

## Спиральные супракристаллические нанотрубки в качестве соленоидов для наноэлектроники

*Р.А. Браже, А.Ф. Савин*

Ульяновский государственный технический университет  
432027, Российская Федерация, г. Ульяновск  
ул. Северный Венец, 32

Показаны способы спирализации электропроводящих супракристаллических нанотрубок, предназначенных для использования в качестве соленоидов в наноэлектронных компонентах радиотехнических систем. Приведены результаты расчета погонной индуктивности таких соленоидов и создаваемой в них индукции магнитного поля.

*Ключевые слова:* супракристаллические нанотрубки, соленоиды, индуктивность, наноэлектроника.

### Введение

По-видимому, впервые об использовании нанотрубок в качестве сверхминиатюрных соленоидов было заявлено нами в работах [1; 2]. Эта идея затем была высказана также в работе [3]. Суть идеи проста: нужно свернуть электропроводящую нанотрубку в спираль. Как было показано бельгийской группой исследователей [4], в случае углеродной нанотрубки (УНТ), состоящей из гексагональных ячеек, это можно сделать путем периодической вставки «дефектных» пятиугольных и семиугольных ячеек. Первые создают участки положительной кривизны, вторые – отрицательной. Этим же авторам удалось впервые обнаружить спиральные УНТ в 1994 г. [5].

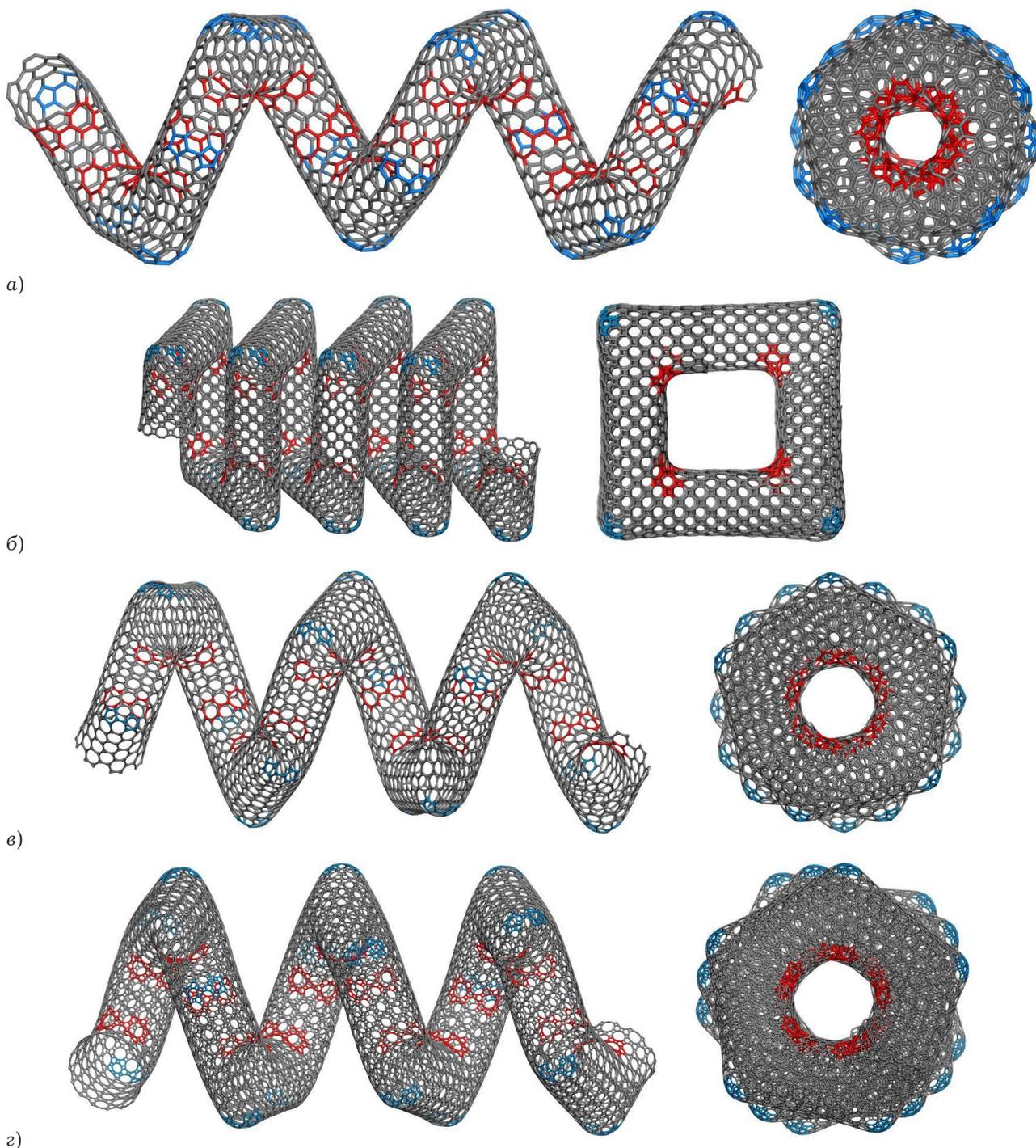
В случае с супракристаллическими нанотрубками [6; 7] ситуация сложнее. Во-первых, такие нанотрубки, в зависимости от химического состава и симметрии, могут быть как электропроводящими, так и диэлектрическими и, стало быть, в последнем случае для создания соленоидов непригодными. Во-вторых, для свертывания таких, даже металлических, нанотрубок в спираль до сих пор не разработаны ни теоретические, ни технологические аспекты. Лишь недавно появились работы, в которых обсуждаются подобные задачи применительно к УНТ [8–10].

Целью данной работы является описание способов конструирования супракристаллических наносолоноидов, расчет их погонной индуктивности, создаваемого в них магнитного поля при протекании электрического тока, а также обсуждение вопросов, связанных с практическим применением таких соленоидов.

### 1. Геометрические характеристики супракристаллических наносолоноидов

В работе [2] нами были оценены предельные значения индуктивности супракристаллических наносолоноидов в предположении, что их витки (одетые в диэлектрическую нанотрубчатую оболочку) примыкают друг к другу. В действительности шаг намотки спиральной нанотрубки не удастся сделать равным диаметру трубки. «Надеть» на нее другую нанотрубку также проблематично. Поэтому ниже рассматриваются супракристаллические нанотрубки (СНТ) [2; 6; 7], в структуру которых введены периодически расположенные парные «дефекты» в виде полигонов с меньшим и большим числом сторон, чем у супракристаллических ячеек исходной нанотрубки. В случае шестиугольных ячеек это соответственно пентагоны и гептагоны, а в случае квадратных ячеек – тригоны и пентагоны. С увеличением диаметра нанотрубки, количество этих дефектов остается неизменным, увеличивается только число разделяющих их супраячеек. Диаметр спирали также можно менять, изменяя количество таких разделяющих супраячеек.

Построение спиральных наносолоноидов вышеуказанного типа осуществлялось в программном пакете Accelrys Materials Studio 6.0. Для быстрой оптимизации их геометрических параметров использовался Forcite-метод молекулярной динамики, после чего дальнейшая оптимизация геометрии осуществлялась на основе метода функционала плотности (DFT) в том же



**Рис. 1.** Наносоленоиды на основе классической УНТ графенового типа (а) и углеродных СНТ: б)  $(C)_{44}$ ; в)  $(C)_{63(12)}$  и г)  $(C)_{664}$

программном пакете. При этом геометрия нанотрубок значительных изменений уже не претерпевала. Последующая визуализация спиральных супракристаллических нанотрубок также осуществлялась в программе Accelrys Materials Studio 6.0.

Мы ограничились рассмотрением углеродных СНТ типов  $(C)_{44}$ ,  $(C)_{63(12)}$  и  $(C)_{664}$  (смысл обозначений см. в работах [6; 7]), в которых атомы углерода находятся в состоянии с  $sp^2$ -гибри-

дизацией. В них  $2p_z$ -электроны не участвуют в образовании ковалентных связей с соседними атомами и являются свободными, определяя электропроводность нанотрубки. Конечно, в местах вставок «дефектных» ячеек возникают скачки ширины запрещенной зоны и изменения хиральности, что влечет за собой вариации электропроводности. Тем не менее это обстоятельство не может устранить наличие свободных носителей заряда и превратить электропро-

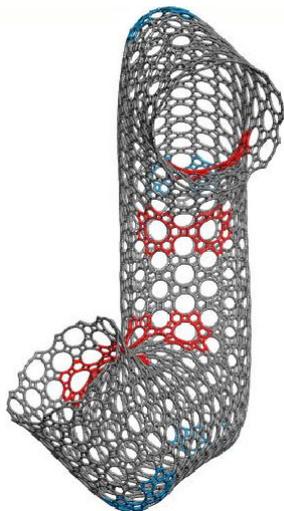


Рис. 2. Боковой сдвиг в коленах наносолоноида на примере СНТ типа  $(C)_{664}$

водящую нанотрубку в диэлектрическую при ее сворачивании в спираль.

На рис. 1 изображены результаты визуализации проделанной вычислительной работы. Для сравнения приведена также спиральная УНТ графенового типа  $(C)_6$ .

Важным параметром наносолоноида, от которого зависят его магнитные характеристики, является шаг спирали. Он, в свою очередь, зависит от диаметра нанотрубки, диаметра спирали и величины бокового сдвига в каждом колене спирали, а также количества таких колен в одном витке. Как можно видеть из рис. 2, наименьший боковой сдвиг получается в случае, если в каждом колене происходит поворот одного сегмента относительно другого на одну супрачейку. Чем меньше диаметр нанотрубки, тем чаще можно вставлять пары «дефектных» ячеек, тем меньше диаметр получаемой спирали, тем меньший боковой сдвиг в ее коленах можно реализовать и тем меньше ее шаг. В то же время с увеличением диаметра нанотрубки поворота на одну супрачейку в одном колене может и не хватить, чтобы шаг спирали превысил диаметр трубки. Тогда в каждом колене следует осуществлять поворот на две супрачейки. Из рис. 1 также видно, что наименьшее количество колен изгиба на один виток спирали (четыре) имеет место в спиральных СНТ, получаемых на основе нанотрубок вида  $(C)_{44}$ . Значит, при прочих равных геометрических показателях спиральные СНТ такого типа будут иметь наибольшее число витков на единицу длины.

Выражение для шага спирали исследуемых наносолоноидов легко находится из геометриче-

ских соотношений и имеет вид (в случае поворота на одну супрачейку в каждом колене изгиба)

$$p = \frac{1}{2} \alpha m D \sin \frac{\alpha \pi}{n}. \quad (1)$$

Здесь  $\alpha$  – коэффициент, принимающий следующие значения: для кресельноподобных СНТ  $(n, n)$   $\alpha = 1$ , а для зигзагообразных  $(n, 0)$   $\alpha = \sqrt{2}$  в случае трубок типа  $(C)_{44}$ , имеющих квадратные супрачейки ( $m = 4$ ), и  $\alpha = \sqrt{3}$  для остальных трубок, имеющих шестиугольные супрачейки ( $m = 6$ );  $D$  – диаметр спирали, измеряемый по осевой линии сворачиваемой СНТ;  $n$  – индекс хиральности. Для наглядности диаметр спирали удобнее измерять в величинах, кратных диаметру СНТ:  $D = kd$ . Тогда выражение (1) принимает вид

$$p = \frac{1}{2} \alpha m k d \sin \frac{\alpha \pi}{n}. \quad (2)$$

В таблице приведены результаты расчета диаметра СНТ и шага спирали для наносолоноидов, изображенных на рис. 1 и имеющих различную хиральность. Диаметр СНТ вычислялся по формулам, приведенным в [2; 6; 7]. Вычислен минимальный шаг спирали  $p_{\min}$ , когда в соленоиде отсутствует внутренняя полость ( $k = 1$ ). Звездочками помечены случаи, когда в каждом колене изгиба нанотрубки осуществлялся поворот на две супрачейки. С увеличением диаметра соленоида ( $k > 1$ ) шаг спирали, естественно, возрастает.

Из представленных результатов видно, что в рассматриваемом диапазоне индексов хиральности шаг спирали весьма слабо зависит от диаметра СНТ и определяется главным образом типом хиральности: соленоиды, выполненные из кресельноподобных нанотрубок, имеют значительно меньший шаг намотки, чем соленоиды из зигзагообразных нанотрубок. Кроме того, подтверждается и ранее высказанное суждение о том, что наименьший шаг должны иметь наносолоноиды на основе СНТ типа  $(C)_{44}$ .

## 2. Магнитные характеристики супракристаллических наносолоноидов

Погонная индуктивность соленоида без сердечника вычисляется по известной формуле

$$L_{\text{ног}} = \mu_0 n^2 S = \mu_0 \frac{S}{p^2}, \quad (3)$$

где  $\mu_0$  – магнитная проницаемость вакуума;  $n$  – число витков на единицу длины соленоида;  $S$  –

Таблица

Геометрические и магнитные характеристики супракристаллических наносолоноидов

Тип СНТ	Хиральность	$d$ , нм	$p_{\min}$ , нм	$L_{\text{ноз}}$ , мкГн/м	$B_{\max} / I$ , кТл/А
$(C)_6$	(6, 6)	0,81	1,22	0,44	1,03
	(8, 8)	1,08	1,24	0,75	1,01
	(10, 10)	1,35	2,38*	0,32	0,53
	(6, 0)	0,46	1,88	0,06	0,67
	(8, 0)	0,62	2,02	0,09	0,62
	(10, 0)	0,78	2,09	0,14	0,60
$(C)_{44}$	(6, 6)	0,93	0,93	0,99	1,35
	(8, 8)	1,24	1,75*	0,50	0,72
	(10, 10)	1,55	1,82*	0,72	0,69
	(6, 0)	0,66	1,25	0,27	1,00
	(8, 0)	0,88	1,30	0,45	0,97
	(10, 0)	1,10	1,33	0,71	0,94
$(C)_{63(12)}$	(6, 6)	1,99	2,99	0,44	0,42
	(8, 8)	2,66	3,05	0,75	0,41
	(10, 10)	3,33	5,87*	0,32	0,21
	(6, 0)	1,15	4,70	0,06	0,27
	(8, 0)	1,54	5,02	0,09	0,25
	(10, 0)	1,92	5,15	0,14	0,24
$(C)_{664}$	(6, 6)	2,44	3,66	0,44	0,35
	(8, 8)	3,25	3,73	0,75	0,34
	(10, 10)	4,06	7,16*	0,32	0,18
	(6, 0)	1,41	5,76	0,06	0,22
	(8, 0)	1,88	6,13	0,09	0,20
	(10, 0)	2,35	6,31	0,14	0,20

площадь его поперечного сечения. Используя соображения, высказанные в ходе вывода соотношения (2), выражение (3) можно представить в виде, не зависящем от диаметра наносолоноида:

$$L_{\text{ноз}} = \frac{\pi}{4} \mu_0 \left( \frac{d}{p_{\min}} \right)^2. \quad (4)$$

Индукция магнитного поля в соленоиде на единицу силы протекающего в нем тока может быть вычислена по формуле

$$\frac{B}{I} = \frac{\mu_0}{p}. \quad (5)$$

Из выражений (1), (2), (5) видно, что при увеличении диаметра наносолоноида индукция создаваемого в нем магнитного поля убывает вместе с увеличением шага спирали.

Значения погонной индуктивности и максимальной индукции магнитного поля в исследуемых наносолоноидах представлены в таблице. Из них видно, что наиболее высокие значения этих величин достигаются в супракристаллических наносолоноидах на основе трубок  $(C)_{44}$ , поскольку в них удастся реализовать наиболее плотное размещение витков. В наносолоноидах других типов при одной и той же хиральности погонная индуктивность одинакова независимо от различий в диаметре нанотрубки и шаге спирали.

Максимально достигаемая индукция магнитного поля в супракристаллических наносолоноидах на основе трубок  $(C)_{63(12)}$  и  $(C)_{664}$  даже ниже, чем в наносолоноидах на УНТ. С увеличением индекса хиральности погонная индуктивность наносолоноидов, как правило, возрастает.

Исключение составляют случаи, когда с целью обеспечения несмыкания витков соленоида приходится увеличивать угол поворота сегментов соленоида в коленах спирали. В то же время индукция магнитного поля с увеличением индекса хиральности слегка падает.

### Заключение

Итак, наилучшие значения магнитных характеристик, как показали наши расчеты, имеют супракристаллические наносолоноиды типа  $(C)_{44}(6,6)$ :  $L_{ног} = 0,99$  мкГн/м,  $V_{max} / I = 1,35$  кТл/А. Сравним полученные результаты с аналогичными параметрами макроскопического соленоида длиной 1 см, намотанного на цилиндрический каркас диаметром 1 мм из проволоки диаметром 0,1 мм. Для него  $r_{min} = 0,1$  мм,  $L_{ног} \approx 100$  мкГн/м,  $V / I \approx 0,01$  Тл/А. Следовательно, в супракристаллических наносолоноидах погонная индуктивность будет на два порядка меньше, чем в привычных макроскопических соленоидах. Однако создаваемое в них магнитное поле при одинаковых токах должно быть на пять порядков сильнее. Это является следствием чрезвычайно маленького шага намотки наносолоноидов. Сравните: 0,93 нм против 0,1 мм. Даже при силе тока  $I = 1$  мкА в указанном наносолоноиде будет создано магнитное поле с индукцией  $B = 1,35$  мТл, в то время как в соленоиде, взятом в качестве примера, будет  $B \approx 10$  мкТл.

Таким образом, при очень малых протекающих токах в наносолоноидах могут достигаться весьма сильные магнитные поля. Более того, они могут быть усилены при использовании ферромагнитных сердечников в виде нанопроводов подходящего диаметра. Индуктивность наносолоноидов также можно многократно увеличить путем их последовательного соединения в блоки, как это показано в нашей работе [2]. Вывод: супракристаллические наносолоноиды представ-

ляются перспективными радиокомпонентами для наноэлектроники.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России № 2014/232 (проект № 1742).*

### Список литературы

1. Браже Р.А., Савин А.Ф. Супракристаллические соленоида // Радиоэлектронная техника: межвуз. сб. науч. тр. / под ред. В.А. Сергеева. Ульяновск: УлГТУ, 2012. С. 169–172.
2. Браже Р.А., Савин А.Ф. Математическое моделирование и численные расчеты супракристаллических суперконденсаторов и суперсоленоидов для сверхнизкочастотной радиоэлектроники // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2013. Т. 16. № 4. С. 58–62.
3. Zhang Z.-Y., Miao C., Guo W. Nano-solenoid: helicoids carbon – boron nitride hetero-nanotube // Nanoscale. 2013. V. 5. P. 1192–1199.
4. Formation mechanism for catalytically grown helix-shaped graphite nanotubes / S.A. Amelinckx [et al.] // Science. 1994. V. 256. P. 635–639.
5. The texture of catalytically grown coil-shaped carbon nanotubules / X.B. Zhang [et al.] // Europhys. Lett. 1994. Vol. 27. P. 141–146.
6. Браже Р.А., Каренин А.А. Компьютерное моделирование электрических свойств супракристаллических нанотрубок // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2011. № 3. С. 131–138.
7. Браже Р.А. Физика супракристаллов. Ульяновск: УлГТУ, 2012. 162 с.
8. Fejes D., Hernadi K. A review of the properties and CVD synthesis of coiled carbon nanotubes // Materials. 2010. № 3. P. 2618–2642.
9. Shaikjee A., Coville N.J. The synthesis, properties and uses of the carbon materials with helical morphology // J. Adv. Research. 2012. № 3. P. 195–223.
10. Liu L., Liu F., Zhao J. Curved carbon nanotubes: from unique geometries to novel properties and peculiar applications // Nano Research. 2014. Vol. 7. № 5. P. 626–657.

## Coiled supracrystalline nanotubes as solenoids for nanoelectronics

*R.A. Brazhe, A.F. Savin*

The methods of conductive supracrystalline nanotubes spiralization are shown. Such coiled nanotubes can be used as the solenoids in nanoelectronic components of radio-technical systems. The calculations of conductance of the solenoids and inductance of the magnetic field created into them are given.

*Keywords:* supracrystalline nanotubes, solenoids, inductance, nanoelectronics.