

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Марийский государственный университет»
Физико-математический факультет
Кафедра физики и материаловедения
Направление подготовки:
22.03.01

Профиль: Материаловедение и технологии обработки материалов

Выпускная квалификационная работа на тему:

«ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА НАНОТРУБОК (5,0) И (6,0) ИЗ АТОМОВ
ЗОЛОТА»

Выполнил: Домрачев П.Ю.

Научный руководитель: Миронов Г.И.

Цели и задачи

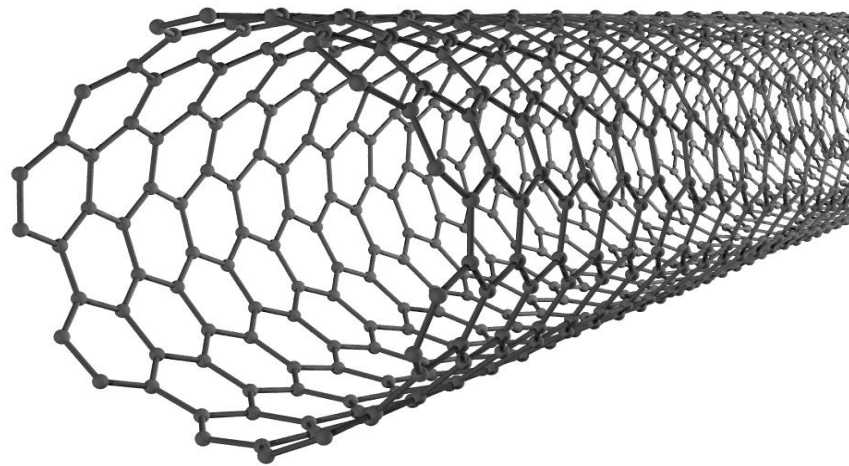
Целью выпускной квалификационной работы является изучение электронной структуры нанотрубок из 30 и 60 атомов золота.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Изучить химические и физические свойства золотых нанотрубок;
2. Исследовать электронные структуры золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 30 атомов;
3. Произвести сравнения энергетических спектров золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 30 атомов;
4. Изучить электронные структуры золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 60 атомов;
5. Произвести сравнения энергетических спектров золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 60 атомов;
6. Произвести анализ полученных результатов.

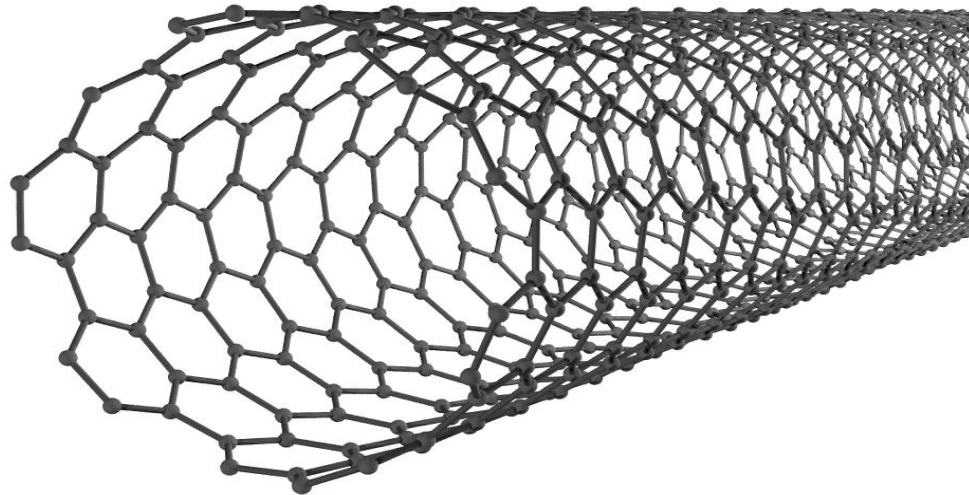
Свойства золотых нанотрубок

Золотые нанотрубки — это трубчатые нанотрубки со сверхвысокой площадью поверхности. Наноразмерные золотые нанотрубки обычно имеют размер 10–100 нанометров (nm) с удельной площадью поверхности в диапазоне 10-75 м²/г.



История открытия нанотрубок

В 1985 году группой трех исследователей Керла, Смолли, и Крото было обнаружен факт существования фуллерена (C₆₀), в 1996 году за это открытие присвоено звание лауреатов Нобелевской премии по химии. В самый первый раз возможность создание наночастиц в формате трубок была обнаружена для углерода. В прочем, открытие нанотрубок не имеет точной даты. Структура многослойности нанотрубок исследовалась Иидзимой еще в 1991 году, но и значительно раньше есть доказательства существования углеродных нанотрубок.



Применение золотых нанотрубок

Золотые нанотрубки обладают большим потенциалом для различных биомедицинских применений, таких как перенос генов, тканевая инженерия, обработка изображений, биосенсоры, в секвенировании нанопр, следовательно, они должны быть нетоксичными и биосовместимыми.

Применения золотых нанотрубок в других областях:

1. В качестве антибиотического, противогрибкового и антимикробного средства при добавлении в пластмассы, покрытия, нановолокна и ткани
2. В нанопроводах и в катализаторах
3. В доставке терапевтического агента
4. Для подключения резисторов, проводников и других элементов электронного чипа
5. В фотодинамической терапии - когда свет распространяется на опухоль, содержащую наночастицы золота, частицы быстро нагреваются, убивая опухолевые клетки
6. В различных сенсорах, например, колориметрический сенсор, с помощью которого можно определить, пригодны ли продукты для потребления
7. В качестве подложек, позволяющих измерять колебательные энергии химических связей в спектроскопии комбинационного рассеяния на поверхности
8. Выявить биомаркеры в диагностике рака, болезней сердца и инфекционных агентов
9. Как катализаторы в ряде химических реакций

Свойства золотых нанотрубок

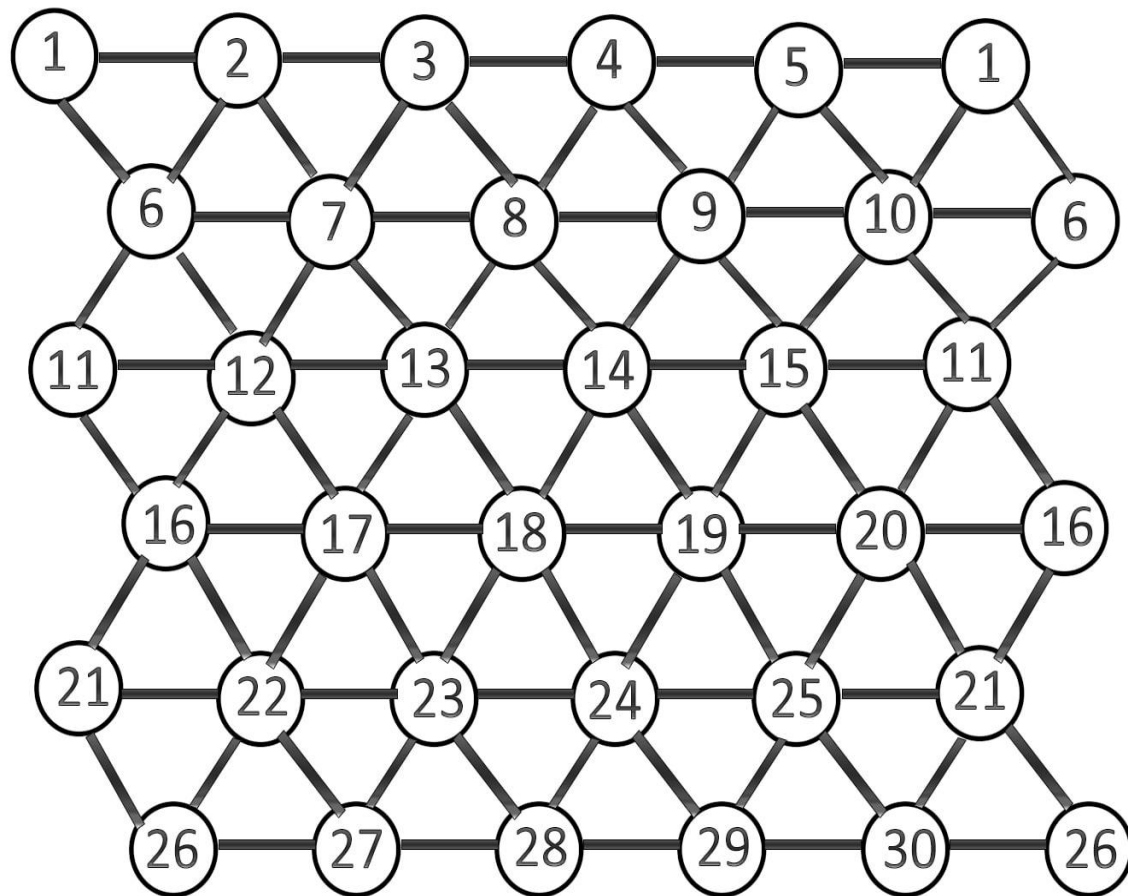
Золото (Au от лат. Aurum), мягкий металл, относящийся, как и 6 металлов платиновой группы, к благородным металлам.

Плотность золота – $19,32 \text{ г/см}^3$, а температура плавления – $1064 \text{ }^\circ\text{C}$. Золото очень мягкий металл, хорошо поддается ковке. Также данный металл превосходно отражает инфракрасный свет и является одним из самых инертных веществ, поэтому не растворяется в щелочах и кислотах.

Помимо вышеописанных свойств, золото активно применяется в микроэлектронике и материаловедении, обеспечивая низкое сопротивление к электричеству, хорошую устойчивость к окислению и обладает высокой теплопроводностью.

Электрические свойства наночастиц золота зависят только от их размера и окружающей среды, которая используется для многих применений, таких как электрические биосенсоры и электронные чипы.

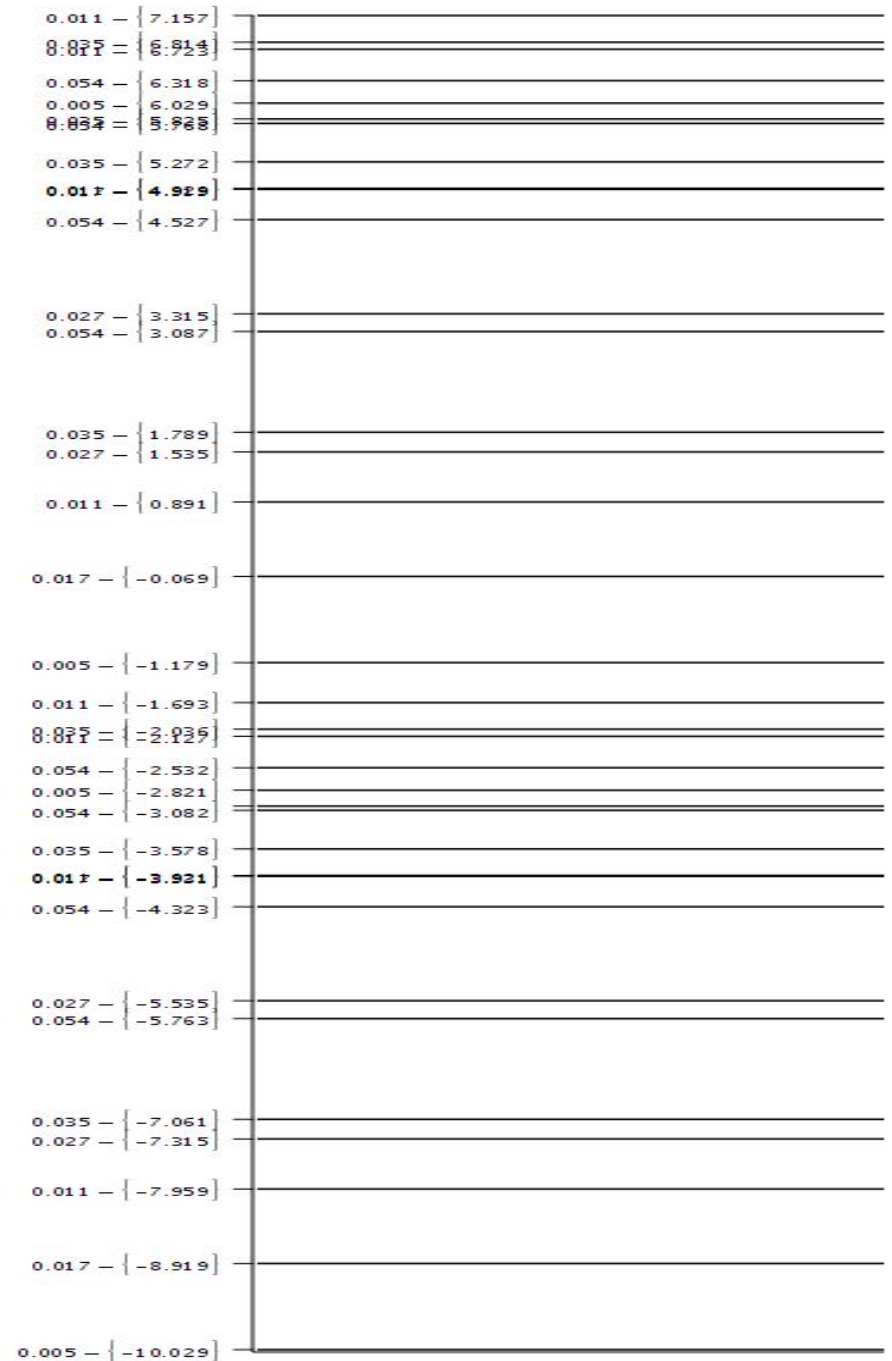
Исследование электронной структуры золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 30



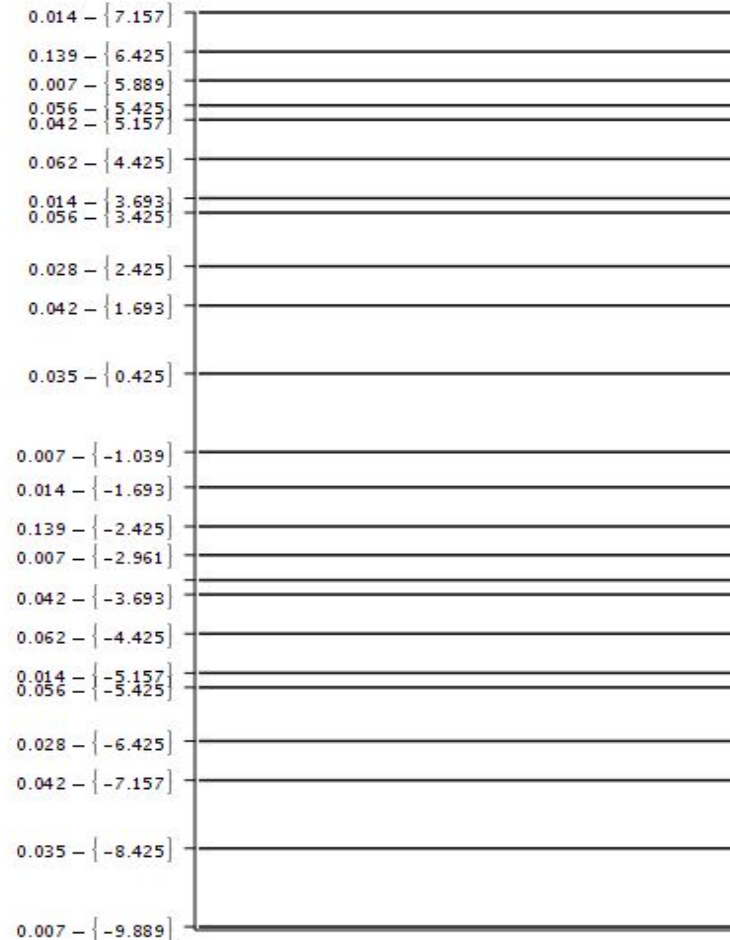
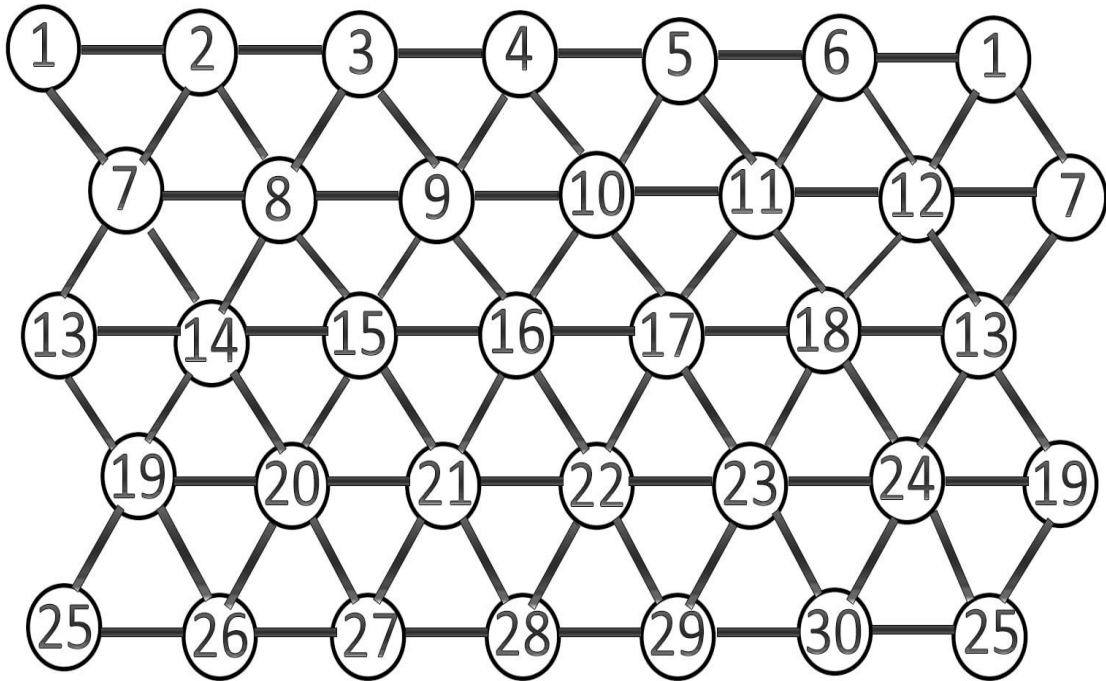
Модель золотой нанотрубки (5,0) из 30 атомов

Исследование электронной структуры золотых нанотрубок (5,0) из 30 атомов

В спектрах мы видим образование восемнадцати верхних и восемнадцати нижних уровней. В данных спектрах ширина восемнадцати верхних и восемнадцати нижних хаббардовских подзон будет равна $D=8,336$ эВ и ширина энергетической щели или зоны запрещённой энергии между хаббардовскими подзонами составит $\Delta=0,514$ эВ.

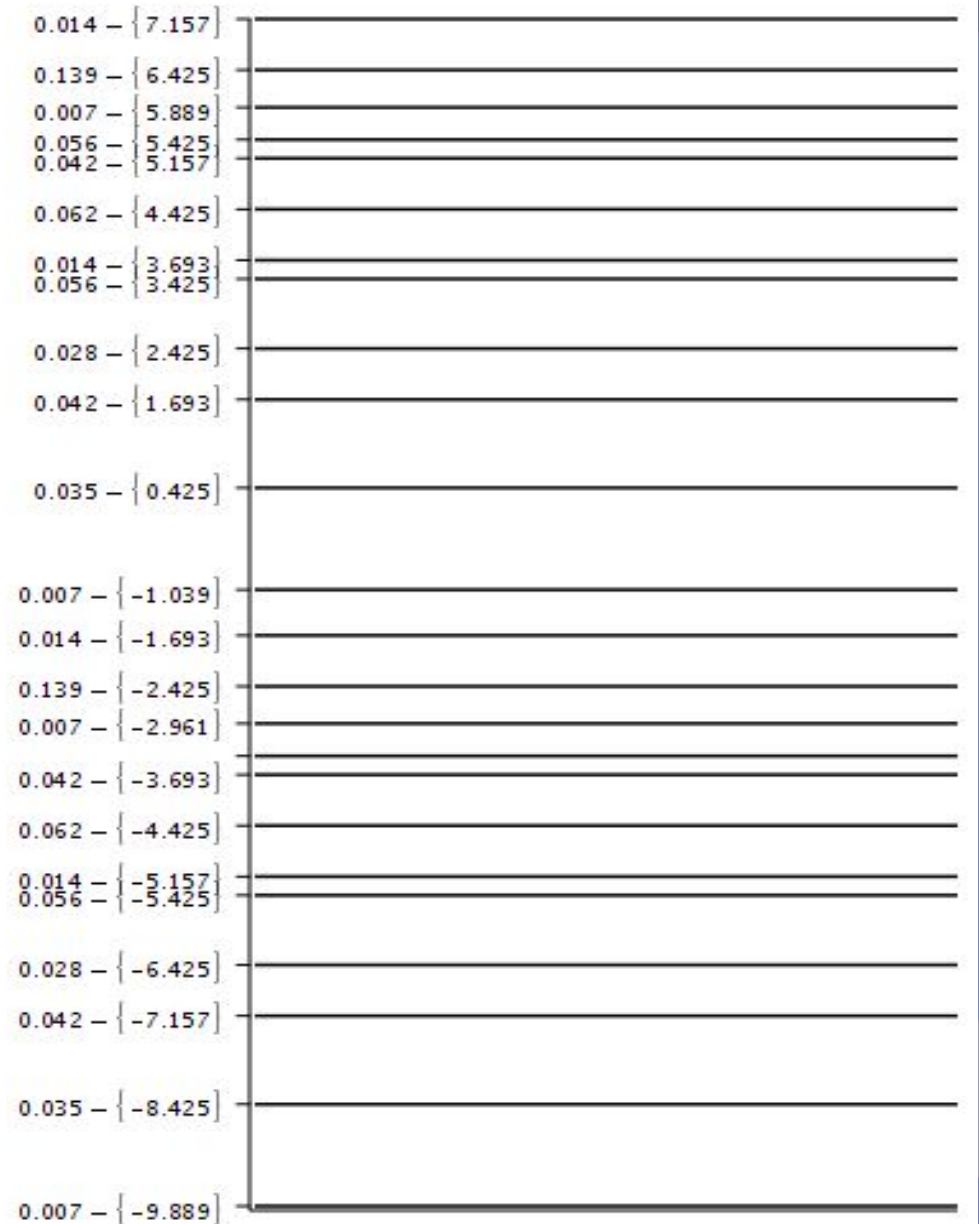


Исследование электронной структуры золотых нанотрубок (6,0) из 30 атомов



Исследование электронной структуры золотых нанотрубок (6,0) из 30 атомов

В полученных энергетических спектрах мы можем увидеть образование двенадцати верхних и двенадцати нижних хаббардовских подзон в нанотрубке (6,0) из 30 атомов золота, их ширина будет равна $D=8,196$ эВ, а ширина энергетической щели или зоны запрещённой энергии составит $\Delta=0,654$ эВ.



Сравнение энергетических спектров золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 30 атомов

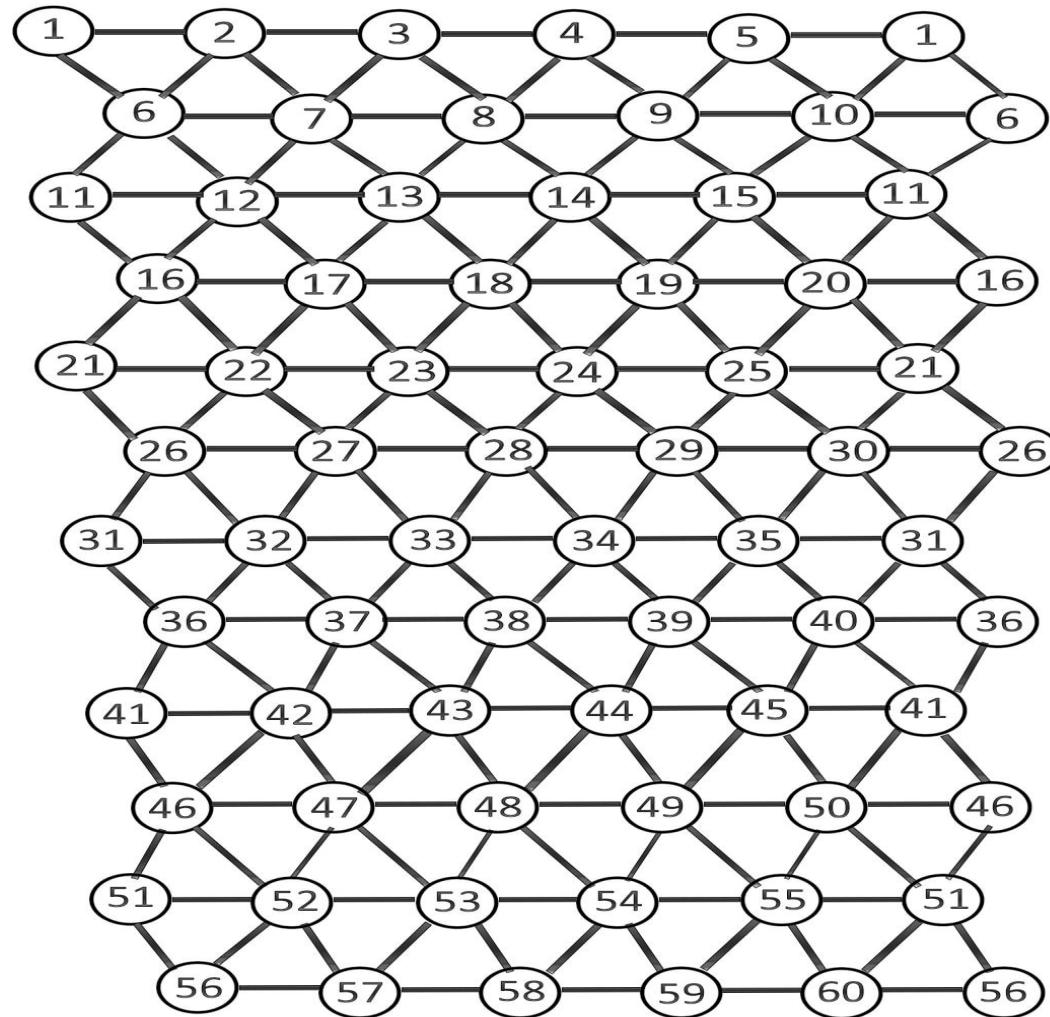
Для нанотрубки (5,0) из 30 атомов золота в спектрах образование восемнадцати верхних и восемнадцати нижних уровней. Ширина нижней и верхней хаббардовских подзон $D=8,336$ эВ и ширина энергетической щели или зоны запрещённой энергии $\Delta=0,514$ эВ.

Для нанотрубки (6,0) из 30 атомов золота в спектрах образование двенадцати верхних и двенадцати нижних уровней. Ширина нижней и верхней хаббардовских подзон $D=8,196$ эВ и ширина энергетической щели или зоны запрещённой энергии $\Delta=0,654$ эВ.

Сравнение нанотрубок (5,0) и (6,0) из 30 атомов золота показывает, что в золотой нанотрубке (6,0) из 30 атомов золота ширина верхней и нижней хаббардовских подзон D меньше, чем у золотой нанотрубки (5,0), а ширина энергетической щели или зоны запрещённой энергии Δ больше;

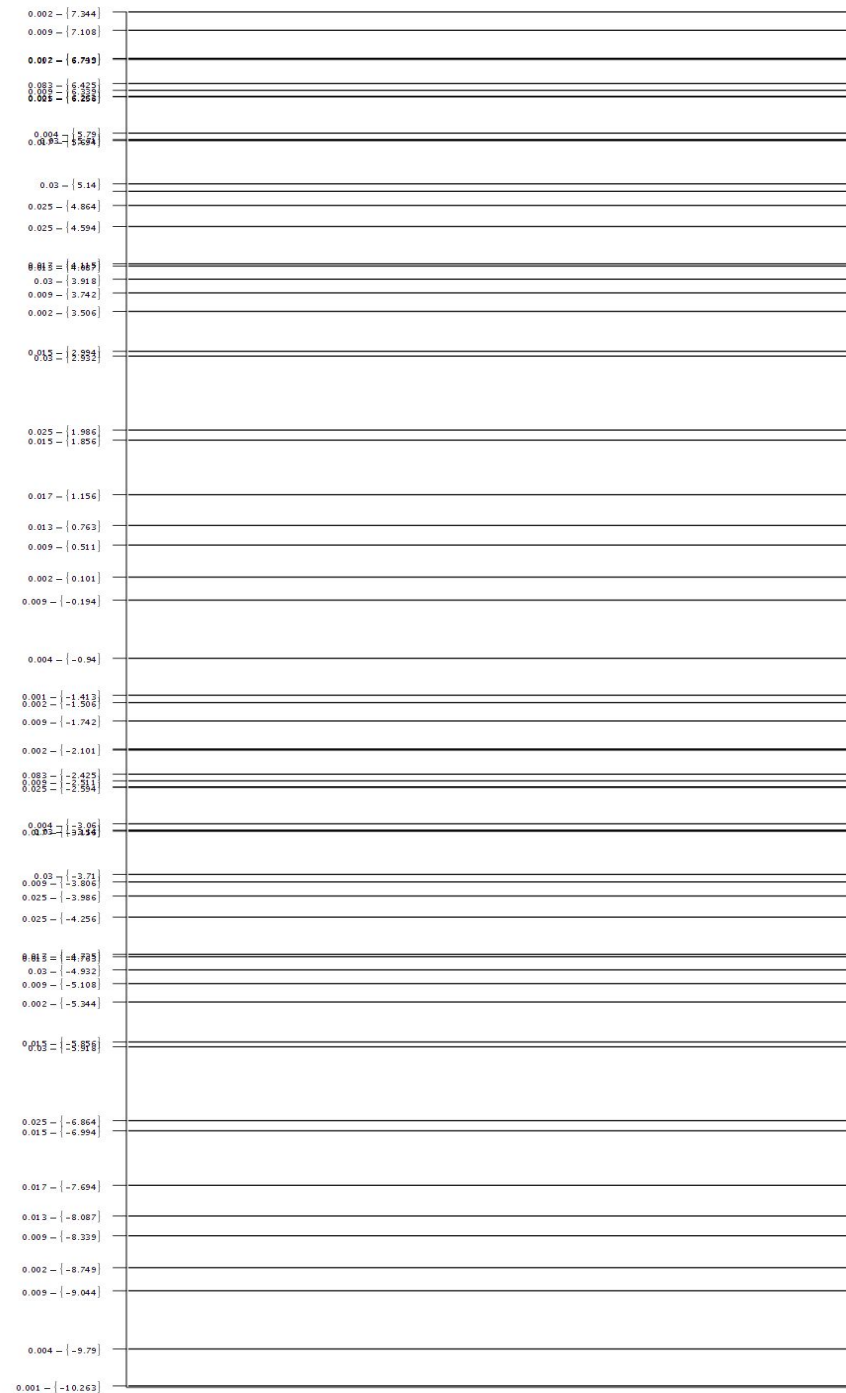
Если провести сравнение ширины энергетической щели или зоны запрещённой энергии золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 30 атомов можно отметить, что при одинаковом количестве атомов ширина подзон зависит от хиральности.

Исследование электронной структуры золотых нанотрубок (5,0) из 60 атомов

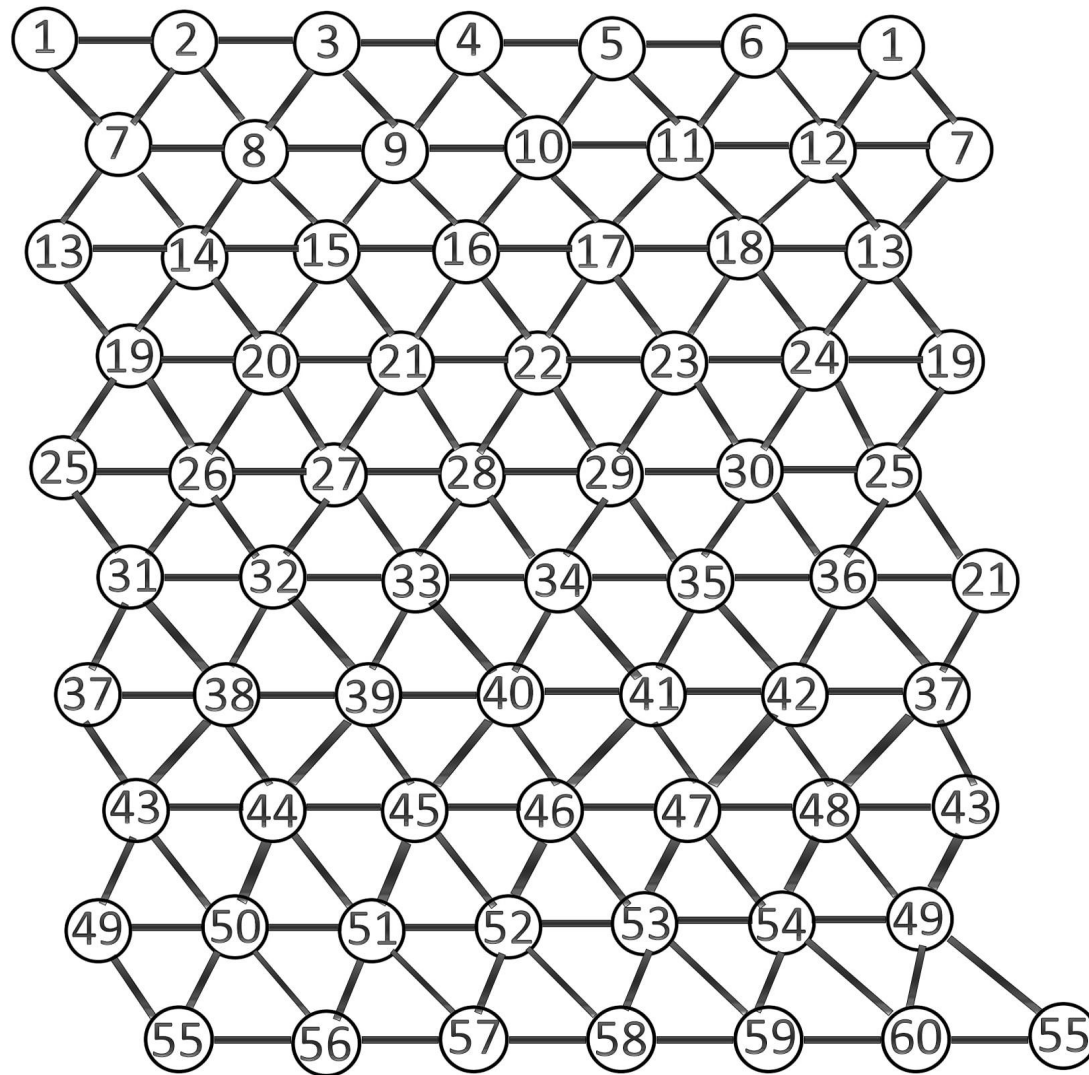


Исследование электронной структуры золотых нанотрубок (5,0) из 60 атомов

В энергетических спектрах мы можем наблюдать образование тридцати шести нижних и тридцати шести верхних уровней. Ширина данных подзон равна $D=8,702$ эВ и ширина зоны запрещенной энергии или энергетической щели составит $\Delta=0,148$ эВ.

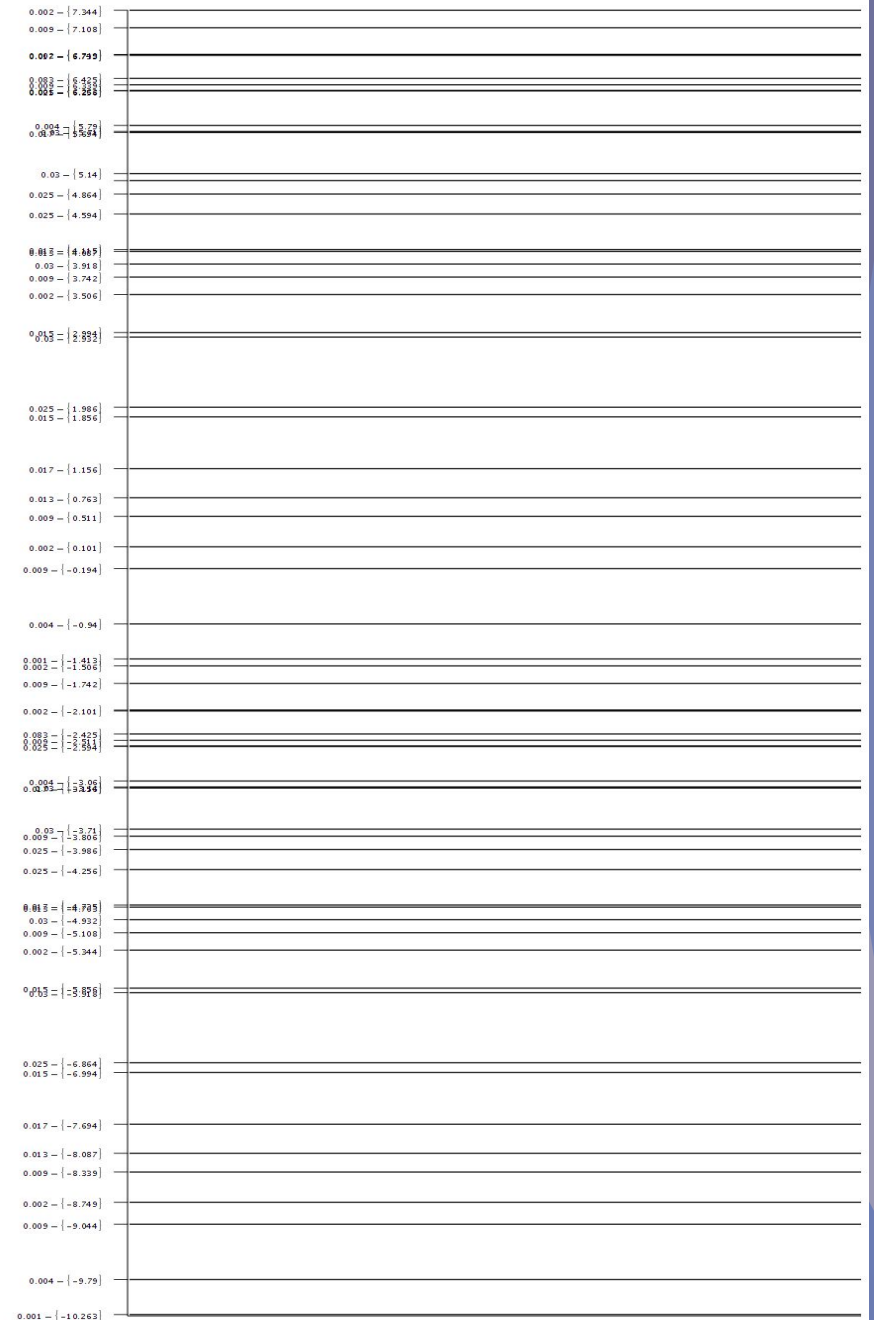


Исследование электронной структуры золотых нанотрубок (6,0) из 60 атомов



Исследование электронной структуры золотых нанотрубок (6,0) из 60 атомов

В спектрах мы видим образование тридцати одного верхних и тридцати одного нижних уровней. Ширина нижней и верхней подзон $D=8,757$ эВ и ширина энергетической щели или зоны запрещённой энергии $\Delta=0,093$ эВ.



Сравнение энергетических спектров золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 60 атомов

Для золотой нанотрубки (5,0) из 60 атомов, наблюдается в данных спектрах образование восемнадцати уровней как верхних, так и нижних. В таком случае, ширина хаббардовских подзон, составит $D=8,702$ эВ, а полученная зона запрещённой энергии составит $\Delta=0,148$ эВ.

Для золотой нанотрубки (6,0) из 60 атомов, получаем в этих энергетических спектрах образование двенадцати уровней верхних и нижних. Ширина данных хаббардовских подзон, в данном случае, составит $D=8,757$ эВ и ширина зоны запрещённой энергии составит $\Delta=0,093$ эВ.

Наблюдение нанотрубок (5,0) и (6,0) из 60 атомов золота показывает, что в золотой нанотрубке (5,0) из 60 атомов золота ширина верхней и нижней хаббардовских подзон D меньше, чем у нанотрубки (6,0) из 60 атомов золота, а ширина энергетической щели или зоны запрещённой энергии Δ больше;

Если провести сравнение ширины энергетической щели или зоны запрещённой энергии золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 60 атомов можно отметить, что ширина подзон зависит от хиральности при одинаковом количестве атомов.

Сравнение электронной структуры золотых нанотрубок из 30 и 60 атомов

	(5,0) из 30 атомов	(5,0) из 60 атомов	(6,0) из 30 атомов	(6,0) из 60 атомов
D	8,336 эВ	8,702 эВ	8,196 эВ	8,757 эВ
Δ	0,514 эВ	0,148 эВ	0,654 эВ	0,093 эВ

Проанализировав данные, получаем, что ширина верхней и нижней хаббардовских подзон D у золотых нанотрубок (5,0) из 30 атомов больше, а зоны запрещённой энергии Δ меньше, однако сравнив ширина верхней и нижней хаббардовских подзон D у золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 30 и 60 атомов между собой и их зоны запрещённой энергии Δ , увидим, что в золотых нанотрубках из 30 атомов хаббардовские подзоны D больше в золотой нанотрубке (5,0), а энергетической щель или зона запрещённой энергии Δ меньше, но в золотых нанотрубках из 60 атомов все наоборот.

Заключение

Выводы по настоящей дипломной работе:

1. Освоена методика теоретического исследования электронных структур нанотрубок (5,0) и (6,0) из 30 и 60 атомов золота.
2. Произведен расчет фурье-образов антикоммутирующей функции Грина для золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 30 и 60 атомов.
3. Определены энергетические спектры исследуемых систем. Проведены сопоставления ширины верхней и нижней хаббардовских подзон D , играющих роль зоны проводимости и произвели сравнение ширин зон запрещенных энергий Δ для исследуемых нанотрубок из атомов золота.
4. Проведены исследования электронной структуры изучаемых золотых нанотрубок (5,0) и (6,0) из 30 и 60 атомов.
5. Проведен анализ полученных результатов.

Спасибо за внимание!