

Особенности дифракции на нанотрубках с гофрированной сверхрешеткой

<u>А.Е. Чканов</u>¹, З.Я. Халитов¹, Д.М. Пашин¹

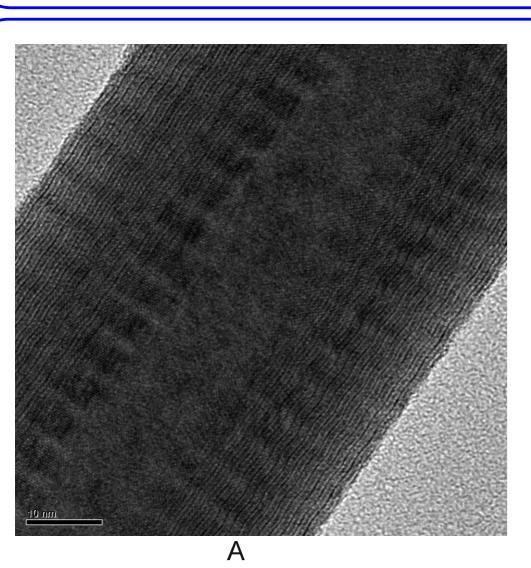
 1 Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева - КАИ, Казань, Россия E-mail: andrey.chkanov@gmail.com

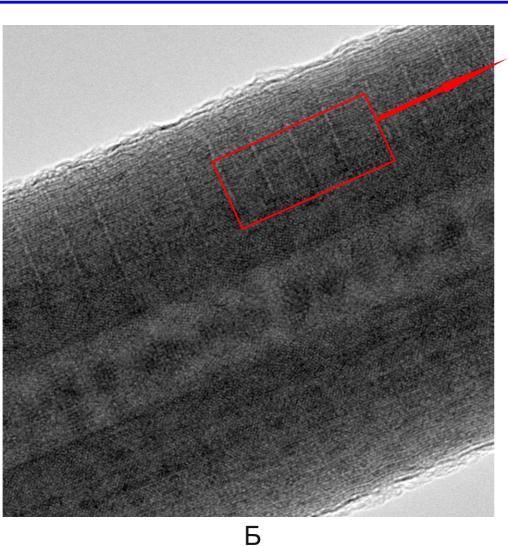
Введение

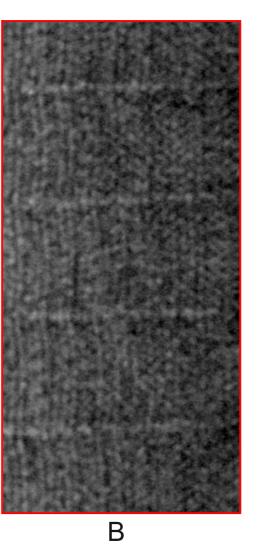
В последнее время синтезированы первые представители смешанослойных нанотрубок, в которых чередуются слои SnS₂ и SnS [1]. Среди них были впервые найдены «гофрированные» нанотрубки имеющие сверхпериод в продольном направлении.

В результате совместного исследования методами ПЭМ был обнаружен ряд дифракционных эффектов присущих данным структурам. Наряду с дифракционными эффектами присущими коаксиальным и спиральным нанотрубкам [2], по которым возможно определение практически полного набора структурных параметров (параметров решетки, угла хиральности и др.) было отмечено образование на дифракционной картине дополнительных слоевых линий. Было обнаружено, что расстояние между данными слоевыми линиями является обратной величиной от длины сверхпериода трубки.

Для анализа гофррированных структур проводился анализ SnS/SnS₂ нанотрубок методом ПЭМ (HRTEM FEI Tehnai F-30 (300 kV)).







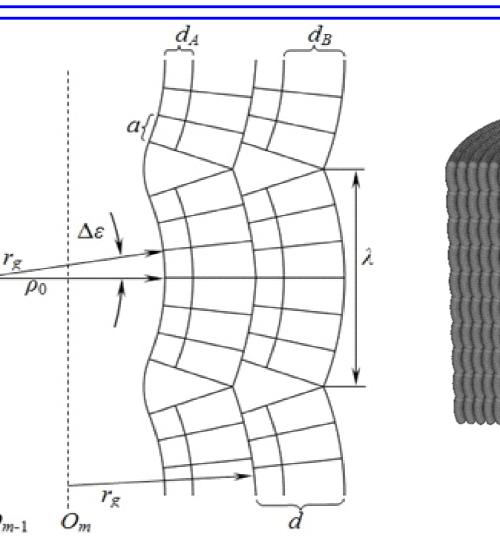
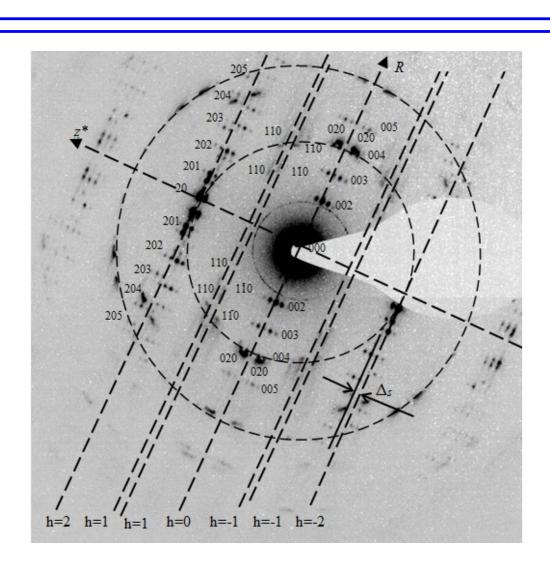
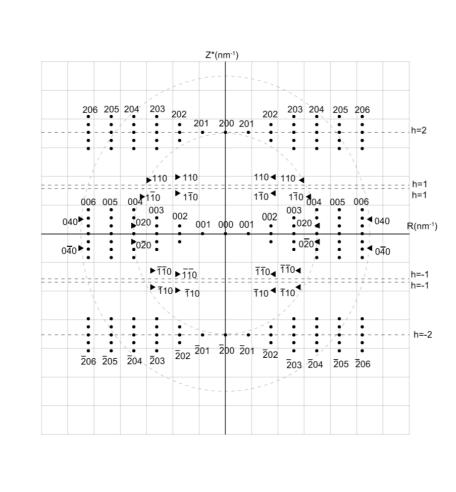


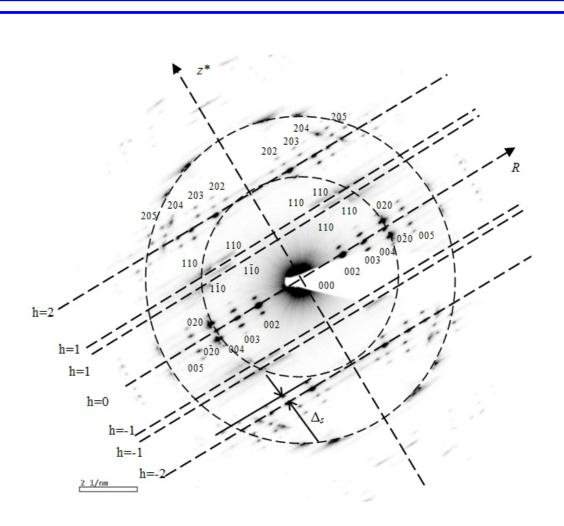
Рис. 1. а) ПЭМ-изображение гофрированной нанотрубки с M<T; б) ПЭМ-изображение гофрированной нанотрубки с M \geq T; в) Увеличенное ПЭМ-изображение слоев нанотрубки.

Рис. 2. Структура и основные параметры гофрированной нанотрубки.

Рис. 3. Структурная модель данного типа нанотрубок.







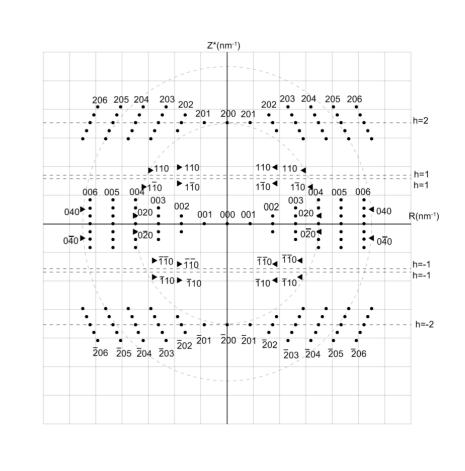


Рис. 4. Модельная и экспериментальная микродифракционная картина в случае (M \geq T). Измеренное $\Delta_s = 0,187$ нм⁻¹, что равно $1/\lambda$.

Рис. 5. Модельная и экспериментальная микродифракционная картина в случае (M<T). Измеренное $\Delta_s = 0.286 \text{ нм}^{-1}$, что равно $1/\lambda$.

Цилиндрические координаты узлов решетки гофрированной нанотрубки (рис. 2):

$$\phi_{mv} = \frac{b}{\rho_m} v + \varepsilon_m \qquad \rho_{mt} = \rho_m - r_g + r_g \cos \varepsilon_t \qquad z_{nt} = n\lambda + \frac{\lambda}{2} + r_g \sin \varepsilon_t$$

где $\varepsilon_t = \Delta \varepsilon t - \varepsilon$ v — номер ячейки Бравэ на витке,

 ε_t – угловое положения узлов пары слоев, r_g – радиус изгиба,

 $\Delta \varepsilon$ — угловое положения узлов пары слось, γ_g радиус изгиоа, $\Delta \varepsilon$ — угол, под которым ячейка λ — длина сверхпериода,

видна из центра кривизны, n- количество длин сверхпериода, m- узлы решеток слоев в пределах волны,

d – толщина пары слоев типа A и B,

 ε_m - начальная азимутальная угловая фаза слоя

a и b — параметры прямоугольной ячейки Бравэ,

Теоретическая часть

Амплитуда h0l рефлексов:

Амплитуда *hk0* рефлексов:

$$A_{S}(R, h_{1}) = N(-1)^{h_{1}} \sum_{t=0}^{T-1} \exp\left(2\pi i \frac{h_{1}}{\lambda} \beta_{t}\right) \sum_{m=0}^{M-1} p_{m} J_{0}(2\pi R \rho_{mt})$$

$$A_{D}(R, h_{1}) = 2N(-1)^{h_{1}} \sum_{t=0}^{T-1} \exp\left(2\pi i \frac{h_{1}}{\lambda} \beta_{t}\right) \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{v=0}^{p_{m}-1} \sum_{q=1}^{\infty} i^{q} \cos\left[q(\varphi_{mv} - \varphi^{*})\right] J_{q}(2\pi R \rho_{mt})$$

Решая уравнение четких рефлексов, получаем две предельные модели микродифракционных картин:

Первая (M≥T) (рис. 4), число слоев в нанотрубке больше количества ячеек в одном сверхпериоде. Получается, что положение рефлексов на доп. слоевых линиях полностью совпадают с положением на основных четких слоевых линиях. $R_h^{h_1} \approx \frac{h_2}{2}$

Вторая (M<T) (рис. 5), число слоев в нанотрубке меньше количества ячеек в одном сверхпериоде. Получается что, при переходе с одной слоевой линии на другую положение всей серии смещается на величину h_1/λ . $R_h^{h_1} \approx \frac{h_2}{h_2} - \frac{h_1}{h_2}$

Выводы

Все рефлексы расположены на системе слоевых линий $z^* = h_1/\lambda$. Однако наибольшую интенсивность имеют рефлексы основных слоевых линий соответствующих согласованному продольному периоду a, а именно $z^* = h_2/a$, где h_2 - целое.

При возрастании индекса l четкого рефлекса становятся заметными интенсивности дополнительных слоевых линий, так, что ширина интервала (вдоль z^*) слоевых линий, обладающих заметной интенсивностью, пропорциональна этому индексу.

В случае $M \ge T$ четкие рефлексы расположены на слоевой линии так же, как у не гофрированной решетки. В случае M < T серии четких рефлексов смещаются вдоль слоевой линии в зависимости от ее индекса h_1 .

Благодарности

Авторы благодарят проффессора Р. Тенне (Department of Materials and Interfaces, Weizmann Institute of Science, Rehovot) и его научную группу за предоставленные изображения и дифракционные картины нанотрубок.

Литература

[1] G. Radovsky, R. Popovitz-Biro, M. Staiger, K. Gartsman, C. Thomsen, T. Lorenz, G. Seifert and R. Tenne, Angew. Chem, Intl. Ed. 50 (51), 12316-12320, (2011).

[2] O. Figovsky, D. Pashin, I. Nasyrov, Z. Khalitov, D. Valeeva. Chemistry & Chemical Technology, 6, 1, 43-49, (2011).

[3] O. Figovsky, D. Pashin, Z. Khalitov, D. Valeeva, A. Chkanov. Chemistry & Chemical Technology, 7, 3, 251-256, (2013).