

3. *Barkovsky L. M. and Furs A. N.* Tensor eikonal approximations in asymptotic expansions for stratified media in the absence of commutation//Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 1999. V. 2. № 3. P. 61–71.
4. *Barkovsky L. M. and Furs A. N.* Eikonal groups of photon and phonon propagators in one-dimensional structures // J. Phys.A: Math. Gen. 2000. V. 33. P. 3241–51.
5. *Федоров Ф. И.* Теория гиротропии / М.: Наука, 1976. 456 с.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ОДНОСЛОЙНЫХ НАНОТРУБОК В ПРИБЛИЖЕНИИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

С. Л. Поденок

Углеродные нанотрубки – это квазиодномерные молекулярные образования из атомов углерода. Эти «молекулы» имеют вид полых цилиндров, стенки которых образованы из атомов углерода. Трубка конечной длины ограничивается фуллереновой крышкой.

Цель данной работы – теоретическое рассмотрение электронной структуры однослойных углеродных нанотрубок, расчет и анализ плотности электронных состояний однослойных нанотрубок для любой их геометрии.

Геометрия

Геометрически нанотрубку можно рассматривать так: участок графитового монослоя сворачивается в цилиндр, и затем этот цилиндр транслируется вдоль своей оси. Любой трубке можно поставить в соответствие пару целых чисел (n,m) , которые будут единственным образом определять эту трубку. В зависимости от чисел (n,m) различают 3 типа трубок: трубки, у которых второй индекс равен нулю, – это трубки в конфигурации zigzag; трубки, у которых индексы одинаковы, называются armchair; все остальные трубки называются хиральными.

Операция симметрии состоит из двух базовых операций: трансляции вдоль и поворота вокруг оси трубки, что соответствует винтовой оси.

Нами был получен ряд математических соотношений для трубок с любыми индексами (n,m) , полезных при рассмотрении геометрии углеродных нанотрубок.

Приближение сильной связи для графита

Зонную структуру нанотрубки можно получить, исходя из данных о зонной структуре графита.

Атом углерода обладает четырьмя валентными электронами. Три из них образуют σ -связи с соседними атомами, а четвертый находится в $2p_z$ состоянии. Именно он участвует в электропроводности.

Воспользовавшись приближением сильной связи и рассматривая взаимодействие первых ближайших соседей, можно получить дисперсионную зависимость для энергии π электронов графитового монослоя.

Зависимость энергии электрона E от квазиволнового вектора k для одномерной нанотрубки можно получить из соотношений для графита при помощи метода свертки зон.

Зонные структуры металлических нанотрубок можно отнести к двум типам:

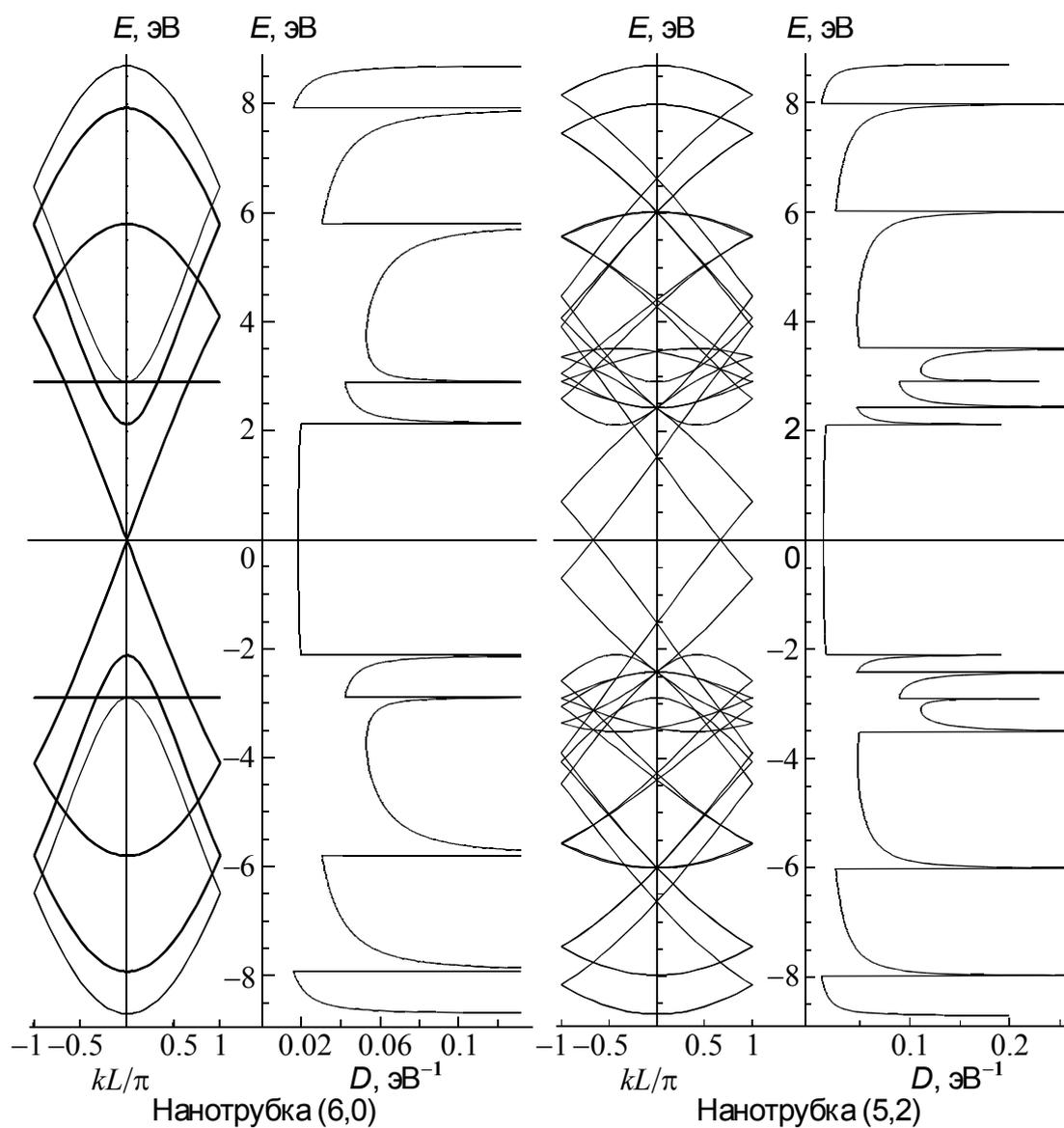


Рис. 1. Дисперсионные зависимости $E(kL/\pi)$:

где L – длина трубки, k – квазиволновой вектор и плотность электронных состояний (на атом углерода) D для нанотрубок (6,0) и (5,2)

- трубки, у которых четыре зоны пересекаются на уровне Ферми в центре зоны Бриллюэна. На рисунке изображен случай, когда зоны двукратно вырождены, что обозначено жирными линиями;

- трубки, у которых четыре зоны пересекаются на уровне Ферми, но уже попарно на расстояниях $2/3$ от центра зоны Бриллюэна.

Плотность электронных состояний $D(E)$ получена численно по простым аналитическим формулам. Результаты для трубок (6,0) и (5,2) представлены на рис. 1.

Примечателен тот факт, что у нанотрубки (6,0) появляется бездисперсионная зона (прямая линия на уровне энергии 2,9 эВ). Подобные зоны появляются в данном приближении у zigzag трубок с четным индексом n , причем как у полупроводниковых, так и у металлических. Это связано с тем, что на дисперсионной поверхности графита из-за симметрии существуют области, полностью совпадающие с прямой линией, которая проходит на уровне 2,9 эВ. Некоторые зоны ввиду симметрии относительно центра зоны Бриллюэна графитового монослоя являются двукратно вырожденными. На рисунке эти зоны нарисованы жирной линией.

Благодарю доктора физ.-мат. наук Поклонского Н.А. и кандидата физ.-мат. наук Кислякова Е.Ф. за помощь в подготовке этой работы.

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ И ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ СПЕКТРОМЕТРА КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

А. Е. Радько, А. В. Егоров

Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) света является одним из наиболее эффективных методов исследования строения вещества. Аналитические возможности спектроскопии КР для молекул основаны на существовании зависимости между структурой и химическим составом молекулы и ее спектром. Эта зависимость четко проявляется при изучении колебательного спектра – спектра инфракрасного (ИК) поглощения и спектра комбинационного рассеяния. Существенно при этом, что зачастую спектры КР и ИК поглощения взаимно дополняют друг друга, т. е. полный набор колебательных частот молекулы может быть получен из опыта, строго говоря, только на основе анализа обоих спектров. Зная колебательный спектр молекулы, можно сделать существенные выводы о ее структуре. Именно этим обусловлен интерес к разработке и применению комплексов аппаратуры