

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ ОДНОСЛОЙНЫХ НАНОТРУБОК

Пономарев О. А., Ахметьянов Р. Ф., Ишмаев Э. Х.,
Шиховцева Е. С.

(Россия, Пушино, Уфа)

Получена точная самосогласованная система уравнений для описания нанотрубок, в коллективных переменных.

Системы из атомов углерода могут существовать в виде нескольких модификаций: слоистого графита с гексагональной структурой, нитевого карбина, кристаллического алмаза, фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{78} , C_{84} , углеродных нанотрубок — двумерных протяженных структур, свернутых в однослойную или многослойную трубку [1]. Открытие сверхпроводимости для C_{60} , легированных металлами [2], позволяет надеяться на обнаружение ее в нанотрубках.

В рассматриваемых нами системах имеют место совершенно необычные свойства, связанные с коллективными колебаниями электронной плотности (плазмонами или плазменными колебаниями). Углеродная нанотрубка с внедренным в нее дефектом обладает гетеропереходом металл-полупроводник, что может стать основой полупроводникового элемента рекордно малых размеров. В 1999 году в нанотрубках был обнаружен проксимный эффект [3], а в 2001 — сверхпроводимость при температуре ниже 20 К.

В настоящее время существуют несколько теоретических подходов для расчета нанотрубок. Основные из них: точечная модель, модель Латинджера, модель Хаббарда, приближение функционала плотности. В большинстве работ, относящихся к этим моделям, исходят из первоначального приближения нанотрубки графитовой плоскостью. Однако динамика электронов в нанотрубке отличается от динамики электронов на графитовой плоскости. Эти отличия учтены в нашей работе.

Основная цель работы состоит в создании эффективных методов расчета физических свойств нанотрубок применительно к реальным условиям проведения эксперимента.

Изучаемая нами система представляет собой одностеночную нанотрубку. Ионы углерода рассматриваем как точечные частицы с заданным зарядом, а систему электронов при температуре много ниже энергии Ферми. Углеродную нанотрубку можно представить в виде слоя графитовой плоскости, состоящей из шестиугольников, которую можно свернуть в цилиндрическую трубку. В зависимости от типа обертывания углеродная нанотрубка характеризуется типом хиральности (N, M) где N и M — целые числа. Расстояние между ближайшими углеродными атомами равно $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$. Развернутая нанотрубка представляет собой сотовую решётку, которую удобно разбить на две подрешётки (а) и (б). Поэтому электронная волновая функция задается в виде столбца из двух функций.

Каждая подрешётка обладает операцией трансляционной симметрий из двух векторов \vec{T}_1 и \vec{T}_2 , $|\vec{T}_1| = |\vec{T}_2| = \sqrt{3}a_0 = d_0$ (рис. 1). Система координат выбрана такая: ось z направлена вдоль оси цилиндра, ось $0\varphi_{xy}$ направлена вдоль периметра трубки, причем $\varphi_{xy} = R_{NM}\varphi$, где φ — угол в цилиндрической системе координат, R_{NM} — радиус нанотрубки, определяемый набором (N, M) , причем $R_{NM} = \frac{d_0}{2\pi} \sqrt{N^2 + M^2 + NM} = R$. Рассмотрен частный случай $\alpha + \beta = \gamma = \pi/3$, когда имеется трансляционная симметрия вдоль оси $0z$, и $\vec{T}_z = L\vec{T}_1 - K\vec{T}_2$, L, K — целые числа. Здесь углы α и β изображены на рис. 1, при этом угол β мы будем называть углом хиральности решётки на поверхности цилиндра при определённом значении.

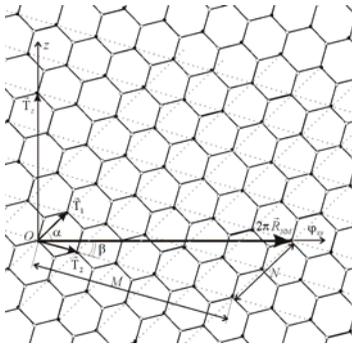


Рис.1. Система координат для описания нанотрубок (обозначения в тексте)

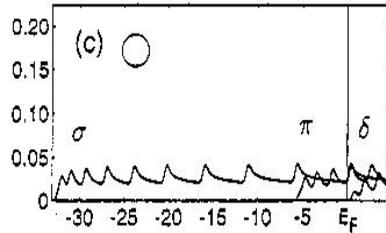


Рис.2. Плотность электронных состояний в нанотрубке в зависимости от энергии (эВ)

Волновой вектор для электрона в нанотрубке в цилиндрической системе координат имеет вид

$$\psi_{nmk}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi L}} R_{nm}(r) e^{i(k_\varphi \varphi_{xy} + kz)}.$$

Так как при преобразовании $\varphi_{xy} \rightarrow \varphi_{xy} + 2\pi R_{NM}$ волновая функция не должна изменяться, то волновой вектор k_φ квантуется, и мы имеем

$$k_\varphi = \frac{2\pi}{d_0} \frac{1}{(N^2 + M^2 + MN)^{1/2}} m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \left[\frac{N+M}{2} \right],$$

и соответственно $k_\varphi \varphi_{xy} = m\varphi$, где скобки [...] означают выделение целой части числа. В реальных трубках N и M порядка единицы. Поэтому k_φ имеет дискретный вид. Величины k можно считать квазинепрерывными.

Функции $R_{nm}(r)$ обладают свойством ортогональности и полноты и определяются из решения некоторой модельной задачи. Для простоты выберем потенциал модельной задачи для одностеночной нанотрубки в виде

$$V_{ef} = \begin{cases} -V_0, & |r - R| \leq \frac{a}{2}, \\ 0, & |r - R| > \frac{a}{2}. \end{cases}$$

Решая уравнение Шредингера для одностенной нанотрубки для радиального направления, имеем для собственных значений и волновых функций

$$E_{nmk} = \frac{\pi^2}{2a^2}(1+2n)^2 + \frac{m^2 - 0,25}{2R^2} + \frac{\pi^2 k^2}{2L^2},$$

$$u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} y \cos(\pi R(1+2n)). \quad (1)$$

Выражение для невозмущенной функции Грина имеет вид

$$4G_0(r, \varphi, z, t; r_1, \varphi_1, z_1, t_1) = \sum_{n,m,k} \exp(iE_{nmk}(t-t_1) + im(\varphi - \varphi_1) + ik(z - z_1)) \frac{1}{2\pi a L}. \quad (2)$$

Выбирая $V_0 = 42$ эВ и $a^2 = (4\pi^2/30)$ эВ⁻¹, получим для E_{000} (σ -состояние) и E_{100} (π -состояние), соответственно, значения -32 эВ и -6 эВ. Экспериментальные значения для них соответственно равны -32 и -7 эВ.

Для рассматриваемой системы из электронов и ионов углерода с кулоновским взаимодействием и заданной структурой решетки (рис. 1) построим метод определения состояний колебаний электронной плотности. Будем исходить из функционального интеграла

$$Z[\psi] = \int D\psi^+ D\psi \exp(S[\psi]), \quad (3)$$

где действие $S[\psi]$ определяется выражением

$$S[\psi] = \int_0^\beta d\tau \int dx \sum_s \psi_s^+(x, \tau) K(x, \tau) \psi_s(x, \tau) -$$

$$-\frac{e^2}{2} \int_0^\beta d\tau \int dx dy \rho(x, \tau) V(x-y) \rho(y, \tau) +$$

$$+ \int_0^\beta d\tau \sum_{\tau_\alpha} \left[i\vec{p}_{\tau_\alpha}(\tau) \partial_\tau \vec{q}_{\tau_\alpha}(\tau) - \vec{p}_{\tau_\alpha}^2(\tau) / 2M_C \right], \alpha = a, b \quad (4)$$

Здесь s — спин электронов, $\psi_s(x, \tau)$ — система из двух под-решеток (а) и (b), $\bar{p}_{i_a}(\tau)$, $\bar{q}_{i_a}(\tau)$, M_C — соответственно импульс, координата и масса иона углерода, расположенного в узле \bar{l}_a подрешеток, $V(x-y) = 1/|x-y|$ — оператор кулоновского взаимодействия, $K(x, \tau)$ — оператор кинетической энергии, представлен в виде

$$K(x, \tau) = \begin{pmatrix} K_a(x, \tau) & 0 \\ 0 & K_b(x, \tau) \end{pmatrix}, \quad K_{a,b}(x, \tau) = -\partial_\tau + \frac{\Delta_{a,b}}{2m_e} + \mu_{a,b},$$

где $\partial_\tau = \frac{\partial}{\partial \tau}$, $\frac{\Delta_a}{2m}$ — кинетическая энергия для подрешетки a , $\mu_{a,b}$ — химический потенциал на подрешетках.

Величина зарядовой плотности $\rho(x, \tau)$ складывается из ионной $\rho^q(x, \tau)$ и электронной $\rho^e(x, \tau)$ частей и равна $\rho(x, \tau) = \rho^q(x, \tau) - \rho^e(x, \tau)$, где $\rho^q(x, \tau) = \sum_{\alpha\gamma} \rho_{\alpha\gamma}^q(x, \tau) \delta_{\alpha\gamma}$, $\rho^e(x, \tau) = \sum_{\alpha\gamma} \rho_{\alpha\gamma}^e(x, \tau)$, $\rho_{\alpha\gamma}^q(x, \tau) = Z \delta(x - \bar{q}_{i_{\alpha\gamma}}(\tau))$, $\rho_{\alpha\gamma}^e(x, \tau) = \sum_s \psi_{\alpha s}^+(x, \tau) \psi_{\gamma s}(x, \tau)$.

Добавим в выражение (3) коллективную переменную локального поля $\phi(x, \tau)$, подчиняющегося статистике Бозе, введя дополнительный множитель

$$Z[\phi] = \int D\phi \exp(S[\phi]),$$

$$S[\phi] = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int dx dy \phi(x, \tau) V^{-1}(x-y) \phi(y, \tau).$$

Тогда

$$\begin{aligned} Z[\phi] \exp\left(-\frac{e^2}{2} \int_0^\beta d\tau \int dx dy \rho(x, \tau) V(x-y) \rho(y, \tau)\right) &= \\ &= \int D\phi \exp(S_1[\phi]) = Z_1[\phi], \end{aligned}$$

$$S_1[\phi] = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int dx dy \phi(x, \tau) V^{-1}(x-y) \phi(y, \tau) + \\ + ie \int_0^\beta d\tau \int dx \rho(x, \tau) \phi(x, \tau).$$

Здесь локальная плотность $\rho(x, \tau)$ в действии $S_1[\phi]$ является источником поля $\phi(x, \tau)$. После данного преобразования, выражение (3) примет вид

$$Z[\psi, \phi] = \int D\psi^+ D\psi \int D\phi \exp(S[\psi, \phi]), \quad (5)$$

где действие $S[\psi, \phi]$ учитывает влияние электронов, поля ϕ и их взаимодействия и имеет вид

$$S[\psi, \phi] = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int dx dy \phi(x, \tau) V^{-1}(x-y) \phi(y, \tau) + \\ + \int_0^\beta d\tau \int dx \sum_s \psi_s^+(x, \tau) K'(x, \tau) \psi_s(x, \tau) + \\ + ie \int_0^\beta d\tau \int dx \rho^q(x, \tau) \phi(x, \tau) + \\ + \int_0^\beta d\tau \sum_{\bar{i}_\alpha} \left[i \bar{p}_{\bar{i}_\alpha}(\tau) \partial_\tau \bar{q}_{\bar{i}_\alpha}(\tau) - \bar{p}_{\bar{i}_\alpha}^2(\tau) / 2M_C \right], \quad \alpha = a, b. \quad (6)$$

$$K'(x, \tau) = \begin{pmatrix} K_a(x, \tau) - ie\phi(x, \tau) & -ie\phi(x, \tau) \\ -ie\phi(x, \tau) & K_b(x, \tau) - ie\phi(x, \tau) \end{pmatrix}.$$

Функциональные интегралы (3) и (5) идентичны. В выражении (5) можно вычислить интеграл по ферми полям. Тогда получаем

$$Z = \int D\phi \exp(S_{eff}[\phi]), \quad (7)$$

где

$$S_{\text{eff}}[\phi] = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int dx dy \phi(x, \tau) V^{-1}(x-y) \phi(y, \tau) + 2SpLn(K'(x, \tau)) + \\ + ie \int_0^\beta d\tau \int dx \rho^q(x, \tau) \phi(x, \tau) + \\ + \int_0^\beta d\tau \sum_{\ell_\alpha} \left[i\bar{p}_{\ell_\alpha}(\tau) \partial_\tau \bar{q}_{\ell_\alpha}(\tau) - \bar{p}_{\ell_\alpha}^2(\tau) / 2M_c \right], \quad \alpha = a, b. \quad (8)$$

Мы, таким образом, перешли к описанию системы в коллективных переменных, усложнив уравнения, но, не потеряв информацию от остальных переменных.

Для углеродных нанотрубок подрешетки a и b идентичны и не различаются между собой. Поэтому можно положить, что $K_a(x, \tau) = K_b(x, \tau) = K(x, \tau)$.

Описание системы будем производить с помощью функций Грина, которые введем по уравнению

$$K'(x, \tau_x) G(x, \tau_x; y, \tau_y) = \delta(x-y) \delta(\tau_x - \tau_y). \quad (9)$$

Отсюда

$$G(x, \tau_x; y, \tau_y) = [K'(x, \tau_x)]^{-1} \delta(x-y) \delta(\tau_x - \tau_y), \quad (10)$$

где

$$G(x, \tau_x; y, \tau_y) = \begin{pmatrix} G_1(x, \tau_x; y, \tau_y) & G_2(x, \tau_x; y, \tau_y) \\ G_2(x, \tau_x; y, \tau_y) & G_1(x, \tau_x; y, \tau_y) \end{pmatrix},$$

$$G_1 = G_{aa} = G_{bb}, \quad G_2 = G_{ab} = G_{ba}.$$

Функция Грина частиц в присутствии только эффективного поля V_{ef} удовлетворяет уравнению

$$G_0(x, \tau_x; y, \tau_y) = [K_0(x, \tau_x)]^{-1} \delta(x-y) \delta(\tau_x - \tau_y).$$

Перепишем (9) в виде

$$K_0(x, \tau_x) G(x, \tau_x; y, \tau_y) + K_1(x, \tau_x) G(x, \tau_x; y, \tau_y) = \delta(x-y) \delta(\tau_x - \tau_y), \quad (11)$$

где $K_1(x, \tau_x) = (-ie\phi(x, \tau_x) + eV_{ef}(x)) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$.

Умножая (11) на K_0^{-1} , имеем

$$G(x, \tau_x; y, \tau_y) = G_0(x, \tau_x; y, \tau_y) - K_0^{-1}(x, \tau_x)K_1(x, \tau_x)G(x, \tau_x; y, \tau_y) =$$

$$G_0(x, \tau_x; y, \tau_y) - \int_0^\beta d\tau_z \int dz G_0(x, \tau_x; z, \tau_z)K_1(z, \tau_z)G(z, \tau_z; y, \tau_y) \quad (12)$$

Введем новые функции

$$G(x, \tau_x; y, \tau_y) = (G_1(x, \tau_x; y, \tau_y) + G_2(x, \tau_x; y, \tau_y)),$$

$$G_0(x, \tau_x; y, \tau_y) = (G_{01}(x, \tau_x; y, \tau_y) + G_{02}(x, \tau_x; y, \tau_y)).$$

Тогда (12) можно переписать в развернутом виде с учетом введенных функций

$$G_1(x, \tau_x; y, \tau_y) = G_{01}(x, \tau_x; y, \tau_y) - G_{02}(x, \tau_x; y, \tau_y) + G_2(x, \tau_x; y, \tau_y),$$

$$G(x, \tau_x; y, \tau_y) = G_0(x, \tau_x; y, \tau_y) + 2ie \int_0^\beta d\tau_z \int dz (\phi(z, \tau_z) -$$

$$iV_{ef}(z))G_0(x, \tau_x; z, \tau_z)G(z, \tau_z; y, \tau_y). \quad (13)$$

Получим уравнения для определения поля $\phi(x, \tau_x)$ и движения ядер. Для этого используем эффективный функционал действия, найдем его вариацию по обобщенным координатам $\phi(x, \tau_x)$, $\bar{q}_{l_\alpha}(\tau)$, $p_{l_\alpha}(\tau)$ и приравняем вариации нулю. Тогда имеем

$$\frac{\delta S_{ef}[\phi]}{\delta(\phi(x, \tau))} = 0, \quad \frac{\delta S_{ef}[\phi]}{\delta(\bar{q}_{l_\alpha}(\tau))} = 0, \quad \frac{\delta S_{eff}[\phi]}{\delta(\bar{p}_{l_\alpha}(\tau))} = 0. \quad (14)$$

Первое равенство приводит к уравнению

$$-\int dy V^{-1}(x-y)\phi(y, \tau) + ie\rho^q(x, \tau) - 2ie \lim_{\substack{y \rightarrow x \\ \tau_y \rightarrow \tau_x - 0}} Sp \left\{ G(x, \tau_x; y, \tau_y) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \right\} = 0. \quad (15)$$

Умножая (15) на $V(z-x)$ и интегрируя по x , имеем

$$\begin{aligned} \phi(z, \tau) = ie \int dx V(z-x) \rho^q(x, \tau) - \\ - 4ie \int dx V(z-x) \lim_{\substack{y \rightarrow x \\ \tau_y \rightarrow \tau_x - 0}} (G_1(x, \tau_x; y, \tau_y) + G_2(x, \tau_x; y, \tau_y)). \end{aligned} \quad (16)$$

Отсюда следует, что величина $i\phi(x, \tau)$ по смыслу есть поле электрического потенциала от ионов и электронов. Это поле формально можно считать внешним. Величина $i\phi(x, \tau)$ полностью определяет характер взаимодействия в системе и ее коллективные возбуждения.

Функции G_1 и G_2 можно выразить через функции $G = G_1 + G_2$ и $G_0 = G_{01} + G_{02}$ по формулам:

$$\begin{aligned} G_1(x, \tau_x; y, \tau_y) &= \frac{1}{2} (G(x, \tau_x; y, \tau_y) + G_{01}(x, y; \tau_x - \tau_y) - G_{02}(x, y; \tau_x - \tau_y)), \\ G_2(x, \tau_x; y, \tau_y) &= \frac{1}{2} (G(x, \tau_x; y, \tau_y) - G_{01}(x, y; \tau_x - \tau_y) + G_{02}(x, y; \tau_x - \tau_y)). \end{aligned}$$

Тогда (13) и (16) примут вид замкнутой системы уравнений

$$\begin{aligned} G(x, \tau_x; y, \tau_y) = G_0(x, \tau_x; y, \tau_y) + \\ + 2ie \int_0^\beta d\tau_z \int dz (\phi(z, \tau_z) - iV_{ef}(z)) G_0(x, \tau_x; z, \tau_z) G(z, \tau_z; y, \tau_y). \end{aligned} \quad (17)$$

$$\phi(x, \tau) = ie \int dz V(x-z) \rho^q(z, \tau) - 4ie \int dz V(x-z) \lim_{\substack{z_1 \rightarrow z \\ \tau_{z_1} \rightarrow \tau_z - 0}} G(z, \tau_z; z_1, \tau_{z_1}). \quad (18)$$

Последнее уравнение описывает плазменные колебания.

Второе и третье уравнения (14) определяют уравнения для движения ионов углерода. Таким образом, удастся получить точную замкнутую самосогласованную систему уравнений для описания нанотрубок, учитывающую электронную и колебательную подсистемы в коллективных переменных. Исследуем выражение (18), переписав его в виде

$$\begin{aligned} \phi(x, \tau) = ie \int dz_1 d\tau_1 V(x - z_1) \delta(\tau - \tau_1) \rho^q(z_1, \tau_1) - \\ - 4ie \int dz_1 d\tau_1 V(x - z_1) \delta(\tau - \tau_1) G(z_1, \tau_1; z', \tau'), \end{aligned}$$

причем до интегрирования следует перейти к пределам $z' \rightarrow z_1, \tau' \rightarrow \tau_1 - 0$.

Введем поляризацию $P(x, \tau; z_1, \tau_1)$ по формуле

$$\begin{aligned} \int dz_1 d\tau_1 V(x - z_1) \delta(\tau - \tau_1) G(z_1, \tau_1; z', \tau') = \\ = \int dz_1 d\tau_1 P(x, \tau, z_1, \tau_1) G_0(z_1, \tau_1; z', \tau'), \quad z' \rightarrow z_1, \tau' \rightarrow \tau_1 - 0. \end{aligned}$$

Эффективный потенциал $V_{ef}(z_2, \tau_2)$ равен

$$\begin{aligned} iV_{ef}(z_2, \tau_2) = ie \int dz_3 d\tau_3 V(z_2 - z_3) \delta(\tau_2 - \tau_3) (\rho^q(z_3, \tau_3) - 4G_0(z_3, \tau_3; z', \tau')), \\ z' \rightarrow z_3, \tau' \rightarrow \tau_3 - 0. \end{aligned}$$

Тогда имеем

$$\begin{aligned} \phi(x, \tau) = iV_{ef}(z, \tau) - \\ - 4ie \int dz_1 d\tau_1 (P(x, \tau; z_1, \tau_1) - V(x - z_1) \delta(\tau - \tau_1)) G_0(z_1, \tau_1; z', \tau'), \\ z' \rightarrow z_1, \tau' \rightarrow \tau_1, \end{aligned} \quad (19)$$

а также

$$\begin{aligned} G(z_1, \tau_1; z', \tau') = G_0(z_1, \tau_1; z', \tau') + \\ + 2ie \int_0^\beta d\tau_2 \int dz_2 G_0(z_1, \tau_1; z_2, \tau_2) (-4ie) \int_0^\beta d\tau_3 \int dz_3 [P(z_2, \tau_2; z_3, \tau_3) - \\ - V(z_2 - z_3) \delta(\tau_2 - \tau_3)] G_0(z_3, \tau_3; z_4, \tau_4) G(z_2, \tau_2; z', \tau'), \quad z_4 \rightarrow z_3, \tau_4 \rightarrow \tau_3. \end{aligned} \quad (20)$$

Умножая это выражение слева на V и учитывая поляризационный оператор, имеем

$$P(x, \tau; x', \tau') = V(x - x')\delta(\tau - \tau') - \quad (21)$$

$$8e^2 \int dx_1 d\tau_1 dx_2 d\tau_2 V(x - x_1)\delta(\tau - \tau_1)G_0(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2)G_0(x_2, \tau_2; x_1, \tau_1)P(x_2, \tau_2; x', \tau').$$

Полюса Фурье образа функции поляризации определяют возбужденные состояния — плазменные колебания плотности относительно основного стационарного состояния. Учитывая, что можно представить

$$4G_0(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2) = \sum_{nmk} \exp(iE_{nmk}(\tau_1 - \tau_2))G_{nmk}(x_1, x_2), \quad (22)$$

и после Фурье преобразования по времени поляризационная функция имеет вид

$$P(q, \omega; q', \omega') = -\frac{4\pi}{q^2} \delta(q - q')\delta(\omega - \omega')[1 + \frac{e^2}{2} \frac{4\pi}{q^2} \sum_{\substack{n, m, k; \\ n_1, m_1, k_1}} \int dx G_{nmk}(x)G_{n_1 m_1 k_1}(-x)e^{-iqx} \delta(\omega - E_{nmk} + E_{n_1 m_1 k_1})]. \quad (23)$$

Это выражение и дает спектр и интенсивность коллективных состояний.

Рассчитаем поляризационную функцию для этого случая. После интегрирования по величине k_1 , имеем

$$P(q_x, q_y, q_z, \omega) = P(q_r, q_z, \omega) = -\frac{4\pi}{q_r^2 + q_z^2} - \frac{e^2}{2} \sum_{\substack{n, m, k; \\ n_1, m_1, k_1}} \left(\frac{4\pi}{q_r^2 + q_z^2} \right)^2 \frac{\sin(\pi R(n - n_1)/a)}{\pi R(n - n_1)}, \quad (24)$$

$$\left(\frac{q_y^2 - q_x^2 - 2iq_x q_y}{q_r^2} \right)^{\frac{m - m_1}{2}} J_{m - m_1}(Rq_r) \delta(\omega - E_{nmk} + E_{n_1 m_1 k - q_z}),$$

где $q_r = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$,

$$E_{m_k} - E_{n_m k_1} = \frac{2\pi}{a^2} (n - n_1)(1 + n + n_1) + \frac{m - m_1}{2R^2} (m + m_1) + \frac{\pi^2 (k - k_1)}{2L^2} (k + k_1).$$

В формуле (24) δ -функцию можно заменить на лоренцову или гауссову функцию формы пика.

Видим, что коллективные возбуждения в нанотрубках описываются квантовыми числами n, m, k , где $(n - 1)$ — число радиальных мод, m — число азимутальных мод, $(k - 1)$ — число продольных мод волновой функции.

Спектр одиночной нанотрубки начинается с энергии -33 эВ ниже уровня Ферми, с состояния, где нет радиальных мод (σ -состояния), $(n - 1) = 1$ дают π -состояния, которые начинаются с -5 эВ, $n = 3$ — δ -состояния. Эти состояния находятся вблизи уровня Ферми и поэтому частично заняты. Положение уровней для одностенной трубки ($R = 3,4$ А) (в эВ): σ -состояния: 0, -6, -10, -15, -20, -24, -26, -29, -31, -32, -33; (опыт, рис.2: 0, -5, -11, -16, -20, -24, -26, -29, -31, -33), π -состояния — -1, -2, -4, -5 (опыт, рис. 2: 0, -2, -4, -5).

Если сравнить наши результаты для (5,5) и креслоподобные трубки того же радиуса 3,4 А, рассчитанные LCAO-методом, то заметна существенная разница между LCAO расчетом и экспериментом и несущественная разница между нашим расчетом и экспериментом, а также трудоемким численным расчетом с учетом эффектов корреляции [4]. Спектр возбуждения характеризуется квантовыми числами n, m , и k . Подход можно использовать и для фуллеренов C_{60} .

Список литературы:

1. Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // Nature (London). 1991. V.354. N.1. P.56–58.
2. Schon J.H., Kloc Ch., Batlogy B. Superconductivity at 52 K in hole-doped C_{60} // Nature. 2000. V.408. P.549–552.
3. Kasumol A. Yu., DeblockR., Kosiak M., Reulet B. et al. Super-current through single-walled carbon nanotubes // Science. 1999. V.284. P.1508–1511.
4. Ostling, D., Tomanek D., Rosen A. Electronic structure of single-wall, multiwall, and filled carbon nanotubes // Phys.Rev.B. 1997. V.55. N.20. P.13980–13988.

**INVESTIGATION OF SING-WALL CARBON NANOTUBES
AFFINITIES**

**Ponomarev O. A., Akhmetyanov R. F., Ishmaev E. H,
Shikhovseva E. S.**

(Russia, Pushchino, Ufa)

*The exact self-consistent, collective coordinates, system equation for
nanotubes was produced.*