

СОЛИТОННЫЕ РЕШЕТКИ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

Белоненко М.Б.⁽¹⁾, Демушкина Е.В.⁽¹⁾, Лебедев Н.Г.*

Волгоградский государственный университет, просп. Университетский, 100,
г. Волгоград, 400062, Россия,

⁽¹⁾ Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет,
ул. Академическая, 1, г. Волгоград, 400074, Россия

* E-mail: nikolay.lebedev@volsu.ru

Введение

Недавние исследования показали, что нанотрубки обладают уникальными свойствами: очень высокой прочностью, проводимостью (полупроводниковой или металлической) и рядом других свойств, обуславливающих неограниченные возможности их применений, например в микроэлектронике [1]. Особенный интерес, как и следовало ожидать, вызывают нелинейные свойства нанотрубок, как акустической, так и электромагнитной природы. Так, в частности, нелинейные свойства углеродных нанотрубок, связанные с негармоничностью потенциала взаимодействия между соседними атомами углерода, исследовались в работах [2 - 4]. Авторы исследовали нелинейные колебательные свойства углеродных нанотрубок при помощи редукции основных уравнений колебаний к уравнению КдФ.

Интересным представляется сосредоточить внимание на нелинейных особенностях нанотрубок, вызванных сильным взаимодействием электронов [5]. Предлагается описывать их энергетическую структуру гамильтонианом Хаббарда-Хюккеля [6]. Интерес к модели Хаббарда так же обусловлен и тем, что она является одним из кандидатов, претендующих на описание эффектов высокотемпературной сверхпроводимости.

Результаты и обсуждение

Предлагается сосредоточить внимание на нелинейных особенностях нанотрубок, вызванных сильным взаимодействием электронов, описываемых гамильтонианом Хаббарда.

Будут рассматриваться однослойные углеродные нанотрубки (SWNT) малого радиуса (рис. 1). Это предполагает невозможность перехода к континуальному приближению по периметру SWNT. На рисунке Z ось направлена вдоль оси трубки и I ось – вдоль периметра SWNT. Графеновый слой состоит из углеродных гексагонов ориентированных так, чтобы C-C связи были параллельны оси SWNT. Т.е. изучаются «zig-zag» или (n,0) SWNT, где n – число гексагонов по периметру трубки.

Чтобы применить Фурье анализ, предполагается, что (n, 0) труба неограниченна вдоль Z оси.

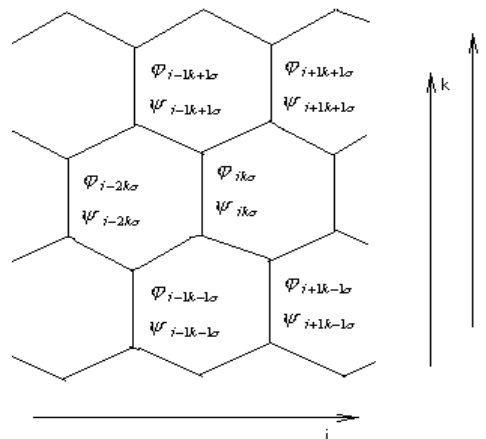


Рис. 1. Геометрия системы.

Как упоминалось выше, для изучения электронных состояний углеродной нанотрубки была использована модель Хаббарда [6]. Модель включает энергию перескока электрона и кулоновского отталкивания электронов на одном узле. Гамильтониан Хаббарда описанной системы:

$$H = - \sum_{j\Delta\sigma} t(a_{j+\Delta\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{j+\Delta\sigma}) + \mu \sum_{j\Delta} a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_j a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{j+\sigma}^+ a_{j-\sigma}, \quad (1)$$

где $a_{j\sigma}^+$, $a_{j\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона на узле j ($j = \{i, k\}$) со спином σ , t – интеграл перескока, U – кулоновская энергия; μ – химический потенциал.

Гейзенберговские уравнения движения операторов были решены в рамках следующих приближений. Решетка SWNT состоит из двух подрешеток. В качестве волновых функций обеих подрешеток рассматриваются функции φ и ψ , которые существенно изменяются на расстояниях больших, чем межатомное расстояние. Были построены фазовые портреты решений гейзенберговских уравнений и показано солитонное поведение электронных волновых функций (солитонные решетки).

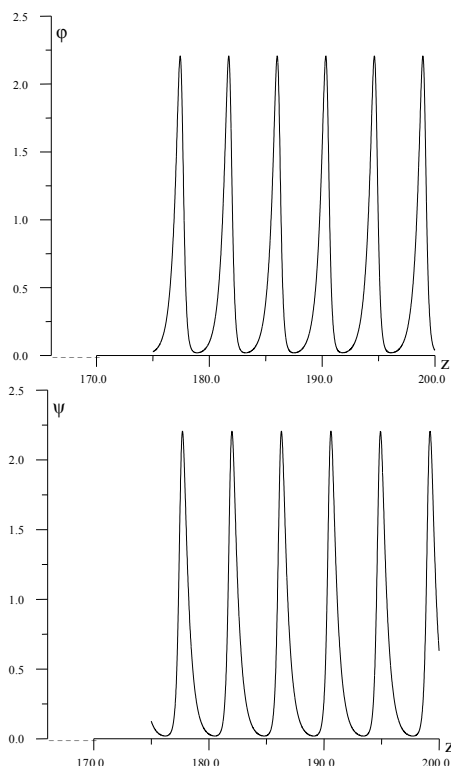


Рис. 2. Модули ненормированных волновых функций $\phi(z-vt)$, $\psi(z-vt)$.

Выводы

Во-первых, подобные решетки достаточно легко можно будет обнаружить с помощью дифракционных методов. Исследование данными методами позволит определить параметры решеток и связать их с соответствующими величинами в микроскопическом гамильтониане.

Во-вторых, данные решетки образуют регулярную структуру, которая фактически является доменной. Доменами здесь являются области с различной плотностью электронов. Наличие доменной структуры внесет свой вклад в восприимчивости нанотрубок и позволяет надеяться на обнаружение эффектов памяти в электронной подсистеме нанотрубок.

В третьих, существование регулярной периодической структуры приводит при движении вдоль такой структуры дополнительного электрона к квантованию его энергии (в силу теоремы Флоке). Подобное квантование приводит к наличию дополнительных энергетических уровней в спектрах углеродных нанотрубок. Также подобное квантование может привести к подавлению электрон-фононного взаимодействия (если уровни энергии будут достаточно разделены с фононным спектром) и увеличению проводимости углеродных нанотрубок.

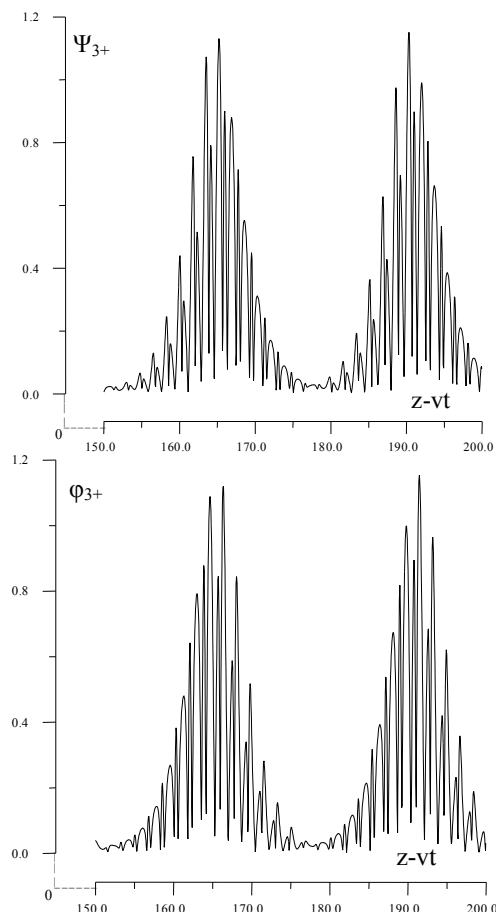


Рис. 3. Модули ненормированных волновых функций $\phi_{3+}(z-vt)$, $\Psi_{3+}(z-vt)$.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 04-03-96501).

Литература

1. Harris P.J.F. Carbon nanotubes and relative structures. New materials of twenty-first century, Cambridge University Press, 1999, 336 p.
2. Astakhova T.Yu., Gurin O.D., Menon M., Vinogradov G.A., Phys. Rev. B 64 (2001) 035418.
3. Astakhova T.Yu., Vinogradov G.A., Gurin O.D., Menon M., Khimicheskaya Fizika. 23, (2004).
4. Astakhova T.Yu., Dmitrieva V.A., Vinogradov G.A. Fullerenes, nanotubes and carbon nanostructures, 12(1,2) (2004) 133.
5. Belonenko M.B., Demushkina E.V., Lebedev N.G. Abstracts of symposium and summer school "Nano and Giga challenges in microelectronics: research and development opportunities", Cracow, Poland, 2004, September 13-17, p. 152.
6. Солитоны / Ред. Р. Буллаф, Р. Буллаф, Ф. Кодри. Москва: Мир. 1983. 408 с.