

T-NANOCONSTRUCTIONS ON THE (0001)-SURFACE OF GRAPHITE BASED ON CARBON (6,6)-NANOTUBES

Popov A.P.^{*}, **Bazjin I.V.**

Chair of informatics,
Rostov State Pedagogical University,
Bolshaya Sadovaya Str. 33, Rostov-on-Don, 344007 Russia

Introduction

The creation of some nanoelectronic devices requires rigid fixation of nanotubes orientations in direction perpendicular to crystal surface. One of the way to solve the problem is discussed in the paper.

Results and discussions

The nanoconstruction of principally new type – open (6,6)-nanotube, which grows from (0001)-surface of graphite and compose the indivisible whole with higher graphite monolayer. The construction in whole is similar to tower; below we use “tower” as term for meaning of construction.

Let's describe the process of “creation” of tower more detailed. One can mark centre of any hexagon on the graphite surface and remove 24 atoms from the first three coordspheres in higher graphite monolayer (this atoms are disposed in foundation of created tower). As result in the higher graphite monolayer the almost round hole appears. In the boundary of the hole 24 carbon atoms from fourth coordsphere are disposed. Namely this atoms participate in formation of firm covalent bonds with 24 carbon atoms disposed at the edge of open carbon (6,6)-nanotube. The construction contains six 7-members cycles near the tower foundation, which are not typical for carbon framework's constructions. But in spite of this, the construction is very stable: binding energy in 10-20 times exceed absorption energy of nanotube with graphite surface.

We consider also construction of two nearly disposed towers. The results of DOS calculations clearly show the essential role of interactions of electron states in nanotubes through graphite monolayer.

It's clear the lots of nanotubes can grow from the graphite surface, forming different well-regulated structures, for example, quasi-two-dimensional hexagonal lattice.

Calculations are performed in scheme, which use empirical Tersoff-Brenner method [1,2] for approximate determination of equilibrium geometry with following quantum chemistry calculations in framework of semiempirical PM3 method [3], making also more precise geometrical parameters of equilibrium configuration. Ab initio Hartree-Fock method RHF [4] in basis STO-3G and 3-21G is applied for calculations of full energy, heat of formation and one-electron states density at fixed geometry of structure only at the last stage.

The results of our calculations are in quality agreement with [5]; the authors of the paper experimentally observed (4,0)-nanotube with diameter 0.33 nm, which growths from more thick nanotube with diameter 1.5 nm.

Conclusions

The possibility of existence of T-constructions based on carbon nanotubes, which grow from graphite (0001)-surface and compose the indivisible whole with higher graphite monolayer is predicted .

References

1. Tersoff J., Phys. Rev. B, 1988, v.38, p.9902.
2. Brenner D.W., Phys. Rev. B, 1990, v.38, p.9902.
3. Stewart J.J.P., J. Comput. Chem., 1989, v.10, p. 209; Stewart J.J.P., J. Comput. Chem., 1989, v.10, p.221.
4. Hartree D.R., Proc. Phil. Mag., 1928, v.24, p.89; Fok V.A., Izv. AN USSR, 1935, v.2, p.169.
5. Peng L.M. et al., 2000, v.85, p.3249.

* E-mail: shenri_revenu@mail.ru

НАНОКОНСТРУКЦИИ Т-ТИПА НА (0001)-ПОВЕРХНОСТИ ГРАФИТА НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ (6,6)-НАНОТРУБОК

Попов А.П.^{*}, Бажин И.В.

Кафедра информатики,
Ростовский Государственный Педагогический Университет,
ул. Большая Садовая 33, Ростов-на-Дону, 344007 Россия

Введение

При создании некоторых нанoeлектронных устройств требуется располагать нанотрубки вблизи поверхности кристалла в направлении перпендикулярном к поверхности, причем ориентация нанотрубок должна быть строго фиксирована. В работе обсуждается один из возможных путей решения данной проблемы.

Результаты и обсуждение

Теоретически исследована наноконструкция принципиально нового типа – открытая (6,6)-нанотрубка, растущая из (0001)-поверхности графита и составляющая с верхним монослоем графита единое целое. В целом конструкция напоминает башню; далее мы так и будем ее называть.

Опишем процесс «создания» башни более подробно. Отметим на поверхности графита центр одного из шестиугольников и удалим из верхнего монослоя графита 24 атома углерода, попавшие в первые три коордсферы и лежащие в основании будущей башни. В результате в монослое графита образуется почти круглое отверстие, на границе которого находятся 24 атома углерода из четвертой коордсферы. Именно эти атомы образуют прочные ковалентные связи с 24 атомами углерода, расположенными по краю открытой (6,6)-нанотрубки. Возникающая конструкция содержит вблизи основания башни шесть семичленных циклов, что вообще говоря нетипично для каркасных конструкций на основе углерода. Несмотря на это, конструкция в целом оказывается чрезвычайно устойчивой и стабильной: энергия связи в 10-20 раз превышает энергию адсорбции нанотрубок на поверхности графита.

Помимо этого, исследована конструкция из двух рядом расположенных башен. Результаты расчета DOS указывают на существенную роль

взаимодействия электронных состояний в нанотрубках через графитовую подложку. Очевидно, что на поверхности графита может расти множество нанотрубок, образуя различные упорядоченные структуры, например, квазидвумерную гексагональную решетку.

Равновесная геометрия определялась с помощью хорошо известного эмпирического метода Терсоффа-Бреннера [1,2]. Последующие квантовохимические расчеты, в процессе которых уточнялась равновесная геометрия, выполнялись в рамках полуэмпирического метода PM3 [3], и лишь на заключительном этапе для расчета электронной структуры при фиксированной геометрии применялся неэмпирический метод Хартри-Фока [4] в базисах STO-3G и 3-21G.

Наши результаты согласуются с работой [5], в которой экспериментально обнаружена (4,0)-нанотрубка диаметра 0.33 нм, растущая в виде бокового отростка из более толстой нанотрубки диаметра 1.5 нм.

Выводы

Предсказана возможность существования Т-конструкций на основе нанотрубок, растущих на (0001)-поверхности графита и составляющих с верхним монослоем графита единое целое.

Литература

1. Tersoff J., Phys. Rev. B, 1988, v.38, p.9902.
2. Brenner D.W., Phys. Rev. B, 1990, v.38, p.9902.
3. Stewart J.J.P., J. Comput. Chem., 1989, v.10, p. 209; Stewart J.J.P., J. Comput. Chem., 1989, v.10, p.221.
4. Hartree D.R., Proc. Phil. Mag., 1928, v.24, p.89; Фок В.А., Изв. АН СССР, 1935, т.2, 169.
5. Peng L.M. et al., 2000, v.85, p.3249.

^{*} E-mail: shenri_revenu@mail.ru