

УДК 538.22

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК (8,0) В
МОДЕЛИ ХАББАРДА**

Миронов Г.И., Семенов А.Д.

ФГБОУ ВО «Марийский государственный университет», г. Йошкар-Ола

e-mail: richman-aleks@mail.ru

В работе проведено теоретическое исследование энергетического спектра золотых нанотрубок (8,0) по мере их роста в рамках модели Хаббарда, вычисление энергии основного состояния. Проведен сравнительный анализ характеристик золотых нанотрубок, содержащих различное число атомов золота. Приведены антикоммутирующие функции Грина и построены энергетические уровни.

Выраженный интерес к теоретическому исследованию нанотрубок, состоящих из атомов золота Au, вызван возможностью их применения в лечении раковых заболеваний, в качестве контактов между элементами молекулярной электроники. Физико-химические свойства золота уникальны, а наноструктура – своеобразна [1]. Отметим, что их свойства сильно отличаются от свойств объемных образцов металла: так, если обычное золото является диамагнетиком, то наночастицы золота ведут себя как ферромагнитные частицы. Наночастицы золота, введенные в организм больного, «прилипают» к опухолевым клеткам, поэтому место локализации опухолевых клеток можно легко обнаружить с помощью современных средств диагностики.

С целью предсказания физико-химических свойств золотых нанотрубок в работе предложено использовать модель Хаббарда [2].

Модель Хаббарда – это приближение, которое используется в физике твёрдого тела и в нанотехнологии для описания перехода между проводя-

щим и диэлектрическим состояниями. Является простейшей моделью, описывающей взаимодействие частиц в решётке или наночастицах. Её гамильтониан кроме собственной энергии электронов, содержит два слагаемые: кинетический член, соответствующий туннелированию частиц между узлами решётки, и слагаемое, описывающее кулоновское отталкивание двух электронов, оказавшихся на одном узле нанотрубки:

$$H = \varepsilon \sum_i^N (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_f^N (a_{f\sigma}^+ a_{f'\sigma} + a_{f'\sigma} a_{f\sigma}^+) + U \sum_i^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

где ε – собственная энергия d-электронов; B – интеграл перескока электрона с узла на соседний узел; U – кулоновский потенциал или энергия кулоновского отталкивания двух электронов на одном узле нанотрубки; $a_{f\sigma}^+ a_{f'\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона на узле f с проекцией спина σ ; f – индекс, нумерует узлы кристаллической решетки, σ – проекция спина (\uparrow или \downarrow).

Рассмотрим модель золотой нанотрубки (8,0), содержащей 24 атома Au, а затем для 40, 56, 72, 88, 112, 184 атомов Au [3, 4]. Энергетический спектр определяется полюсами функций Грина. При построении энергетического спектра будем исходить из следующих значений параметров рассматриваемой модели для атомов золота: интеграл перескока $B=-1$ эВ, а кулоновский потенциал $U=8,8$ эВ.

Энергетический спектр для нанотрубки из 24 атомов золота, обозначим ее как Au(24), состоит из двух подзон. Нижние 18 уровней «валентной» зоны называют нижней хаббардовской подзоной. Верхние 18 уровней зоны «проводимости» носят название верхней хаббардовской подзоны. Ширины нижней и нижней хаббардовской подзон одинаковы и равны при указанных значениях параметров $D=7,325$ эВ. Ширина запрещенной зоны между подзонами равна $\Delta=1,475$ эВ. В энергетическом спектре Au(40)

(рис. 1) ширина нижней и верхней Хаббардовской подзоны $D=8,204$ эВ. Ширина запрещенной зоны между подзонами равняется $\Delta=0,596$ эВ.

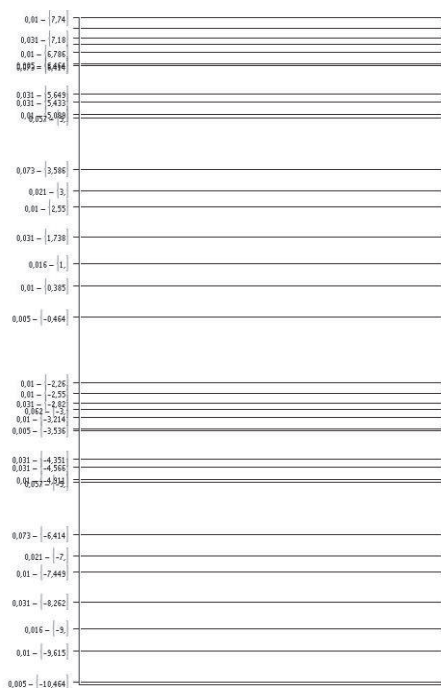


Рис. 1. Энергетический спектр 40 атомов золота.

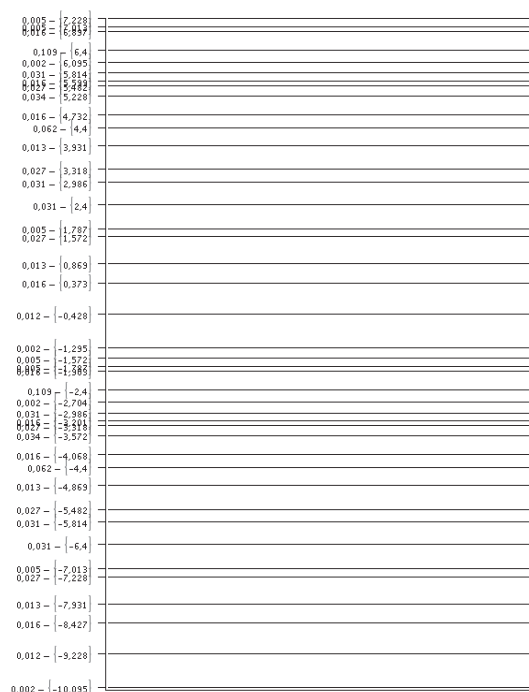


Рис. 2. Энергетический спектр 56 атомов золота.

В энергетическом спектре Au(56) (рис. 2) ширина нижней и верхней хаббардовских подзон $D=8,523$ эВ. Ширина запрещенной зоны между подзонами равняется $\Delta=0,277$ эВ. В энергетическом спектре Au(144) ширина нижней и верхней хаббардовской подзон $D=8,807$ эВ. Система находится в металлическом состоянии.

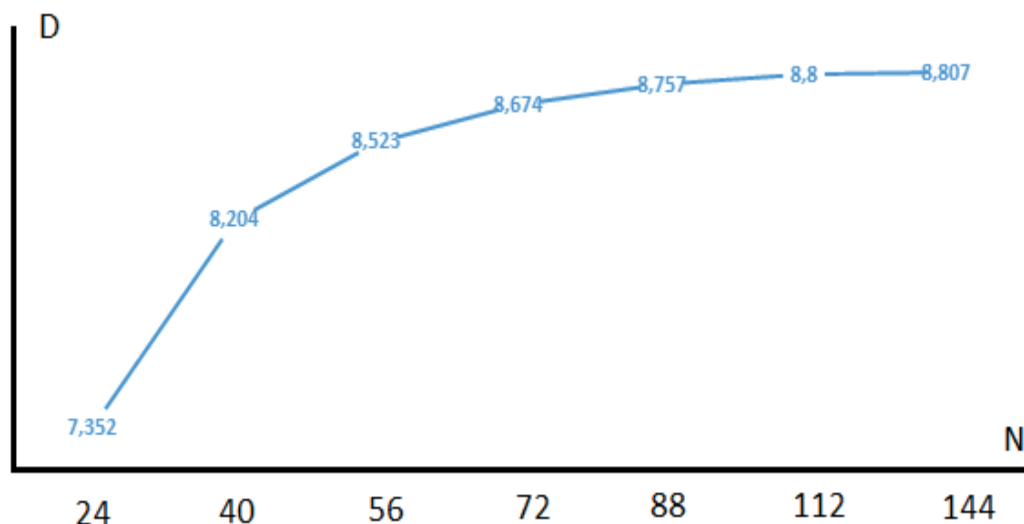


Рис. 3. График зависимости ширины хаббардовской подзоны от числа атомов в золотой нанотрубке, при интеграле перескока $V=-1$ эВ и кулоновском потенциале $U=8,8$ эВ.

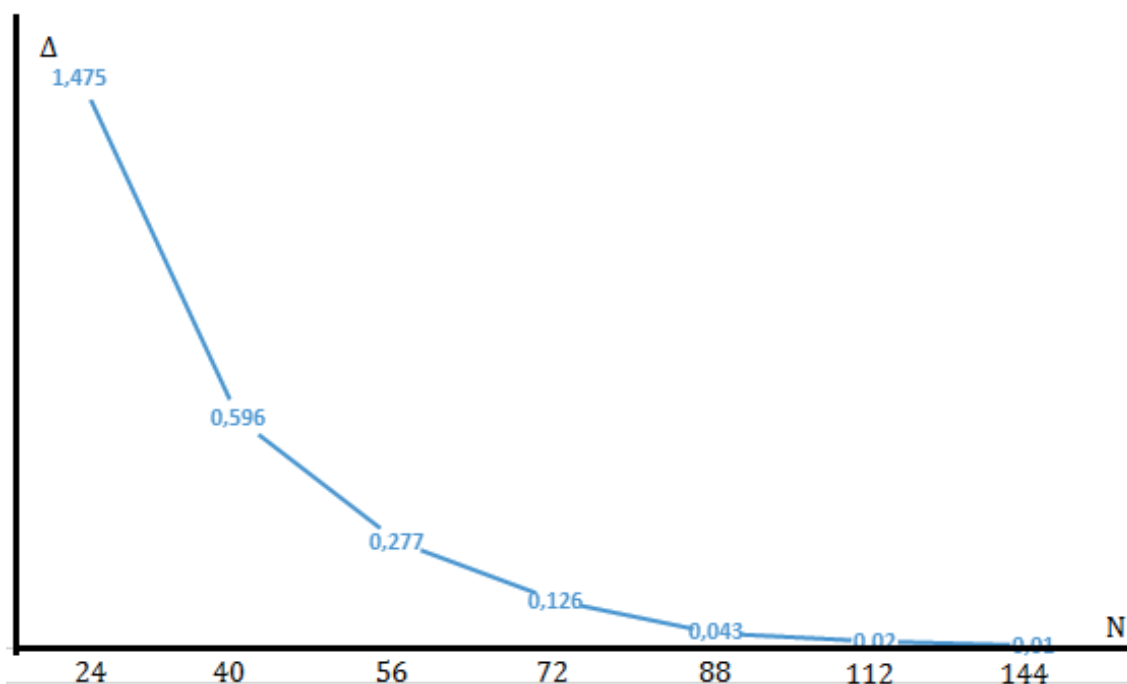


Рис. 4. График зависимости ширины запрещенной зоны от числа атомов в золотой нанотрубке, при интеграле перескока $V=-1$ эВ и кулоновском потенциале $U=8.8$ эВ.

Решения были получены в рамках приближения статических флуктуаций. При небольшом количестве атомов в [4] было показано, что одностенная золотая нанотрубка (SWGН) ведет себя как полупроводник, при большем количестве атомов, как показывает наша работа, нанотрубка по-

казывает себя как металл, т.е. увеличение числа атомов ведет как к увеличению числа уровней энергии в спектре, так и увеличению ширины валентной зоны и зоны проводимости. Ширина щели между верхней и нижней хаббардовскими подзонами заметно сужается от Au(24) к Au(144) по мере увеличения количества атомов в золотой нанотрубке (8,0). Определить значение собственной энергии электронов помогает решение уравнений на химический потенциал (рис. 5) в соответствии с количеством узлов в системе. Чем больше электронов, тем больше и собственная энергия электронов, при одинаковом числе узлов Au.

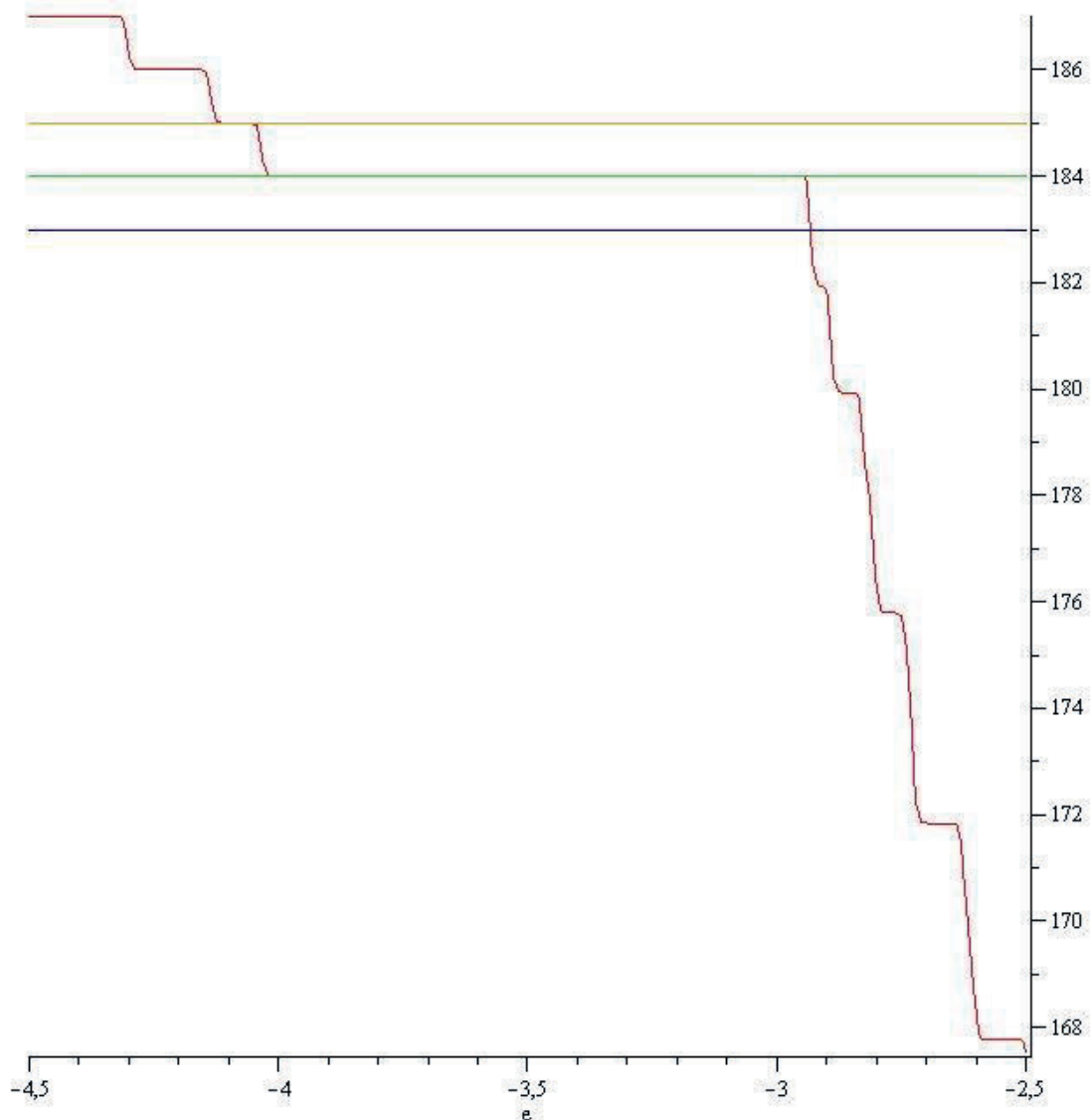


Рис. 5. Химический потенциал одностенной золотой нанотрубки при 184 атомах золота.

На рисунке 6 показана зависимость корреляционной функции (термодинамического среднего), характеризующей вероятность обнаружения на одном узле нанотрубки двух электронов с противоположно ориентированными проекциями спинов при 184 атомах золота в нанотрубке. Нижний график соответствует 183 электронам при числе узлов 184, видно, что вероятность обнаружения пары электронов меньше. График, обозначенный точками, соответствует 184 электронам на 184 узлах, этот график занимает промежуточное положение. Верхний график характеризует 185 электронов на 184 узлах. Наличие одного «лишнего» электрона приводит к увеличению вероятности обнаружения двух электронов на одном узле нанотрубки.

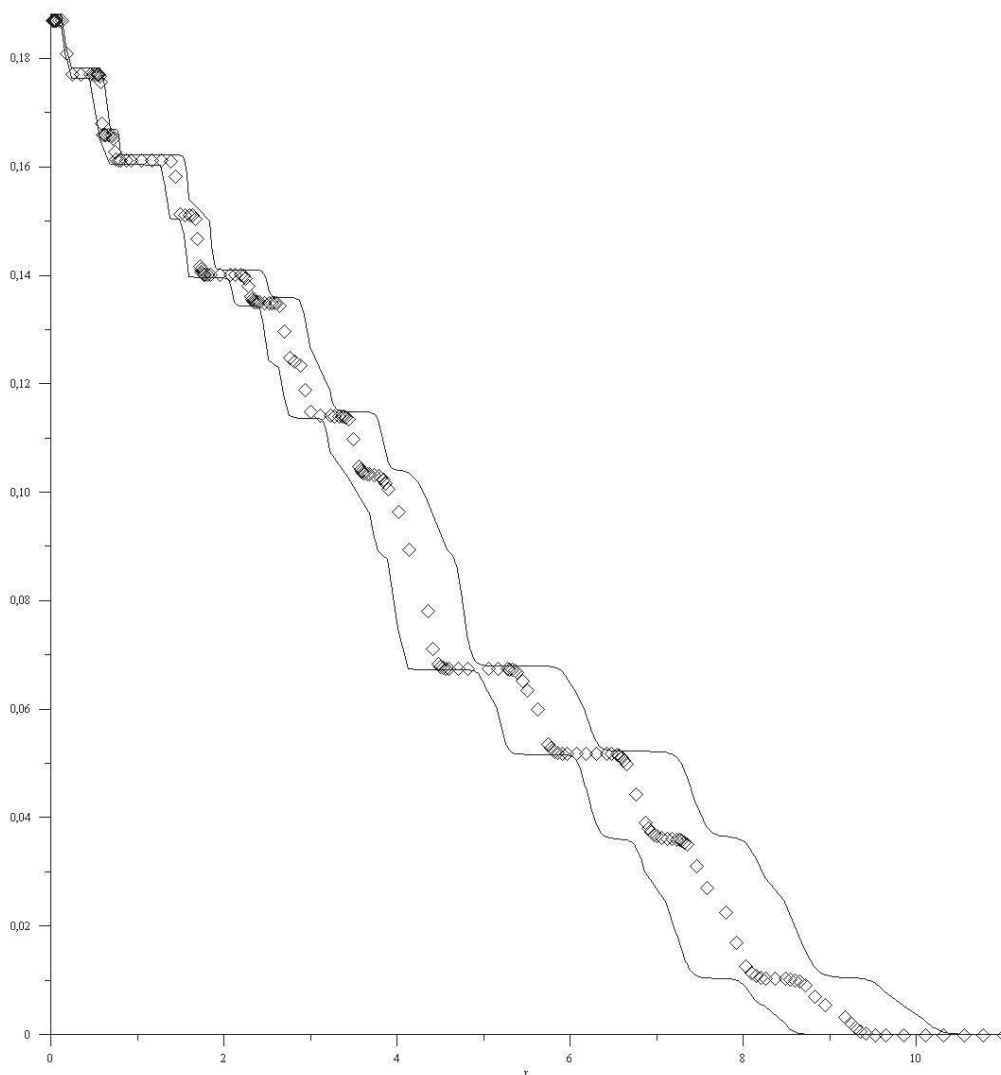


Рис. 6. Корреляционная функция, характеризующая вероятность обнаружения на одном узле нанотрубки двух электронов с противоположно ориентированными проекциями.

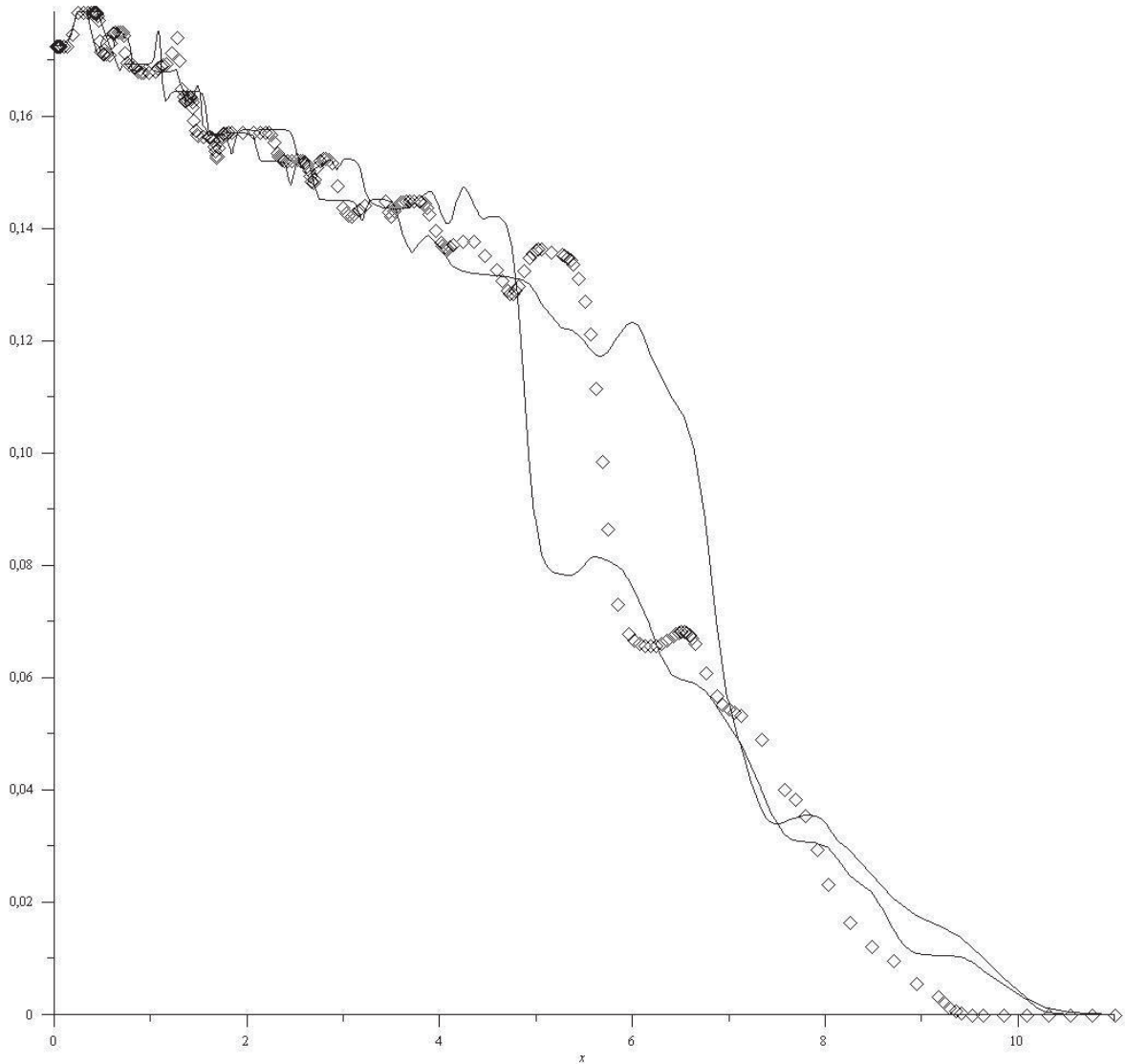


Рис. 7. Корреляционная функция, характеризующая вероятность перескока с одного узла на соседний.

На рис. 7 корреляционная функция, характеризующая вероятность перескока с одного узла на соседний в случае 184 электронов на 184 узлах, имеет минимальное значение по сравнению с другими случаями. В случае 183 электронов по сравнению с 185 электронами вероятность перескока больше, потому что меньше вероятность занять узел, где уже есть электрон, испытав при этом кулоновское отталкивание.

Вычислены для Au(40)-Au(56)-Au(72)-Au(88)-Au(112)-Au(184) энергии основного состояния.

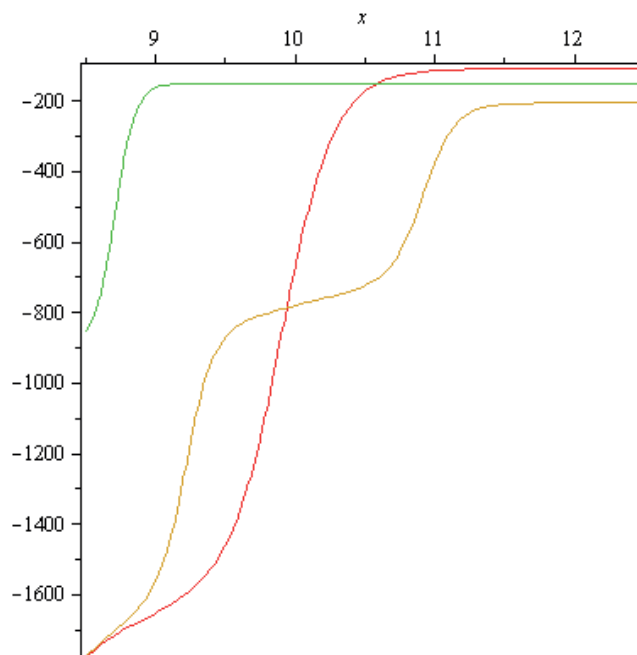


Рис. 8. Энергия основного состояния для Au(40), при собственной энергии электрона $\varepsilon_1=-2,76$ эВ, $\varepsilon_2=-3,73$ эВ, $\varepsilon_3=-5,00$ эВ, интеграле перескока $V=-U/x$ эВ и кулоновском потенциале $U=10$ эВ.

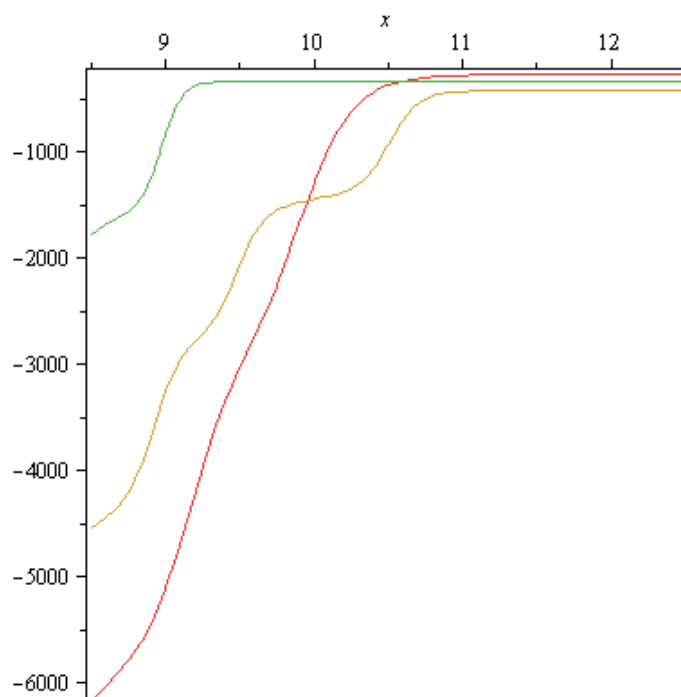


Рис. 9. Энергия основного состояния для Au(72), при собственной энергии электрона $\varepsilon_1=-2,89$ эВ, $\varepsilon_2=-3,53$ эВ, $\varepsilon_3=-4,48$ эВ, интеграле перескока $V=-U/x$ эВ и кулоновском потенциале $U=10$ эВ.

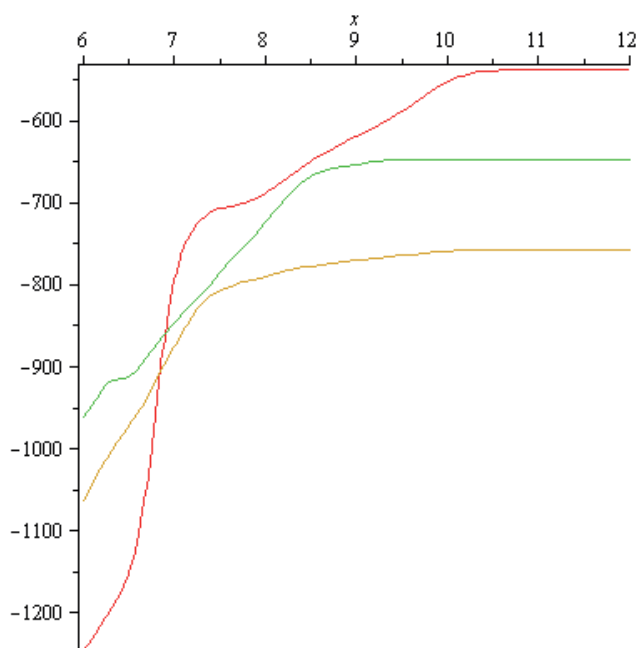


Рис. 10. Энергия основного состояния для Au(184), при собственной энергии электрона $\epsilon_1=-2,94$ эВ, $\epsilon_2=-3,52$ эВ, $\epsilon_3=-4,09$ эВ, интеграле перескока $V=-U/x$ эВ и кулоновском потенциале $U=10$ эВ.

На представленных рисунках три разные линии, верхняя линия, расположенная ближе к оси X, несет в себе информацию отсутствия одного электрона в золотой нанотрубке (положительно заряженная золотая нанотрубка). Нижняя линия, расположенная дальше от оси X - наоборот, когда у нее появился один электрон (отрицательно заряженная нанотрубка). Линия, расположенная в середине, характеризует нейтральное состояние. Энергия ионизации уменьшается с ростом нанотрубки, а энергия сродства, наоборот, увеличивается.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Yarzhemsky V.G., Battocchio C.*//*Rus. J. Inorg. Chem.* 2011. V.56, P.947.
2. *Hubbard J.*// *Proc. Roy. Soc. A.* 1963. V. 276. P.238.
3. *Миронов Г.И., Филлипова Е.Р.*// *ФТТ.* 2012. Т.54, С.1600.
4. *Миронов Г.И.*// *Журнал неорган. химии.* 2018. Т.63. С.74.