

УДК 538.22

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

Захаров А.В., Миронов Г.И.

*Марийский государственный университет  
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 1  
e-mail: zahar93n@mail.ru*

Исследована углеродная нанотрубка типа зигзаг хиральности (9,0) в приближении статических флуктуаций в рамках модели Хаббарда, где гамильтониан данной системы будет иметь вид:

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

где  $\varepsilon$  – собственная энергия электронов,  $B$  – интеграл перескока электрона с одного узла на соседний узел ( $a_{f\sigma}^+$ ,  $a_{f\sigma}$  – операторы рождения и уничтожения электрона на узле  $f$  и со спином  $\sigma$ ),  $U$  – энергия кулоновского взаимодействия двух  $\pi$ -электронов на одной орбитали с разными направлениями спинов  $\sigma = \pm 1/2$ .

С помощью приближения статических флуктуаций решена модель Хаббарда для  $\pi$ -электронов. Получены аналитические выражения для Фурье-образов антикоммутирующих функций Грина. Построен энергетический спектр, показано как с увеличением количества атомов изменяется вид спектра элементарных возбуждений.

Получено аналитическое выражение и построены графики для энергий основного состояния, химического потенциала, плотности электронных состояний для  $\pi$ -электронов, показано, как происходит изменение вида представленных графиков по мере роста одностенной углеродной нанотрубки.