

01;05

Изменение электронного спектра углеродной нанотрубки при упругой деформации и относительном сдвиге атомных подрешеток

© M.J. Majid,¹ С.С. Савинский²

¹ University of Basrah / IRAQ-Basrah

² Удмуртский государственный университет,

Ижевск, Россия

e-mail: savinsky@uni.udm.ru

(Поступило в Редакцию 5 июля 2011 г.)

Теоретически исследован энергетический спектр π -электронов однослойной углеродной нанотрубки в зависимости от величины упругой деформации, представляющей собой одноосное растяжение–сжатие либо кручение трубки. Исследовано изменение энергетического спектра при атомной реконструкции нанотрубки. Приведены численные данные по ширине энергетической щели в спектре углеродной нанотрубки в зависимости от типов деформации.

В работе рассмотрена возможность изменения электронного спектра углеродной нанотрубки при упругой деформации и относительном сдвиге атомных подрешеток (реконструкции). Причиной изменения электронного спектра углеродной нанотрубки в рассматриваемых ситуациях является нарушение ближнего атомного порядка. Углеродная нанотрубка является квазиодномерной структурой. Общая проблема трансформации электронного спектра при упругой деформации структур, обладающих трансляционной симметрией, рассмотрена в [1].

Геометрически углеродную нанотрубку можно представить как результат сворачивания атомной полосы на графитовой плоскости — графене с последующим „склеиванием“ противоположных сторон полосы. Как показано в работе [2], в зонной структуре графена отсутствует запрещенная зона, причем в точках соприкосновения валентной зоны и зоны проводимости энергетический спектр электронов и дырок линейен. Условие периодичности волновой функции электрона в поперечном направлении графеновой полосы приводит к квантованию поперечной компоненты волнового вектора, в результате в зонной структуре полосы образуется энергетическая щель, которая наследуется углеродной нанотрубкой. Деформированную нанотрубку геометрически можно представить как результат деформирования полосы и последующую „склеивку“ полосы в углеродную нанотрубку. В данной постановке решалась задача о трансформации электронного спектра нанотрубки при упругой деформации [3] с использованием приближения сильной связи. Обсуждение возникающих проблем в случае более общих деформаций приведено в [4]. Авторами в дополнении к [3] рассматриваются упругая деформация и атомная реконструкция углеродной нанотрубки с позиций геометрического преобразования координат атомов, составляющих элементарную ячейку, и изменения параметров операторов винтовых поворотов, определяющих симметрию нанотрубки. Это позволяет решать задачу преобразования энергетического спектра

при упругой деформации нанотрубки с позиций изменения симметрии.

Обсудим вопросы атомного геометрического строения углеродной нанотрубки при сворачивании графитовой плоскости в углеродную нанотрубку. Для этого на плоскости выберем вектор \mathbf{C} (см. рис. 1), определяемый через базисные векторы \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 решетки, $\mathbf{C} = i_1\mathbf{a}_1 + i_2\mathbf{a}_2$. Целые числа (i_1, i_2) определяют индексы хиральности углеродной нанотрубки, с помощью которых нетрудно получить формулы для вычисления радиуса трубки и угла хиральности (угол между векторами \mathbf{C} и \mathbf{a}_1). Вектор \mathbf{C} соединяет два узла, которые совмещаются при сворачивании плоскости. Выбор системы координат (x', z') на рис. 1 соответствует ориентации графенового листа относительно координатных осей типа „зигзаг“, система координат (x, z) на рисунке соответствует произвольной ориентации координатных осей относительно графенового листа, θ — угол хиральности, значению $\theta = \pi/6$ соответствует случай ориентации типа „кресло“.

Рассматриваемая процедура сворачивания приводит к отождествлению точек на противоположных сторонах полосы, отстоящих друг от друга на вектор \mathbf{C} , края полосы являются параллельные линии, проходящие

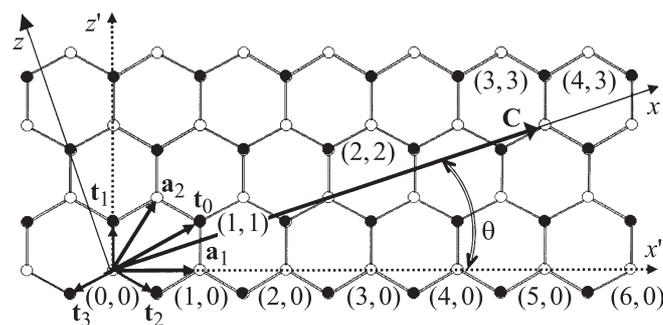


Рис. 1. Выбор базисных векторов и атомной полосы на графитовой плоскости для построения углеродной нанотрубки.