

УДК 538.915

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК, ЭНЕРГИИ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ

Миронов Г.И.

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

В [1] зонная структура (8,0) нанотрубки из атомов золота была рассчитана методом линеаризованных присоединенных плоских волн. Расчеты показали, что уровни энергии s -электронных состояний расположены полностью в пределах валентной зоны, s -электроны не принимают участие в электронном транспорте. Зона проводимости соответствует d -электронным состояниям, d -электроны вовлекаются в электронный транспорт. Целью данной работы является исследование в дополнение [1,2] золотой нанотрубки в рамках квантовой теории поля.

Для изучения квантовых систем, в которых определяющую роль играют d -электроны, была предложена модель Хаббарда [3], решение которой в работе осуществлено в рамках «приближения статических флуктуаций» [4].

В работе произведено вычисление Фурье-образа антикоммутирующей функции Грина, получен энергетический спектр золотой нанотрубки. Вычислена плотность электронных состояний золотой нанотрубки, пики которой соответствуют особенностям Ван-Хова [1]. Приведен спектр оптического поглощения для первого прямого перехода при оптическом поглощении в золотой нанотрубке. Вычислена энергия основного состояния нанотрубки, анализ которой позволяет понять, почему золотые наночастицы могут «прилипать» к раковым клеткам живого организма.

Литература

1. Dyachkov P.N. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2014. 59. 12. P. 1454-1461.
2. Mironov G.I. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2018. 63. 1. P. 66-68.
3. Hubbard J. Proceedings of the Royal Society, Series A, 1963. 276. 1365. P. 238-257.
4. Mironov G.I. Physics of the Solid State, 2006. 48. 7. P. 1378-1386.