

Министерство образования и науки Российской Федерации
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального
образования
ПЕТРОЗАВОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Кафедра физики твердого тела

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
ОДНОСЛОЙНЫХ И МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ
НАНОТРУБОК

Логинов Дмитрий Владимирович

Целью работы являлись рентгенографические исследования образцов однослойных и многослойных углеродных нанотрубок и компьютерное построение моделей атомной структуры.

В рамках указанной цели решались следующие **задачи**:

1. Проведение рентгенографических исследований и расчет характеристик ближнего порядка
2. Построение атомных моделей в областях ближнего упорядочения.

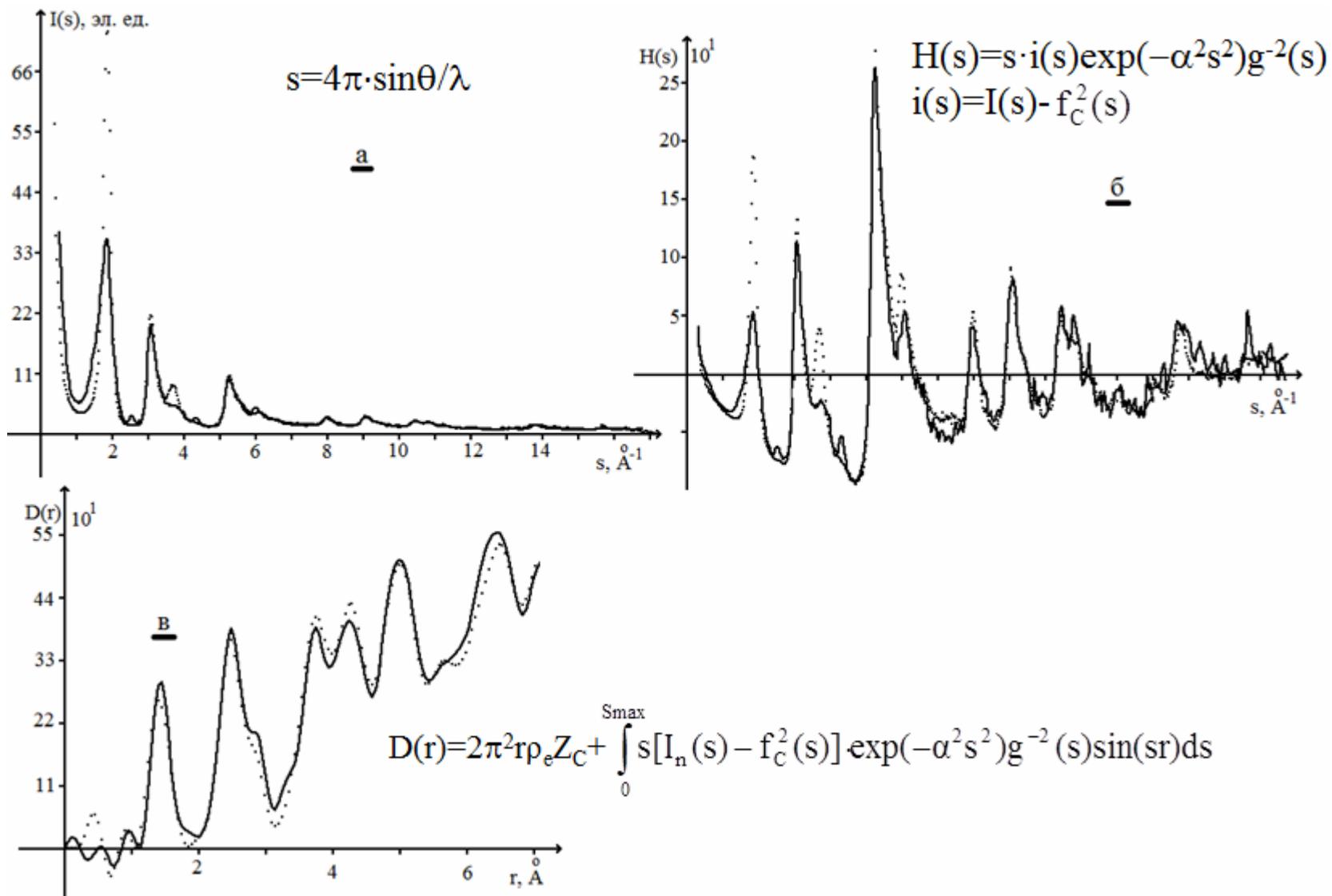


Рис. 1. Кривые распределения $I(s)$ (а), $H(s)$ (б), $D(r)$ (в): — однослойные УНТ, --- многослойные УНТ; s -длина дифракционного вектора
 Подробно методика расчета описана в [1]

Таблица 1. Значения радиусов r_i и размытий σ_i координационных сфер и координационные числа N_i . Ошибки в определении радиусов $\Delta r_i = \pm 0.01 \text{ \AA}$ и размытий $\Delta \sigma_i = 0.02 \text{ \AA}$.

№ сф.	Графит Н		Однослойные УНТ q=3.7%			Многослойные УНТ q=4.5%		
	$r_{i-s}, \text{ \AA}$	$N_{i-s}, \text{ ат.}$	$r_i, \text{ \AA}$	$\sigma_i, \text{ \AA}$	$N_i, \text{ ат.}$	$r_i, \text{ \AA}$	$\sigma_i, \text{ \AA}$	$N_i, \text{ ат.}$
1	1.42	3.0	1.43	0.03	2.3±0.1	1.41	0.05	2.3±0.1
2	2.46	6.0	2.47	0.04	5.7±0.1	2.46	0.03	5.3±0.2
3	2.84	3.0	2.85	0.10	3.7±0.2	2.81	0.09	2.8±0.1
4	3.35	1.0	3.35	0.08	2.1±0.2	3.26	0.11	0.1±0.2

q - степень несоответствия экспериментальной ($D_{\text{эксп}}$) и подбираемой ($D_{\text{подб}}$) кривых распределения парных функций $D(r)$

$$q(\%) = \frac{\sum_{s=s_{\min}}^{s_{\max}} \frac{|D_{\text{эксп}}(r_s) - D_{\text{под}}(r_s)|}{|D_{\text{эксп}}(r_s)|}}{(s_{\max} - s_{\min}) + 1} \cdot 100$$

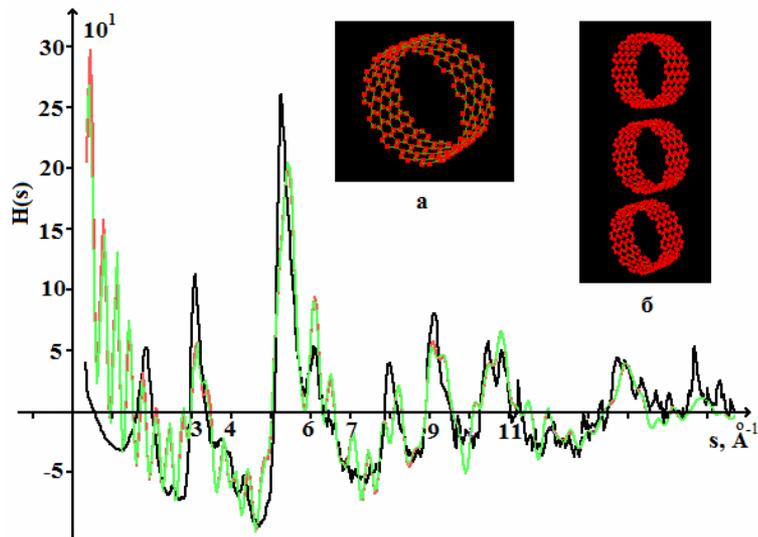


Рис. 2. Интерференционные функции рассеяния для кластера (а и б) и эксперимента (—):
 а ($r \sim 10 \text{ \AA}$, $d = 10 \text{ \AA}$, $n = 1$, —) — красная линия
 б ($r \sim 10 \text{ \AA}$, $d = 10 \text{ \AA}$, $n = 3$, —) — зеленая линия

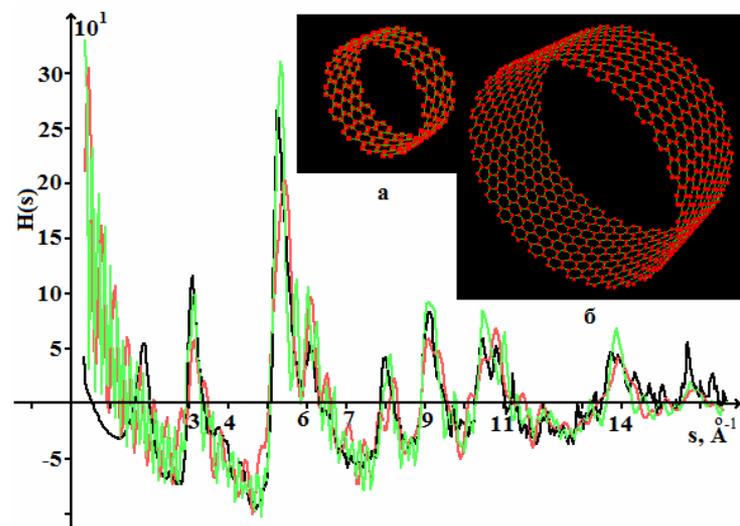


Рис. 3. Интерференционные функции рассеяния для кластера (а и б) и эксперимента (—):
 а ($r \sim 10 \text{ \AA}$, $d = 10 \text{ \AA}$, $n = 1$, —) — красная линия
 б ($r \sim 20 \text{ \AA}$, $d = 20 \text{ \AA}$, $n = 1$, —) — зеленая линия

В данной работе для расчета распределения интенсивности рассеяния одиночными фуллеренами и их группами использовалась программа, алгоритм которой описан в [2, 3]. Расчет проводился по формуле Дебая:

$$I(s) = \frac{1}{N_\phi} \left[\sum_{i=1}^N f_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{2} \cdot [f_i f_j^* + f_i^* f_j] \cdot \frac{\sin(s \cdot r_{ij})}{s \cdot r_{ij}} \exp(-0.5 y_{ij}^2 s^2) \right]$$

где f_i , f_j — функции атомного рассеяния i -го и j -го атомов, N — число атомов в рассматриваемой конфигурации, σ_{ij} — дисперсия межатомных расстояний относительно среднего значения r_{ij} , N_ϕ — число формульных единиц в конфигурации.

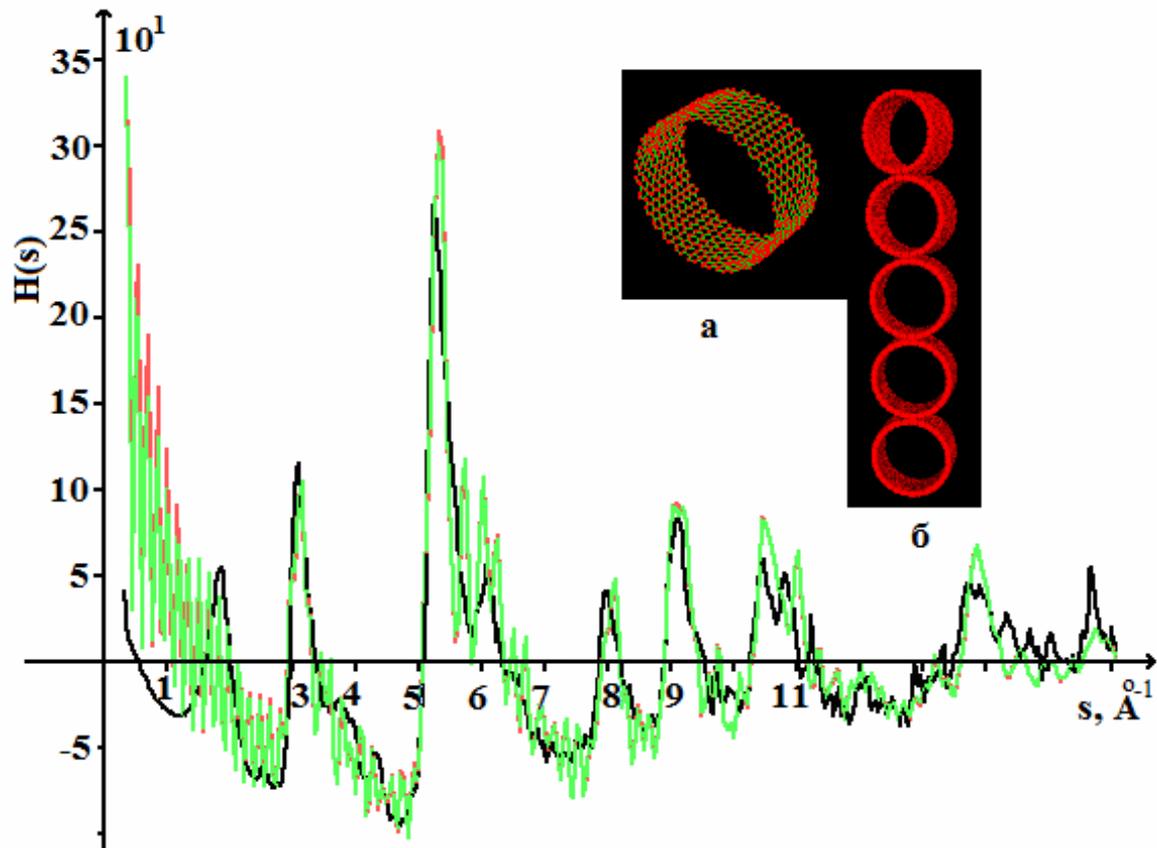


Рис. 4. Интерференционные функции рассеяния для кластеров, представленных на вкладках а и б, и эксперимента (—):
а ($r \sim 20 \text{ \AA}$, $d = 20 \text{ \AA}$, $n = 1$, —) —
б ($r \sim 20 \text{ \AA}$, $d = 20 \text{ \AA}$, $n = 5$, —).

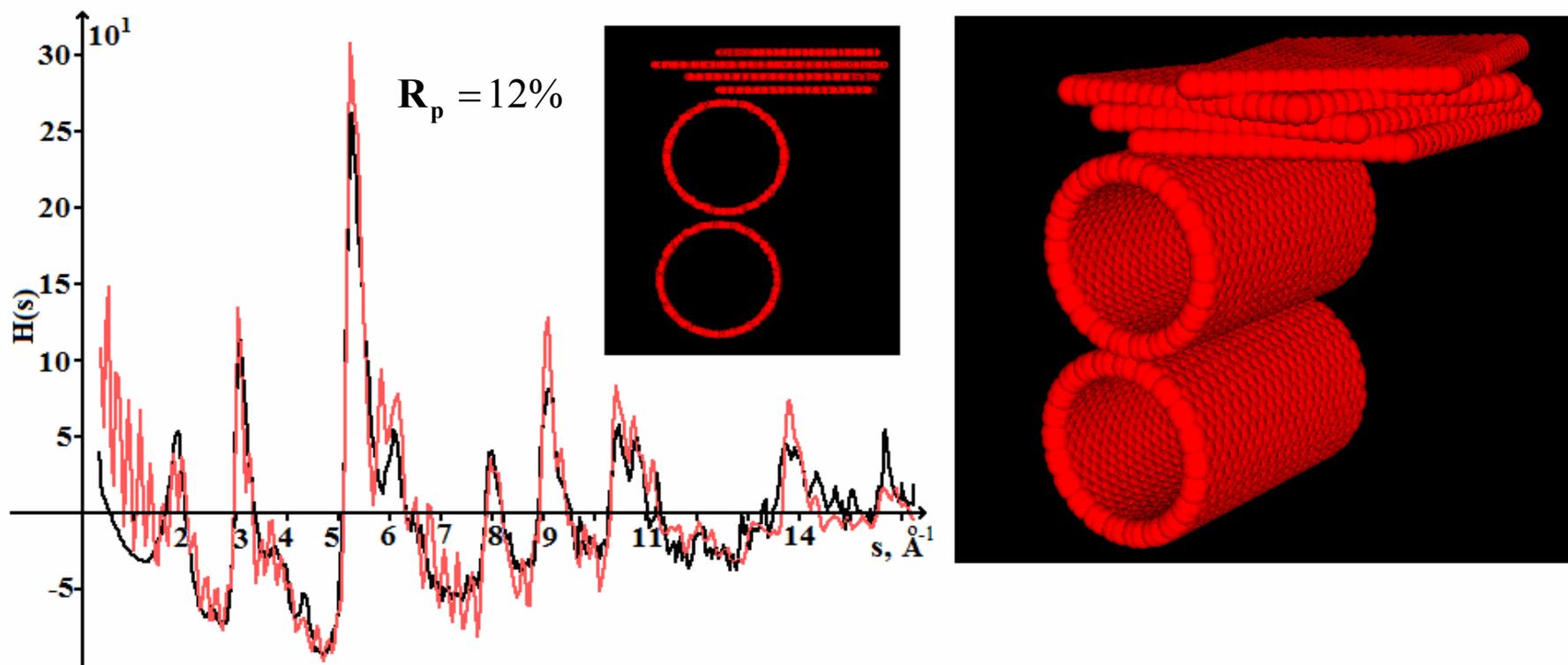


Рис. 5. Экспериментальная (—) и теоретически рассчитанная $H(s)$ (---) для кластера

$$R_p = \frac{\sum_i |H_{\text{эксп}}(s_i) - H_{\text{теор}}(s_i)|}{\sum_i H_{\text{эксп}}(s_i)}$$

Основные результаты и выводы

1. Рассчитаны характеристики ближнего порядка для двух исследуемых образцов. Из анализа картин рассеяния ($I(s)$) и анализа характеристик ближнего порядка (r_{ij} и N_{ij}) было сделано предположение, что в образце однослойных УНТ присутствуют многослойные УНТ или, возможно, упаковки графеновых сеток.
2. Для образца однослойных УНТ методом компьютерного моделирования построена одна из возможных моделей, состоящая из двух параллельных друг-другу углеродных нанотрубок радиусом 10\AA , длиной 50\AA и 4-х графеновых слоев, смещенных друг относительно друга и разориентированных на угол 10° .

Литература

1. Алешина Л.А., Фофанов А.Д. Рентгеноструктурный анализ аморфных материалов: Учебное пособие. – Петрозаводск, 1987. – 88с.
2. Фофанов А.Д. Структура и ближний порядок в кислород- и углерод-содержащих системах с особыми свойствами. диссертация доктора ф.-м. наук. Москва. МГУ.– 1998. – 343с.
3. Кучер Е.В., Фофанов А.Д., Никитина Е.А. Компьютерное моделирование атомной структуры углеродной составляющей шунгита различных месторождений // Электронный журнал «Исследовано в России» –2002. –102. – С. 1113 – 1121.