КРЕМНИЙ-УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ

Свечников А.Б.

РНЦ “Курчатовский институт”, г. Москва

На основании квантово-химических расчетов полной энергии крупных кластеров предложены структуры нанотрубок (НТ) нового вида, которые образованы атомами кремния и углерода с соотношением 1:1. Всего рассмотрено 7 различных структур одностеночных НТ с параметрами в диапазоне от (2,3) до (6,6). Проведен сравнительный анализ энергий связи между атомами в НТ, образованных только углеродом и атомными парами кремний-углерод. Показано, что связи Si-C в рассмотренных НТ характеризуются высокой прочностью, лишь на 5% уступая связям C-C в углеродных НТ

С момента открытия углеродных нанотрубок прошло 15 лет, и теперь их можно считать одним из самых перспективных материалов микроэлектроники, приборостроения, оптики и медицины [1]. В 1992 г. были успешно синтезированы первые НТ WS_2, положив начало работам, посвященным поиску т.н. «неорганических нанотрубок» сложного состава [2]. Важным событием стало открытие НТ нитрида бора [3]. Интенсивные исследования свойств НТ продолжаются в настоящее время, параллельно ведутся исследования по синтезу новых видов НТ.

В данной работе предложен новый вид нанотрубок, в состав которых входят атомы углерода и кремния в соотношении 1:1. Расчеты в рамках квантово-химического полуэмпирического приближения (PM3)[4,5] позволили с высокой точностью определить равновесные геометрические параметры нанотрубок и энергии межатомных взаимодействий.

Структуры НТ моделировались кластерами до 1500 атомов, их равновесные положения определялись путем минимизации полной энергии. Расчет проводился с помощью параллельной версии программы GAMESS [6], разработанной в группе Марка Гордона (Университет, шт. Айова). Для расчета был создан вычислительный кластер, состоящий из 4 компьютеров с процессорами AMD, под управлением ОС LINUX.

Всего было рассмотрено 7 различных структур, 3 ахиральные, типа armchair с параметрами (3,3), (4,4) и (6,6), а также 4 хиральные с параметрами (2,3), (4,3), (4,5) и (4,6). На рис.1(а, б) представлена равновесная структура хиральной НТ (2,3), светлые шарики- атомы кремния, темные – углерода. Хорошо видно, как сильно деформированы шестиугольные циклы в НТ с малым радиусом.

а) б)

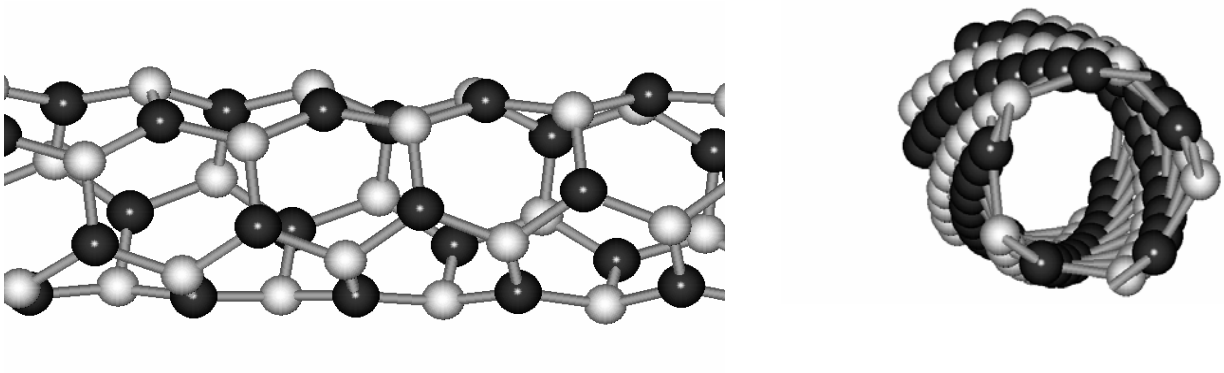

Рис.1. Геометрическая структура нанотрубки (2,3) SiC, (а) вид сбоку, (б) сечение

Для сравнения были проведены аналогичные расчеты для углеродных НТ с теми же структурными характеристиками (n,m). Т.е. были выбраны кластеры, включавшие до 1500 атомов, и в приближении PM3 найдены равновесные геометрические положения всех атомов.

Показано, что для углеродных и НТ Si-C, характерное межатомное расстояние не является монотонной функцией радиуса (n) или продольного сдвига (m). Можно отметить, что при увеличении структурного параметра (n), длины межатомных связей уменьшаются.

Минимальное значение межатомного расстояния Si-C (1,82 Å) соответствует структуре (6,6), представленной на рис.2 (а, б).

а) б)

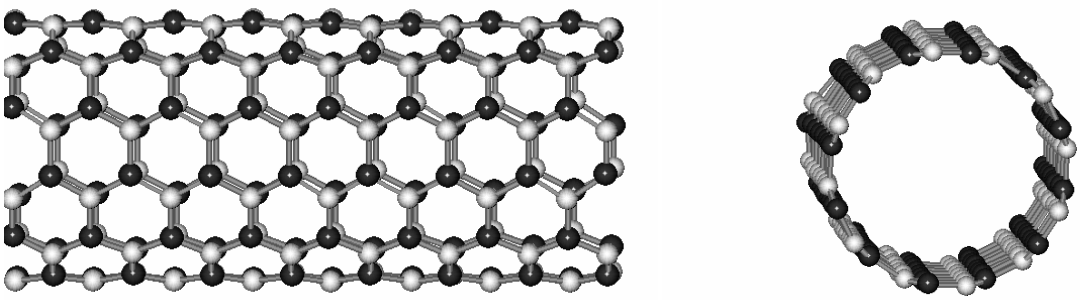

Рис.2. Геометрическая структура нанотрубки (6,6) SiC, (а) вид сбоку, (б) сечение

Особый интерес представляют данные по энергиям связей между атомами в НТ, поскольку именно эти величины определяют основные физические и химические свойства исследуемых наноструктур. Рассчитанные зависимости энергий связи (E_b) от геометрической структуры (n,m) углеродных и НТ Si-C показаны на рис. 3.

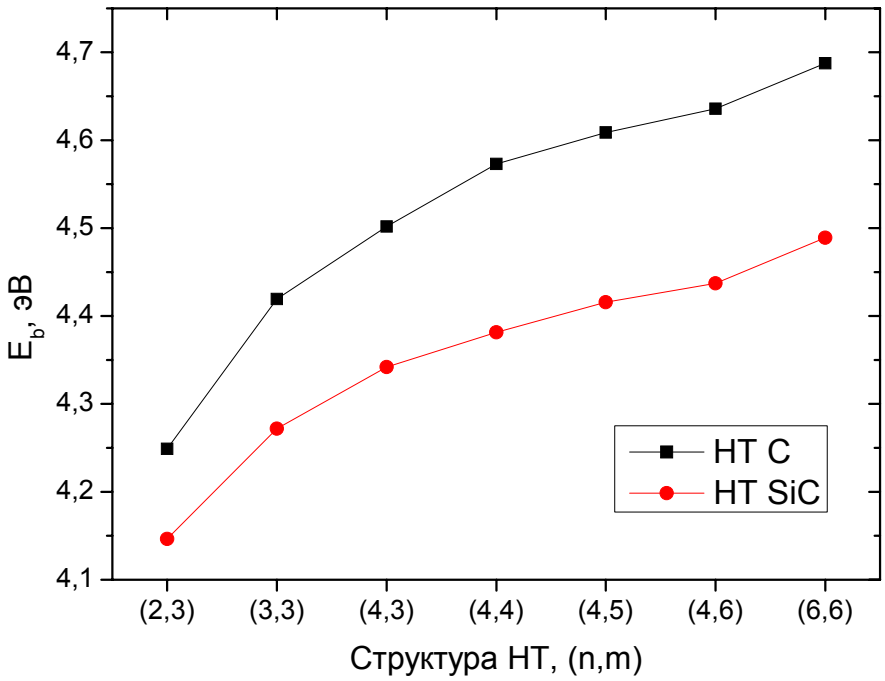

Рис.3. Зависимости энергий связи в НТ от структуры, SiC (красная) и С (черная).

Монотонно возрастающие зависимости E_b от (n+m) для углеродных и Si-C НТ свидетельствуют об увеличении стабильности НТ с большими радиусами (n) и большими параметрами продольного сдвига (m). Как и следовало ожидать, более высокие характеристики межатомных связей были получены для углеродных НТ. В тоже время надо отметить, что для НТ SiC характерны достаточно высокие значения энергий связи. Сравнение соответствующих значений E_b для НТ со структурой (6,6) дает различие менее 5% от абсолютных величин.

В настоящее время в лаборатории дисперсных систем РНЦ «Курчатовский институт» (зав. лаб., д. ф.-м. н. Кирш А.А.) проводится подготовительные работы по синтезу кремний-углеродных нанотрубок из газа с участием металлических катализаторов.

Литература

1. *Harris P.* Carbon nanotubes and related structures. Cambridge University Press, 2003.
2. *Tenne R., Margulis L., Genut M., Hodes G.* Polyhedral and cylindrical structures of tungsten desulphite // Nature. 1992. V.360. P.444.
3. *Chopra N.G., Luyken R.J., CherreyK., Crespi V.H., Cohen M.L., Louie S.G., Zettl A.* Boron-nitride nanotubes // Science. 1995. V.269. P.966-967.
4. *Stewart J.J.P.* Optimization of Parameters for Semi-Empirical Methods I. Method // J. Comp. Chem. 1989. V.10. 209-220.
5. *Stewart J.J.P.* Optimization of Parameters for Semi-Empirical Methods II. Applications. // J. Comp. Chem. 1989. V.10. 221-264.
6. *Schmidt M.W., Baldridge K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.J., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A.* The general atomic and molecular electronics structure systems // J.Comput.Chem. 1993. V.14. 1347-1363.