

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики
наименование кафедры

**Управление движением икосаэдрического фуллерена C₆₀ в полости
гибридного нанокompозита УНТ/C₆₀ внешним электрическим полем**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 2 курса 2233 группы

направления 03.04.03 «Радиофизика»

код и наименование направления

института физики

наименование института

Левицкого Семена Геннадьевича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

к.ф.-м.н., доцент

должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

В.В. Шунаев

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор

О.Е. Глухова

Цели и задачи

- Определить режимы электрического поля, позволяющие контролировать перемещения фуллерена C₆₀ внутри гибридной углеродной нанотрубки
- Изучить электронные и оптические свойства комплекса K@C₆₀ с целью управления его движением внутри УНТ

1. Введение

В настоящее время продолжается активное изучение различных свойств нано-углеродных структур (оптических, теплопроводность и др)[1, 2]. Уже реально рассматривается возможность конструирования на их основе наноэлементов памяти [3, 4, 5, 6].

В частности, были показаны структуры [7][8], реализующие два равновероятных состояния, возникающие вследствие нахождения свободной молекулы C₆₀ в потенциальных ямах.

Более того, уже были экспериментально получены гибридные структуры C₆₀/УНТ [9].

При рассмотрении C₆₀/УНТ гибридных структур как элементов памяти или других устройств наноэлектроники, возникает задача управления свободным фуллереном внутри полости УНТ.

Задача №1 Определить режимы электрического поля, позволяющие контролировать перемещения фуллерена C₆₀ внутри гибридной углеродной нанотрубки.

Нами рассматривалась Т-образная ячейка (рис. 1) – бесшовное, Т-образное соединение нанотрубок (10,10). На краях ячейки находятся триммеры фуллерена C₆₀, химически связанных со стенками трубки. Красным выделен свободный фуллерен.

Модель данной структуры была получена при помощи программного комплекса Seammaker [10]. Визуализация атомистической модели осуществляется с помощью программы Kview [11].

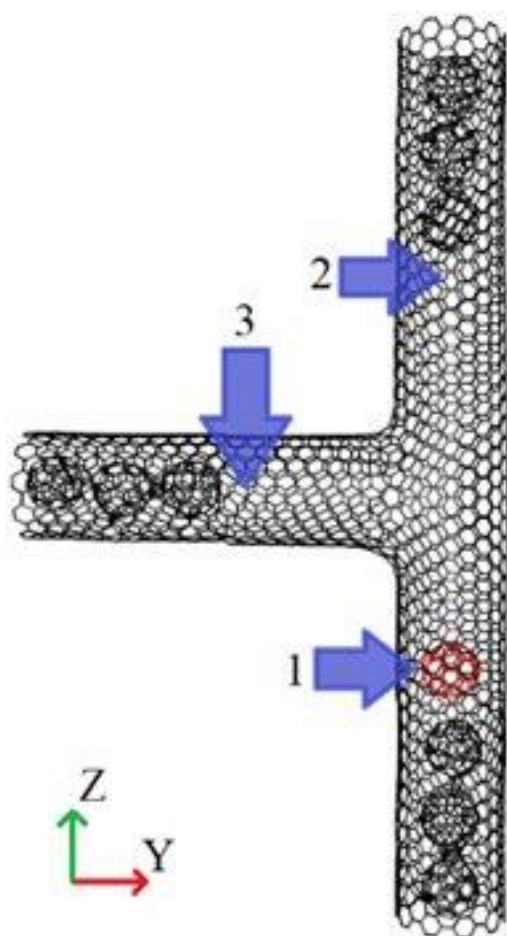


Рис. 1 Расположение потенциальных ям внутри C60-УНТ композита

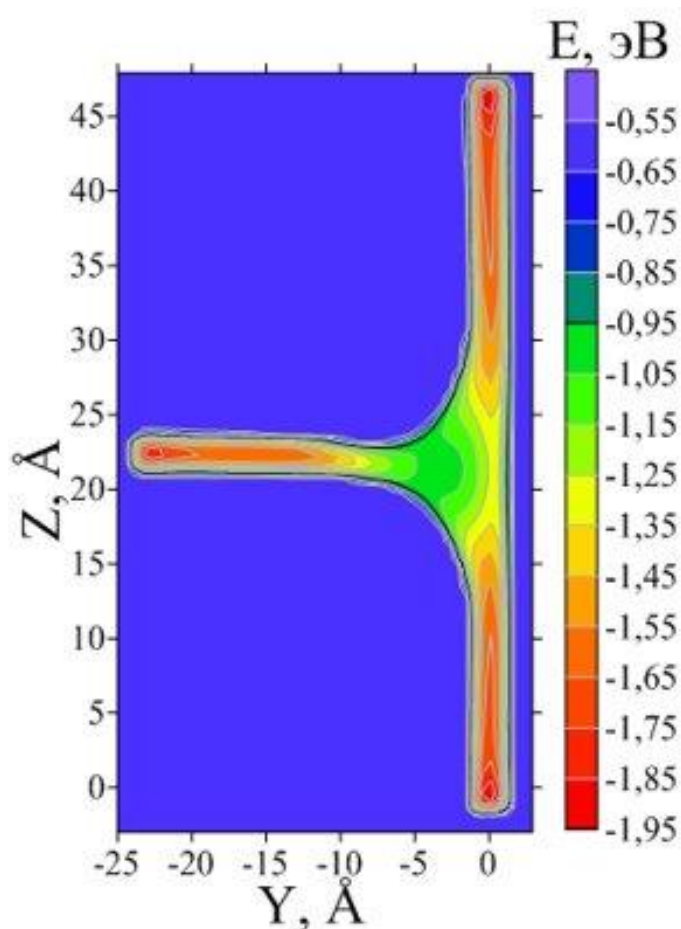


Рис. 2 Распределение энергии Ван-дер-Ваальса внутри композита

При рассмотрении данной структуры с помощью потенциала Леннарда-Джонса был построен энергетический профиль взаимодействия свободного фуллерена с внешней оболочкой. Найдены потенциальные ямы вблизи приконцевых участков структуры (рис. 2).

Следующим шагом было моделирование движения фуллерена внутри полости УНТ. На первом этапе моделирование осуществлялось методом классической молекулярной динамики на основе потенциала AIREBO[13].

В результате моделирования были найдены режимы электрического поля, необходимые для перемещения свободного фуллерена между потенциальными ямами (рис. 1). Данные представлены в таблице 1.

Табл. 1 Напряженности (V_{nm}) и направления электрического поля, необходимые для перемещения комплекса C60 между потенциальными ямами внутри композита C60/УНТ. Частота поля 500 ГГц.

Номер ямы	Номер ямы		
	1	2	3
1	-	1.6 (0;0;1)	1.65 (0;-0.75;1)
2	1.6 (0;0;-1)	-	1.65 (0;-0.75;-1)
3	1.65 (0;1;-0.75)	1.6(0;1;0.75)	-

Полученные результаты исследований были опубликованы в сборнике научных статей [14].

Отметим, что показанные выше результаты были получены с помощью эмпирического метода AIREBO, который не учитывает квантовые эффекты, в частности, перераспределение заряда в структуре.

В связи с этим нами было принято решение провести дальнейшие расчёты методом функционала плотности в приближении сильной связи - SCC DFTB.

Для управления движением фуллерена необходимо поместить на его атомный каркас максимально возможный заряд. Для этого в полость фуллерена помещают атомы металлов. Нами были рассмотрены атомы железа, кобальта и калия.

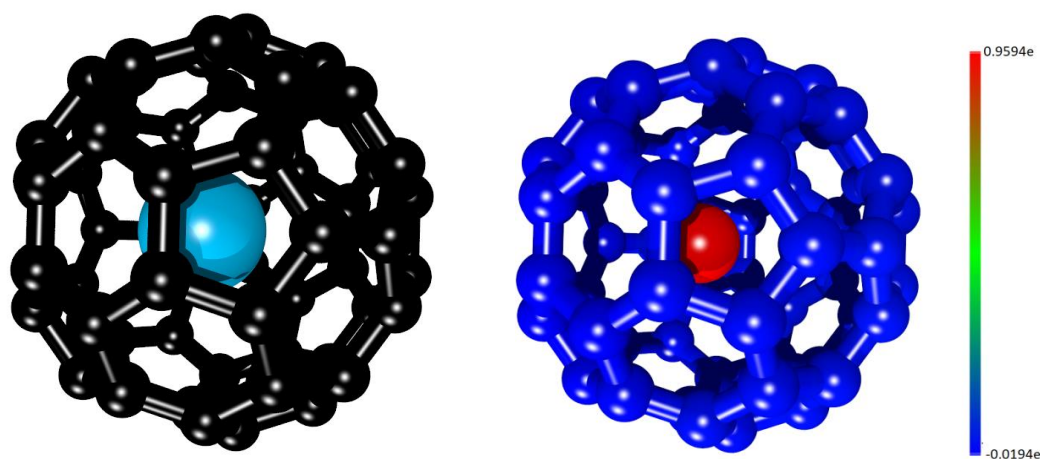


Рис. 3 Комплекс K@C₆₀. Внешний вид и распределение заряда

Наибольший заряд (0.9594 e) отдал атом калия. При этом расположение атома калия внутри полости фуллерена не оказывает заметного влияния (<1%) на распределение заряда.

Задача № 2 Изучить электронные и оптические свойства комплекса K@C₆₀ с целью управления его движением внутри УНТ

Следующей задачей нашей работы было изучение энергетических и электронных параметров комплекса K@C₆₀ с целью управления его движением внутри полости УНТ.

Ввиду того, что расчёты SCC DFTB занимают значительно больше времени, в сравнении с методами молекулярной динамики, для установления основных закономерностей управления движением фуллерена, было принято решение рассмотреть более простую ячейку, представляющую из себя УНТ (10,10) на краях которой закреплены фуллерены C₆₀. В полости данной структуры может перемещаться свободный фуллерен (рис. 4).

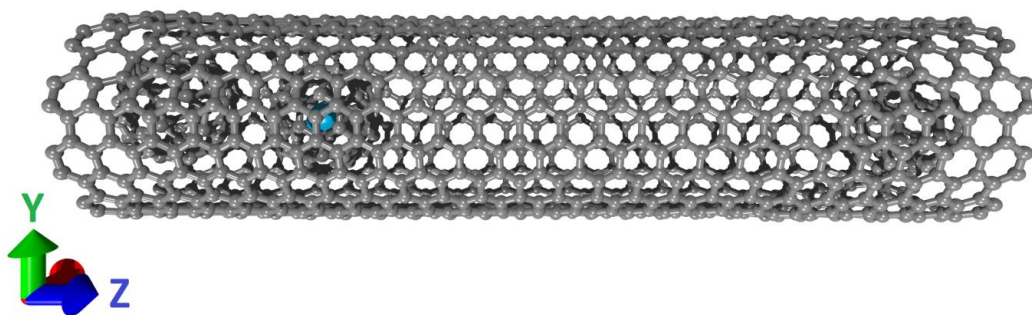


Рис. 4 Вид рассматриваемой ячейки

Первым этапом исследования данной структуры было изучение энергетического профиля. Используя написанную мною программу, были найдены потенциальные ямы в приконцевых участках структуры. В данном случае минимум энергии определялся по уровню полной энергии, рассчитанной с помощью пакетов DFTB SCC



Рис. 5 Распределение энергии внутри структуры, представленной на рис. 4

Далее нами были рассчитаны такие электронные и энергетические параметры эндоэдрального комплекса, как энергия электронного сродства (VEA), потенциал вертикальной ионизации (VIP) и энергия связи E_b .

Таблица 2 Электронные и энергетические параметры

	E_b , эВ	VIP, эВ	VEA, эВ	E_f , эВ
C60		7.40	2.17	-4.97
K@C60	-1.68	5.60	2.22	-4.19

Был построен график DOS. На данном графике (рис. 6) видно, что при помещении внутрь фуллерена C60 атома калия, пропала щель и появился пик порядка 15 эВ⁻¹.

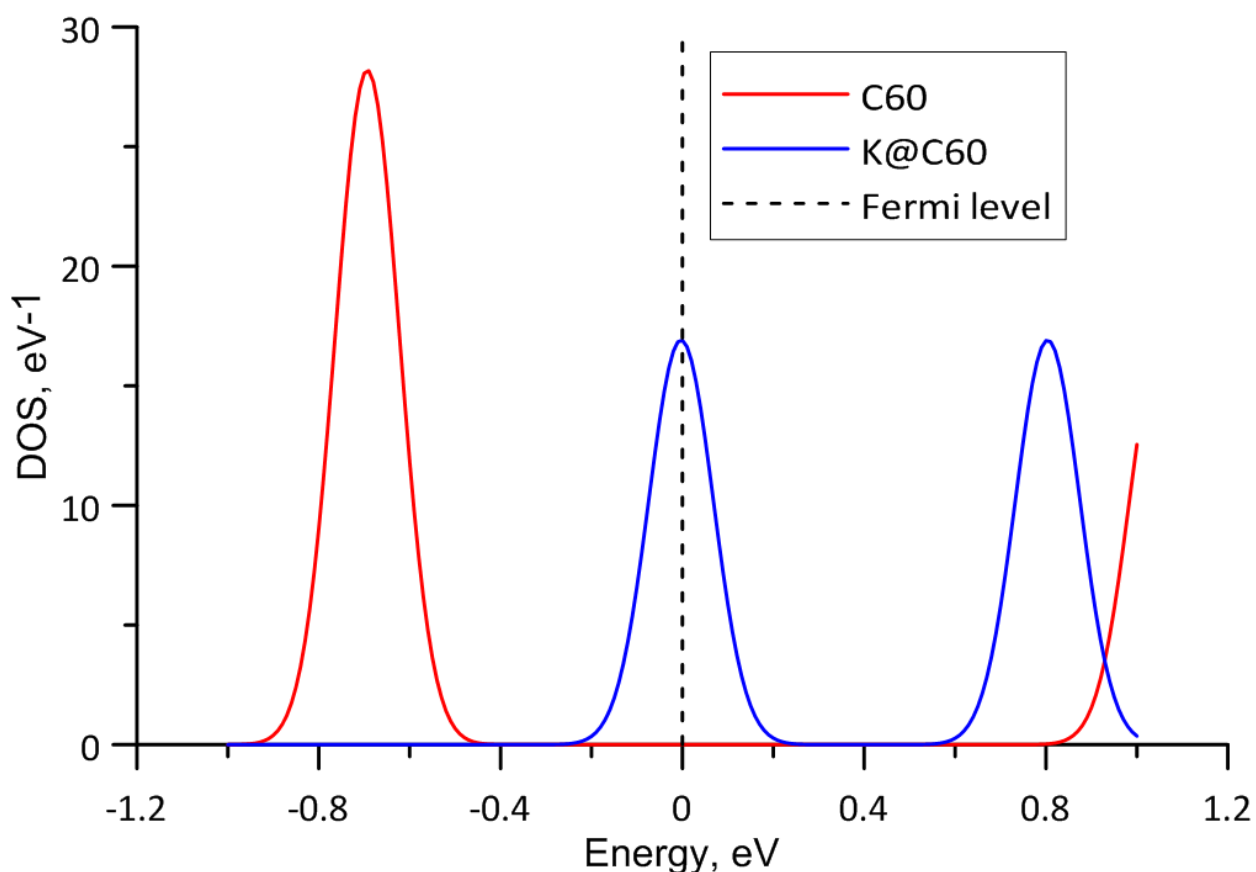


Рис. 6 DOS эндоэдрального комплекса

Также был получен спектр поглощения (рис. 7)

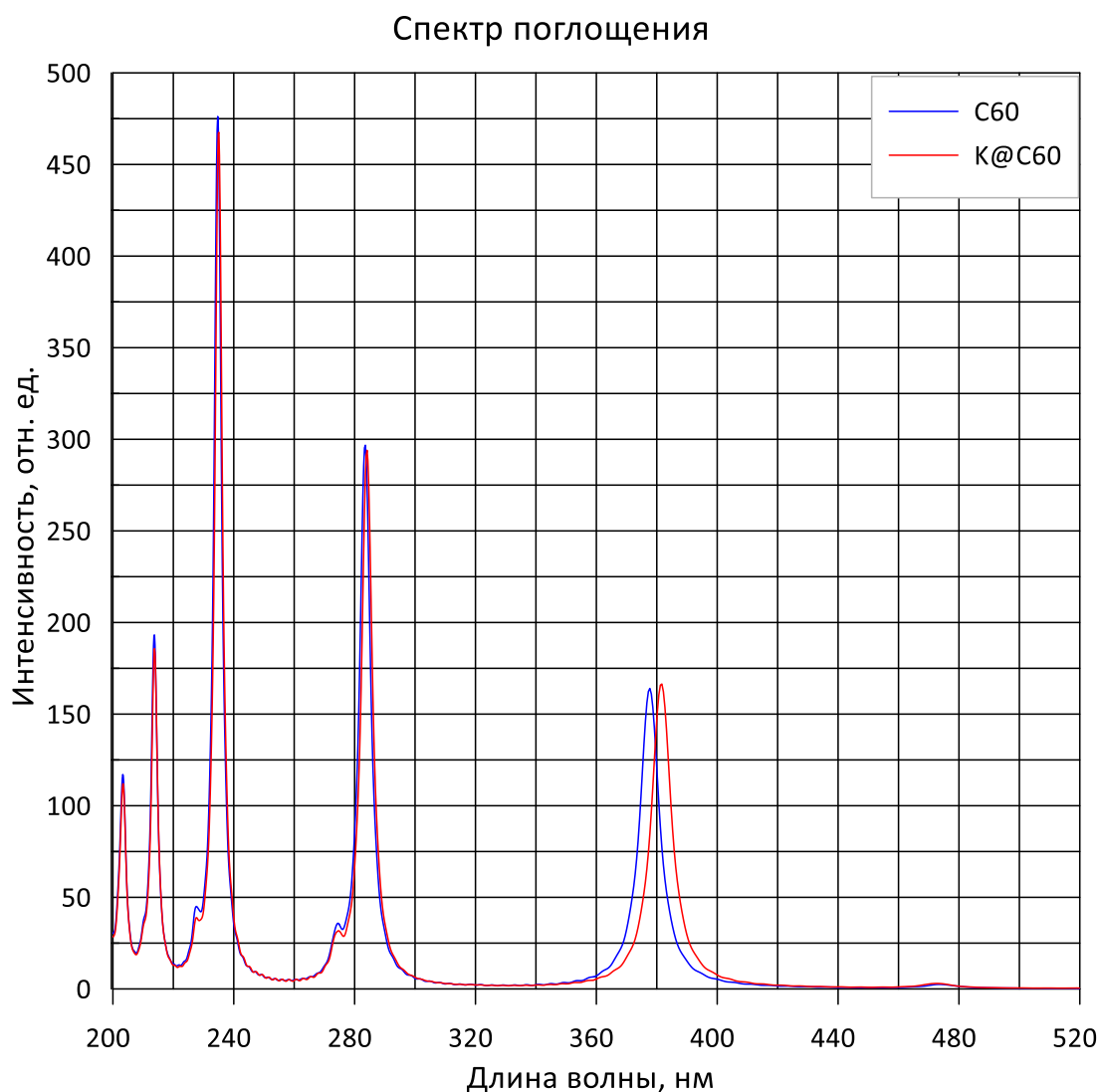


Рис. 7 Спектр поглощения фуллерена C₆₀ и комплекса K@C₆₀

Первый, самый большой пик поглощения приходится на длину волны 235 нм. Второй пик приходится на длину волны 284 нм. Расхождение первых двух пиков поглощения для C₆₀ и K@C₆₀ составляет менее 1 нм. Самое сильное расхождение между чистым фуллереном C₆₀ и комплексом K@C₆₀ наблюдается в ультрафиолетовом диапазоне: 382 нм для эндоэдрального комплекса и 378 для чистого фуллерена.

Заключение

- Построена атомистическая модель троичной ячейки памяти на основе Т-образного соединения из УНТ с эндоэдральным фуллереном
- В рамках полуэмпирического метода AIREBO определены параметры электрического поля, при которых свободный фуллерен перемещается между потенциальными ямами
- В рамках квантового метода SCC DFTB определено, что наибольший заряд на атомную сетку фуллерена C₆₀ отдает инкапсулированный атом калия
- Определены основные энергетические и электронные характеристики комплекса K@C₆₀: энергия ионизации, энергия электронного сродства, а также частота, на которой наблюдается максимальный абсорбционный пик
- Написана программа, позволяющая рассчитывать энергетический профиль взаимодействия двух низкоразмерных структур в рамках программы DFTB+.

Направление дальнейшей деятельности и перспективы:

- Детектирование положения свободного фуллерена

Для проектирования наноустройств, необходимо изучить не только методы управления фуллереном, но также и методы детектирования его положения. Одним из методов является регистрация заряда комплекса.

В целях создания не симметричной ячейки один из краёв трубки был окислирован — на внешнюю сторону УНТ были посажены равномерно распределённые атомы кислорода (всего 30 атомов).

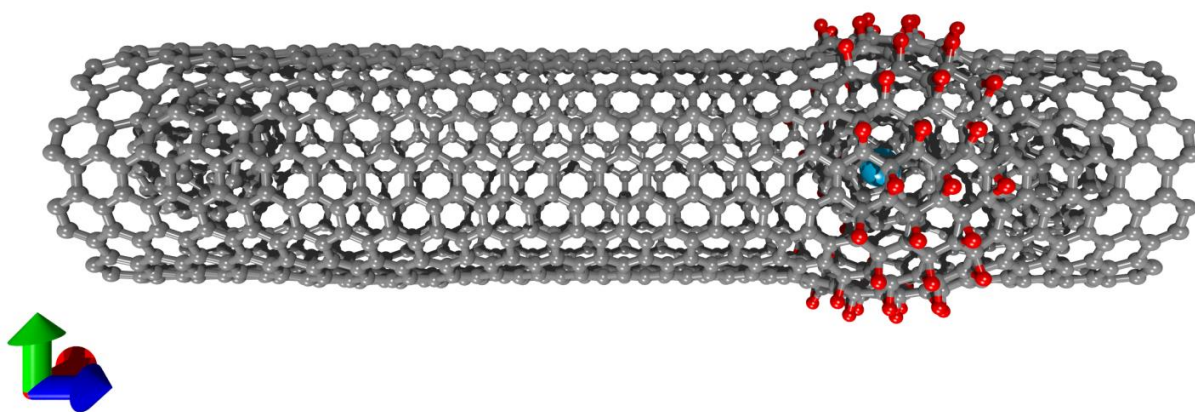


Рисунок 8 Вид рассматриваемой структуры. Красный – атомы кислорода

Заряд на таких структурах зависит от степени окисированности и расположения свободного фуллерена внутри структуры.

- Разработка троичных ячеек памяти.

Троичная система является самой эффективной для представления произвольного числового диапазона.

Главным недостатком возможных реализаций троичных ЭВМ является отсутствие подходящей компонентной базы, что не позволяет в полной мере использовать преимущества троичной логики.

Структура, представленная на рис. 2 и рассматриваемая в [14], может лечь в основу троичных элементов памяти, так как:

- 1) Структура обладает 3 стабильными состояниями – 3 возможными положениями свободного фуллерена внутри гибридного композита.
- 2) Возможен переход между 2 любыми положениями напрямую, при этом за одинаковые интервалы времени.

Список литературы

1. Kataura H., Maniwa Y., Fujiwara M. et al. Optical properties of fullerene and nonfullerene peapods // Appl. Phys. A, 2002. V. 74. P. 349—354.
2. Noya E. G., Srivastava D., Chernozatonskii L. A. et al. Thermal conductivity of carbon nanotube peapods // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. N 11. P. 115416(5).
3. Zhihong Chen, Damon Farmer, Sheng Xu, Roy Gordon, Phaedon Avouris, Joerg Appenzeller. Externally Assembled Gate-All-Around Carbon Nanotube Field-Effect Transistor // IEEE ELECTRON DEVICE LETTERS, VOL. 29, NO. 2, FEBRUARY 2008. P 183-185
4. S. J. Wind, J. Appenzeller, R. Martel, V. Derycke, and Ph. Avouris. Vertical scaling of carbon nanotube field-effect transistors using top gate electrodes // APPLIED PHYSICS LETTERS VOLUME 80, NUMBER 20 20 MAY 2002
5. So-Young Kim, Sunwoo Heo, Kiyung Kim, Myungwoo Son, Seung-Mo Kim, Ho-In Lee, Yongsu Lee, Hyeon Jun Hwang, Moon-Ho Ham, Byoung Hun Lee. Demonstration of ternary devices and circuits using dual channel graphene barristors // 2019 IEEE 49th International Symposium on Multiple-Valued Logic (ISMVL)
6. Yang, Heejun & Heo, Jinseong & Park, Seongjun & Song, Hyun & Seo, David & Byun, Kyung-Eun & Kim, Philip & Yoo, InKyeong & Chung, Hyun-Jong & Kim, Kinam. (2012). Graphene Barristor, a Triode Device with a Gate-Controlled Schottky Barrier. Science (New York, N.Y.). 336. 1140-3. 10.1126/science.1220527.
7. О. Е. Глухова. Функциональные наноустройства на основе наночастицы C60@C450 // Нано- и микросистемная техника, №3, 2007. С. 52-57
8. M. M. Slepchenkov, V. V. Shunaev, O. E. Glukhova. Response to external GHz and THz radiation of K+@C60 endohedral complex in cavity of carbon

- nanotube containing polymerized fullerenes // J. Appl. Phys. 125, 244306 (2019); <https://doi.org/10.1063/1.5083846>
9. Nano Research. 2015. Vol. 8. I. 8. P. 2595-2602
10. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №20202610936 «Программный генератор полноатомных моделей бесшовных соединений между одностенными углеродными нанотрубками различной киральности «Seammaker»». Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 22 января 2020 г. Авторы: О.Е. Глухова, Г.В. Савостьянов, Д.С. Шмыгин.
11. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021668147 «Программа визуализации результатов моделирования атомно-молекулярных систем «Kview»». Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 10.11.2021. Авторы: О.Е. Глухова, Д.А. Колосов, М.М. Слепченков.
12. Программный продукт "Программа для моделирования наноструктур (Ring)". Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2010612881. Зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 28.04.2010 г. Авторы: О.Е. Глухова, О.А. Терентьев.
13. *The Journal of Chemical Physics*. AIP Publishing. **112** (14): 6472–6486
14. **Левицкий С. Г.**, Шунаев В. В., Глухова О. Е. Управление движением эндоэдрального комплекса C60 в полости нанокompозита УНТ/C60 внешним электрическим полем // Радиоэлектронная техника: межвузовский сборник научных трудов. – Ульяновск : УлГТУ, 2021 с. 138-140
15. Phys. Rev. B 58, 7260 (1998)