

УДК 538.22

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ
ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ
НАНОТРУБОК ПО МЕРЕ РОСТА НАНОТРУБОК**

Григорьева А.В., Миронов Г.И.

*ФГБОУ ВО «Марийский государственный университет», г. Йошкар-Ола
e-mail: alevtina-grigoreva1305@mail.ru*

Целью работы является исследование изменения электронной структуры нанотрубок типа armchair (6,6) и zigzag(6,0); определение графического вида уравнения на химический потенциал; вычисление энергии основного состояния для одностенных углеродных нанотрубок.

ВВЕДЕНИЕ

Работа посвящена исследованию изменения электронной структуры нанотрубок типа armchair (6,6) и zigzag(6,0), содержащих различное число атомов; определение графического вида уравнения на химический потенциал; вычисление энергии основного состояния для одностенных углеродных нанотрубок. Для этого была вычислена антикоммутаторная функция Грина для НТ и по полюсам функции Грина построены энергетические спектры.

При построении теоретической модели мы исходили из предположения, что в нанотрубках в результате s-p гибридизации определяющую роль играют π -электроны, поскольку энергия σ -электронов лежит ниже энергии π -электронов [1]. Совокупность π -электронов представляет собой сильно-коррелированную систему, для описания которой можно использовать модель Хаббарда [2]. Вычисления проводятся в приближении статических флуктуаций [3-5].

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

где ε – собственная энергия электронов в атоме; B – интеграл переноса; U – потенциальная энергия кулоновского взаимодействия двух электронов на одном атоме; $a_{f\sigma}^+$, $a_{f\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона; f – индекс, описывающий номер узла углеродной нанотрубки, σ – проекция спина (\uparrow или \downarrow).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Одностенная углеродная нанотрубка типа armchair (6,6)

В спектре для armchair (6,6) в случае 36 атомов показаны нижние уровни, их 14, образующие нижнюю хаббардовскую подзону и верхние 14 уровней, образующие верхнюю хаббардовскую подзону. Ширины D нижней и верхней хаббардовской подзон одинаковы и равны 4,828 eV. Ширина запрещенной зоны Δ между подзонами равна 2,172 eV. В энергетическом спектре нанотрубки в случае 60 атомов ширина нижней и верхней хаббардовской подзон $D=5,464$ eV. Ширина запрещенной зоны между подзонами принимает значение $\Delta=1,536$ eV. В энергетическом спектре для armchair (6,6), содержащего 84 атома ширина нижней и верхней хаббардовской подзон $D=5,696$ eV. Ширина запрещенной зоны между подзонами по сравнению с предыдущими случаями уменьшается и равна $\Delta=1,304$ eV. В энергетическом спектре для 96 атомов ширина нижней и верхней хаббардовской подзоны $D=5,758$ eV. Ширина запрещенной зоны между подзонами равняется $\Delta=1,242$ eV. Построим энергетический спектр с учетом начальных условий: собственная энергия электрона $\varepsilon = -3,5$ eV, интеграл переноса $B=-1$ eV, кулоновский потенциал $U=7$ eV.

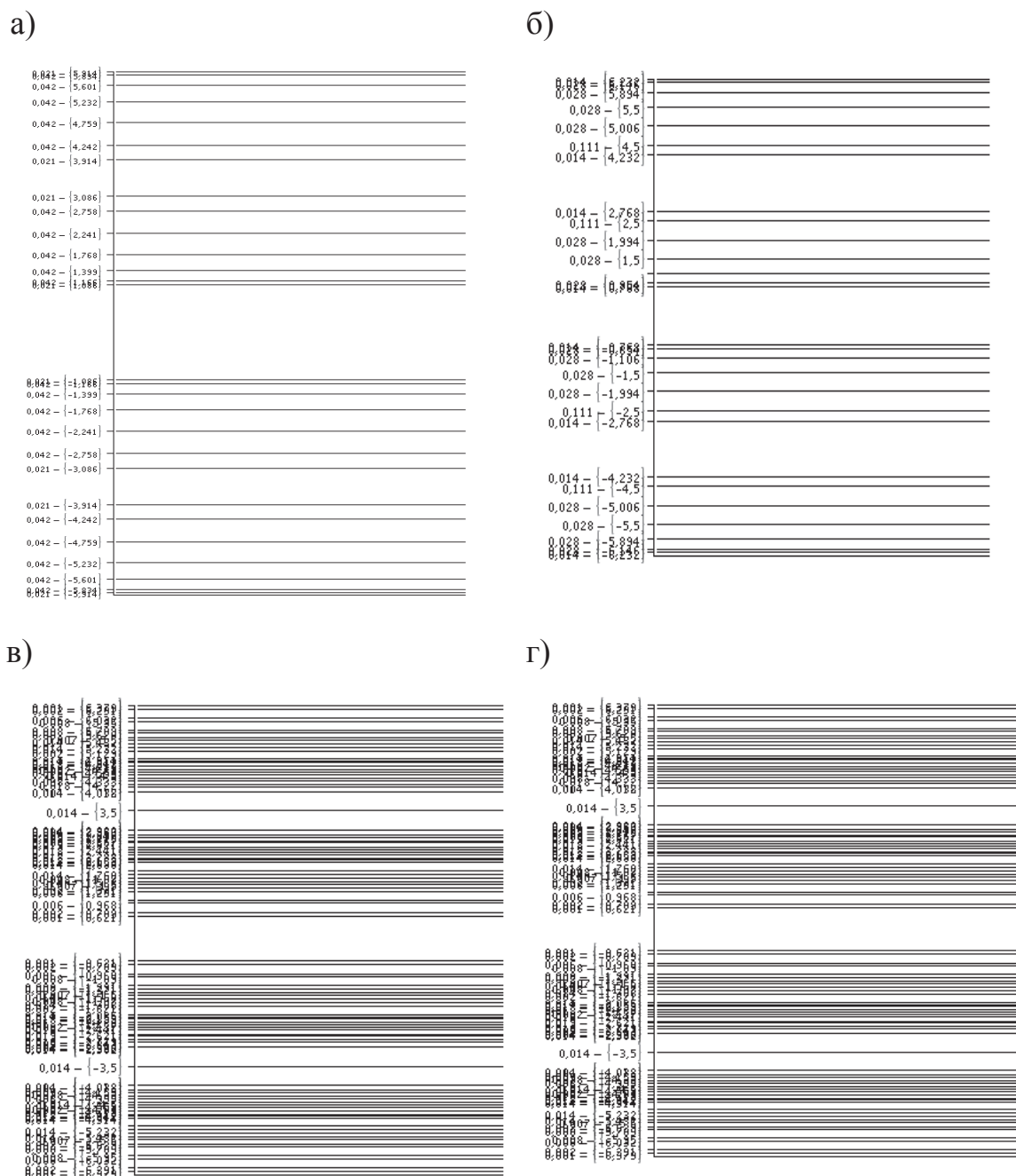


Рис. 1. Энергетический спектр одностенной углеродной нанотрубки типа кресло, содержащий: а) 36 атомов. б) 60 атомов. в) 84 атома. г) 96 атомов.

На графике (рис. 2) представлена зависимость корреляционной функции (термодинамического среднего). Нижний график соответствует 35 электронам при числе узлов 36. Получается, что вероятность обнаружения пары электронов меньше по сравнению со случаями 36 и 37 электронов на 36 узлов нанотрубки. Второй график соответствует 36 электронам на 36 узлов, этот график занимает промежуточное положение. Верхний график

характеризует 37 электронов на 36 узлов. Наличие одного «лишнего» электрона приводит к увеличению вероятности обнаружения двух электронов на одном узле НТ. Аналогичным образом получается и в случае 60, 84 и 96 атомов. По мере увеличения числа атомов в нанотрубе увеличивается отношение $x=-U/V$ – если при числе узлов 36 вероятность обнаружения на одном узле двух электронов стремится к нулю при $-U/V \geq 5$ в случае нейтральной НТ, то при 84 атомах эта же вероятность стремится к нулю – U/V порядка шести. Аналогичным образом и в случае положительно и отрицательно заряженных НТ.

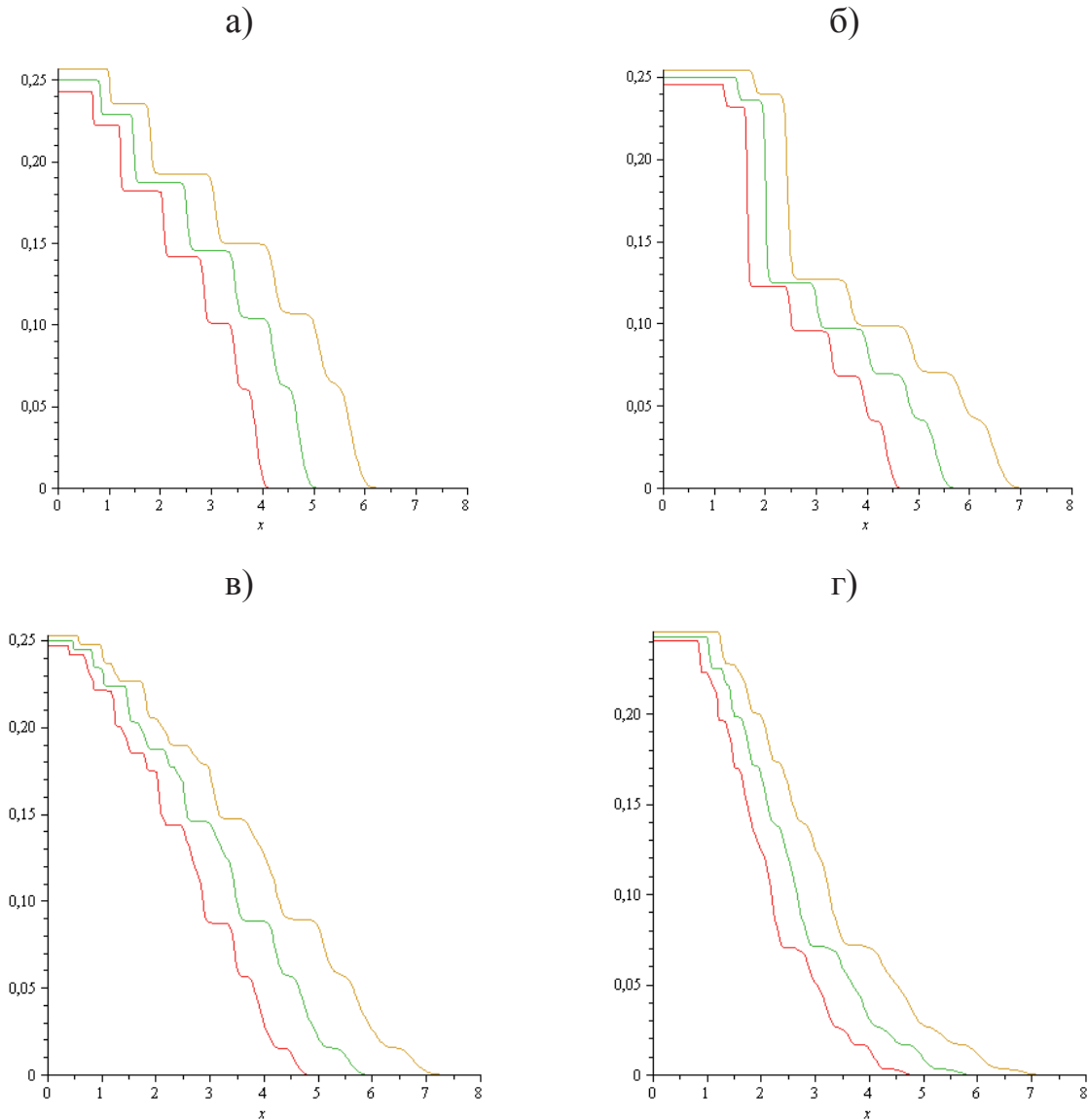


Рис. 2. Зависимость корреляционной функции (термодинамического среднего) $\langle \hat{n}_{1\uparrow} \hat{n}_{1\downarrow} \rangle$, в случае: а) 36 атомов; б) 60 атомов; в) 84 атомов; г) 96 атомов.

На рис. 3 приведена корреляционная функция $\langle \diamond \rangle$, характеризующая вероятность перескока с одного узла на соседний, в случае 36 электронов на 36 узлов, имеет минимальное значение по сравнению с другими случаями. В случае 35 электронов по сравнению с 37 электронами вероятность перескока больше, потому что меньше вероятность того, что соседний узел уже занят электроном. Аналогичным образом и в случае большего количества узлов в НТ.

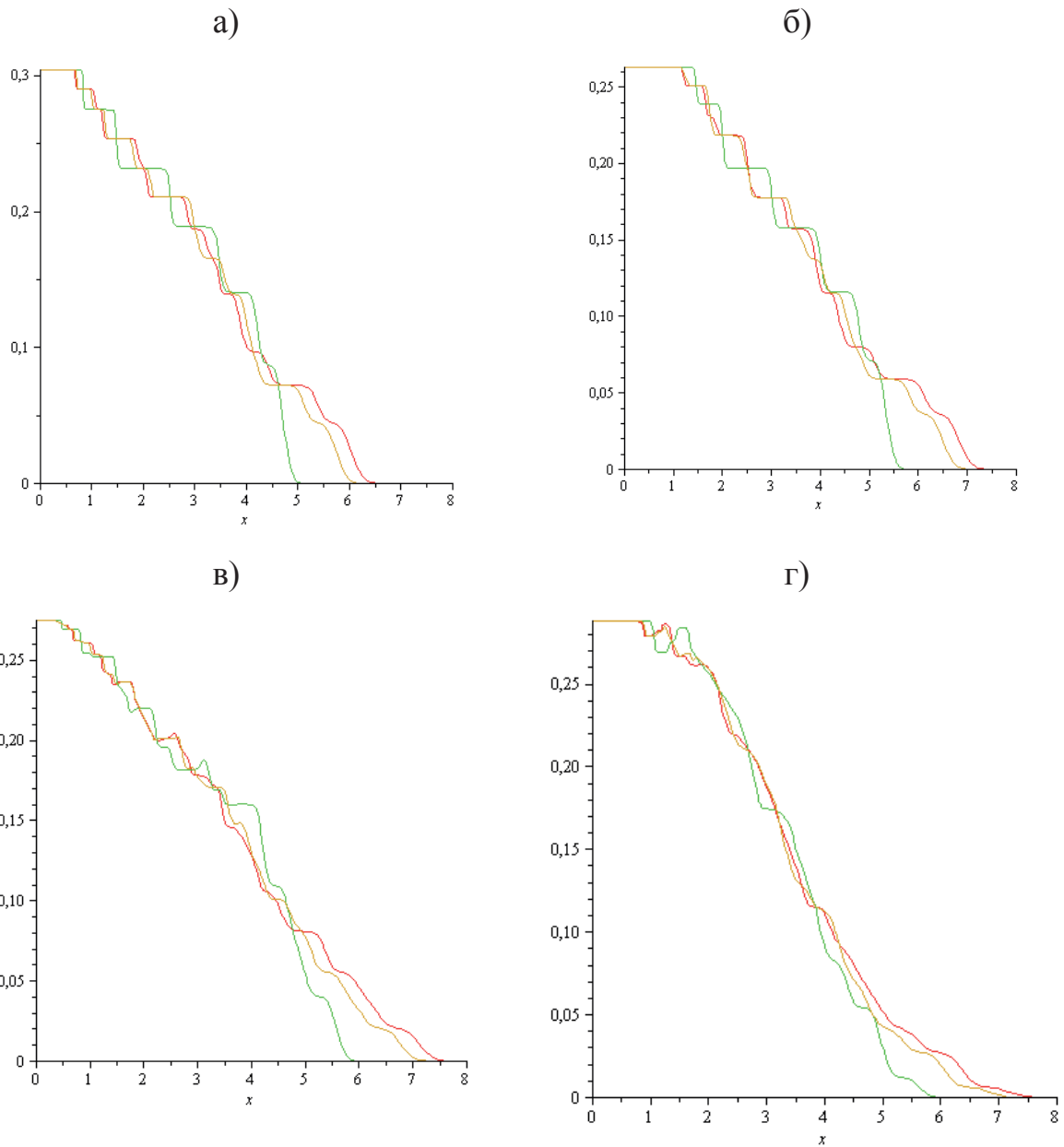


Рис. 3. Корреляционная функция $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$, характеризующая вероятность перескока с одного узла на соседний в случае: а) 36 атомов; б) 60 атомов; в) 84 атомов; г) 96 атомов.

Отметим, что химический потенциал в нашем случае равен $-\mu$ ($\mu = \epsilon - \epsilon_0$ — определяется через собственную энергию). После получения уравнения на химпотенциал для НТ, содержащей соответствующее количество атомов углерода, мы определяем химпотенциал (собственную энергию) для отрицательно или положительно заряженных НТ или нейтральной НТ. Графическое представление уравнения на химпотенциал дано на рис. 4.

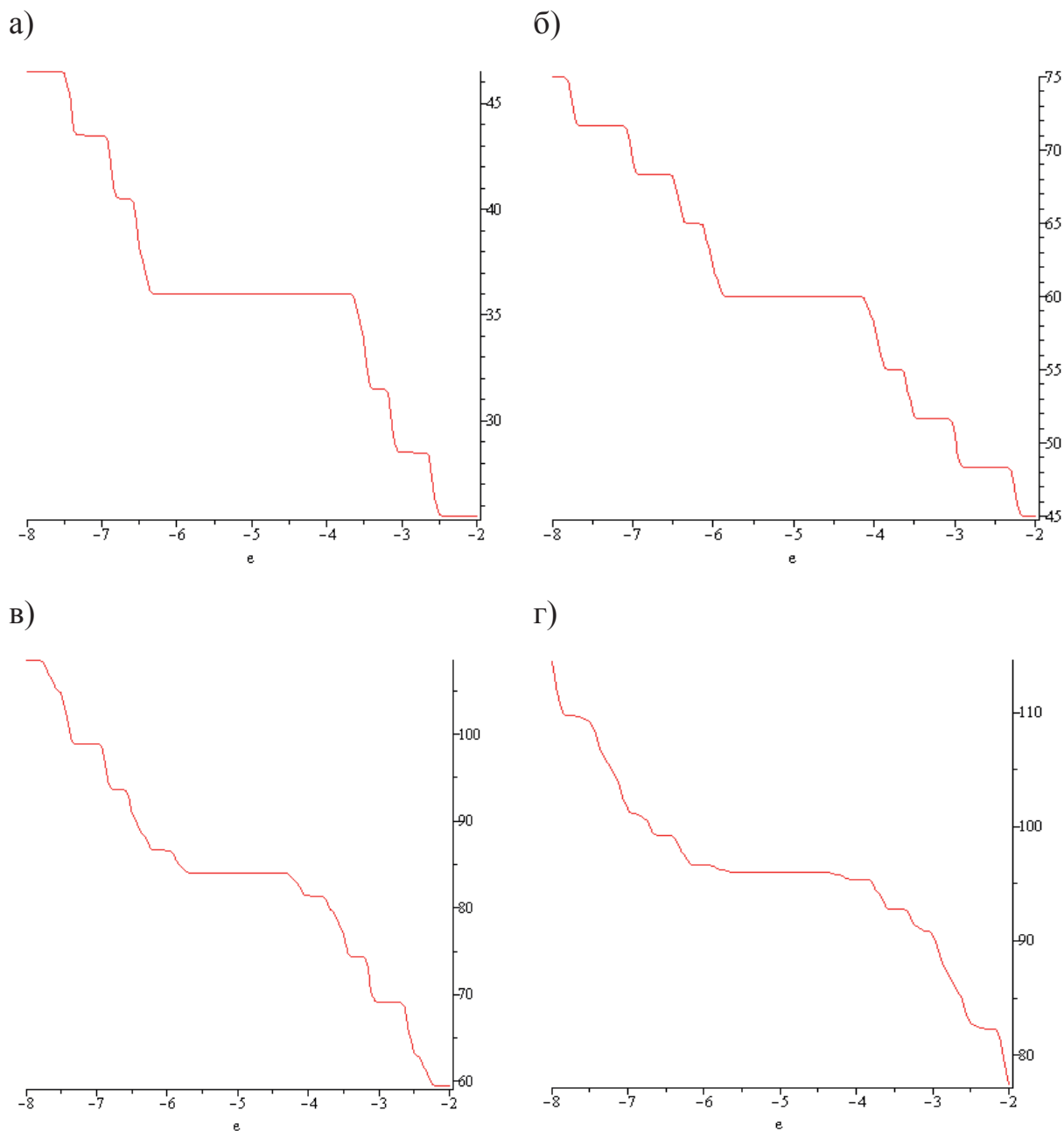


Рис. 4. Химический потенциал одностенной углеродной нанотрубки типа кресло, содержащей: а) 36 атомов; б) 60 атомов; в) 84 атомов; г) 96 атомов.

Одностенная углеродная нанотрубка типа zigzag(6,0)

Для нанотрубки типа zigzag(6,0), содержащей 24 атома: $D=5,123$ eV; $\Delta=1,876$ eV. В энергетическом спектре в случае 60 атомов ширина нижней и верхней хаббардовской подзон $D=5,798$ eV. Ширина запрещенной зоны между подзонами принимает значение $\Delta=1,202$ eV. Для 72 атомов: $D=5,889$ eV; $\Delta=1,074$ eV. Так же как и для углеродной нанотрубки типа armchair(6,6) построим энергетический спектр с учетом начальных условий: собственная энергия электрона $\varepsilon = -3,5$ eV, интеграл переноса $V=-1$ eV, кулоновский потенциал $U=7$ eV.

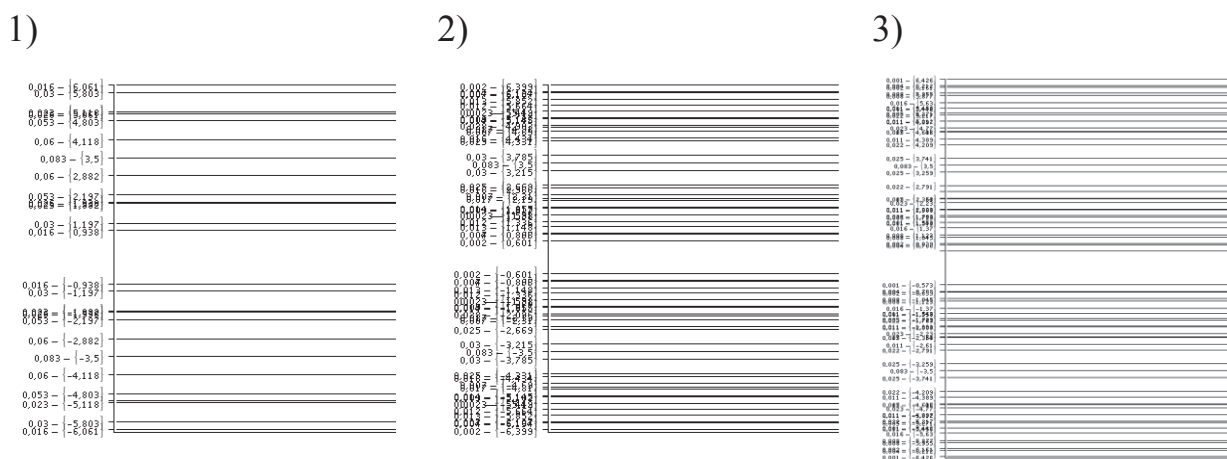


Рис. 5. Энергетический спектр в случае: 1) 24 атомов; 2) 60 атомов; 3) 72 атомов.

Так же как и для НТ типа кресло на графике (рис. 6) представлена зависимость корреляционной функции. Нижний график (красный) соответствует 23 электронам при числе узлов 24. Видно, что вероятность обнаружения пары электронов меньше. Зеленый график соответствует 24 электронам на 24 узла, этот график занимает промежуточное положение. Желтый график характеризует 25 электронов на 24 узла. В этом случае вероятность обнаружения электрона на одном узле НТ увеличивается. Для нанотрубок типа zigzag, содержащих 60 и 72 атома графики расположены аналогично (рис. 6.: 2, 3)

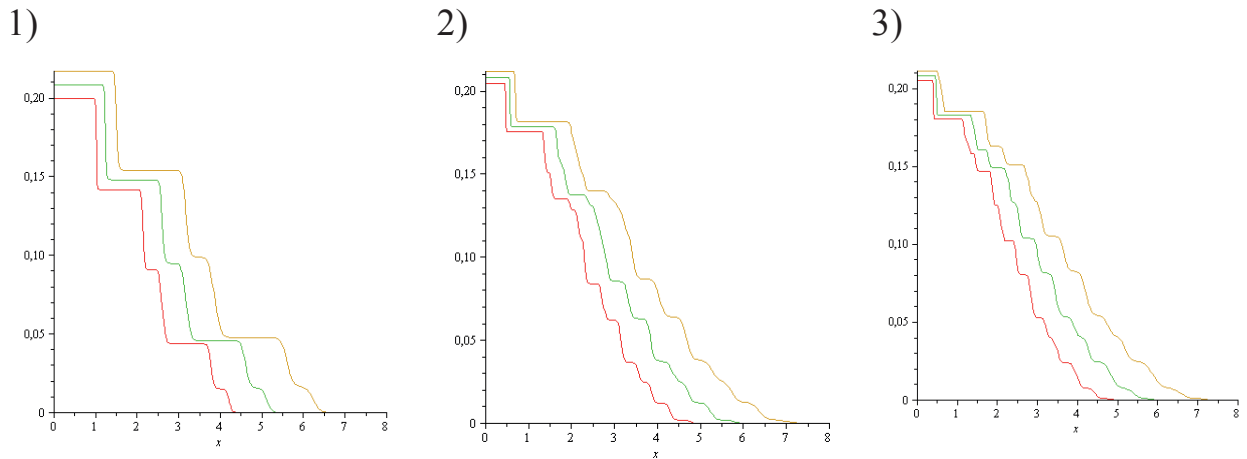


Рис. 6. Зависимость корреляционной функции (термодинамического среднего) $\langle \hat{n}_{1\uparrow} \hat{n}_{1\downarrow} \rangle$, в случае: 1) 24 атома; 2) 60 атомов; 3) 72 атома.

На рис. 7 по сравнению с другими случаями корреляционная функция, характеризующая вероятность перескока с одного узла на соседний в случае 24 электронов на 24 узла, имеет минимальное значение (зеленый график). В случае 23 электронов по сравнению с 25 электронами вероятность перескока больше, потому что меньше вероятность занять узел, где уже есть электрон. Так же и для нанотрубок типа zigzag, содержащих 60 и 72 атома графики расположены аналогично (рис. 6.: 2, 3)

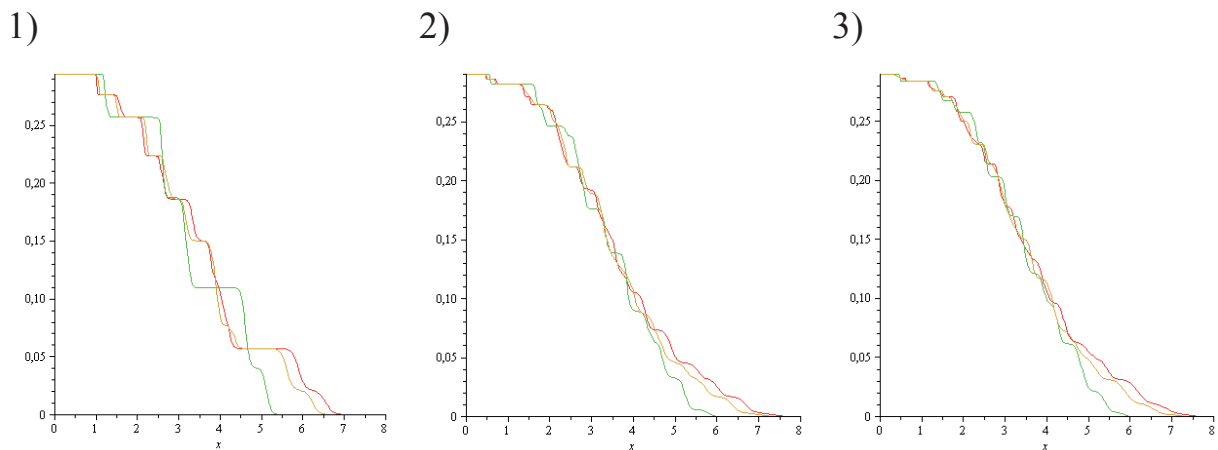


Рис. 7. Корреляционная функция $\langle a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\uparrow} \rangle$, характеризующая вероятность перескока с одного узла на соседний в случае: 1) 24 атома; 2) 60 атомов; 3) 72 атома.

Химический потенциал для НТ типа зигзаг аналогичен химическому потенциалу НТ типа кресло. Чем больше приходится электронов, тем больше собственная энергия электронов, при одинаковом числе узлов.

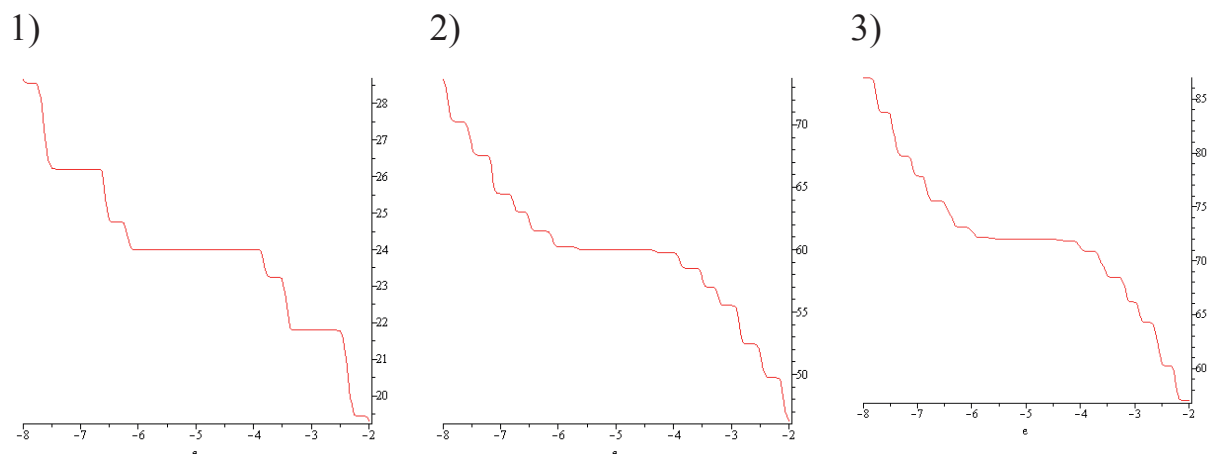


Рис. 8. Химический потенциал углеродной нанотрубки типа зигзаг, содержащий: 1) 24 атома; 2) 60 атомов; 3) 72 атома.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы исследовали энергетические спектры нанотрубок типа armchair (6,6), содержащих 36, 60, 84 и 96 атомов и нанотрубок типа zigzag(6,0), содержащих 24, 60, 72 атома; определили графический вид уравнения на химический потенциал; вычислили энергии основного состояния для одностенных углеродных нанотрубок.

Из приведенных выше решений и сравнений энергетических спектров можно сделать вывод о том, что нанотрубки типа armchair (6,6) и zigzag(6,0) ведут себя как полупроводники, т.к. ширина ЗЗЭ Δ порядка 1-2 eV.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дьячков П.Н. Электронные свойства и применение нанотрубок. Бином. Лаборатория знаний, М. 2011. 488с.
2. Hubbard, J. // Proc. of the Royal Society A. 1963. V.276. P.238.
3. Mironov G.I. // Physics of the Solid State. 2006. V.48, P.1378.
4. Mironov G.I. // J. Superconductivity and Novel Magn. 2007. V.20. P.135.
5. Миронов Г.И. // ФНТ. 2017. Т.43. С.902.