

На правах рукописи

БЕЛОСЛУДЦЕВ Александр Вениаминович

УДК 530.1

СИММЕТРИЯ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ
НАНОТРУБОК

Специальность 01.04.02 – Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико–математических наук

Ижевск – 2007

Работа выполнена в ГОУВПО «Удмуртский государственный университет»
г. Ижевск

Научный руководитель: Кандидат физико–математических наук,
доцент Сергей Степанович Савинский

Официальные оппоненты: Доктор физико–математических наук,
доцент Аркадий Михайлович Сатанин
Кандидат физико-математических наук,
доцент Владимир Павлович Бовин

Ведущая организация: Физико–технический институт
УрО РАН г.Ижевск

Защита диссертации состоится «__» _____ 2007г. в 14⁰⁰ на заседании диссертационного совета К212.275.04 в ГОУ ВПО «Удмуртский государственный университет» по адресу: 426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1 (корп. 4), ауд 222. E-mail: imi@uni.udm.ru

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Удмуртского государственного университета

Автореферат разослан «__» _____ 2007г.

**Ученый секретарь
диссертационного совета**

к.ф.–м.н., доцент

Н.Н.Петров

Общая характеристика работы

Актуальность темы:

Углеродные нанотрубки были экспериментально получены в 1991г. японским физиком–исследователем Иджимой. Нанотрубки представляют собой цилиндрические макромолекулы диаметром порядка нанометра и длиной до нескольких микрон, состоящие из одного или нескольких свернутых в трубку гексагональных графитовых слоев обычно закрытых полусферами. Полученные экспериментально нанотрубки принимают спиралевидные, клубкообразные формы вперемешку с фуллеренами и аморфным углеродом. По внешнему виду это черный порошок, который очищают механическими и химическими способами. Существует много экспериментальных методик получения нанотрубок, но о промышленном производстве речь пока не идет в связи с высокой стоимостью.

Сегодня углеродные трубки применяются в разработках нового поколения приборов имеющих молекулярные размеры, новых полимерных материалов с улучшенными физико–химическими свойствами, обсуждается возможность создания на основе трубок контейнеров для хранения водорода, и т.д.

Ряд уникальных свойств углеродных нанотрубок: варьируемая в зависимости от симметрии трубки ширина запрещенной щели, высокая прочность, указывают на возможность применения этих объектов в наноэлектронике и наномеханике. Несмотря на имеющиеся трудности по получению, нанотрубки имеют хорошие перспективы для использования в наноэлектронике. Вопросы использования нанотрубок в качестве диода, транзистора, иглы атомно–силового микроскопа, материала для получения низковольтовых эмиттеров и многих др. широко обсуждаются в литературе.

Цель работы

Целью диссертационной работы является симметричный анализ однослойных и многослойных нанотрубок с целью предсказания их физических свойств; исследование феноменологических моделей электронных спектров однослойных углеродных нанотрубок для прогнозирования электрических и магнитных характеристик.

Для реализации этой цели рассмотрены следующие задачи:

1. Выполнена классификация идеальных однослойных и многослойных углеродных нанотрубок по группам симметрии, проведен анализ скалярных функций, обладающих симметрией нанотрубки.
2. Разработана методика расчета структурного фактора нанотрубки в зависимости от симметрии.
3. Рассмотрены феноменологические модели электронных спектров углеродных нанотрубок в рамках различных приближений.

4. Проведен теоретический анализ вольт–амперных характеристик, кондактанса и магнитных свойств углеродных нанотрубок в широкой области магнитных полей и температур с использованием феноменологических моделей электронных спектров.

Методы исследования

Для решения поставленных задач использованы методы современной математической и теоретической физики: теория групп, квантовой механики, статистической физики, кристаллографии и методы компьютерного моделирования.

Научная новизна

Исследовано поведение энергии связи двухслойных трубок при пространственном изменении их относительной ориентации (сдвиге и повороте). Проведен анализ структурного фактора нанотрубки для случая произвольной симметрии. Впервые сделан теоретический расчет вольт–амперных характеристик однослойных углеродных нанотрубок в широкой области магнитных полей и температур с использованием феноменологической модели электронного спектра в приближении сильной связи.

Научная и практическая ценность

Проведенные исследования могут быть использованы для экспериментальной идентификации однослойных нанотрубок на основе данных по рассеянию. Результаты теоретического расчета вольт–амперных характеристик нанотрубок необходимы для создания наноэлектронных приборов на основе углеродных нанотрубок. Анализ энергии связи двухслойной нанотрубки может быть использован для создания нового класса нанодвижителей (наноподшипник, нанотружины и др.)

На защиту выносятся:

- анализ энергии межслоевого взаимодействия в двухслойной нанотрубке на основе симметричных характеристик однослойных трубок;
- феноменологические модели электронного спектра однослойных нанотрубок;
- теоретический анализ особенностей вольт–амперных характеристик однослойных углеродных трубок для широкого диапазона магнитных полей и температур.

Апробация работы. Основные результаты диссертационных исследований были доложены на следующих конференциях:

1. XXIX Международная зимняя школа по теоретической физике “Коуровка–2002” ИФМ УрОРАН (Екатеринбург, 2002).
2. Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам, "Ломоносов–2003" (Москва, МГУ, 2003).
3. XXX Международная зимняя школа по теоретической физике “Коуровка–2004”, ИФМ УрОРАН (Екатеринбург, 2004).
4. XI Национальная конференция по росту кристаллов (НКРК–2004), Москва, Институт

кристаллографии РАН (2004).

5. 5-ая Национальная конференция по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования наноматериалов и наносистем, Москва ИК РАН (2005).

6. XXXI Международная зимняя школа по теоретической физике “Коуровка–2006”, ИФМ УрОРАН (Екатеринбург, 2006).

Публикации. Основные результаты по теме диссертации опубликованы в 11 работах.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения, изложена на 108 страницах машинописного текста, включая 54 рисунков. В списке литературы приведено 101 цитируемых работ отечественных и зарубежных авторов.

Содержание работы

Во **Введении** отмечается актуальность темы исследования, определена цель работы, сформулированы основные задачи, решаемые в диссертации. Приведены основные результаты, показана их научная новизна, научная и практическая значимость. Сформулированы основные положения, защищаемые в работе; сведения о структуре и объеме работы.

В **главе 1** работы приводится литературный обзор, в котором представлены данные по физико–химическим свойствам углеродных нанотрубок и возможным областям их применения.

В **главе 2** рассмотрены симметричные свойства однослойных и многослойных нанотрубок.

Геометрически углеродную нанотрубку можно представить как результат сворачивания графитового листа. На графитовой плоскости (см. рис. 1) рассмотрим прямоугольник ограниченный двумя ортогональными векторами **C** и **L**, вектор $\mathbf{C} = i_1 \mathbf{a}_1 + i_2 \mathbf{a}_2$, соединяет ячейки совмещаемые при сворачивание; i_1 и i_2 (целые числа) – индексы хиральности; \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 – базисные векторы графитовой плоскости. Вектор **L** сонаправлен с осью трубки. При сворачивании прямоугольник на графитовом листе переходит в цилиндрическую поверхность, соответственно системы базисных векторов графитового слоя \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 ; \mathbf{a}_3 , \mathbf{a}_4 и **d** переходят в винтовые повороты S_1 , S_2 ; S_3 , S_4 и S_d (рис. 1).

Первая система базисных векторов \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 используется в большинстве теоретических работ по нанотрубкам, вторая система векторов \mathbf{a}_3 , \mathbf{a}_4 является более удобной для исследования симметрии. Вторая система базисных векторов задает углеродную нанотрубку как набор идентичных колец, на которых находятся атомы углерода. Кольца повернуты относительно друг друга на фиксированный угол. Поворот S_3 в рассматриваемом случае соответствует оси симметрии трубки, порядок которой определяется как наименьший общий

делитель индексов хиральности ($n = \text{mod}(i_1, i_2)$). Параметры винтового поворота S_4 задают расстояние между кольцами Δz_4 и угол относительного поворота колец $\Delta \varphi_4$.

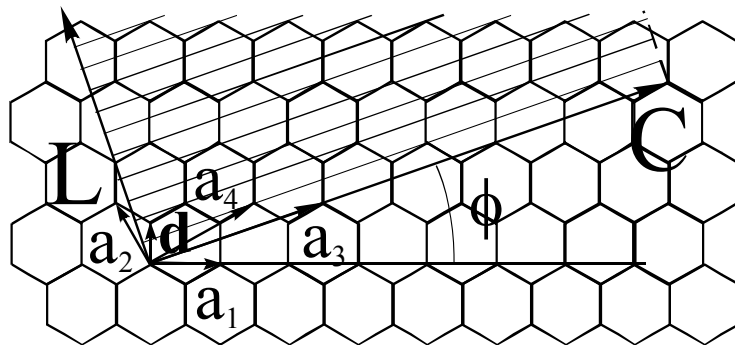


Рис. 1 Схема выбора на графитовом слое базисных векторов \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 и \mathbf{a}_4 . Векторы \mathbf{L} и \mathbf{C} задают углеродную трубку с индексами хиральности (9,3).

Базисные винтовые повороты S_1, S_2 либо S_3, S_4 определяют атомную структуру трубки, состоящую из двух вложенных друг в друга подструктур связанных винтовым поворотом S_d .

Однослойные трубки можно условно разделить на три группы по численному значению параметра $\frac{\Delta \varphi_4}{\Delta \varphi_3}$, если этот параметр является иррациональным числом,

то углеродная трубка имеет две поворотные оси, первая поворотная ось направлена по оси трубки, вторая поворотная ось перпендикулярно оси трубки. Такого рода трубки обладают точечной группой симметрии D_n . Второй случай соответствует отношению равному рациональному числу. В этом случае имеет место группа D_n и трансляционная симметрия вдоль оси трубки T_r . Значение трансляции T_r может быть определено из соотношения $\frac{\Delta \varphi_4}{\Delta \varphi_3} = \frac{m}{k}$,

где m и k целые числа, в этом случае численное значение параметра трансляции равно $m \cdot \Delta z_4$.

Особый случай соответствует значению параметра $\frac{\Delta \varphi_4}{\Delta \varphi_3} = \frac{1}{2}$, в этом случае трубка имеет наибольшее число элементов симметрии: точечная группа D_{nd} и трансляция. Значение трансляции T_r равно $2 \cdot \Delta z_4$, к этому классу трубок относят трубки конфигурации zigzag $(n, 0)$ и armchair $(2n, n)$, n - целое число.

Через параметры операторов S_3 и S_4 , произвольную скалярную функцию, обладающую симметрией нанотрубки можно представить в виде $f(\varphi, z) = \sum_{m,q} A_{m,q} \cdot \exp(im\varphi + iqz)$, где $m = 0, \pm n, \pm 2n, \pm 3n, \dots$ - целые числа, n - номер

поворотной оси нанотрубки, $q = 0, \pm \frac{2\pi}{Tr}, \pm \frac{4\pi}{Tr}, \pm \frac{6\pi}{Tr}, \dots$ – волновой вектор. Симметрия многослойной нанотрубки определяется через общие элементы групп симметрии составляющих ее трубок. В частности, для вычисления энергии связи между трубками в двухслойной нанотрубке можно получить следующее выражение

$$E_b(\varphi_1, z_1; \varphi_2, z_2) = \sum_{m,q} a_{m,q} \exp\left(i \frac{m}{g}(\varphi_1 - \varphi_2) + iq(z_1 - z_2)\right), \quad (1)$$

где нижние индексы в показателе экспоненты относятся к первой и второй трубкам; m – пересечение множеств целочисленных значений m_1 и m_2 , g – общий делитель порядков поворотных осей, q – пересечение множеств значений q_1 и q_2 , $a_{m,q}$ – коэффициенты определяющие амплитуды гармоник. Переменные $\varphi_1, z_1; \varphi_2, z_2$ в вышеприведенной формуле задают положение выделенных колец первой и второй трубок в цилиндрической системе координат.

Были проведены численные расчеты энергии взаимодействия трубок при их относительных движениях: вращении и поступательном сдвиге. Энергия связи трубок вычислялась как сумма парных энергий взаимодействий атомов расположенных на различных трубках при фиксированных жестких атомных конфигурациях трубок.

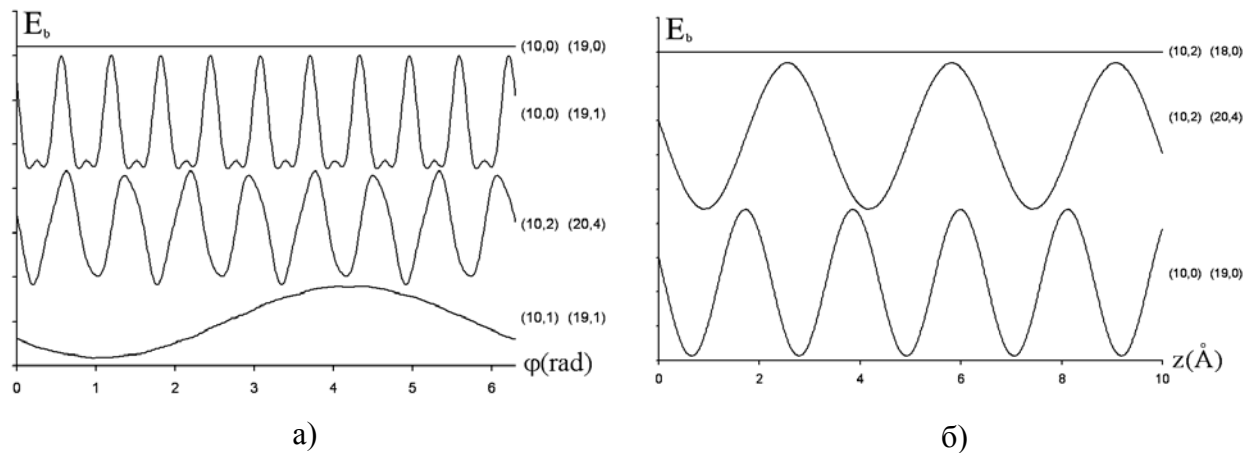


Рис. 2. Зависимость энергии связи E_b от угла поворота а) и от относительного сдвига б) для различных двухслойных трубок.

Полученные численные данные для энергии связи в двухслойных нанотрубках представлены на рис.2. На рис.2а показаны численно рассчитанные зависимости энергии связи двухслойных нанотрубок как функции от относительных углов поворота трубок. Первая кривая в нижней части рис. 2а построена для трубок с индексами $(10,1)$ и $(19,1)$, эти трубки имеют поворотные оси первого порядка, соответственно $n_1 = n_2 = 1$ и энергия связи периодична по относительному углу поворота с периодом 2π . Вторая кривая снизу на рис. 2а соответствует нанотрубкам одинаковой хиральности с индексами $(10,2)$, $(20,4)$, эти трубки

имеют оси симметрии второго и четвертого порядков, т.е. $n_1=2$ и $n_2=4$, соответственно общий делитель этих чисел $g=2$, по формуле (1) период энергии связи по относительному углу поворота равен $\frac{\pi}{2}$. Третья кривая снизу на рис 2а соответствует двум трубкам с индексами (10,0) и (19,1), одна трубка имеет ось симметрии десятого порядка, другая первого, соответственно период по относительному углу поворота трубок, согласно формуле (1), равен $\frac{\pi}{5}$. Последняя кривая на рис. 2а соответствует трубкам с индексами хиральности (10,0) и (19,0), эти трубки имеют оси симметрии десятого и девятнадцатого порядков, соответственно энергия связи как функция от относительного поворота трубок представляет собой быстроосциллирующую функцию с относительно малой амплитудой и периодом $\frac{2\pi}{190}$. Кривые на рис.2а, имеют осциллирующий характер с амплитудой меняющейся в широком диапазоне, соотношение амплитуд нижней кривой на рис. 2а и последующих уменьшается на порядок, соответственно амплитуда верхней кривой уменьшается еще на один порядок.

На рис.2б представлены численные расчеты энергии связи двухслойных нанотрубок как функции от относительного сдвига трубок. Характерные размеры трубок при расчетах выбирались следующие: длина внутренней трубки 200 Å, длина внешней трубки 40 Å. Трубки (10,0) и (19,0) имеют одинаковые трансляции $T_1=4,266\text{Å}$, на рис 2б график энергии от сдвига имеет период равный 2,133Å, что два раза меньше периода трансляции. Для трубок (10,2) и (20,4) трансляция каждой трубки равны $T_1=6,52\text{Å}$ и зависимость энергии от сдвига имеют период 6,52 Å. Для трубок (10,2) и (18,0) (см. рис.2б) трансляции равны $T_1=6,52\text{Å}$, $T_2=4,266\text{Å}$, значение общей трансляции равно $T_1=\infty$.

Данные рис.2 показывают, что двухслойная нанотрубка может рассматриваться как наномеханизм позволяющий реализовать подшипник скольжения либо качения, так и молекулярный механизм обладающий нелинейной упругостью к относительному повороту либо сдвигу.

В конце главы, используя представление о нанотрубке как наборе атомных спиралей, рассчитан структурный фактор однослойной нанотрубки.

Глава 3 посвящена рассмотрению феноменологических моделей энергетического спектра электронов. Первая из них – модель потенциала удерживающего электрон на поверхностях многослойной нанотрубки представляющего собой цилиндрические потенциальные ямы. В простейшем случае, решая уравнение Шредингера в цилиндрических координатах с потенциалом в виде суммы цилиндрических δ -функций, можно найти энергию и собственные функции локализованных квантовых состояний.

В случае одной трубки простейшее приближение соответствует электрону на цилиндрической поверхности, спектр которого может быть представлен в следующем виде

$$E_{m,k} = \frac{\hbar^2 m^2}{2m_{\perp} R^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_*}, \quad (2)$$

где m_{\perp} и m_* – эффективные массы поперечного и продольного движения электрона по цилиндрической поверхности, k – волновой вектор, m – магнитное квантовое число.

Включение магнитного поля вдоль трубки приводит к замене в формуле для спектра электронов (2) квантового числа $m \rightarrow m + \frac{\Phi}{\Phi_0}$, где $\Phi = \pi R^2 H$ – поток магнитного поля через

сечение трубки, $\Phi_0 = \frac{ch}{|e|}$ – элементарный квантовый поток магнитного поля, e – заряд

электрона. Спектр электрона обладает периодичностью по магнитному потоку. Рассмотренное приближение исходит из предположения о достаточно большой глубине и малой ширине цилиндрической ямы удерживающей электрон на поверхности, в результате расстояние между уровнями энергии движения электрона в направлении нормали к поверхности велики, мы предполагаем, что электрон по соответствующим квантовым числам находится в нижнем энергетическом состоянии.

Для нанотрубок малого радиуса необходимо учитывать влияние кривизны трубки на параметры спектра электрона связанные со спин-орбитальным взаимодействием. В работе используется феноменологическая модель Рашба. В этой модели к оператору Шредингера электрона на цилиндре добавляется оператор линейный по матрице Паули и импульсу, формально представляющий собой смешанное произведение, в которое входит вектор нормали к поверхности цилиндра

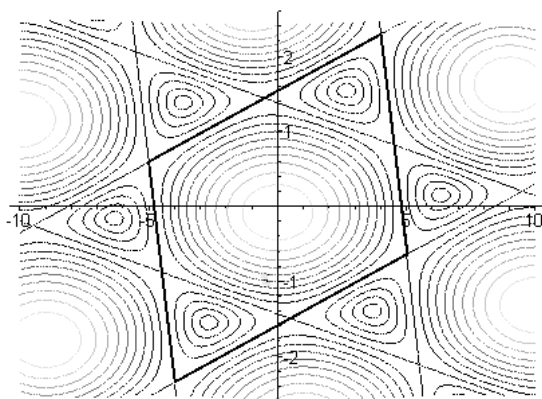
$$V = \gamma \mathbf{n} \cdot [\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}],$$

где $\boldsymbol{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – матрицы Паули, \mathbf{p} – оператор импульса, \mathbf{n} – локальная нормаль к поверхности цилиндра, γ – феноменологическая константа спин-орбитального взаимодействия. Рассматриваемая модель позволяет найти аналитическое выражение для волновых функций электрона и энергетического спектра для случая продольного магнитного поля, соответственно квантовые числа, определяющие состояние электрона – проекция полного момента импульса j на ось трубки и волновой вектор k , определяющий импульс электрона.

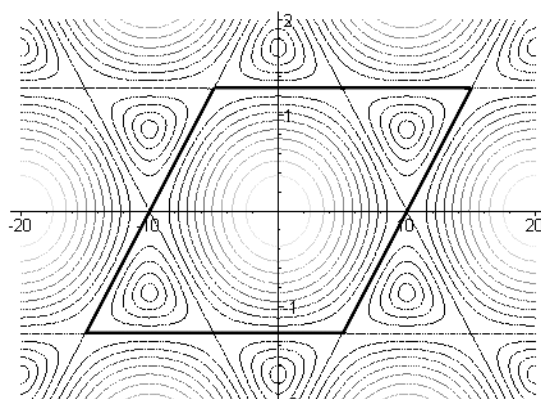
Следующая феноменологическая модель наиболее распространена в литературе – параметрическая модель сильной связи

$$E_{m,k}^{\pm} = E^0 \pm |H_{m,k}|, \quad H_{m,k} = \beta(1 + \exp(-im\Delta\varphi_2 - ik\Delta z_2))(1 + \exp(-im\Delta\varphi_1 - ik\Delta z_1)), \quad (3)$$

где параметры $(\Delta\varphi_1, \Delta z_1)$ и $(\Delta\varphi_2, \Delta z_2)$ определяются винтовыми операторами S_1, S_2 ; β – подгоночный параметр, равный матричному элементу оператора Гамильтона рассчитываемый через волновые функции между ближайшими атомными соседями, знаки \pm в формуле относятся к двум энергетическим зонам; E^0 – энергия связи π -электрона со свободным атомом углерода, которая в расчетах принималась равной 0. Изолинии энергетического спектра на плоскости (m, k) представлены на рис.3.



(10,9)



(20,10)

Рис. 3 Изолинии энергии в модели сильной связи для двух однослойных нанотрубок, с различными вариантами выбора элементарных ячеек. Под рисунками указаны индексы трубок.

В рамках данной модели ширина щели диэлектрических углеродных нанотрубок обратно пропорциональна радиусу трубки.

Формально учет магнитного поля направленного вдоль оси трубки приводит к замене магнитного квантового числа m на $m + \frac{\Phi}{\Phi_0}$, что приводит к сдвигу спектра на величину $\frac{\Phi}{\Phi_0}$, где Φ – магнитный поток через сечение трубки, Φ_0 элементарный квант магнитного потока. Данная замена приводит к периодичности энергетического спектра от магнитного потока и изменению ширины щели запрещенной зоны.

С использованием феноменологических моделей спектра электронов, в **главе 4** приведен расчет электрических и магнитных характеристик углеродных нанотрубок. Расчет вольт-амперной характеристики углеродной нанотрубки проведен в баллистическом приближении с использованием энергетического спектра взятого в приближении однопараметрической модели сильной связи.

Электронный поток, проходящий через произвольное сечение, от каждого из концов трубки вычисляется по формуле

$$J = \frac{2e}{h} \sum_{m,k} \frac{\partial E_{m,k}}{\partial k} \frac{2\pi}{L} f_{m,k} = \frac{2e}{h} \sum_m \int \frac{\partial E_{m,k}}{\partial k} f_{m,k} dk, \quad (4)$$

где $f_{m,k}$ – функция Ферми – Дирака. Суммирование проходит по всем неэквивалентным квантовым состояниям. Формально переход от суммирования к интегрированию в формуле (4) происходит при длине трубки $L \rightarrow \infty$. Пределы суммирования и интегрирования при каждом фиксированном дискретном квантовом числе m могут быть определены геометрически по положению линии разрешенных состояний на плоскости m,k относительно границ зоны (см. рис. 4).

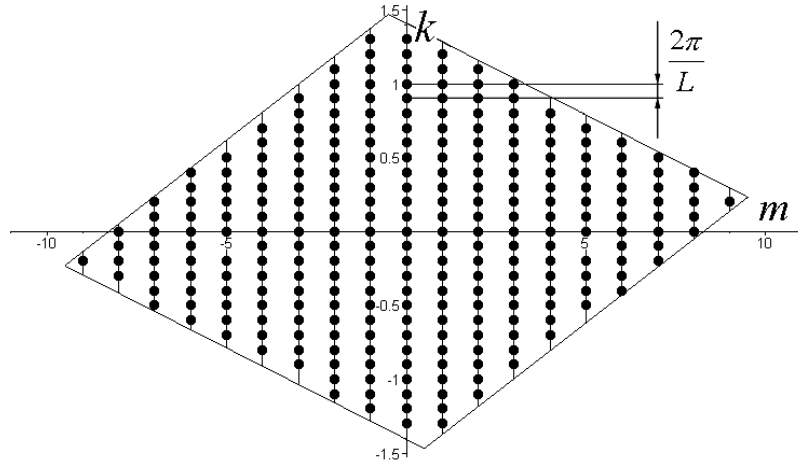


Рис. 4 Неэквивалентные дискретные квантовые состояния π -электронов углеродной нанотрубки с индексами (10,9) в плоскости квантовых чисел m,k .

Ток, протекающий по трубке, в предположении отсутствия рассеивания, может быть вычислен как разность электронных потоков от правого и левого концов трубки. Рассматривается термодинамически равновесное состояние левого и правого концов трубки, в силу того, что химический потенциал в состоянии термодинамического равновесия одного конца трубки больше потенциала второго, т.к. на него подано напряжение V , общий поток электронов через трубку не равен нулю и при $T=0$ может быть найден из (4)

$$I = J_L - J_R = \frac{2e}{h} \sum_m (|e|V - E_{\min}^m) \Theta(|e|V - E_{\min}^m), \quad (5)$$

в которой предполагается, энергия связи E^0 в (3) равна нулю, напряжение V больше нуля, дискретные значения E_{\min}^m определяют минимальные значения энергии на соответствующих ветвях энергетического спектра определяемые через значения квантовых чисел m .

Для трубок малого радиуса вольт-амперная характеристика представляет собой кусочно-линейную кривую. В точках изменения угла наклона вольт-амперной

характеристики химический потенциал сравнивается со значением энергии дискретного квантового состояния, что приводит к включению в проводимость нового баллистического канала (см. рис. 5). При увеличении радиуса, интервалы линейных участков сокращаются и ломаная линия переходит в растущую кривую напоминающую параболу.

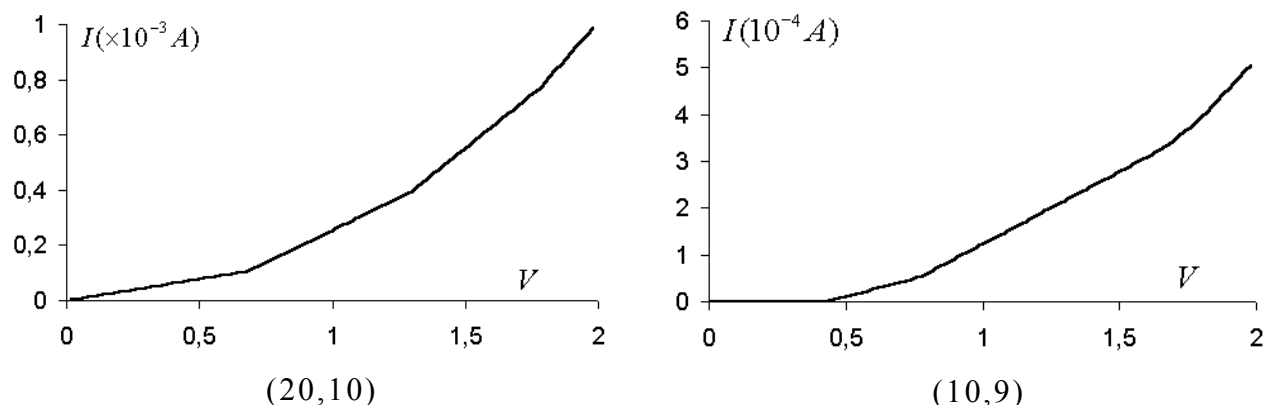


Рис. 5 Вольт–амперные характеристики металлической и полупроводниковой углеродной нанотрубки.

Кондактанс углеродной нанотрубки при нулевой температуре, согласно формуле (5), имеет вид

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} \sum_m \left(1 - \frac{E_{\min}^m}{|e|V} \right) \Theta(|e|V - E_{\min}^m).$$

Для проводящей нанотрубки одно из значений E_{\min}^m при $m=m_*$ равно нулю, поэтому в сумме при малом напряжении V будет только два слагаемых, каждое из которых равно единице, в результате кондактанс проводящей трубки равен $4 \left(\frac{e^2}{h} \right)$. Соответственно для диэлектрической трубки при малых напряжениях число слагаемых равно нулю, поэтому кондактанс трубки равен нулю, при напряжении $|e|V \geq \frac{\Delta}{2}$ трубка становится проводящей и в сумме появляется одно отличное от нуля слагаемое (см. рис. 6).

Включение магнитного поля приводит к изменению ширины запрещенной щели. При значениях магнитного потока $\frac{1}{3}\Phi_0$ и $\frac{2}{3}\Phi_0$ щель в спектре диэлектрических нанотрубок исчезает. Металлические трубки в магнитном поле становятся диэлектрическими (см. рис. 6).

Увеличение температуры размывает дискретный характер зависимости кондактанса от напряжения. Это связано с тем, что термически возбуждается много каналов ответственных за проводимость трубки. При нулевой температуре вероятность возбуждения канала принимает значения равные 1 для включенного канала и 0 для не включенного канала, при температуре отличной от нуля эта вероятность меняется от 0 до 1 в зависимости

от энергии состояния. При больших температурах кондактанс трубки слабо зависит от магнитного поля.

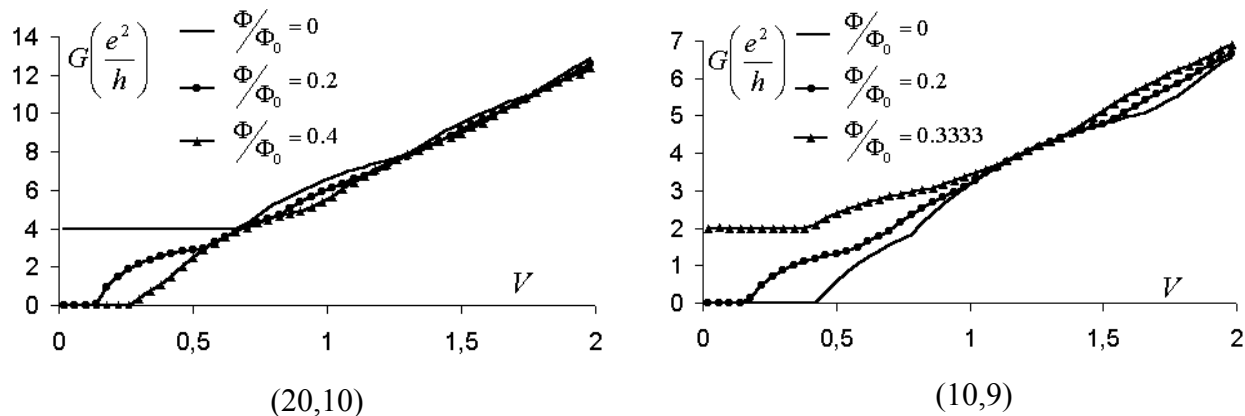


Рис. 6 Зависимость кондактанса металлической и диэлектрической трубки от напряжения при различных значениях магнитного потока.

Дифференциальный кондактанс $g = \frac{dI}{dV}$ (производная тока по напряжению) более чувствителен к включению "новых" каналов проводимости при увеличении напряжения связанных с различными ветвями спектра электронов, в результате по особенностям в поведении дифференциального кондактанса можно определить положение энергетических минимумов ветвей электронного спектра. Дифференциальный кондактанс нанотрубки при нулевой температуре имеет ступенчатый вид, увеличение температуры приводит к размытию ступенек. На рис.7 представлены численные расчеты дифференциального кондактанса нанотрубки (210,0) как функции напряжения для различных температур, повышение температуры приводит к сглаживанию особенностей дифференциального кондактанса.

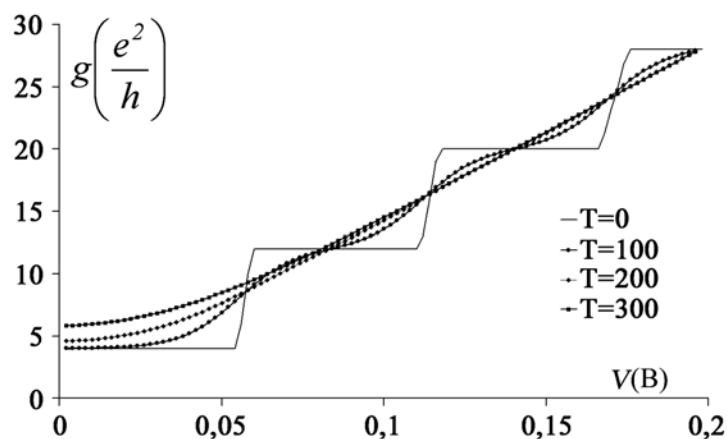


Рис. 7. Зависимость дифференциального кондактанса g углеродной нанотрубки (210,0) от напряжения при различных значениях температуры.

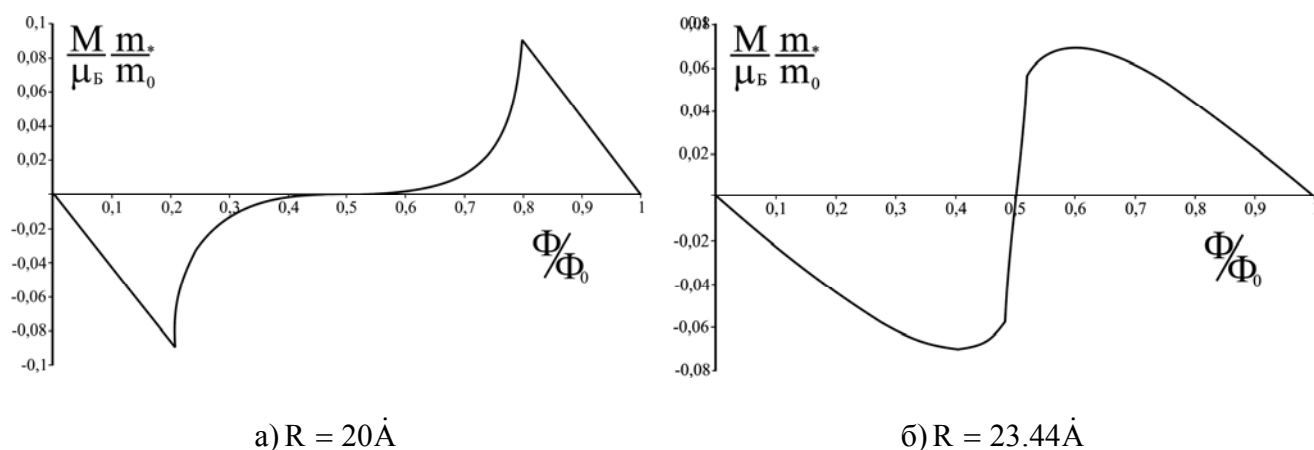
Для определения намагниченности углеродных нанотрубок воспользуемся формулой

$$M = -\frac{\partial \Omega}{\partial H}. \text{ Значение термодинамического потенциала при температуре равной нулю в}$$

рамках используемого приближения определяется следующим образом

$$\Omega = -\frac{4L\sqrt{2m_*}}{3\pi\hbar} \sum_{E_{mn0} \leq \mu} (\mu - E_{mn0})^{3/2},$$

где μ – химический потенциал, определяемый при нулевом магнитном поле, E_{mn0} – минимальное значение энергии для магнитного m и радиального n квантовых чисел, определяющих состояние электрона на трубке при $k=0$.



а) $R = 20 \text{ \AA}$

б) $R = 23.44 \text{ \AA}$

Рис. 8 Зависимость магнитного момента (на один атом) от значения магнитного потока для однослойных трубок различного радиуса в модели локализованных электронов.

На рис. 8 представлен численный расчет магнитного момента однослойных углеродных нанотрубок в зависимости от величины магнитного поля направленного вдоль осей трубок. Как следует из рисунка, магнитный момент периодичен по магнитному потоку. На графиках имеются две точки, в которых происходит излом производной. Эти изломы вызваны пересечением уровня Ферми с термами энергетического спектра, которые смещаются под действием магнитного поле.

Основные выводы

- На основе рассмотрения двух структурных базисов идеальных однослойных углеродных нанотрубок проведена классификация нанотрубок по их симметрии.
- Используя симметричные характеристики трубок-составляющих двухслойной нанотрубки, исследовано поведение энергии связи двухслойной трубки связанное с ван-дер-Ваальсовским взаимодействием. Определены минимумы энергии взаимодействия двух трубок при их относительном сдвиге и повороте.
- Используя представление о нанотрубке как наборе дискретных спиралей, рассчитан структурный фактор нанотрубки.

- Рассмотрены феноменологические модели энергетических спектров электронов на поверхности однослойной нанотрубки.
- Рассчитаны численно вольт–амперные характеристики и кондактанс идеальной нанотрубки в баллистическом приближении с использованием однопараметрической модели сильной связи.
- Исследованы зависимости кондактанса от величины магнитного поля направленного вдоль оси трубки и от температуры в широкой области полей и температур.
- Проведен расчет магнитной восприимчивости углеродных проводящих трубок с использованием простой модели спектра электронов.

Список публикаций по теме диссертации

1. С.С. Савинский, А.В. Белослудцев Электронный спектр многослойной углеродной нанотрубки в модели цилиндрических потенциальных ям // Труды XXIX Международной зимней школы по теоретической физике “Коуровка–2002”. ИФМ УрОРАН. Екатеринбург. 2002. С.169–170.
2. С.С. Савинский, А.В. Белослудцев Феноменологические модели для расчета намагниченности многослойных углеродных нанотрубок // Химическая физика и мезоскопия. Ижевск: ИПМ УрОРАН. Изд. дом “Удм. ун–т”. 2002. Т.4. №2 С249-260.
3. С.С. Савинский, А.В. Белослудцев Кондактанс однослойных углеродных нанотрубок в однопараметрической модели сильной связи // ФТТ. 2004. Т.46. В.7. С.1333–1338.
4. А.В. Белослудцев Численный расчёт вольтамперной характеристики идеальной нанотрубки // Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам "Ломоносов–2003". Сборник тезисов, секция физика. Москва. МГУ. 2003. С. 249.
5. С.С. Савинский, А.В. Белослудцев, М.А. Костенкова Симметричный анализ многослойных нанотрубок // Труды XXX Международной зимней школы по теоретической физике “Коуровка–2004”. ИФМ УрОРАН. Екатеринбург. 2004. С.53.
6. С.С. Савинский, А.В. Белослудцев, Численный расчет вольт–амперных характеристик углеродных нанотрубок // Труды XXX Международной зимней школы по теоретической физике “Коуровка–2004”. ИФМ УрОРАН. Екатеринбург. 2004. С.121.
7. С.С. Савинский, А.В. Белослудцев Нанодвижители на основе углеродных нанотрубок // Труды XI Национальной конференции по росту кристаллов (НКРК–2004). Москва. Институт кристаллографии РАН. 2004г. С.444.
8. С.С. Савинский, А.В. Белослудцев Симметричный анализ относительных движений в двухслойной нанотрубке // Письма в ЖТФ. 2005. Т.31. В.16. С.42–48.
9. С.С. Савинский, А.В. Белослудцев Структурный фактор многослойной углеродной нанотрубки. Симметричный анализ. // Тезисы докладов 5–ой Национальной конференции по

применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования наноматериалов и наносистем. М.: ИК РАН. 2005. С.289.

10. С.С. Савинский, А.В. Белослудцев Симметричный анализ относительных движений в двухслойной нанотрубке // Труды XXXI Международной зимней школы по теоретической физике “Коуровка–2006”. ИФМ УрОРАН. Екатеринбург. 2006. С.46.

11. С.С. Савинский, А.В. Белослудцев Феноменологические модели электронных спектров углеродных нанотрубок // Труды XXXI Международной зимней школы по теоретической физике “Коуровка–2006”. ИФМ УрОРАН. Екатеринбург. 2006. С.47.1