

УДК 538.22

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

Григорьева А.В., Миронов Г.И.

Марийский государственный университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 1
e-mail: alevtina-grigoreva1305@mail.ru

Работа посвящена теоретическому исследованию изменения электронной структуры одностенных углеродных нанотрубок типа «кресло» и «зигзаг» по мере роста нанотрубок. Для этого были вычислены антикоммутирующие функции Грина, построены энергетические спектры, определен графический вид уравнения на химический потенциал для углеродных нанотрубок типа *armchair* (6,6), содержащих 36, 60, 84 и 96 атомов и нанотрубок типа *zigzag* (6,0), содержащих 24, 60, 72 атома. Вычислена энергия основного состояния для углеродных нанотрубок.

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 электронов представляет собой сильнокоррелированную систему, для описания которой можно использовать модель Хаббарда [2]. Вычисления проводятся в приближении статических флуктуаций [3].

Литература

1. Дьячков П.Н. Электронные свойства и применение нанотрубок. Бином, М., 2011. 488 с.
2. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. Proceedings of the Royal Society A, 1963. V. 276. P. 238-257.
3. Миронов Г.И. Углеродные кольца нанотрубок в модели Хаббарда. Сб. статей «Структура и динамика молекулярных систем», 2007. С. 706.