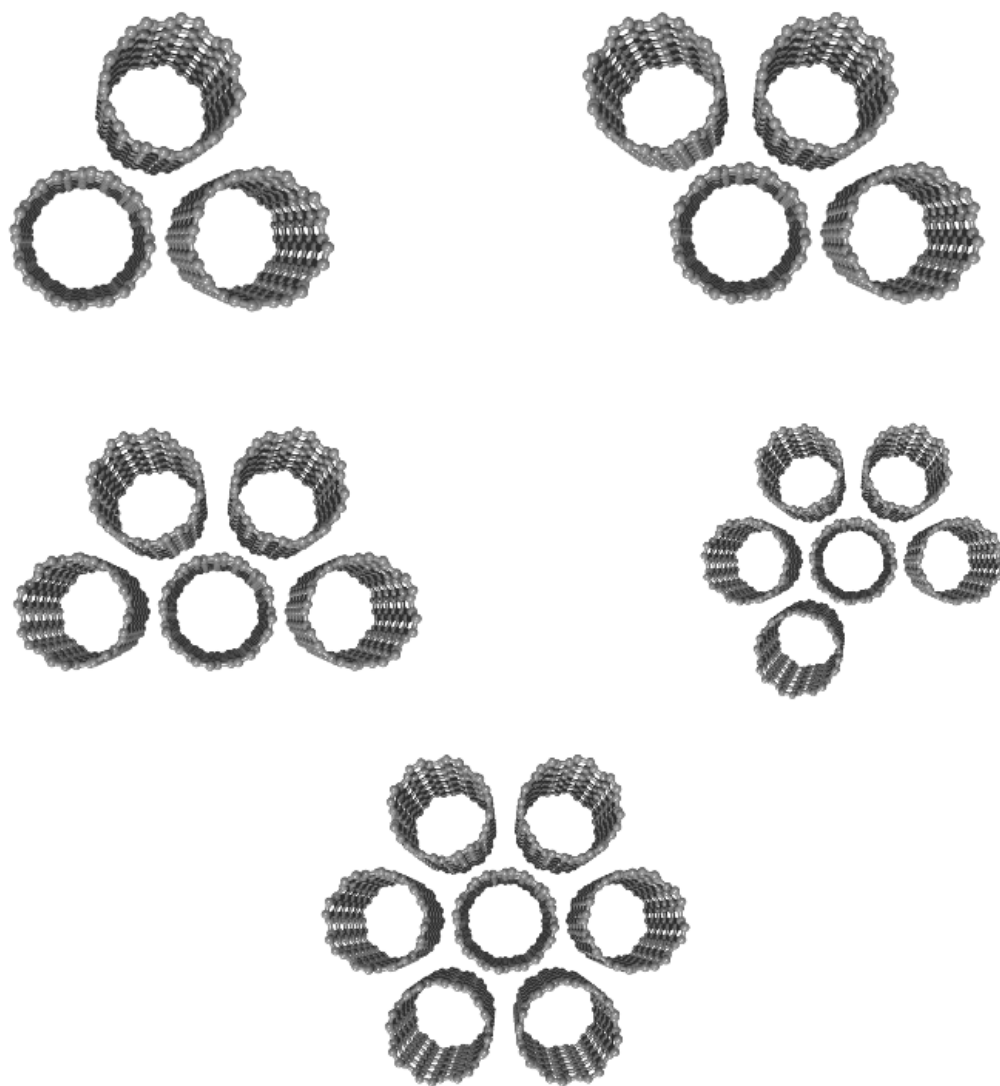


Рисунок 5. Этапы построения жгута из УНТ типа Armchair

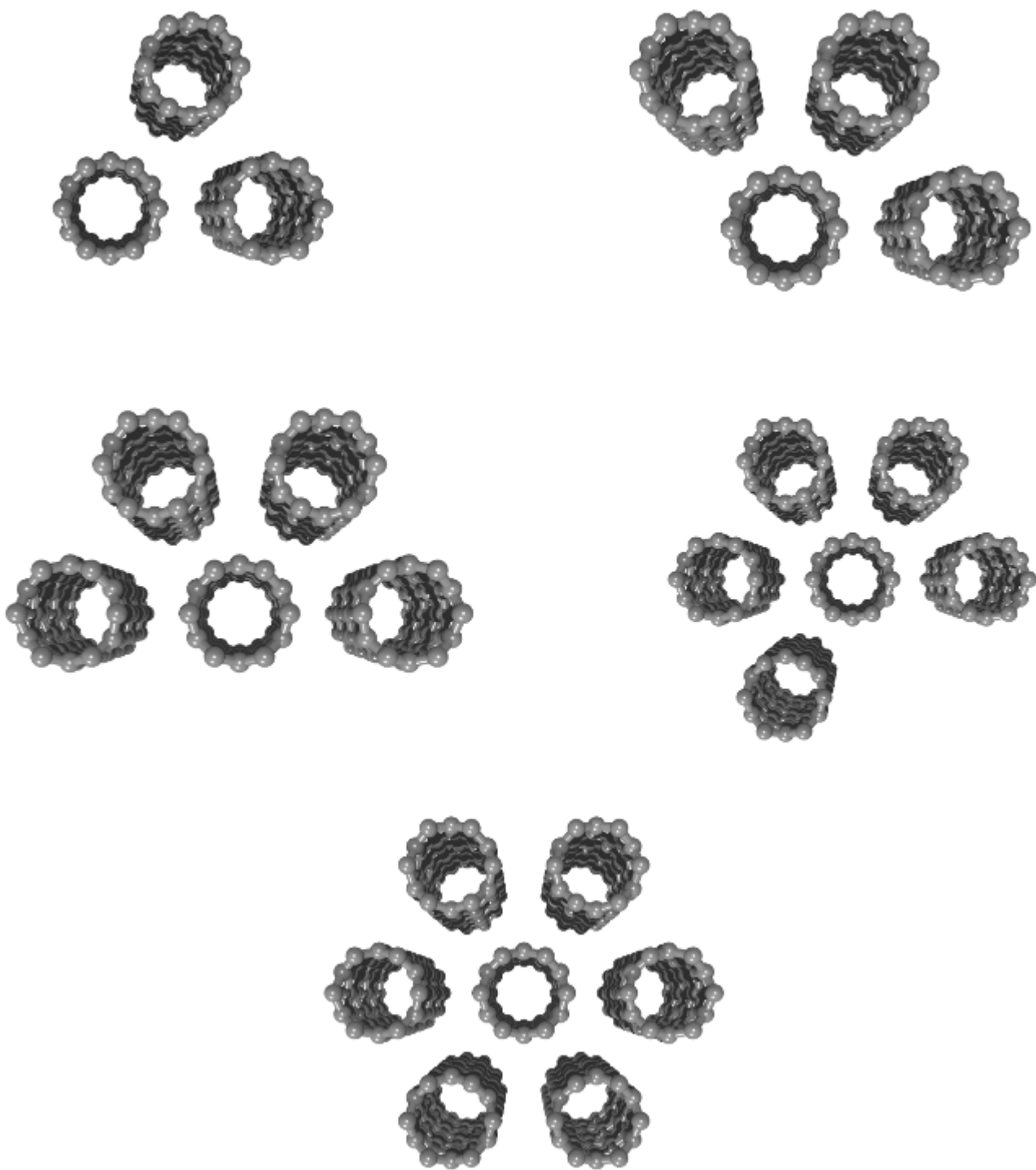


Рисунок 6. Этапы построения жгута из УНТ типа Zigzag

Далее были рассчитаны значения сопротивлений в зависимости от количества УНТ в системе, после чего было произведено сравнение со значениями сопротивлений параллельно соединенных резисторов

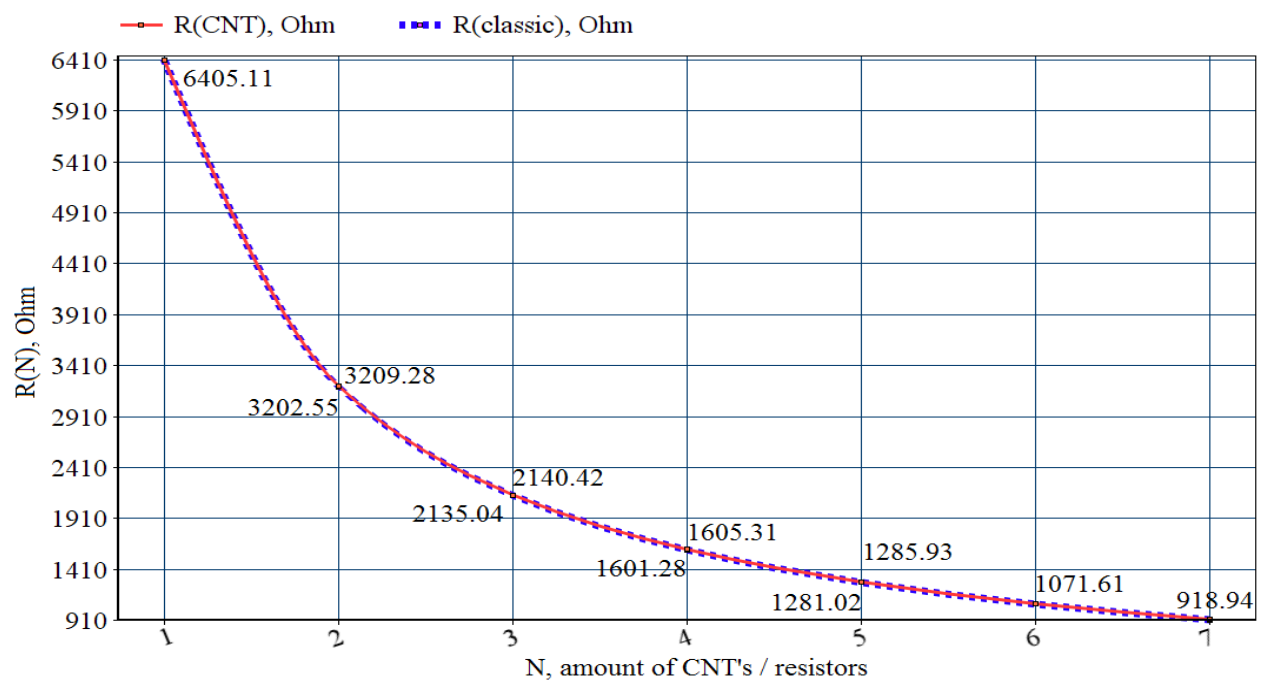


Рисунок 7. Сравнение графиков сопротивления для жгута из УНТ типа Armchair и параллельно соединенных резисторов.

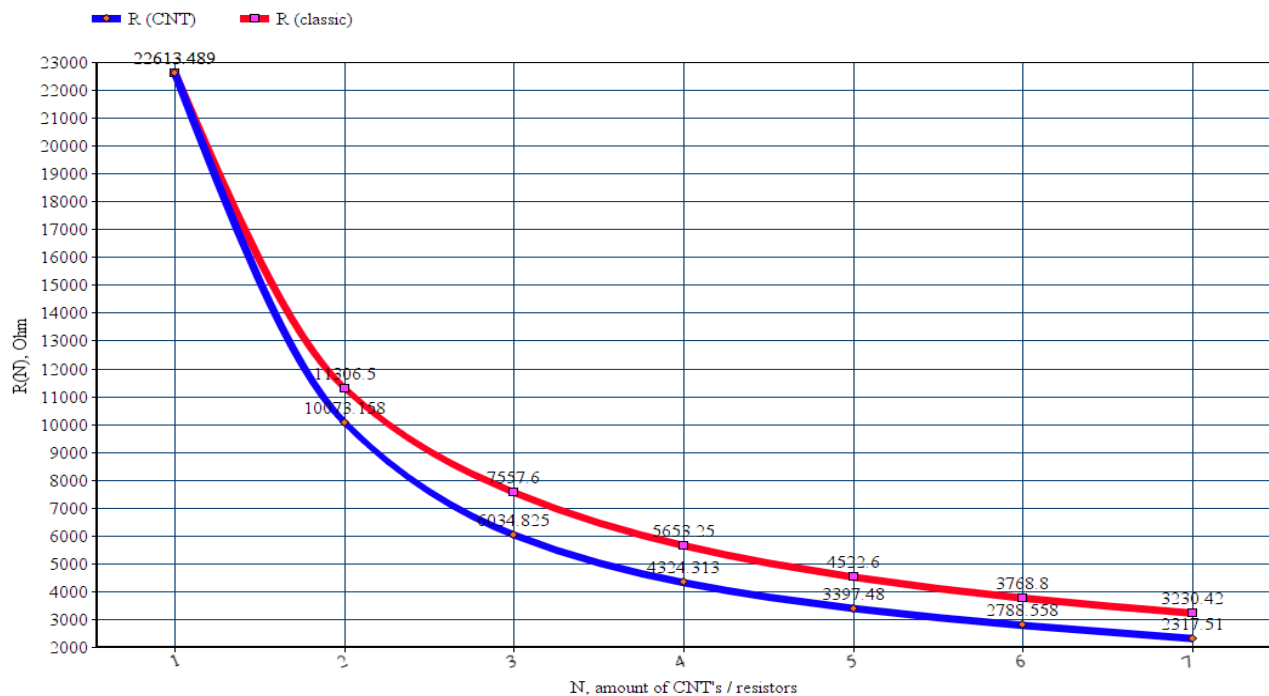


Рисунок 8. Сравнение графиков сопротивления для жгута из УНТ типа Zigzag и параллельно соединенных резисторов.

Результаты

1. В зависимости от типа УНТ сопротивления для одиночных нанотрубок и жгутов УНТ значительно отличается; проводимость УНТ типа Armchair в разы лучше проводимости УНТ типа Zigzag.
2. При увеличении числа нанотрубок в жгуте сопротивление системы в целом экспоненциально уменьшается: для УНТ типа Armchair сопротивление снизилось с 6405 Ом до 918 Ом, для УНТ типа Zigzag сопротивление снизилось с 22613 Ом до 2317 Ом
3. По сравнению с классическими элементами цепи, значения сопротивлений для УНТ жгута типа Armchair и резисторов практически идентичны, а относительная погрешность не превышает 0.428%, в то время как сопротивление УНТ жгута типа Zigzag ниже значений сопротивления параллельно соединенных резисторов в среднем на 25%.

Заключение

УНТ являются уникальными по своей природе и свойствам структурами. В настоящее время происходит активное внедрение и использование УНТ во многих сферах современных технологий. Вторичная же наноструктура, а именно жгуты из нанотрубок различной хиральности, превосходящие по многим параметрам одиночные УНТ, обладают потенциалом для дальнейшего использования в качестве проводниковых элементов современной техники.

С помощью метода плотности состояний в приближении сильной связи (DFTB) и формализма Ландауэра — Буттикера и их применении в качестве инструмента программных комплексов KVAZAR и MIZAR были построены атомистические модели одиночных УНТ, а затем жгутов из УНТ различной хиральности, после чего были рассчитаны их сопротивление и проводимость. Так, было экспериментально доказано, что для трубок типа Armchair проводимость жгута из 7 УНТ выше проводимости одиночной УНТ в 7 раз, а для случая трубок типа Zigzag проводимость жгута выше одиночной УНТ почти в 10 раз.

Полученные результаты позволяют предположить, что применение связок из УНТ в качестве проводникового материала в современной технике или технике будущего является перспективным для изучения направлением.