

УДК 538.22

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

Миронов Г.И., Семенов А.Д.

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

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, являющееся важным составляющим при конструировании электронных устройств и наноэлектронных схем [1].

Для возможности применения методов квантовой теории поля реальную золотую нанотрубку заменим теоретической моделью, которая могла бы объяснить большую часть физико-химических свойств золотых нанотрубок и предсказать новые свойства этих наночастиц золота. Для этого мы можем применить микроскопическую модель Хаббарда [2].

Решения получены в рамках приближения статических флуктуаций [3]. Мы подтвердили вывод, полученный в [4], что при небольшом количестве атомов одностенная золотая нанотрубка (SWGН) ведет себя как полупроводник. При большем количестве атомов, как показывает наше исследование, нанотрубка ведет себя как металл. Таким образом, при определенных значениях параметров рассматриваемой квантовой системы мы наблюдаем переход полупроводник – металл. Энергия ионизации уменьшается с ростом нанотрубки, а энергия сродства, наоборот, увеличивается. Вычислены энергия основного состояния, энергия ионизации и энергия сродства к электрону, был проведен сравнительный анализ наносистем. Вычислена и построена плотность электронных состояний.

Литература

1. Yarzhemsky V.G., Battocchio C. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2011. 56. 1. P. 947.
2. Hubbard J. Proceedings of the Royal Society, Series A, 1963. 276. 1365. P. 238.
3. Миронов Г.И., Филлипова Е.Р. Физика твердого тела, 2012. 54. С. 8.
4. Yang X.P., Dong J.M. Physical Review B, 2005. 71. P. 233403.