

УДК 538.915

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТИПА ЗИГЗАГ
ХИРАЛЬНОСТИ (9,0) В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ
ФЛУКТУАЦИЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ХАББАРДА**

Захаров А.В., Миронов Г.И.

Марийский государственный университет,

Республика Марий Эл, г.Йошкар-Ола, пл. Ленина, 1

Zahar93n@mail.ru

Определена длина нанотрубки, когда центральный атом характеризуется теми же физико-химическими свойствами, что и произвольный атом бесконечной нанотрубки. При исследовании электронных свойств углеродных нанотрубок можно использовать и узельное и волновое представления, эти исследования будут органично дополнять друг друга.

ВВЕДЕНИЕ

В 1991 году Ииджима обнаружил такого рода полимерную структуру как побочные продукты синтеза фуллеренов [1]. Исследования показали, что нанотрубки обладают уникальными электронными свойствами, даже более значимыми для практического применения [3, 4] по сравнению с фуллеренами. Пи-электроны, электронные облака которых ориентированы перпендикулярно плоскости sp^2 гибридизации, определяют уникальные свойства углеродных нанотрубок, что в первую очередь обусловлено возможностью перескакивать с одного узла на соседний узел нанотрубки.

С использованием понятия хиральных индексов можно описать структуру углеродных нанотрубок. Два индекса хиральности (n, m) характеризующие структуру нанотрубки и задают в углеродной плоскости хиральный вектор θ . Для зигзагообразной нанотрубки хиральный угол $\theta=0^\circ$, а индексы хиральности есть $(n, 0)$, в нашем случае $(9, 0)$ [5]. Нанотрубка,

представленная на рис. 1, обладает полупроводниковыми свойствами с шириной «запрещенной» зоны порядка 0,101–1,876 эВ [6].

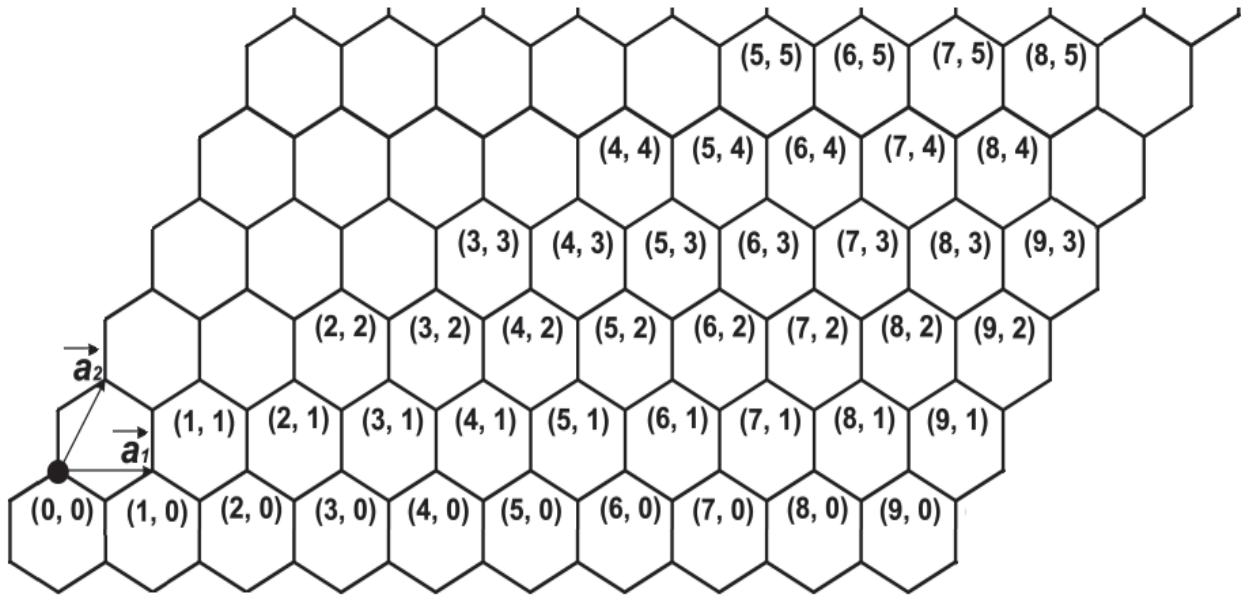


Рис. 1. Графеновая плоскость, состоящая из гексагонов, в вершинах которых находятся атомы углерода, \vec{a}_1 и \vec{a}_2 – единичные вектора плоской гексагональной решетки.

$$\vec{T} = 9\vec{a}_1 + 0\vec{a}_2 - \text{вектор трансляции.}$$

ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

По методике, разработанной в [7, 8], исследована углеродная нанотрубка типа зигзаг хиральности (9,0) в приближении статических флуктуаций в рамках модели Хаббарда. Для большей наглядности, рассмотрим гамильтониан данной наносистемы, состоящей из 36 атомов, который будет иметь следующий вид [5, 9]:

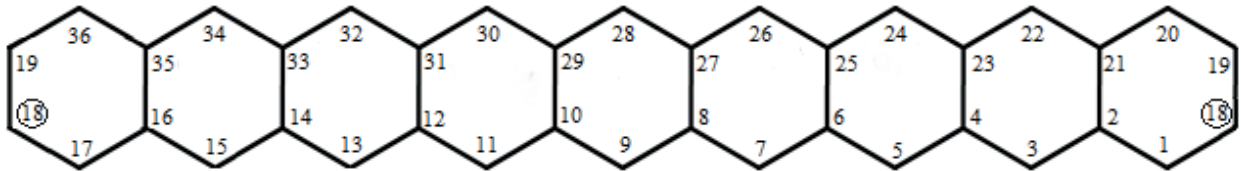


Рис. 2. Один слой нанотрубки, состоящей из 36 узлов.

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{i=1}^{36} (\hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow}) + \sum_{i,j,\sigma} B_{ff'} (a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} + a_{i,\sigma} a_{j,\sigma}^+) + U \sum_{i=1}^{36} \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} \quad (1)$$

где ε – собственная энергия электронов, $B_{ff'}$ – интеграл перескока электрона с узла f на соседний узел f' и с узла f' на узел f , U – кулоновский потенци-

$$\begin{aligned}
 & \frac{0.01915977260}{E - 2.111612967B - \varepsilon_\alpha} + \frac{0.03491947836}{E - 1.444759340B - \varepsilon_\alpha} + \frac{0.03491947836}{E + 1.444759340B - \varepsilon_\alpha} + \\
 & \frac{0.01725743924}{E - \frac{1}{2}B + \frac{1}{2}\sqrt{17}B - \varepsilon_\alpha} + \frac{0.01725743924}{E + \frac{1}{2}B - \frac{1}{2}\sqrt{17}B - \varepsilon_\alpha} + \frac{0.04020037765}{E + \frac{1}{2}B - \frac{1}{2}\sqrt{5}B - \varepsilon_\alpha} + \\
 & \frac{0.04020037765}{E - \frac{1}{2}B + \frac{1}{2}\sqrt{5}B - \varepsilon_\alpha} + \frac{0.01052033854}{E + \frac{1}{2}B + \frac{1}{2}\sqrt{17}B - \varepsilon_\alpha} + \frac{0.01052033854}{E - \frac{1}{2}B - \frac{1}{2}\sqrt{17}B - \varepsilon_\alpha} + \\
 & \frac{0.05059202525}{E + 0.1087813722B - \varepsilon_\alpha} + \frac{0.05059202525}{E - 0.1087813722B - \varepsilon_\alpha} + \frac{0.03639578296}{E - 1.111612967B - \varepsilon_\alpha} + \\
 & \left. \frac{0.03639578296}{E + 1.111612967B - \varepsilon_\alpha} + \frac{0.02063607720}{E + 2.444759339B - \varepsilon_\alpha} + \frac{0.02063607720}{E - 2.444759339B - \varepsilon_\alpha} \right] \quad (3)
 \end{aligned}$$

где
$$\varepsilon_\alpha = \begin{cases} \varepsilon_1 = \varepsilon \\ \varepsilon_2 = \varepsilon + U \end{cases} \quad (4)$$

Энергетический спектр соответствует полюсам функций Грина. Верхняя хаббардовская подзона будет состоять из двадцати выражений, находящихся в знаменателе антикоммутирующей функции Грина со значением параметра энергии электрона: $\varepsilon_\alpha = \varepsilon + U$, где $\varepsilon = -3,5eV$, $U = 7eV$.

Соответственно, нижняя хаббардовская подзона будет формироваться следующими двадцатью уровнями энергии со значением параметра энергии электрона: $\varepsilon_\alpha = \varepsilon$, где $\varepsilon = -3,5eV$.

Числитель в антикоммутирующей функции Грина, свидетельствует о вероятности нахождения электрона на том или ином уровне энергии. Сумма всех вероятностей нахождения электрона на всех уровнях энергии равняется 1 – вероятности достоверного события.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для построения энергетического спектра необходимо задать значения собственной энергии электрона, интеграла перескока электрона с узла на

соседний узел и кулоновского потенциала, возьмем их равными $\varepsilon = -3,5eV$, $B = -1eV$, $U = 7eV$.

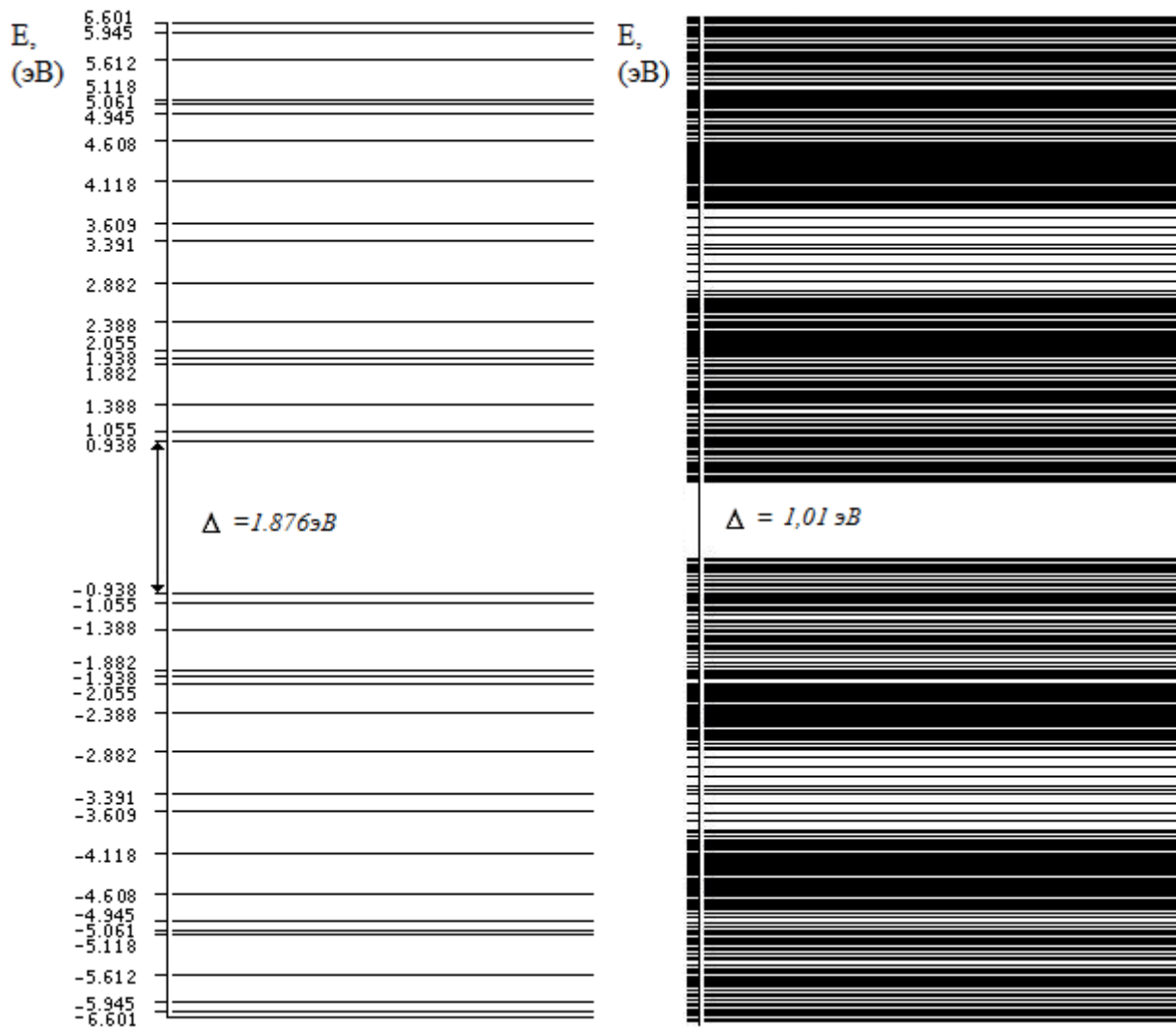


Рис. 3. Энергетический спектр наноструктуры с 36 атомами (слева) и 468 атомами (справа) при значениях параметров $\varepsilon = -3,5eV$, $B = -1eV$, $U = 7eV$.

Из анализа энергетических спектров (рис. 3) можно сделать вывод, что с увеличением количества узлов в структуре одностенной углеродной нанотрубки ширина зоны запрещенных энергий уменьшается, если в нанотрубке с 36 атомами ширина «запрещённой» зоны $\Delta = 1,876 \text{ эВ}$, то для структуры с 468 атомами нанотрубка имеет ширину «запрещенной» зоны $\Delta = 1,01 \text{ эВ}$ (рис. 4).

Соответственно, при уменьшении ширины «запрещенной» зоны происходит увеличение ширин верхней и нижней хаббардовской подзон. При этом улучшаются проводящие свойства нанотрубки, нанотрубка хиральности (9,0) является полупроводником с узкой шириной «запрещенной» зоны [9, 10].

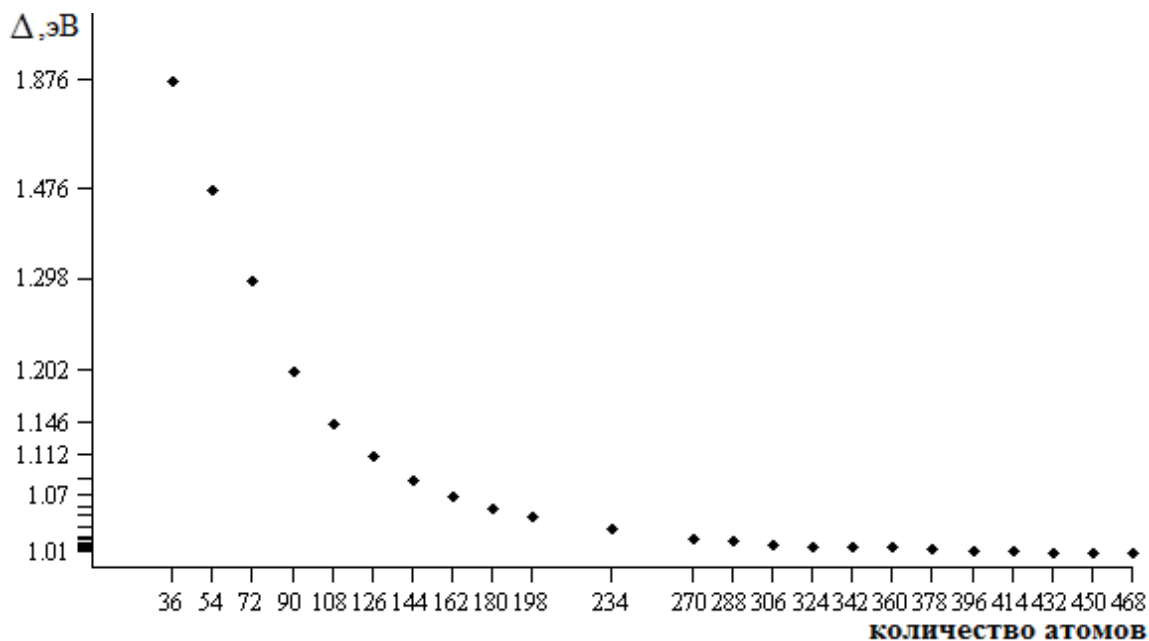


Рис. 4. График зависимости ширины «запрещенной» зоны между верхней и нижней хаббардовской подзонами при увеличении числа атомов в структуре нанотрубки.

Из вида графика, представленного на следующем рис. 5, следует, что ширина верхней хаббардовской подзоны увеличивается при росте нанотрубки, а энергия при увеличении узлов в структуре, стремится к некому постоянному значению верхней подзоны и нижней соответственно. Аналогичная картина наблюдается и на рис. 4, где ширина «запрещенной» зоны тоже стремится к определенному постоянному значению энергии.

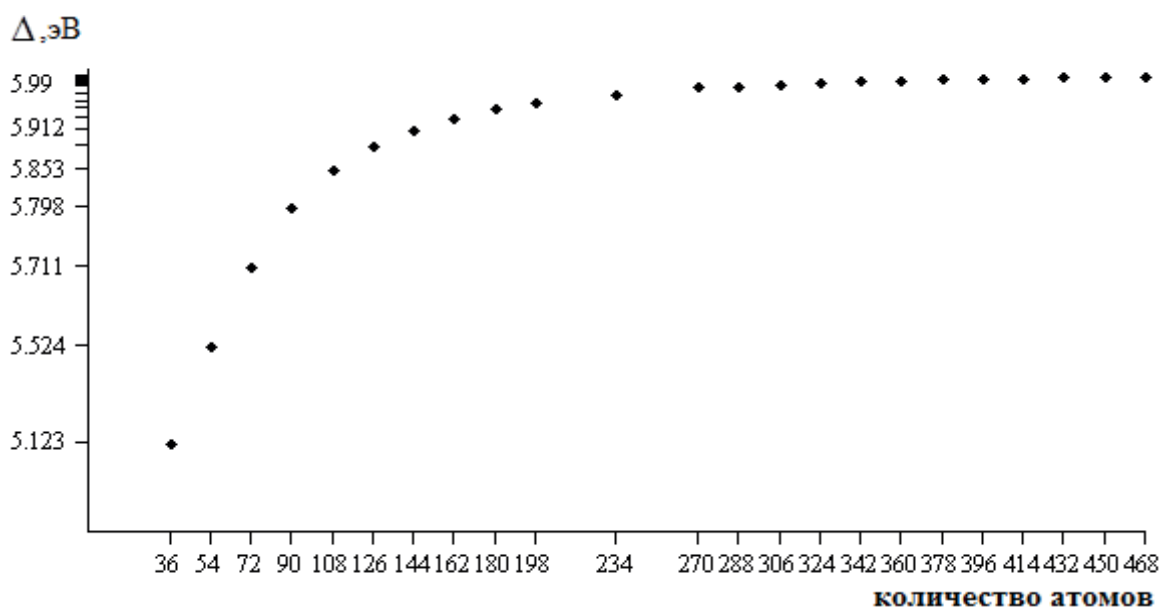
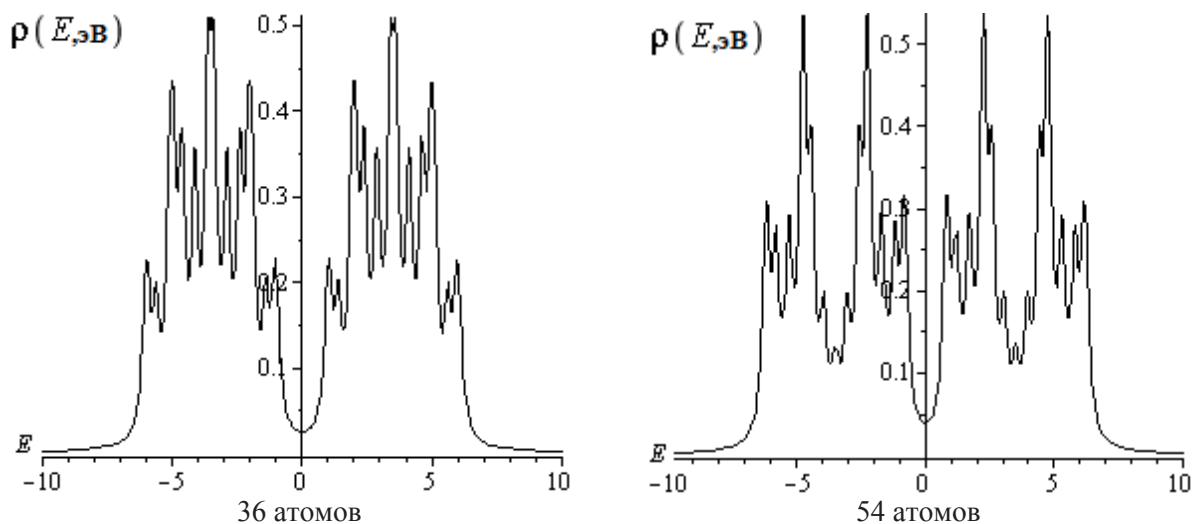
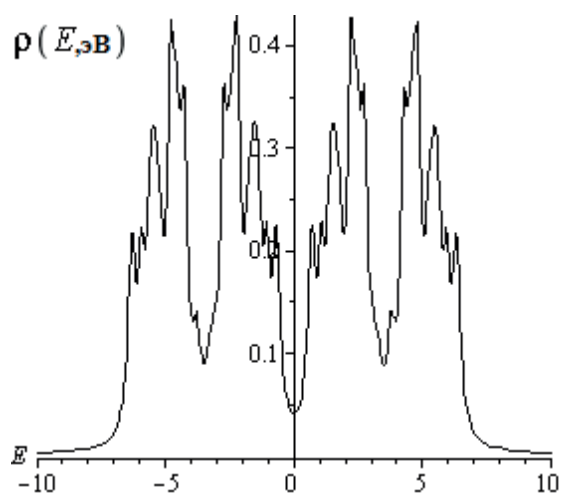


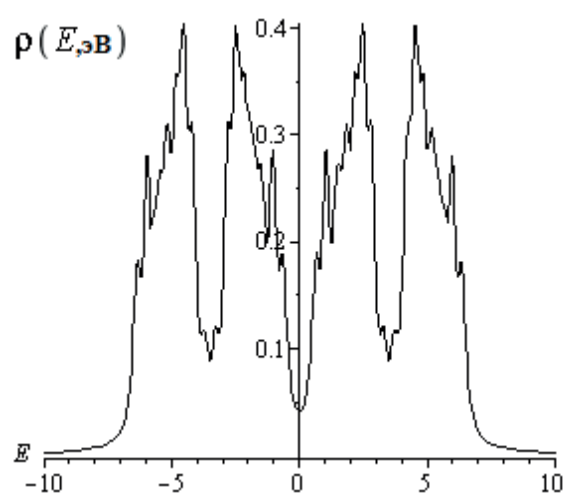
Рис. 5. График зависимости ширины верхней и нижней хаббардовских подзон с увеличением числа атомов в структуре.

Для нанотрубки хиральности (9,0) получены плотности электронного состояния (рис. 6), для нанотрубок, содержащих конечное число атомов от 36 атомов до 468 атомов углерода и нанотрубки бесконечной длины. С увеличением количества узлов от центрального атома графики постепенно сглаживаются.

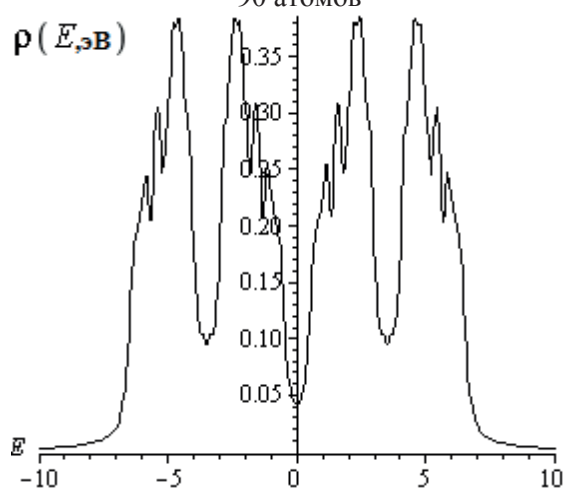




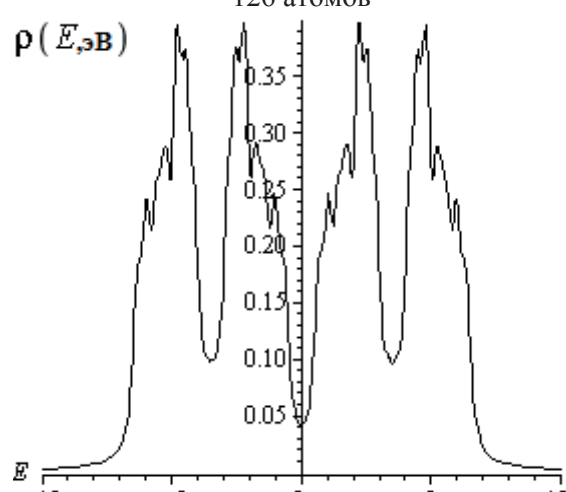
90 атомов



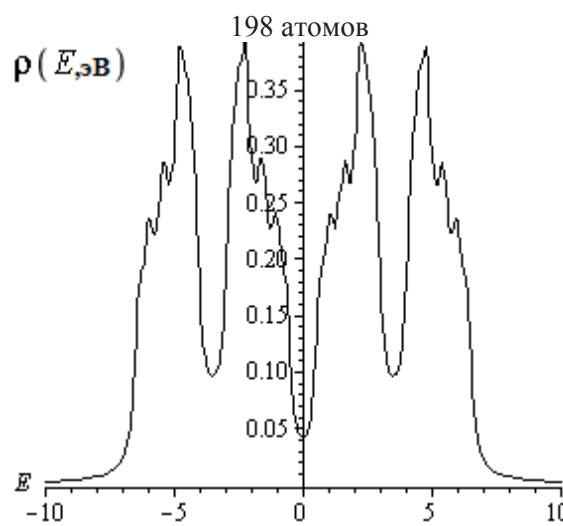
126 атомов



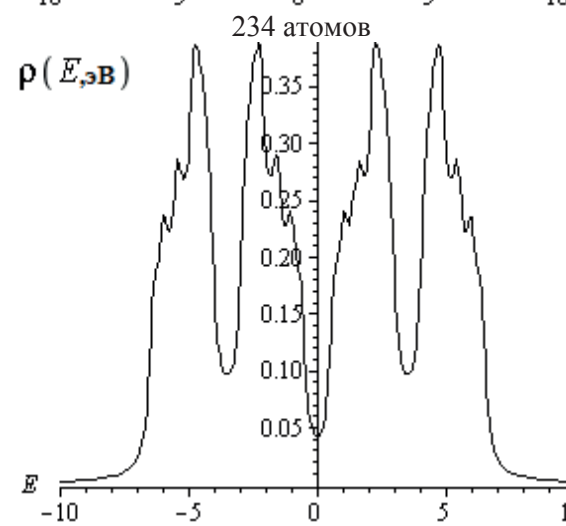
198 атомов



234 атомов



378 атомов



450 атомов

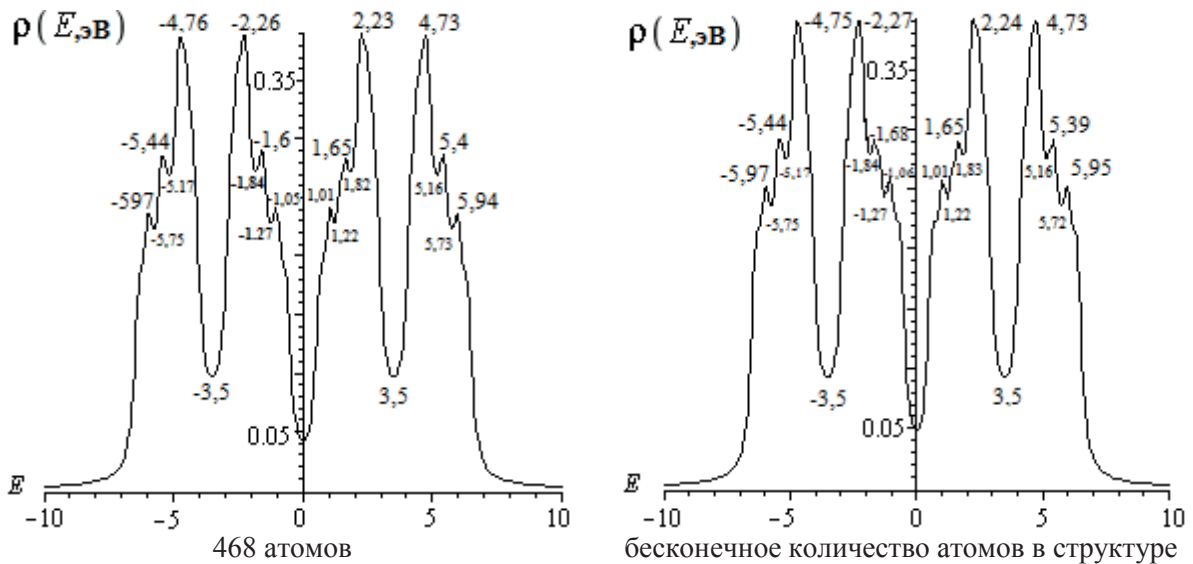


Рис. 6. Плотность электронного состояния в произвольных единицах как функция энергии для 36, 54, 90, 126, 198, 270, 378, 450, и 468 атомов в нанотрубке хиральности (9,0) и бесконечного количества атомов при значениях параметров модели Хаббарда $\varepsilon = -3,5 eV$, $B = -1 eV$, $U = 7 eV$.

Если сравнить графики для плотностей электронных состояний при переходе от 450 атомов к 468 атомам в системе плотность электронного состояния практически не изменяется, это, очевидно, свидетельствует о том, что на поведение центрального атома периферийные атомы перестают оказывать какое-либо действие. Центральный атом нанотрубки ведет себя как атом углерода в нанотрубке бесконечной длины. Для того чтобы убедиться в этом, мы проанализировали графики плотностей электронного состояния для центрального атома в нанотрубке с 468 атомами и бесконечной нанотрубке можно сделать вывод, что плотности электронных состояний имеют одинаковый вид, положения сингулярностей Ван Хофа с большой степенью точности совпадают. Таким образом, мы определили длину нанотрубки, когда центральный атом характеризуется теми же физико-химическими свойствами, что и произвольный атом бесконечной нанотрубки. Поэтому при исследовании электронных свойств углеродных нанотрубок можно использовать и узельное и волновое представления, эти исследования будут органично дополнять друг друга.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Iijima S.* /Helical microtubules of graphitic carbon / Nature (London).1991. №354. P.56.
2. *Kroto H.W., Allafand A.W., Balm. S.P.* /C₆₀ Buckminsterfullerene./ Chem. Rev. 1991. 91. P.2113.
3. *Iijima S. Ichihashi T., Ando Y.* /Pentagons, heptagons and negative curvature in graphite microtubule growth / Nature (London). 1992. 356. P.776.
4. *Iijima S. Ajayan P.M., Ichihashi T.* /Growth model for carbon NT/ Phys. Rev. Lett. 1992. 69. 21. P.3100.
5. *Захаров А.В.* /Исследование углеродной зигзагообразной нанотрубки хиральности (9,0)/ Студенческая наука и XXI век. 2017. 14. №1. С.41–43.
6. *Сысоев И.В. Пересланцева Н.С., Дубровский О.И.* /Электронная структура одностенных углеродных нанотрубок типа зигзаг/ Конденсированные среды и межфазные границы. 2014. Т.163. №3. С.318—322.
7. *Hubbard J.* /Electron correlations in narrow energy bands/ Proc. Roy. Soc. A. 1963. 276. P.238.
8. *Mironov G.I.* /Nanosystems in the Static-Function Approximation Hubbard Model/ Physics of the Solid State. 2006. 48. №7. P.1299-1306.
9. *Захаров А.В., Миронов Г.И.* /Теоретическое исследование электронной структуры углеродных нанотрубок типа зигзаг по мере роста нанотрубок/ Физика и ее преподавание в школе XV Емельяновские чтения. 2017. С.74–80.
10. *Захаров А.В., Миронов Г.И.* /Теоретическое исследование электронной структуры углеродных нанотрубок типа зигзаг (9,0) в Модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Молодой исследователь от идеи к проекту. 2017. С.11–16.