




Комплекс углеродная нанотрубка+графен

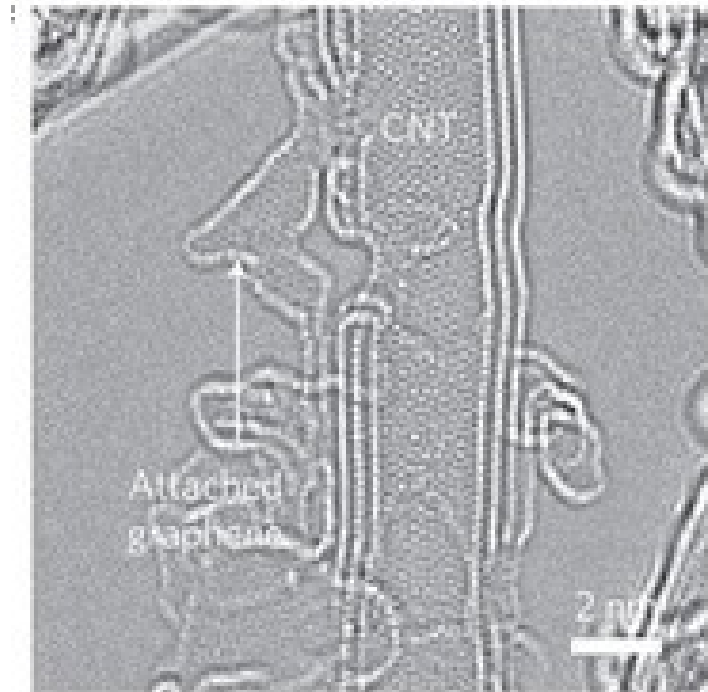
Аспирантка 3 года Саратовского
государственного университета

Научный руководитель д.ф-м.н. Глухова О.Е.



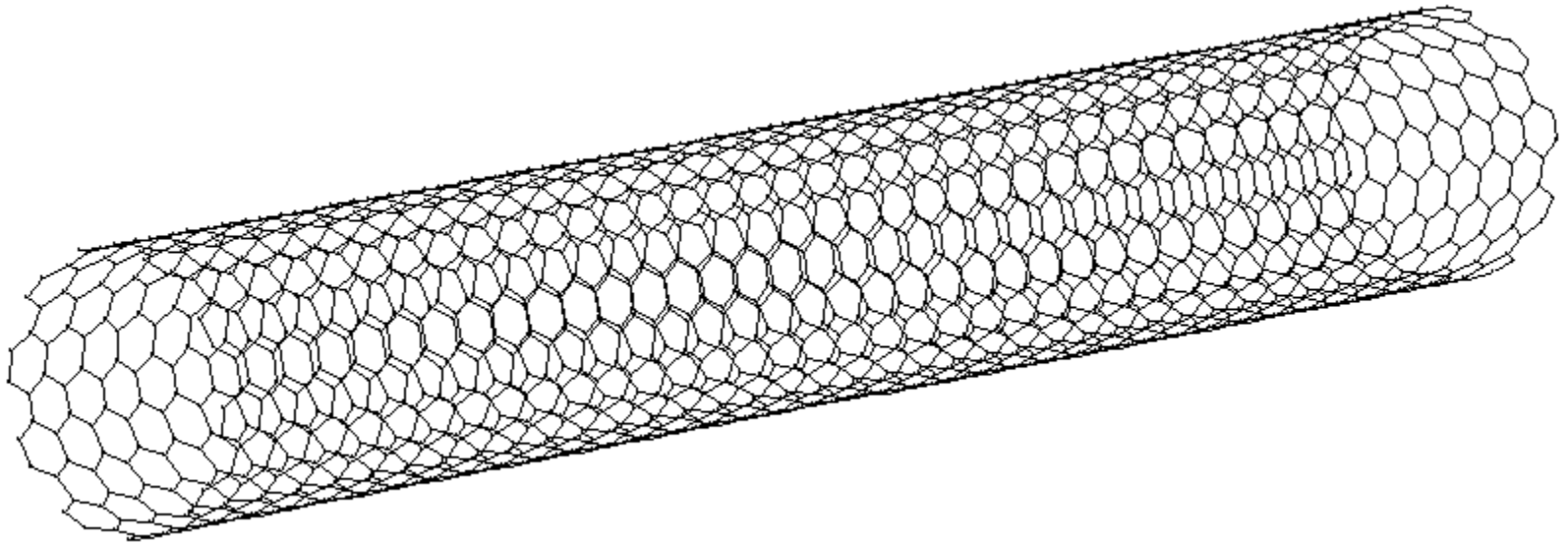
Целью данной работы является определение оптимальной топологии комплекса графен+УНТ с помощью эмпирического метода Бреннора, а также исследование электронные свойства композита при увеличении размеров и количества графеновых наночастиц с помощью метода сильной связи.

Комплекс УНТ+графеновая наночастица
полученный в процессе окисления в
 $\text{KMnO}_4/\text{H}_2\text{SO}_4$ при температуре 65°C [1]



[1]Li Y., Zhou W., Wang H., Xie L., Liang Y., Wei F., Idrobo J. C., Pennycook S.J., Dai H. An oxygen reduction electrocatalyst based on carbon nanotube–graphene complexes// Nature Nanotechnology. 2012. V. 7. P. 394–400.

Рис.1. Геометрическое моделирование комплекса углеродная нанотрубка + графен: а) углеродная нанотрубка диаметром 1.35 нм; б) графеновая наночастица шириной 0.74 нм и длиной 0.7 нм



а)

б)

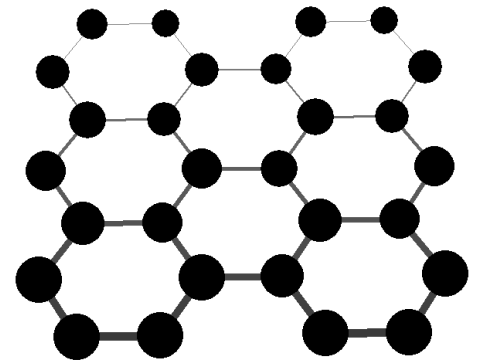


Рис.2. Композит графеновая наночастица +УНТ, основанный на трубке диаметром 2.37 нм и длиной 4 нм и графеновой наночастице (ГНЧ) шириной 1.988нм и длиной 4.428нм



Композит ГНЧ+УНТ, основанный на трубке диаметром 2.37 нм и ГНЧ шириной 0.742 нм и длиной 0.7 нм

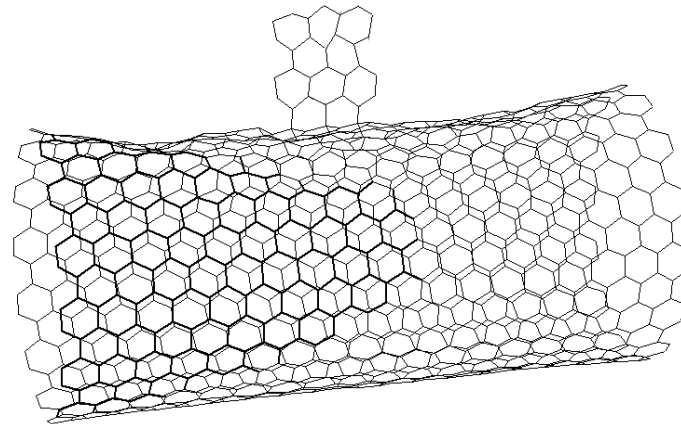


Таблица 1. Значения энтальпии комплекса в зависимости от параметров нанотрубки

	ГНЧ шириной 2 нм и длиной 4 нм	ГНЧ шириной 0.742 нм и длиной 0.7 нм
Диаметр трубки, нм	Энтальпия, эВ	Энтальпия, эВ
1.09	34.59	90.85
1.35	32.49	47.28
2.25	35.99	18.32
2.37	34.99	80.80

Рис.4. Композит наностручков + ГНЧ, основанный на нанотрубке диаметром $\sim 1,4$ нм и длиной 6,13 нм и ГНЧ шириной (armchair) 0,7 нм и изменяющейся длиной (zigzag) от 0,7 нм до 1,72 нм

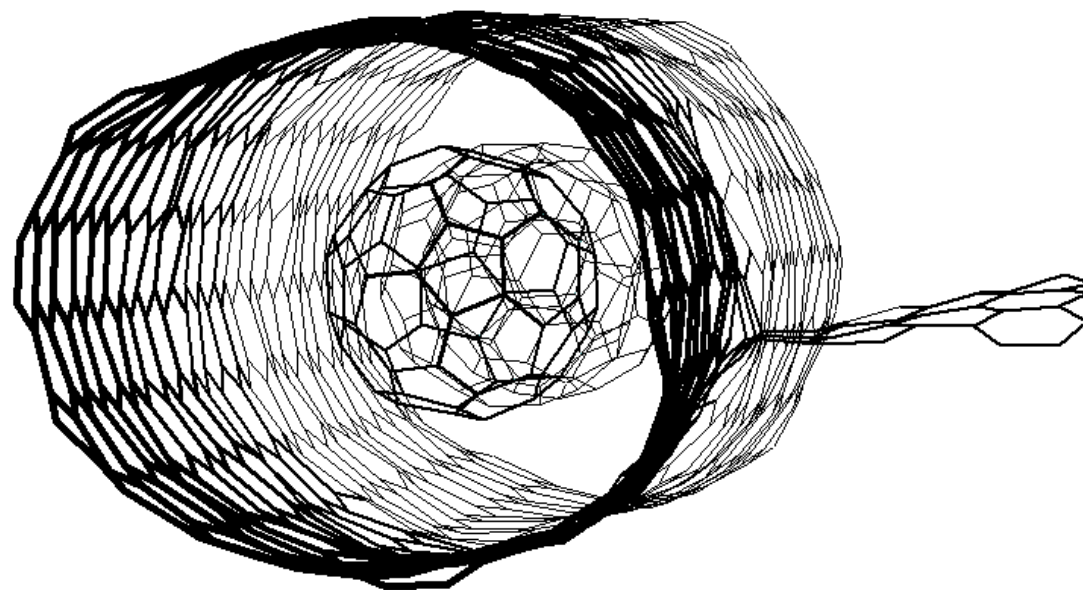


Таблица 2. Энтальпия реакции комплекса с шириной наночастицы 0,7 нм

Zigzag длина, нм	энтальпия, эВ
0,73	-5,63
0,98	-5,62
1,23	-6,31
1,47	-16,69
1,72	-18,60
1,96	-19,62
2,21	-21,58
2,46	-23,72
2,70	-25,28
2,95	-27,58

Рис.5. При взаимодействии наностручка с двумя и с тремя ГНЧ шириной (armchair) 0,7 нм и длиной (zigzag) 1,4 нм структура сохраняет стабильность, а при увеличении длины (zigzag) ГНЧ до 1,7 нм стабильность композитов (наностручок +2ГНЧ и наностручок+3ГНЧ) теряется и энтальпия становится положительной

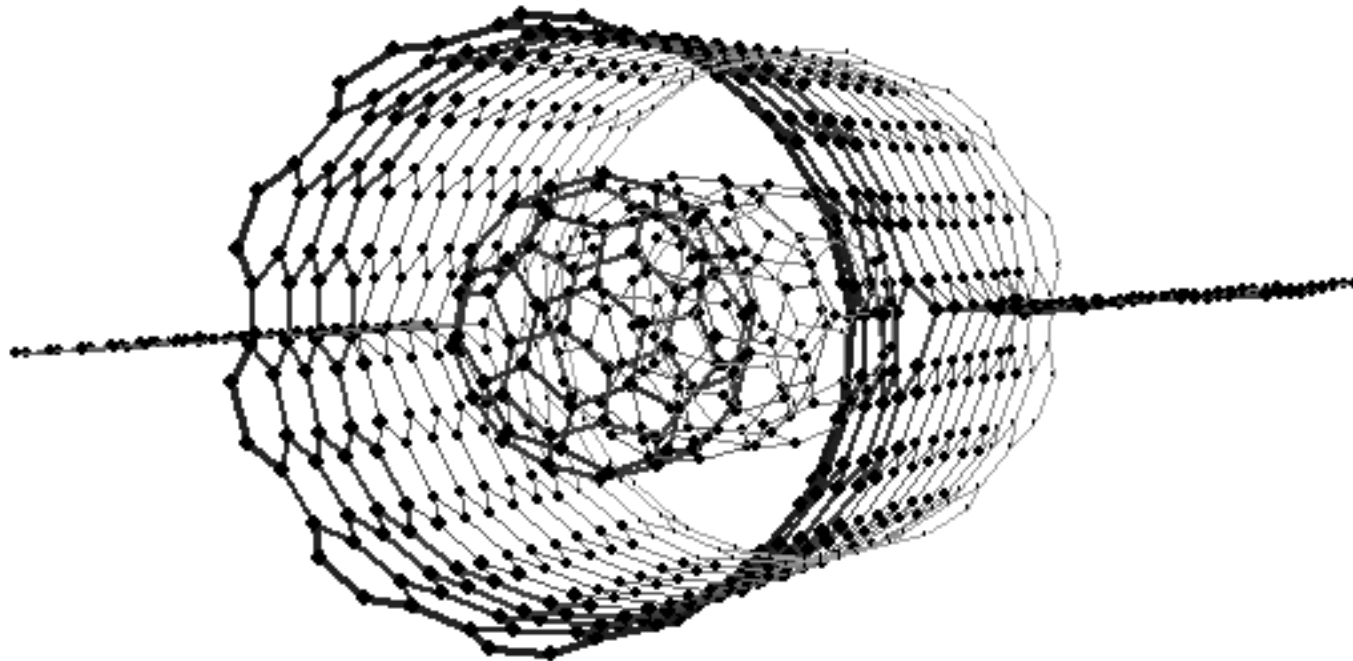
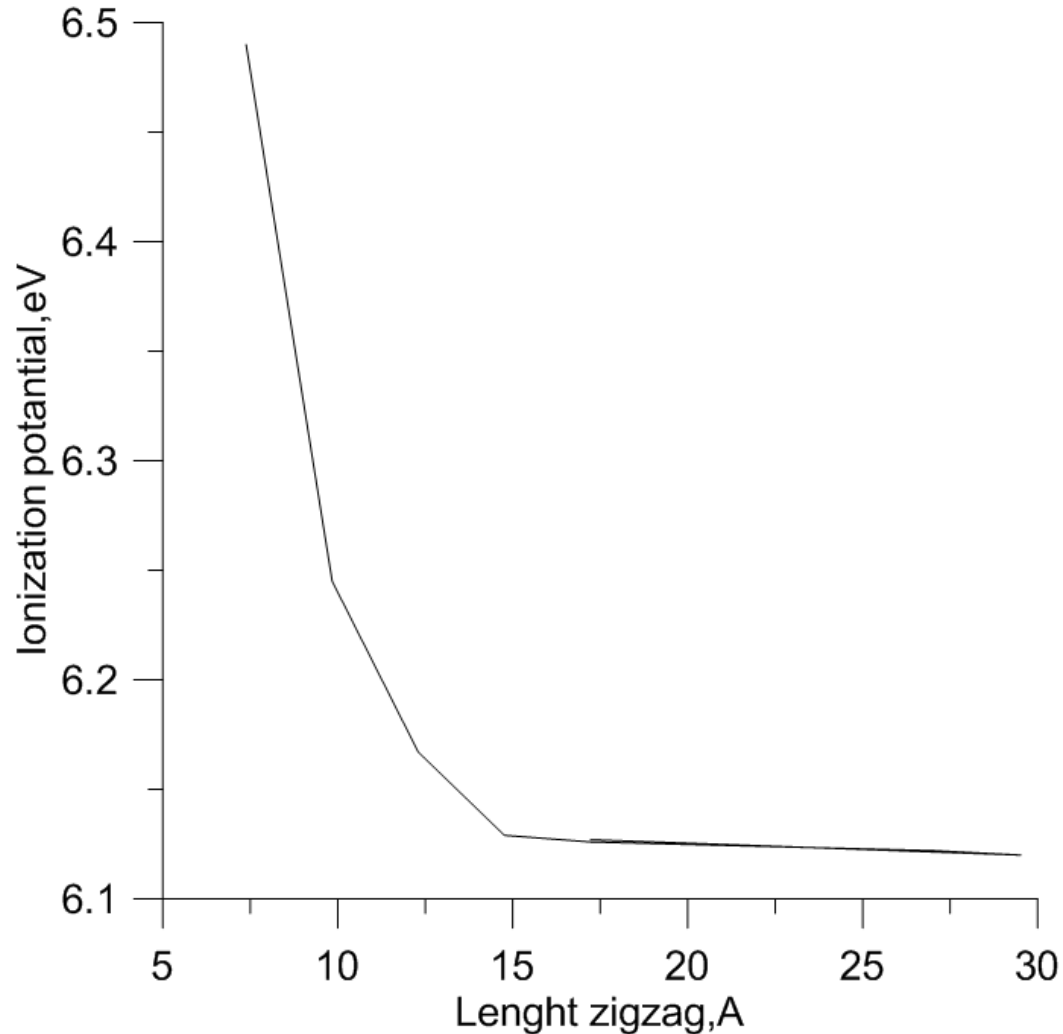


Рис. 6. Потенциал ионизации поллой нанотрубки и наностручка без ГНЧ на 0.5% выше чем у наностручков с ГНЧ



- При взаимодействии наностручка с ГНЧ от 1 до 4 и шириной (armchair) 0,7 нм и длиной (zigzag) 1,4 нм потенциал ионизации не изменяется и составляет $\sim 6,13 \text{ эВ}$

Выводы

- При химическом взаимодействии стабильный комплекс образуется между наностручком и углеродной наночастицей, т.е. происходит выделение энергии (энтальпия отрицательная).
- Наностручок с двумя и тремя ГНЧ шириной (armchair) 0,7 нм и длиной (zigzag) 1,4 нм сохраняет стабильность, а при увеличении стороны zigzag ГНЧ стабильность композита теряется. Показано, что при взаимодействии нанотрубки с ГНЧ от 1 до 4 потенциал ионизации не изменяется и составляет $\sim 6,13$ эВ.
- Установлено, что потенциал ионизации композита наностручок+ГНТ уменьшается на 0.5 % по сравнению с потенциал ионизацией полый нанотрубки, когда размеры ГНЧ становятся соизмеримы с длиной нанотрубки.