

Оглавление

Предисловие	3
Часть 1. Строение и свойства нанотрубок	10
1.1. Аллотропические формы углерода	10
1.1.1. Гибридизация	10
1.1.2. Алмаз	11
1.1.3. Графит	12
1.1.4. Карбин	13
1.1.5. Фуллерены	13
1.1.6. Нанотрубки	16
1.2. Получение нанотрубок	24
1.2.1. Разрядно-дуговой метод	24
1.2.2. Метод химического осаждения из пара	26
1.2.3. Метод лазерной абляции	27
1.2.4. Нанотрубки из спирта	29
1.2.5. Диспергирование нанотрубок	29
1.2.6. Управляемый рост упорядоченных рядов углеродных нанотрубок	30
1.2.7. Длинные нити из нанотрубок	32
1.2.8. Самые тонкие нанотрубки	33
1.2.9. Кольца из нанотрубок	35
1.2.10. Заточка многослойных нанотрубок	36
1.3. Металлы и полупроводники	37
1.3.1. Строение и электропроводность	37
1.3.2. Минищели	43
1.3.3. Электронные уровни в коротких нанотрубках — квантовых точках	44
1.3.4. Квантовые проводя	46
1.3.5. Большой электронный орбитальный момент	49
1.3.6. Спин-орбитальное взаимодействие в нанотрубке	51
1.3.7. Перенос электронного спина	56
1.3.8. Эффект Ааронова–Бома	58
1.3.9. Эффект Кондо и магнитные кластеры в нанотрубках	60

1.3.10.	Индукцированная сверхпроводимость	63
1.3.11.	Собственная сверхпроводимость	63
1.3.12.	Теплопроводность	65
1.4.	Нанотрубки для электроники.	65
1.4.1.	Диоды	66
1.4.1.1.	Выпрямление на изогнутой нанотрубке	66
1.4.1.2.	Y- и T-образное соединение нанотрубок	70
1.4.1.3.	Выпрямление на межмолекулярном переносе электронов	72
1.4.1.4.	Туннельный диод на легированной трубке.	74
1.4.2.	Транзисторы.	77
1.4.2.1.	Полевой транзистор	77
1.4.2.2.	Транзистор на кольцевой нанотрубке	79
1.4.2.3.	Модуляции потенциала в полевом транзисторе	80
1.4.2.4.	Канальный транзистор	82
1.4.2.5.	Одноэлектронный транзистор	83
1.4.2.6.	Транзистор на сверхпроводящем токе.	86
1.4.2.7.	Квантовая емкость	90
1.4.2.8.	Метод конструктивного разрушения	94
1.4.2.9.	Плазменное травление	95
1.4.2.10.	Селективная адсорбция с упорядочением	97
1.4.2.11.	Транзистор с электрохимическим затвором	98
1.4.3.	Интерференция Фабри–Перо	100
1.4.4.	Химические сенсоры	102
1.4.4.1.	Сенсор на полевом транзисторе	102
1.4.4.2.	pH-сенсор на одной молекуле.	104
1.4.5.	Электронные логические элементы на нанотрубках	107
1.4.5.1.	Простейшие логические схемы.	107
1.4.5.2.	Инвертор на нанотрубке	108
1.4.5.3.	Чипы с логическими элементами	112
1.4.6.	Светодиод.	123
1.4.7.	Память на нанотрубках	125
1.4.7.1.	Элемент на полевом транзисторе	125
1.4.7.2.	Высокоскоростная память	127
1.4.7.3.	Оптоэлектронный элемент	129

1.4.8.	Электролюминесценция нанотрубок	131
1.4.9.	Нанотрубки, распознающие видимый свет	133
1.4.10.	Интегральные схемы на гибкой подложке	135
1.4.11.	Нанотрубки в эмиссионных приборах	136
1.4.11.1.	Индикаторы и плоские экраны	136
1.4.11.2.	Выпрямитель	139
1.4.11.3.	Источник высокочастотного излучения	140
1.4.11.4.	Электронный пучок для микроскопа	141
1.4.11.5.	Эмиссионный ток, оптическое излучение и тепловыделение	142
1.4.11.6.	Рентгеновское излучение	143
1.4.11.7.	Ионизационный сенсор для газов	144
1.4.12.	Ограничители мощности излучения	146
1.4.13.	Нанотрубки, взрывающиеся от фотовспышки	147
1.5.	Механические и электромеханические эффекты	148
1.5.1.	Сверхпрочность	148
1.5.2.	Деформация под действием поля	150
1.5.3.	Влияние механической нагрузки на электрические свойства	151
1.5.4.	Настраиваемый электромеханический осциллятор	153
1.5.5.	Электрохимический преобразователь электрической энергии в механическую	155
1.5.6.	Наномеханические системы на многослойных нанотрубках	156
1.5.6.1.	Наноболты, наногайки, наноподшипники	157
1.5.6.2.	Нанореле	157
1.5.6.3.	Нанорезисторы	159
1.5.6.4.	Электромеханический нанотермометр	159
1.5.6.5.	Наноактуатор	160
1.5.6.6.	Наноосциллятор на телескопической структуре	161
1.5.6.7.	Наномотор	163
1.5.7.	Нановесы	164
1.5.8.	Нанопинцет	165
1.5.9.	Нанотрубки для атомных силовых микроскопов	166
1.5.10.	Наносенсор для потока жидкости	170

1.5.11. Радио на нанотрубке	171
1.5.12. Нановесы с атомным разрешением	175
1.6. Адсорбционные свойства	178
1.6.1. Хранение водорода	178
1.6.2. Нанофильтр	180
1.6.3. В борьбе с ядами	181
1.7. Капиллярные эффекты	181
1.8. Нанотрубки для композитов	182
1.8.1. Механические и тепловые свойства	182
1.8.2. Композиты для твердотельных сенсоров.	183
1.8.3. Промышленное производство композитов.	185
1.9. Создание высокого давления внутри нанотрубки . .	186
1.10. Термометр для нанообъектов	187
1.11. Бумага из нанотрубок.	189
1.11.1. Получение и структура	189
1.11.2. Необычный эффект Пуассона	191
1.12. Громкоговоритель на тонкой пленке из нанотрубок	193
1.13. Нанотрубки и биомолекулы	195
1.13.1. Супрамолекулярные комплексы ДНК с нанотрубками	195
1.13.2. Сортировка нанотрубок с помощью ДНК	197
1.13.3. Нанотрубки с ДНК-рекогницией	200
1.13.4. Транзистор на нанотрубке с кодирующей нитью ДНК	201
1.13.5. Сенсор на комплексе ДНК с нанотрубкой	204
1.13.6. Иммуно-нанотрубки.	206
1.13.7. Доставка противоопухолевых препаратов	207
1.13.8. Распределение нанотрубок <i>in vivo</i>	208
1.13.9. Токсичность нанотрубок.	210
Часть 2. Квантовая химия нанотрубок.	211
2.1. Введение в метод линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).	211
2.1.1. Атомная теория Бора	211

2.1.2.	Электронный гамильтониан и электронное строение атомов и молекул	213
2.1.3.	Молекулярные и атомные орбитали	215
2.1.4.	Секулярное уравнение	217
2.1.5.	Атомный базис	218
2.2.	Химическая связь в простейших молекулах	219
2.2.1.	Орбитали двухатомных молекул	219
2.2.2.	π -Орбитали в ненасыщенных соединениях	222
2.3.	Трансляционная симметрия	227
2.3.1.	Симметрия полимеров	227
2.3.2.	Симметрия графитового слоя	230
2.4.	Метод ЛКАО для полимеров	232
2.4.1.	Цепочка из атомов водорода	232
2.4.2.	π -Уровни карбина	234
2.4.3.	π -Зоны нанотрубок (n, n)	236
2.4.4.	π -Зоны нанотрубок $(n, 0)$	240
2.4.5.	π -Зоны нанотрубок (n, m)	242
2.4.6.	π -Зоны нанотрубок с простыми аддендами	243
	2.4.6.1. Нанотрубки $F^-(n, n)$	243
	2.4.6.2. Нанотрубки $F^-(n, 0)$	246
2.5.	Метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн (ЛПЦВ) в теории нанотрубок	248
2.5.1.	Потенциал	249
	2.5.1.1. Цилиндрический маффин-тин-потенциал	249
	2.5.1.2. Кулоновское и обменное взаимодействие	252
2.5.2.	Вывод уравнений метода ЛПЦВ	252
	2.5.2.1. Решение уравнения Шрёдингера для межсферной области	252
	2.5.2.2. Решение уравнения Шрёдингера для области МТ-сфер	258
	2.5.2.3. Базисные функции	259
	2.5.2.4. Интегралы перекрывания	267
	2.5.2.5. Матричные элементы гамильтониана	271
	2.5.2.6. Парциальные заряды	276
2.5.3.	Практические аспекты метода	279

2.6. Применения метода ЛПЦВ.	281
2.6.1. Углеродные нанотрубки	281
2.6.1.1. σ - и π -Зоны нанотрубок	281
2.6.1.2. Энергии оптических переходов металлических нанотрубок	283
2.6.1.3. Энергии оптических переходов полупроводниковых нанотрубок	287
2.6.1.4. Легирование азотом, бором, кислородом	291
2.6.2. Цилиндрические наностержни	299
2.6.2.1. Метод расчета	299
2.6.2.2. Одноатомные нанопровода	303
2.6.3. Гетероатомные аналоги углеродных нанотрубок	312
2.6.3.1. Боразотные нанотрубки	312
2.6.3.2. Нанотрубки из BC_2N	341
2.6.3.3. Нанотрубки из GaAs	343
2.6.3.4. Нанотрубки из AlN	344
2.6.4. Нанотрубка в кристаллической матрице.	344
2.6.4.1. Метод расчета	345
2.6.4.2. Результаты расчета.	352
2.6.5. Двустенные нанотрубки	357
2.6.5.1. Метод расчета	359
2.6.5.2. Результаты расчета.	367
2.6.6. Одностенные хиральные нанотрубки	378
2.6.6.1. Метод расчета	378
2.6.6.2. Результаты расчета.	393
2.7. Метод функций Грина для точечных дефектов в нанотрубках	402
2.7.1. Определения и общие свойства функции Грина.	404
2.7.2. Одноэлектронная функция Грина для массива MT-сфер	407
2.7.3. Структурная функция Грина для идеальной нанотрубки	408
2.7.4. Взаимосвязь между возмущенной и исходной системами.	413
2.7.5. Плотности состояний	415
2.7.6. Точечные примеси В и N в карбине и нанотрубках.	416

2.8. Электродинамика нанотрубок	423
2.8.1. Волновой импеданс и квант сопротивления	423
2.8.2. Углеродная нанотрубка как линия передачи электромагнитных волн	425
2.8.2.1. Кинетическая индуктивность	427
2.8.2.2. Электростатическая емкость	427
2.8.2.3. Квантовая емкость	428
2.8.2.4. Сверхвысокочастотные интерконнекторы на углеродных нанотрубках	428
2.8.3. Наноантенны и микрорезонаторы на углеродных нанотрубках	431
2.8.3.1. Дипольные антенны на одиночных нанотрубках	431
2.8.3.2. Многоэлементные антенны на углеродных нанотрубках	436
2.8.3.3. Углеродная нанотрубка как микрорезонатор	438
2.8.4. Углеродные нанотрубки и квантовая оптика	439
2.8.4.1. Эффект Парселла на нанотрубке	440
2.8.4.2. Тепловое излучение углеродных нанотрубок	443
2.8.5. Углеродные нанотрубки и нелинейная оптика	445
2.8.5.1. Генерация высших оптических гармоник	447
2.8.5.2. Генерация третьей гармоники	449
2.8.5.3. Генерация терагерцового электромагнитного излучения	450
Литература	453