11-ДӘРІС

Көміртекті нанотүтікшелер

11

Құрылымы, хиралдық индексі және электрондық қасиеттері

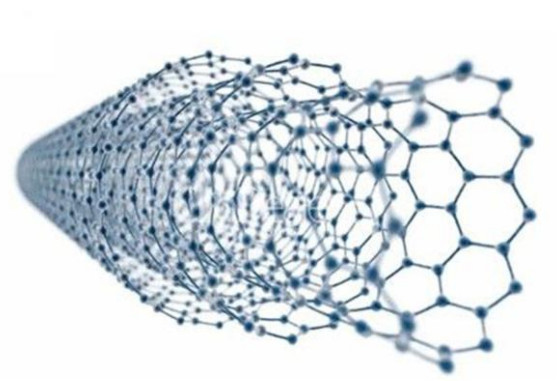
Оқу материалы негізінде

Көміртекті нанотүтікшелер

Құрылымы

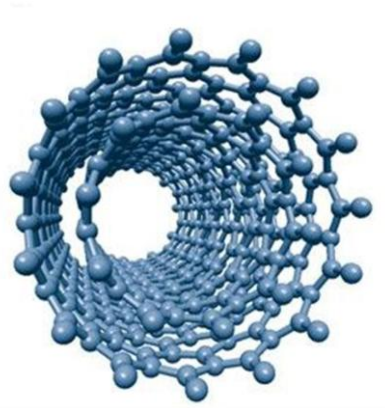
Көміртекті нанотүтікше (КНТ) — графен торы цилиндр тәрізді тұйықталған қуыс наноқұрылым.

Торда әр көміртек атомы үш көрші атоммен sp^2 байланыс түзіп, алтыбұрышты ұяшықтар құрайды.



Бір қабырғалы

Бір графен цилиндрі



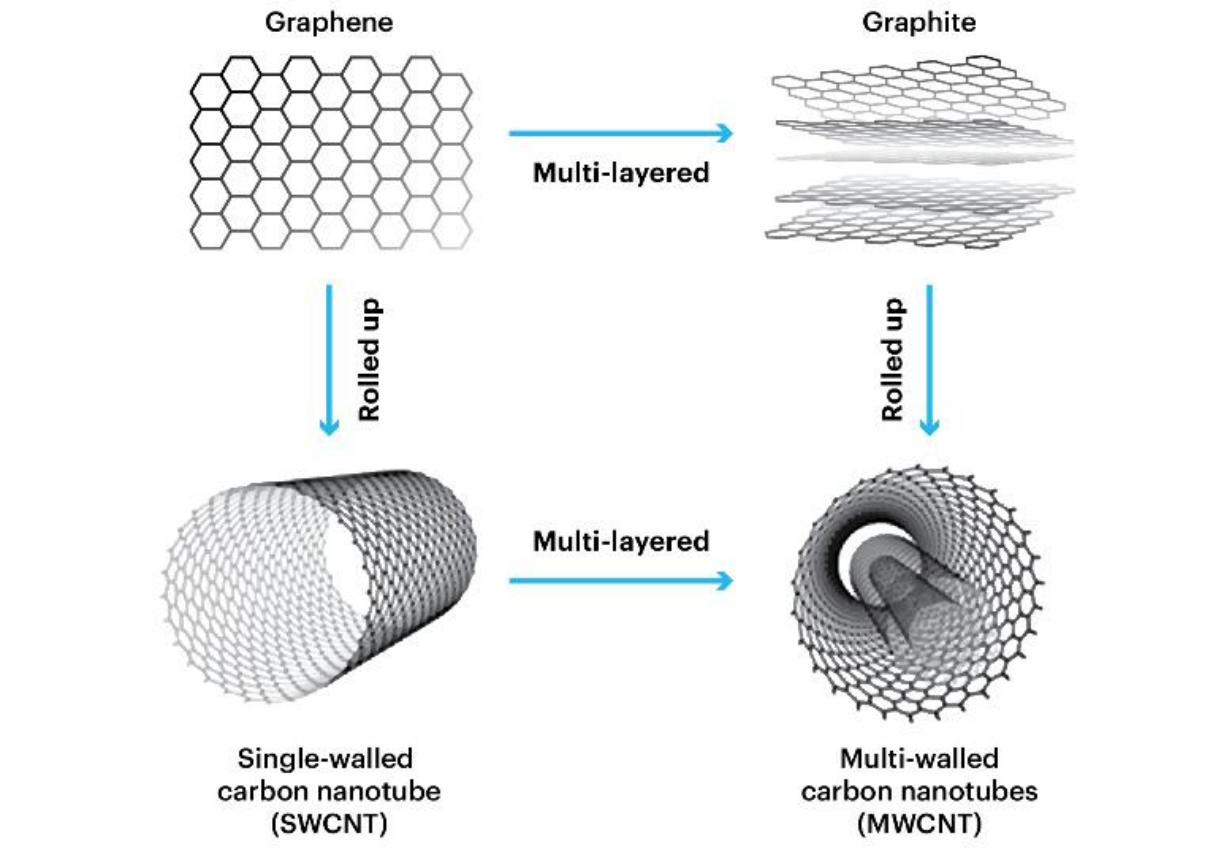
Көп қабырғалы

Бір осьті бірнеше графен цилиндрі

02

Көміртекті нанотүтікшенің құрылысы

CNT графеннің гексагональды торын цилиндрге орау арқылы түзіледі



1991

Сумио Ииджима көміртекті нанотүтікшелерді сипаттады

Графен негізі

Көміртек атомдары алтыбұрышты тор түзеді. Қабаттың оралу бағыты түтікшенің геометриясы мен электрондық қасиетін анықтайды.

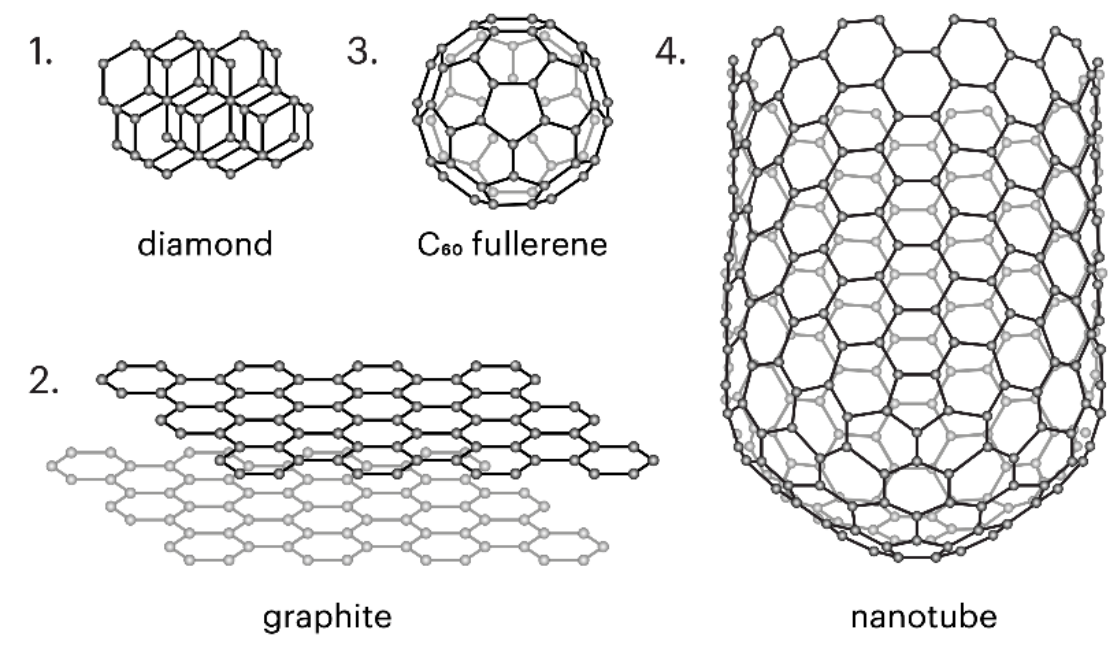
Жоғары пішіндік қатынас

Ұзындығы микрометрден миллиметрге дейін жетіп, диаметрі нанометрлік деңгейде қалады.

03

SWCNT және MWCNT құрылымдары

Қабат саны диаметрге, беріктікке және электрондық қасиеттерге әсер етеді



SWCNT

Бір графен цилиндрінен тұрады. Диаметрі әдетте 0,4–3 нм. Қабырғасы жұқа және құрылымы біртұтас.

MWCNT

Бірнеше концентрлік графен цилиндрлері «түтік ішіндегі түтік» түрінде орналасады. Диаметрі бірнеше ондаған нанометрге жетеді.

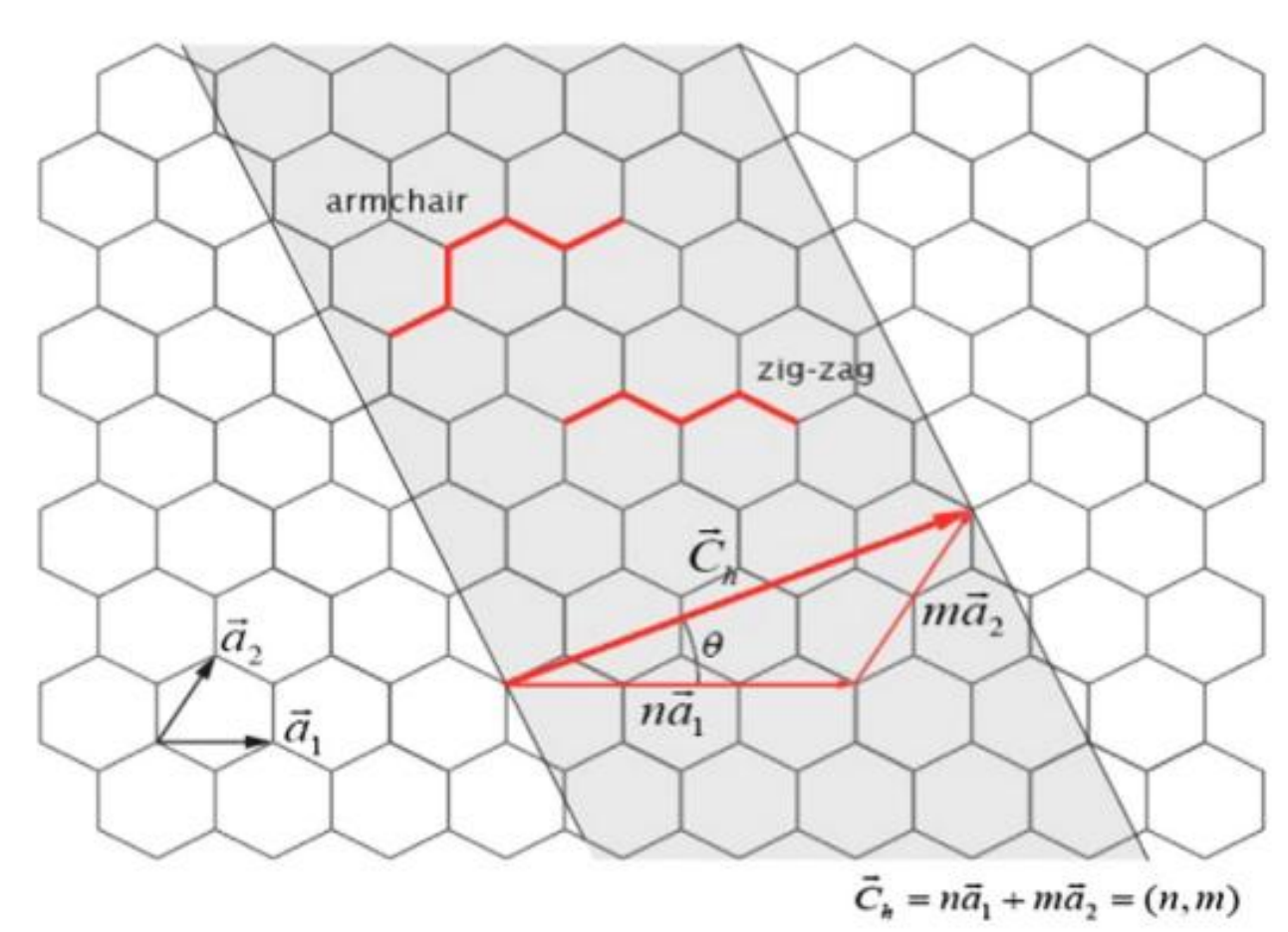
0,34 нм

MWCNT қабаттарының шамамен арақашықтығы

04

Хиралдық вектор және геометриялық параметрлер

(n,m) индекстері графен қабатының оралу бағытын сипаттайды



$$C_h = n \cdot a_1 + m \cdot a_2$$

n және m графеннің негізгі тор векторлары бойынша оралу бағытын көрсететін бүтін сандар.

Хиралдық бұрыш

θ бұрышы 0° пен 30° аралығында өзгереді. 0° zigzag түріне, 30° armchair түріне сәйкес келеді.

Диаметр

$$d = a/\pi \cdot \sqrt{(n^2 + m^2 + nm)}$$

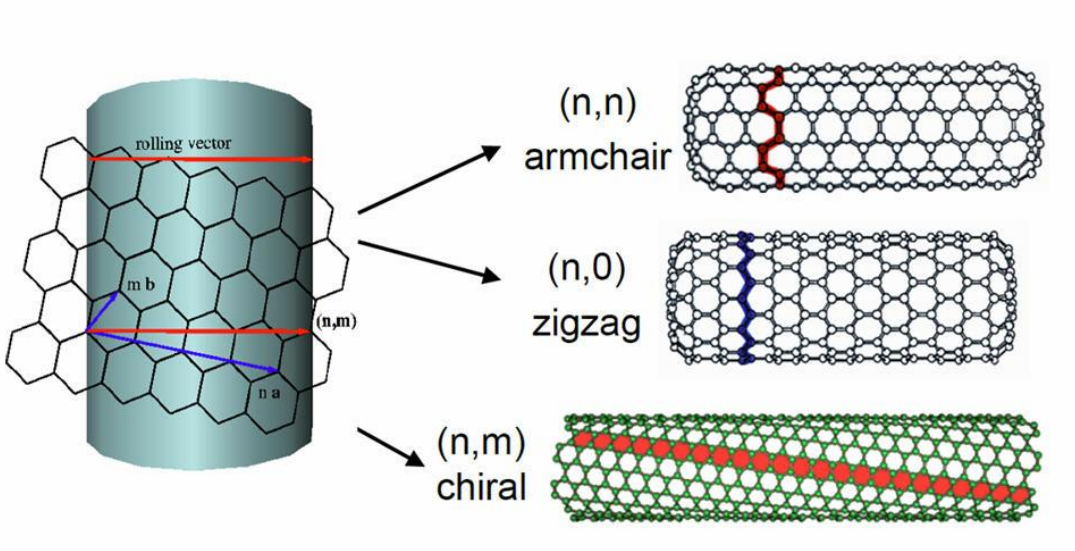
Хиралдық индекс (n, m)

$C_h = n\,a_1 + m\,a_2$

a_1 және a_2 — графен торының базистік векторлары. n және m мәндері (n ≥ m ≥ 0) түтіктің айнала тұйықталу бағыты мен диаметрін анықтайды.

(n, 0)	Зигзаг (zigzag)	**0°**
(n, n)	Кресло тәрізді (armchair)	**30°**
(n, m), 0 < m < n	Хиралды	**0° < θ < 30°**

θ — C_h пен a_1 арасындағы хиралдық бұрыш.

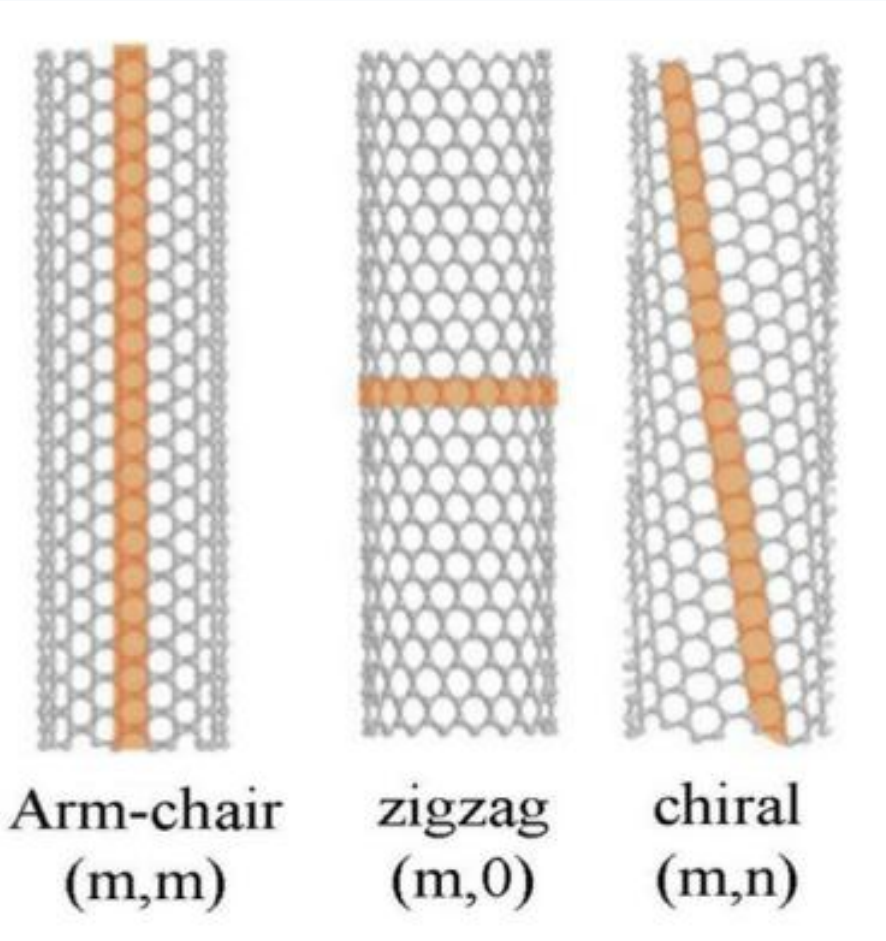


Графен торының оралу бағыты (NIST)

05

Хиралдық және электрондық қасиет

Оралу бағыты түтікшенің металдық немесе жартылай өткізгіш сипатын анықтайды



Zigzag	**m = 0**
Armchair	**n = m**
Хиралды	**Басқа (n,m) жұптары**

Металдық шарт

Егер (n − m) айырмасы 3-ке еселік болса, идеал түтікше металдық қасиет көрсетеді.

Қалған жағдайларда түтікше жартылай өткізгіш болады. Бандтық саңылау диаметрге кері пропорционал өзгереді.

Электрондық қасиеттері

Бір қабырғалы КНТ үшін қарапайым зоналық модель

$n - m = 3k$

(6, 6) түтігінде $n - m = 0$.
Бұл түтіктің тыйым салынған аймағы жоқ.

$n - m \neq 3k$

(7, 5) түтігінде $n - m = 2$.
Бұл түтіктің тыйым салынған аймағы бар.

k — бүтін сан. $n - m = 3k$ болатын кейбір түтіктерде (мысалы, (9, 0)) қабырға қисықтығы шағын тыйым салынған аймақ тудыруы мүмкін.

06

Құрылымды зерттеу әдістері және ақаулар

Әр әдіс CNT құрылымының белгілі бір деңгейін сипаттайды

TEM

Қабат санын, түтікше диаметрін және қабатаралық қашықтықты көрсетеді.

Raman

RBM сызығы SWCNT диаметріне тәуелді. G және D жолақтары кристалдық тәртіп пен ақау деңгейін сипаттайды.

SEM

Түтікшелердің морфологиясын, ұзындығын және агрегатталуын бағалауға мүмкіндік береді.

Құрылымдық ақаулар

Stone–Wales дефектісі жергілікті қисықтықты өзгертеді. Вакансиялар мен адсорбцияланған атомдар механикалық беріктікке және өткізгіштікке әсер етеді.

Қосымша әдістер **XRD, XPS және AFM**

07

Қасиеттері, қолданылуы және қорытынды

Механикалық қасиет

CNT жоғары беріктік пен икемділікті өте төмен массамен біріктіреді. Жоғары пішіндік қатынас композиттерді тиімді нығайтады.

Жылу және электр тасымалы

Жылу өткізгіштігі өте жоғары. Электрлік сипаты хиралдық индексе қарай металдық немесе жартылай өткізгіш болады.

Қолданылу салалары

Наноэлектроника

Энергетика және жылу таратқыштар

Композиттік материалдар

Сенсорлар және биомедицина

Қорытынды

CNT қасиеттерін (n,m) индексі, қабат саны, диаметр және ақаулар анықтайды. Құрылымды басқару материалдың қызметін алдын ала таңдауға мүмкіндік береді.