

РАСЧЕТ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ЧЕРЕЗ ДИСПЕРСИОННОЕ СООТНОШЕНИЕ ДЛЯ ЭНЕРГИИ ГРАФЕНА

М.А. Мосин

med-aid@yandex.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Описана реализация методики расчета зонной структуры одностенных углеродных нанотрубок типа «кресло» и «зигзаг», а также численные вычисления и формулы простейшего аналитического расчета. Получены дисперсионные соотношения энергии нанотрубок и их зонные структуры. Представленные результаты могут быть использованы для изучения электронных свойств одностенных углеродных нанотрубок типа «кресло» и «зигзаг», определения проводимости и в целях проведения сравнительного анализа

Ключевые слова

Графен, метод сильно связанных электронов, дисперсионное соотношение для энергии, зоны Бриллюэна, зонная структура, углеродная нанотрубка типа «кресло», углеродная нанотрубка типа «зигзаг»

Поступила в редакцию 29.05.2017

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2017

В 1991 году после изучения осадка, образующегося на катоде при распылении графита в электрической дуге, японским исследователем Иджима, углеродные нанотрубки привлекли внимание научного сообщества [1]. С тех пор проведено много экспериментов, которые показали, что углеродные нанотрубки обладают уникальными электронными [2], термическими [3] и механическими [4] свойствами. Наибольший интерес представляют электронные свойства, так как нанотрубки способны заменить металлы подобные алюминию и меди в интегральных схемах [5].

Однако из-за малых размеров довольно сложно экспериментально изучать свойства нанотрубок, поэтому прибегают к различным методам математического моделирования. Среди существующих методов моделирования отметим метод сильно связанных электронов. Его используют в основном при моделировании и изучении электронных свойств зонной структуры нанотрубок. Однако в основе метода лежит моделирование дисперсионного соотношения для энергии графена, наноматериала из которого получают нанотрубки. Попытаемся разобраться, как можно получить зонную структуру углеродных нанотрубок из имеющегося соотношения.

Структура углеродных нанотрубок. Графен (графитовый слой) — плоскость из атомов углерода, которые, благодаря ковалентной связи между ними, формируют шестиугольную решетку (рис. 1). Длина ковалентной связи между двумя атомами $a_0 = 0,142-0,144$ нм.

Графитовый слой рассматривается как решетка, сформированная из элементарных ячеек двух соседних атомов (А и Б) (рис. 1), повторяющихся в направлении базисных векторов \vec{a}_1 и \vec{a}_2 , при этом

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{3a_0}{2}\vec{i} + \frac{\sqrt{3}a_0}{2}\vec{j}; \\ \vec{a}_2 &= \frac{3a_0}{2}\vec{i} - \frac{\sqrt{3}a_0}{2}\vec{j}.\end{aligned}\quad (1)$$

Углеродными нанотрубками называют протяженные цилиндрические структуры, состоящие из свернутых гексагональных сеток с атомами углерода в узлах, полученных при сворачивании графитового слоя без шва.

Геометрически нанотрубки могут быть разделены на одностенные, полученные путем сворачивания только одного слоя графита (SWCNT), и многостенные, представляющие собой систему находящихся внутри одностенной нанотрубки нескольких других, но меньших по размеру нанотрубок (MWCNT).

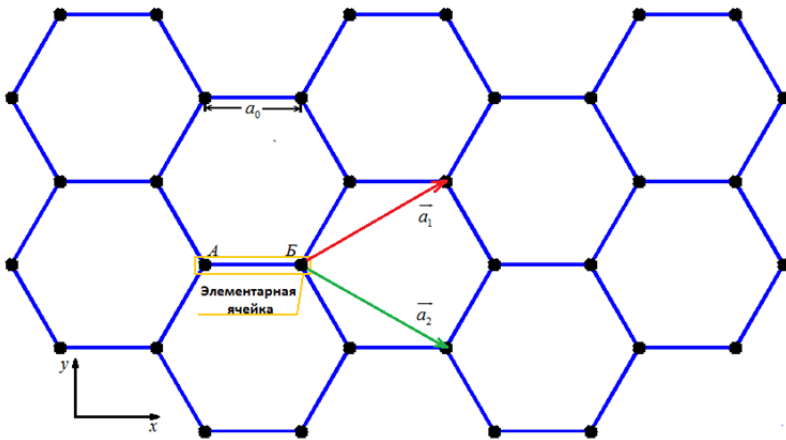


Рис. 1. Графитовый слой в виде решетки элементарных ячеек:

a_1, a_2 — базисные векторы; a_0 — длина ковалентной связи между двумя атомами; А — левый атом углерода элементарной ячейки; Б — правый атом углерода элементарной ячейки

Нанотрубки имеют диаметр от 0,4 до 100 нм, длину — от 1 мк до 1 мм [6]. Направления сворачивания графитового слоя определяются вектором хиральности [7]:

$$\vec{C}_h = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2, \quad (2)$$

где m и n — количества элементарных ячеек нанотрубки в направлениях векторов \vec{a}_1 и \vec{a}_2 .

Нанотрубки могут быть отнесены в соответствии с вектором хиральности \vec{C}_h к ахиральным (симморфным) или хиральным (несимморфным) [8]. Только два типа нанотрубок можно назвать ахиральными — «кресло» (armchair) и «зигзаг» (zigzag). Данная классификация связана с получившимся «узором», расположенным параллельно направлению вектора хиральности слоя графена (рис. 2). Остальные трубки, не имеющие таких особенностей, принято относить к хиральным.

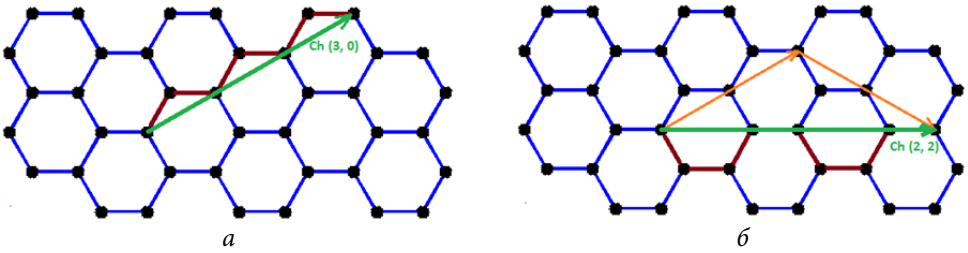


Рис. 2. Направление вектора хиральности, определяющего тип нанотрубок:

a — «зигзаг»; *б* — «кресло»

Углеродные нанотрубки типа «кресло» — это нанотрубки, где хиральный вектор \vec{C}_h параллелен оси X , поэтому угол θ между хиральным вектором \vec{C}_h и вектором \vec{a}_1 составляет 30° и $m = n$.

Углеродные нанотрубки типа «зигзаг» — это нанотрубки, где хиральный вектор \vec{C}_h параллелен оси Y , но из-за гексагональной симметрии шестиугольной решетки угол θ между хиральным вектором \vec{C}_h и вектором \vec{a}_1 составляет 0° , и m представляет собой любое положительное целое число, в то время как $n = 0$.

Для хиральных нанотрубок угол θ принимает любые значения, за исключением 0° и 30° . Хиральный вектор \vec{C}_h может принимать любые положительные целые значения за исключением $m = n$ и $n = 0$.

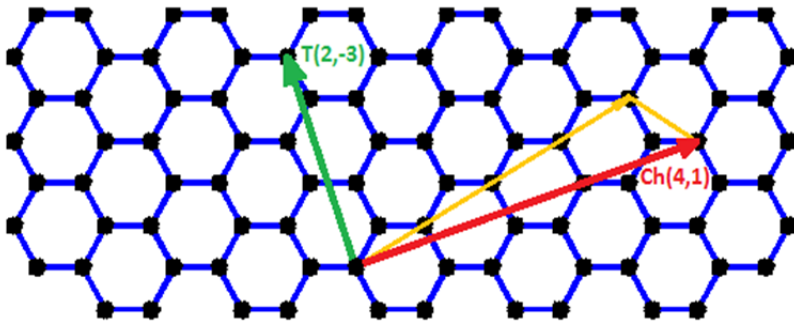


Рис. 3. Вектор хиральности нанотрубки и соответствующий ей вектор трансляции

Другим важным вектором является вектор трансляции (смещения) \vec{T} , который определяет периодичность структуры в направлении перпендикулярном направлению хирального вектора \vec{C}_h (рис. 3). Вектор трансляции запишем как

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2, \tag{3}$$

где t_1, t_2 — коэффициенты разложения вектора трансляции, $t_1 = \frac{2n+m}{d_R}$,

$t_2 = -\frac{2m+n}{d_R}$; d_R — наибольший общий делитель $2n+m$ и $2m+n$.

Метод сильно связанных электронов. Чтобы получить зонную структуру углеродных нанотрубок необходимо знать дисперсионное соотношение для энергии графена [9]. Воспользовавшись методом сильно связанных электронов ($N = 2n = n + m$ орбитальной моделью) было получено дисперсионное соотношение для энергии графена, представленное как следующее уравнение:

$$E(\vec{k}) = \varepsilon_{2p_z} \pm tw(\vec{k}), \quad (4)$$

где $w(\vec{k}) = \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{3k_x a_0}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a_0}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y a_0}{2}\right)}$.

Значения $E(\vec{k}) > \varepsilon_{2p_z}$ и $E(\vec{k}) < \varepsilon_{2p_z}$ представляют собой соответственно зону проводимости и валентную зону слоя графена. Точки соприкосновения зон ($E(\vec{k}) = \varepsilon_{2p_z}$) называют k -точками. Если $\varepsilon_{2p_z} = 0$, то выражение (4) называют уравнением Дирака, а k -точки, соответственно, точками Дирака. Результат численного расчета уравнения Дирака представлен на рис. 4.

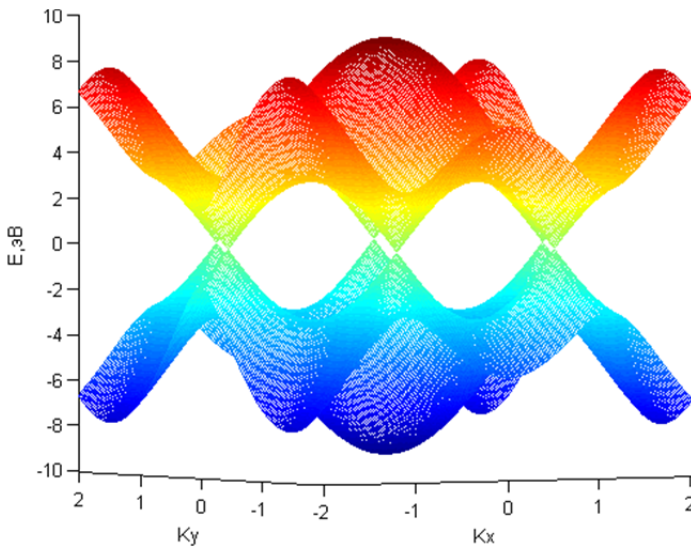


Рис. 4. Дисперсионное соотношение для энергии графена ($\varepsilon_{2p_z} = 0$)

Данное представление численного расчета дисперсионного соотношения для энергии графена будет использована при расчете зонных структур углеродных нанотрубок.

Подзонная теория. Перед началом вычислений необходимо проверить положение точек Дирака, чтобы они совпадали с местами соединения зоны проводимости и валентной зоны. При соединении данных точек в k -пространстве должен получиться шестиугольник [10]. Данные точки играют главную роль в определении наличия запрещенной зоны в полученной зонной структуре. Кроме того,

для удобства визуализации достаточно использовать только зону проводимости, так как валентная зона будет автоматически учитываться при расчете (рис. 5).

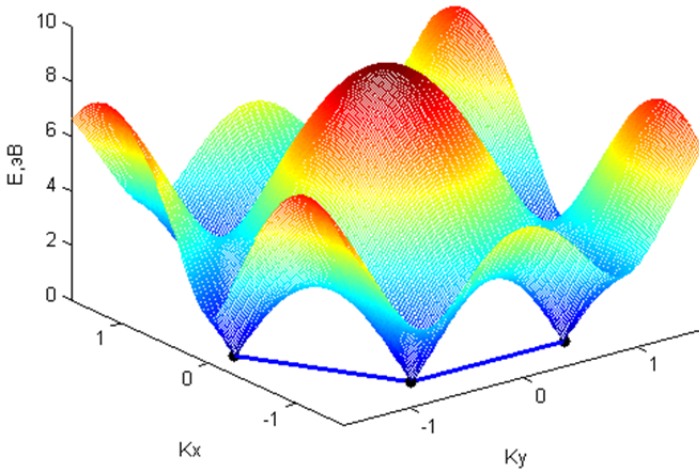


Рис. 5. Дисперсионное соотношение для энергии зоны проводимости графена и положение точек Дирака

Если слой графена представляет собой бесконечную плоскость, то его зонная структура непрерывна. Но как только слой графена сворачивается в нанотрубку, допустимые значения $E(\vec{k})$ ограничиваются привязкой периодических граничных условий по направлению скручивания, задаваемым хиральным вектором \vec{C}_h . В результате происходит квантование волнового вектора \vec{k} . Периодическое граничное условие зададим с помощью выражения

$$\vec{k}\vec{C}_h = (k_x\vec{i} + k_y\vec{j})(n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2) = k_x(n+m)\frac{3a_0}{2} + k_y(n-m)\frac{\sqrt{3}a_0}{2} = 2\pi\nu, \quad (5)$$

где ν — целое число.

Уравнение (5) описывает семейство параллельных прямых. Каждая прямая соответствует определенному числу ν . Поэтому дисперсионное соотношение для энергии углеродной нанотрубки определяется набором одномерных дисперсионных соотношений $(E_\nu(\vec{k}))$ для каждой подзоны ν вдоль этих прямых. Данные одномерные подзоны являются поперечными сечениями дисперсионного соотношения для энергии графена.

В случае, когда речь идет о нанотрубках, волновой вектор $\vec{k}(k_x, k_y)$ удобнее представить в виде [11]

$$\vec{k}(k_\perp, k_\parallel) \equiv \vec{k}(\nu, \delta k_\perp, k), \quad (6)$$

где δk_\perp — параметр, зависящий от хиральности углеродной нанотрубки, показывает расстояние между подзонами; k_\perp, k_\parallel — векторы обратной решетки.

Количество подзон участвующих в расчете зависит от вводимых индексов хиральности n и m и может быть определено по следующему алгоритму [12]:

- 1) ищем наибольший общий делитель dr для $2n + m$ и $2m + n$;
- 2) определяем число элементарных ячеек в нанотрубке по формуле

$$N = 2(n^2 + m^2 + nm) / dr. \quad (7)$$

Число элементарных ячеек показывает, какое количество подзон будет использовано в дальнейших вычислениях и уже с их помощью получают зонную структуру. Воспользуемся этой теорией и определим зонные структуры нанотрубок типа «кресло» и «зигзаг».

Расчет зонной структуры углеродных нанотрубок типа «кресло». Воспользуемся описанным выше алгоритмом для расчета зонной структуры углеродных нанотрубок типа «кресло», где $m = n$:

- 1) наибольший общий делитель всегда будет равен $dr = 3n$;
- 2) находим число элементарных ячеек

$$N = 2(n^2 + m^2 + nm) / dr = 2(n^2 + n^2 + n^2) / 3n = 2n.$$

Количество подзон нанотрубок типа «кресло» также можно представить в виде выражения

$$N = 2n = n + m.$$

Прежде чем, получить дисперсионное соотношение для энергии графена на подзонах, необходимо установить, в каком направлении они формируются, в соответствии с хиральным вектором \vec{C}_h . Для этого в уравнение (5) подставим условие соответствия нанотрубок типа «кресло» $m = n$:

$$\vec{k}\vec{C}_h = (k_x \vec{i} + k_y \vec{j})(n\vec{a}_1 + n\vec{a}_2) = k_x(n+n)\frac{3a_0}{2} + k_y(n-n)\frac{\sqrt{3}a_0}{2} = k_x 3a_0 n = 2\pi v. \quad (8)$$

Преобразуем выражение (8) и получим

$$k_x = \frac{2\pi v}{3a_0 n}. \quad (9)$$

Формула (9) показывает, что хиральный вектор, и соответственно подзоны, распространяются вдоль направления волнового вектора k_x , в то время как вектор трансляции будет идти перпендикулярно, и будет совпадать с вектором k_y . Для упрощения записи обозначим k_y в соответствии с (6):

$$k_y = k. \quad (10)$$

Ширина подзоны неограниченна и может принимать любое значение. Но для построения дисперсионного соотношения для энергии необходимо ввести

предельные значения ширины данной подзоны. Поскольку с привязкой периодических граничных условий происходит периодизация результатов, то лучшим ограничением в данном случае являются границы первой зоны Бриллюэна, задаваемые следующим образом [13]:

$$\begin{aligned}
 A &= -\frac{\pi}{T}, \quad \text{при } k \leq 0 \\
 A &= \frac{\pi}{T}, \quad \text{при } k > 0
 \end{aligned}
 \tag{11}$$

где T — длина вектора трансляции.

Подзоны всегда начинаются с максимальной возможной энергии, что находится при волновом векторе $k=0$ в центре зоны Бриллюэна с соответствующим начальным номером подзоны $v=0$, затем последовательно чередуются с увеличением номера v и волнового вектора k с шагом δk_{\perp} . Если учесть, что количество подзон всегда является четным для нанотрубок типа «кресло», а зоны распределены симметрично относительно подзоны $v=N/2$, то начало отсчета подзон целесообразно сдвинуть. В случае нанотрубок типа «кресло» началом отсчета подзон удобно считать $v=n$, так как независимо от того, какой будет n , одна из подзон всегда попадет на уровень $v=N/2$ [14]. Следует отметить, что из-за такой симметрии, каждая подзона после $v=N/2$ может получить схожие с предыдущими подзонами результаты.

Далее построим деление на подзоны семейства параллельных прямых шестиугольника графена, полученного посредством соединения точек Дирака (рис. 6). Видно что, все подзоны всегда будут помещаться в данный шестиугольник, захватывая при этом точки Дирака. Единственным изменяемым параметром является расстояние между подзонами δk_{\perp} , которое уменьшается с увеличением индекса хиральности.

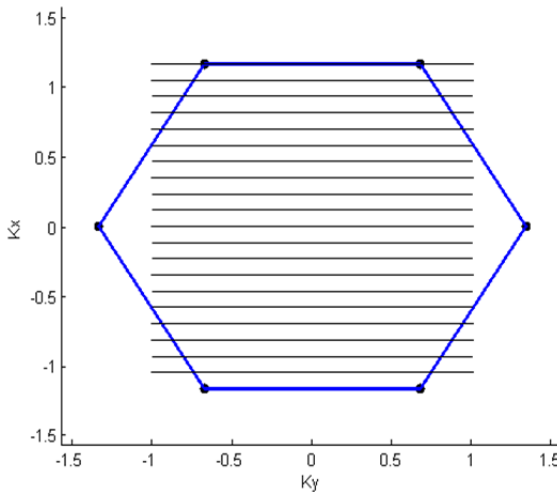


Рис. 6. Расположение подзон шестиугольника графена, полученного путем соединения точек Дирака (нанотрубка типа «кресло»)

Произведем то же деление на подзоны, используя дисперсионное соотношение для энергии зоны проводимости графена (рис. 7, а). Как было сказано ранее, подзоны представляют собой поперечные сечения, поэтому для получения зонной структуры нанотрубки необходимо исключить из расчета все, что не охвачено подзонами (рис. 7, б).

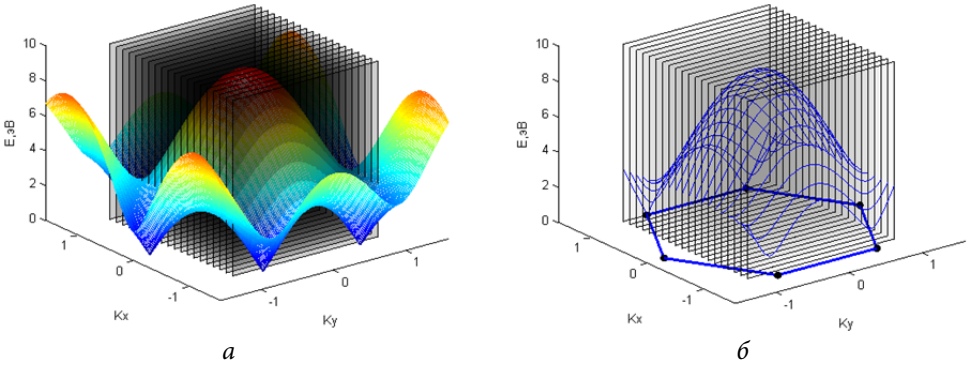


Рис. 7. Подзоны дисперсионного соотношения для энергии графена (а) и «отсеченные» подзонами энергии (б)

Для получения конечного результата в виде дисперсионного соотношения для энергии зоны проводимости нанотрубки (рис. 8, а) необходимо объединить значения энергий, «отсеченных» подзонами в общую схему методом сложения зон [15]. Значения на подзонах валентной зоны автоматически захватывались вместе с зоной проводимости, поэтому в объединении участвует и валентная зона.

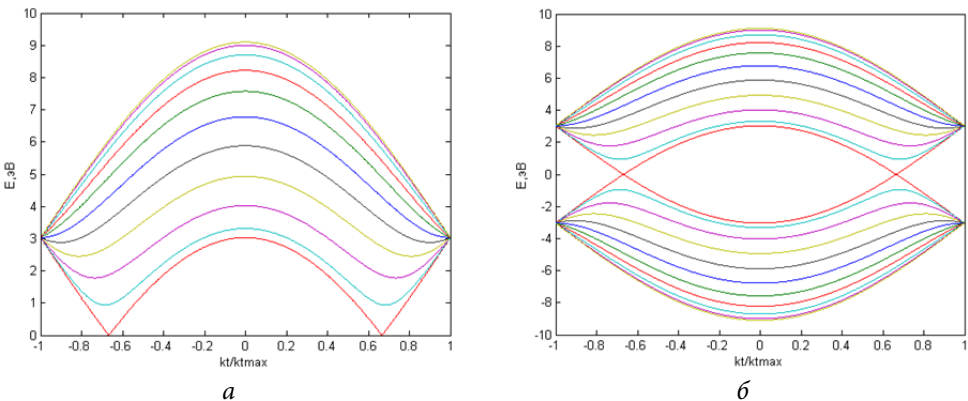


Рис. 8. Дисперсионное соотношение для энергии зоны проводимости (а) и зонная структура нанотрубки типа «кресло» (б)

Результат же представляет собой дисперсионное соотношение для энергии углеродной нанотрубки типа «кресло» (рис. 8, б).

Существует еще и аналитический вариант нахождения дисперсионного соотношения для энергии нанотрубки типа «кресло». Для этого подставим в уравнение (4) выражения (9), (10) и запишем

$$E(k, \nu) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\nu\pi}{n}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}ka_0}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}ka_0}{2}\right)}. \quad (12)$$

Расчет зонной структуры углеродных нанотрубок типа «зигзаг». Воспользуемся тем же алгоритмом, что и ранее, теперь для расчета зонной структуры нанотрубок типа «зигзаг», где $m = 0$:

наибольший общий делитель всегда будет $dr = n$;

найдем число элементарных ячеек

$$N = 2(n^2 + m^2 + nm) / dr = 2(n^2 + 0^2 + 0n) / n = 2n.$$

Определим, в каком направлении формируются подзоны в соответствии с хиральным вектором \vec{C}_h . Для этого в уравнение (5) подставим условие соответствия нанотрубок типа «зигзаг» $m = 0$ и получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} \vec{k}\vec{C}_h &= (k_x \vec{i} + k_y \vec{j})(n\vec{a}_1 + 0\vec{a}_2) = \\ &= k_x(n+0)\frac{3a_0}{2} + k_y(n-0)\frac{\sqrt{3}a_0}{2} = k_x \frac{3a_0}{2}n + k_y \frac{\sqrt{3}a_0}{2}n = 2\pi\nu. \end{aligned} \quad (13)$$

Вектор трансляции нанотрубок типа «зигзаг» имеет узор на границе в виде кресла, а хиральный вектор в виде зигзага. Это означает, что вектор трансляции нанотрубок типа «зигзаг» направлен по оси x , в то время как хиральный вектор по оси y . Поэтому выражение (13) может быть записано в виде

$$k_y \sqrt{3}a_0 n = 2\pi\nu. \quad (14)$$

Преобразовав выражение (14), получим

$$k_y = \frac{2\pi\nu}{\sqrt{3}a_0 n}. \quad (15)$$

Выражение (15) показывает, что хиральный вектор, и соответственно подзоны формируются вдоль направления волнового вектора k_y , в то время как вектор трансляции будет направлен перпендикулярно, и будет совпадать с вектором k_y . Для упрощения записи в соответствии с (6) запишем

$$k_x = k. \quad (16)$$

В нанолентах типа «зигзаг» подзоны всегда начинаются с максимальной возможной энергии соседних симметричных по оси волнового вектора k_y , что находится при волновом векторе с номером подзоны $\nu = n$, а далее следуют с уменьшением номера и волнового вектора k с шагом δk_{\perp} .

Построим деление на подзоны семейством параллельных прямых шестиугольника графена (рис. 9). Следует отметить, что подобно нанотрубкам типа «кресло» единственным изменяемым параметром является расстояние между подзонами δk_{\perp} , которое уменьшается с увеличением индекса хиральности. Однако главным отличием от нанотрубок типа «кресло» является то, что не при каждом индексе хиральности подзоны будут захватывать точки Дирака, что играет важнейшую роль в определении зонной структуры нанотрубки. Например, в нанотрубке (10, 0) точки Дирака не захвачены.

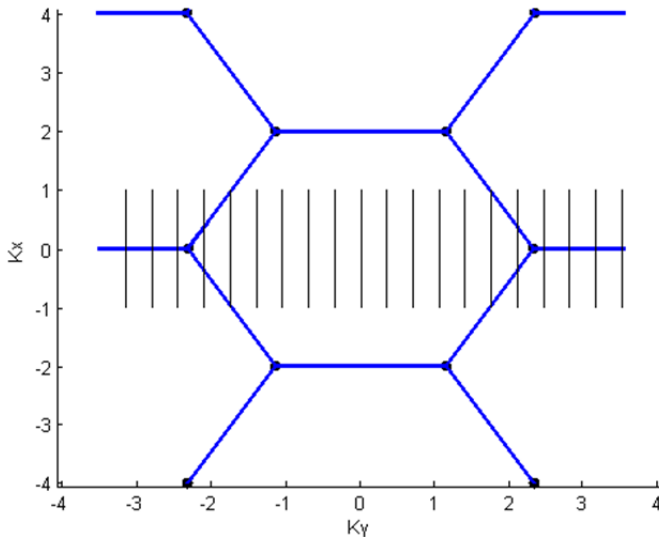


Рис. 9. Расположение подзон нанотрубки типа «зигзаг»

Произведем деление на подзоны дисперсионного соотношения для энергии зоны проводимости графена (рис. 10, а). Для получения зонной структуры нанотрубки необходимо исключить из расчета все, что не охвачено подзонами (рис. 10, б).

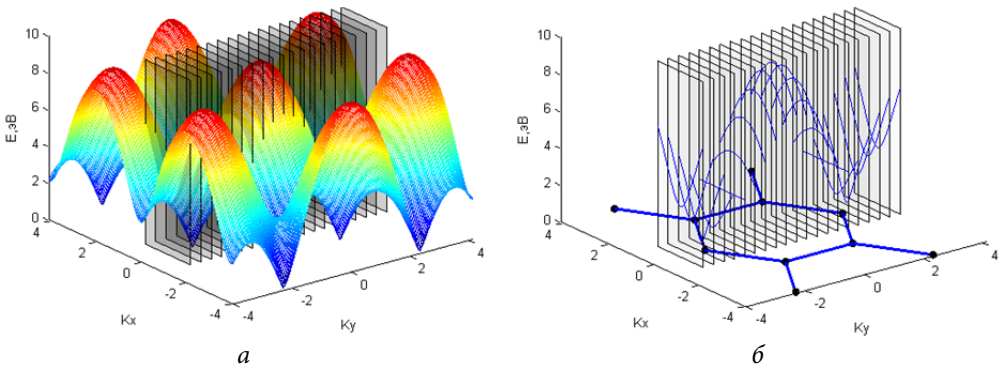


Рис. 10. Подзоны дисперсионного соотношения для энергии графена (а) и «отсеченные» подзонами энергии (б)

Объединим значения энергий, «отсеченных» подзонами, методом сложения зон (рис. 11, а). В результате получим дисперсионное соотношение для энергии углеродной нанотрубки типа «зигзаг» (рис. 11, б).

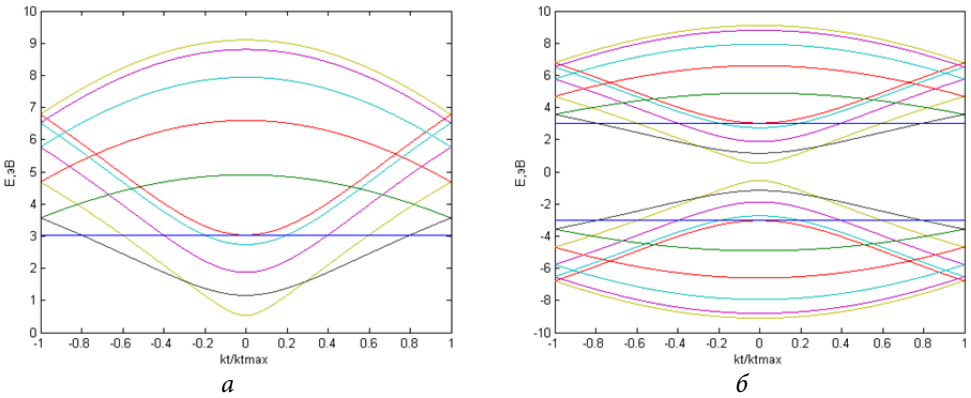


Рис. 11. Дисперсионное соотношение для энергии зоны проводимости (а) и зонная структура нанотрубки типа «зигзаг» (б)

Аналитический вариант нахождения дисперсионного соотношения для энергии нанотрубки типа «зигзаг» получается аналогично тому, как находили такое соотношение для нанотрубок типа «кресло». Подставим в уравнение (4) выражения (15) и (16), тогда запишем

$$E(k, \nu) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\nu\pi}{n}\right) \cos\left(\frac{3ka_0}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\nu\pi}{n}\right)}. \quad (17)$$

Определение наличия запрещенной зоны. Для того чтобы определить наличие запрещенной зоны, проанализируем полученные зонные структуры нанотрубок типа «кресло» и «зигзаг» (см. рис. 8, б и 11, б). Из рисунков видно, что нанотрубки типа «кресло» имеют две энергетические линии, значения которых близки к нулю (рис. 12, а). Связано это с тем, что как было сказано ранее, одна или две подзоны независимо от заданных индексов хиральности всегда будет захватывать точки Дирака. Следовательно, в зонной структуре нанотрубки типа «кресло» присутствует запрещенная зона, но она имеет достаточно малую ширину, поэтому ей можно пренебречь. На основании этого можно сделать вывод, что полученная нанотрубка будет обладать металлическими свойствами.

В нанотрубках типа «зигзаг» ни одна из энергетических линий не достигает близкого к нулю значения (рис. 12, б). Следовательно, в зонной структуре данной нанотрубки имеется запрещенная зона, для определения ширины которой необходимо сложить абсолютные значения минимальной энергии зоны проводимости и максимальной энергии валентной зоны, а значит, данная нанотрубка обладает полупроводниковыми свойствами. Отметим, что полученный результат не является истинным для всех нанотрубок.

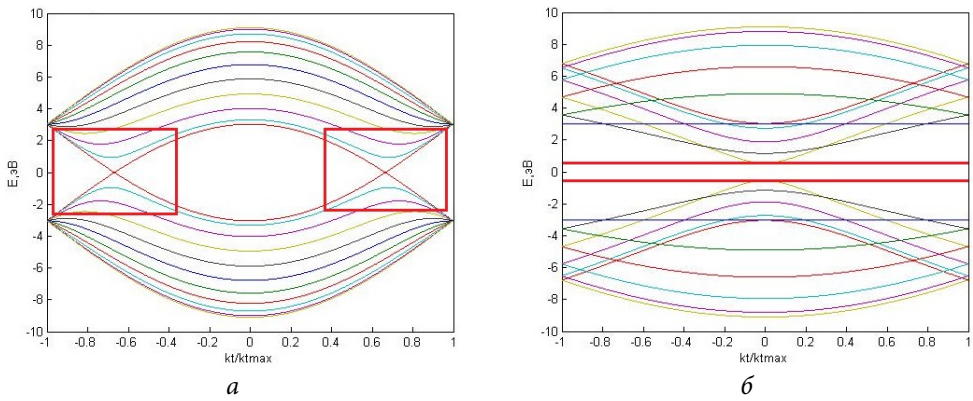


Рис. 12. Отсутствие (а) и наличие (б) запрещенной зоны в нанотрубках типа «кресло» и «зигзаг» соответственно

Изменение ширины запрещенной зоны для различных индексов хиральности. Для проведения расчетов выбран диапазон индексов хиральности от 4 до 40, то есть смоделировано 37 нанотрубок для каждого типа.

Сначала рассмотрим нанотрубки типа «кресло». Результаты расчетов ширины запрещенной зоны для различных индексов хиральности представлены на рис. 13. Из рисунка видно, что нанотрубки данного типа обладают достаточно малой шириной запрещенной зоны на всем диапазоне моделирования. Следовательно, подобно ранее сделанному выводу, все нанотрубки типа «кресло» будут обладать металлическими свойствами.

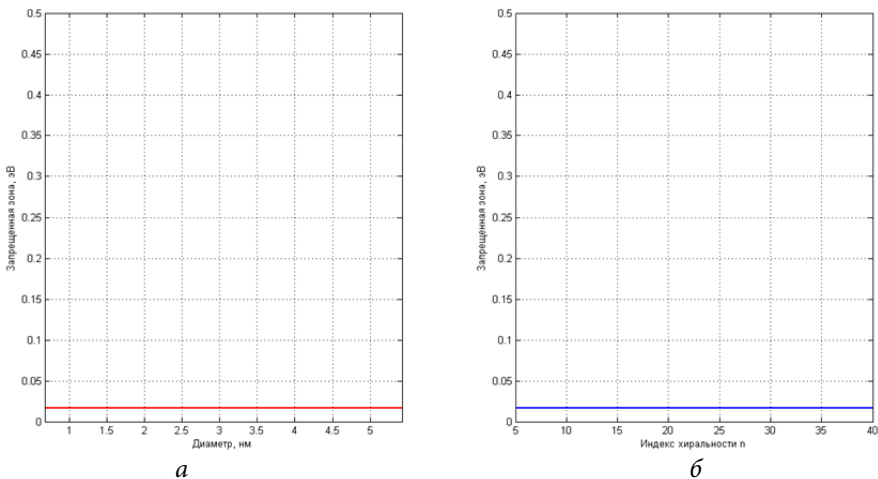


Рис. 13. Малая ширина запрещенной зоны нанотрубок типа «кресло» с различными индексами хиральности:

a — зависимость ширины запрещенной зоны от диаметра нанотрубки; *б* — зависимость ширины запрещенной зоны от индекса хиральности нанотрубки

Далее рассмотрим нанотрубки типа «зигзаг». Результаты расчетов ширины запрещенной зоны представлены на рис. 14.

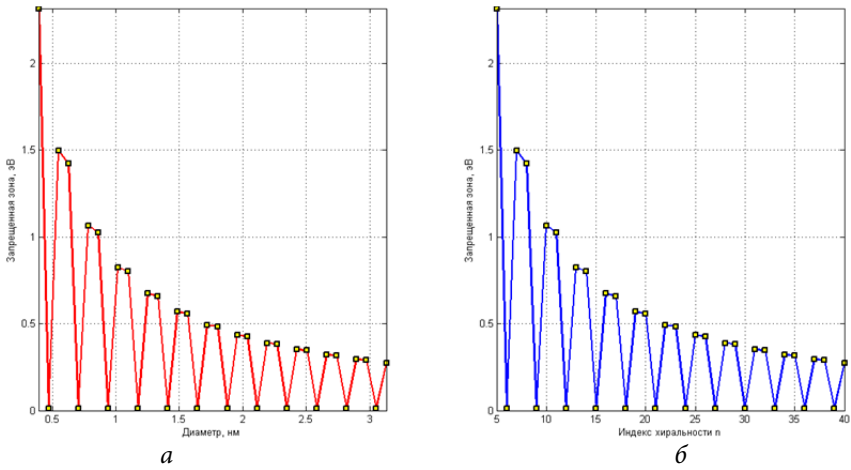


Рис. 14. Ширина запрещенной зоны нанотрубок типа «зигзаг» с различными индексами хиральности:

a — зависимость ширины запрещенной зоны от диаметра нанотрубки; *b* — зависимость ширины запрещенной зоны от индекса хиральности нанотрубки

В ходе моделирования нанотрубок данного типа с различным индексом хиральности было установлено, что они обладают «скачущей» шириной запрещенной зоны. Из рисунка понятно, что в отличие от нанотрубок типа «кресло», у некоторых нанотрубок типа «зигзаг» полностью отсутствует запрещенная зона. При проведении расчетов также обнаружено, что если индекс хиральности кратен трем, то данная нанотрубка будет обладать металлическими свойствами, а значит, все остальные будут иметь полупроводниковые свойства. Исключим из полученного результата, представленного (см. рис. 14) все металлические нанотрубки и посмотрим, как меняется ширина запрещенной зоны.

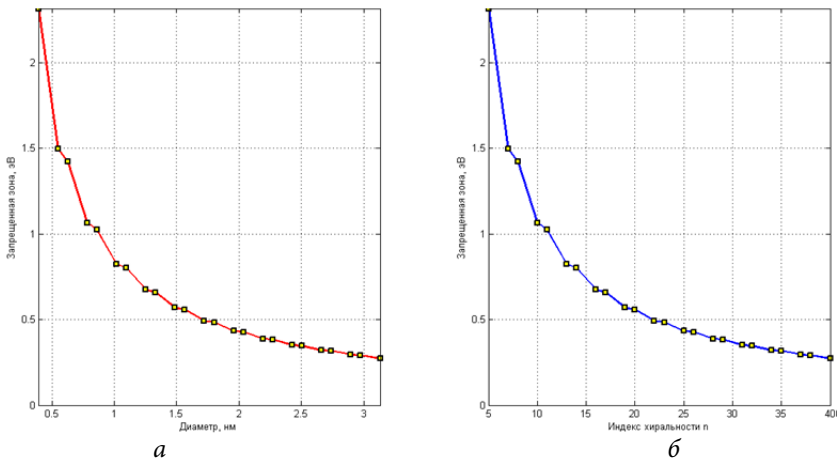


Рис. 14. Ширина запрещенной зоны нанотрубок типа «зигзаг» с различными индексами хиральности без учета металлических трубок:

a — зависимость ширины запрещенной зоны от диаметра нанотрубки; *b* — зависимость ширины запрещенной зоны от индекса хиральности нанотрубки

Заметно, что вначале наблюдается сильное падение значения ширины запрещенной зоны, которое с увеличением индекса хиральности замедляется. В таком случае можно предположить, что при достаточно высоких значениях индексах хиральности ширина запрещенной зоны для полупроводниковых нанотрубок типа «зигзаг» достигнет некоторого постоянного значения.

Выводы. Итак, чтобы изучить зонную структуру углеродных нанотрубок необходимо знать дисперсионное соотношение для энергии нанотрубок. Для нахождения данного соотношения прибегли к использованию определенной методики над дисперсионным соотношением для энергии электронов в слое графена. Сначала применили метод одномерных подзон, представляющих собой поперечные сечения дисперсионного соотношения для энергии графена, затем использовали основное свойство первой зоны Бриллюэна. Наконец, применили метод сложения подзон для получения итоговой картины.

Полученные результаты представляют собой зонные структуры нанотрубок типа «кресло» и «зигзаг» с использованием метода сильно связанных электронов, где легко оценить наличие запрещенной зоны. Однако следует помнить, что результаты численного моделирования методом сильно связанных электронов имеют «идеализированный» характер вследствие исключения из расчета возможных деформаций и дефектов наноструктуры. Хотя это не означает, что данным методом стоит пренебречь, поскольку он является хорошим инструментом для быстрой оценки возможной зонной структуры нанотрубок.

Литература

- [1] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 1991, vol. 354, pp. 56–58.
- [2] Pop E., Dai H. Electrical and thermal transport in metallic single-wall carbon nanotubes on insulating substrates. *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 101, no. 9, pp. 093710.
- [3] Morimoto T., Ichida M., Ikemoto Yu., Okazaki T. Temperature dependence of plasmon resonance in single-walled carbon nanotubes. *Physical Review B*, 2016, vol. 93, no. 19, pp. 195409.
- [4] Tsuchikawa R., Heligman D., Blue B.T., Zhang Z.Y., Ahmadi A., Mucciolo E.R., Hone J., Ishigami M. Scattering strength of potassium on a carbon nanotube with known chirality. *Physical Review B*, 2016, vol. 94, no. 4, pp. 045408.
- [5] Graham A.P., Duesberg G.S., Seidel R., Liebau M., Unger E., Kreupl F., Hönlein W. Towards the integration of carbon nanotubes in microelectronics. *Diamond & Related Materials*, 2004, vol. 13, no. 4–8, pp. 1296–1300.
- [6] White C.T., Robertson D.H., Mintmire J.W. Helical and rotational symmetries of nanoscale graphitic tubules. *Physical Review B*, 1993, vol. 47, no. 9, pp. 5485–5488.
- [7] Spesyvtseva S., Shoji S., Kawata S. Chirality-selective optical scattering force on single-walled carbon nanotubes. *Physical Review Applied*, 2015, vol. 3, no. 4, pp. 044003.
- [8] Montes E., Schwingenschlögl U. Nanotubes based on monolayer blue phosphorus. *Physical Review B*, 2016, vol. 94, no. 3, pp. 035412.
- [9] Kreupl F., Graham A.P., Duesberg G.S., Steinhögl W., Liebau M., Unger E., Hönlein W. Carbon nanotubes in interconnect applications. *Microelectronic Engineering*, 2002, vol. 64, no. 1–4, pp. 399–408.

- [10] [Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S. *Physical properties of carbon nanotubes*. London, Imperial college press. 1998. 272 p.
- [11] Datta S. *Quantum transport: Atom to transistor*. New York, Cambridge University Press, 2013. 417 p.
- [12] Ashcroft N.W., Mermin N.D. *Solid state physics*. Philadelphia, Saunders College Publishing, 1976. 272 p.
- [13] Hasegawa M., Nishidate K., Yoshimoto N. Collapsed armchair single-walled carbon nanotubes as an analog of closed-edged bilayer graphene nanoribbons. *Physical Review B*, 2015, vol. 92, no. 24, pp. 245429.
- [14] Negi S., Warriar M., Chaturvedi S., Nordlund K. Molecular dynamic simulations of a double-walled carbon nanotube motor subjected to a sinusoidally varying electric field. *Computational Materials Science*, 2009, vol. 44, no. 3, pp. 979–987.
- [15] Mylvaganam K., Zhang L.C. Important issues in a molecular dynamics simulation for characterising the mechanical properties of carbon nanotubes. *Carbon*, 2004, vol. 42, no. 10, pp. 2025–2032.

Мосин Михаил Александрович — студент кафедры «Физика», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Научный руководитель — О.С. Еркович, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Физика», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

CALCULATION OF CARBON NANOTUBES ZONE STRUCTURE THROUGH DISPERSIVE RELATION FOR GRAPHEN ENERGY

М.А. Мосин

med-aid@yandex.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

Abstract

The article describes the implementing techniques for calculating the band structure of single-walled carbon nanotubes of the "chair" and "zigzag" type, as well as numerical calculations and formulas of the simplest analytical calculation. We obtained the dispersion relations of the nanotubes energy and their band structures. Findings of the research can be useful for studying electronic properties of carbon nanotubes of the "chair" and "zigzag" type, determining the conductivity and for the purposes of comparative analysis.

Keywords

Graphene, strongly coupled electron method, dispersion relation for energy, Brillouin zones, band structure, carbon nanotubes of the "chair" type, carbon nanotubes of the "zigzag" type

© Bauman Moscow State Technical University, 2017

References

- [1] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 1991, vol. 354, pp. 56–58.
- [2] Pop E., Dai H. Electrical and thermal transport in metallic single-wall carbon nanotubes on insulating substrates. *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 101, no. 9, pp. 093710.
- [3] Morimoto T., Ichida M., Ikemoto Yu., Okazaki T. Temperature dependence of plasmon resonance in single-walled carbon nanotubes. *Physical Review B*, 2016, vol. 93, no. 19, pp. 195409.
- [4] Tsuchikawa R., Heligman D., Blue B.T., Zhang Z.Y., Ahmadi A., Mucciolo E.R., Hone J., Ishigami M. Scattering strength of potassium on a carbon nanotube with known chirality. *Physical Review B*, 2016, vol. 94, no. 4, pp. 045408.
- [5] Graham A.P., Duesberg G.S., Seidel R., Liebau M., Unger E., Kreupl F., Hönlein W. Towards the integration of carbon nanotubes in microelectronics. *Diamond & Related Materials*, 2004, vol. 13, no. 4–8, pp. 1296–1300.
- [6] White C.T., Robertson D.H., Mintmire J.W. Helical and rotational symmetries of nanoscale graphitic tubules. *Physical Review B*, 1993, vol. 47, no. 9, pp. 5485–5488.
- [7] Spesyvtseva S., Shoji S., Kawata S. Chirality-selective optical scattering force on single-walled carbon nanotubes. *Physical Review Applied*, 2015, vol. 3, no. 4, pp. 044003.
- [8] Montes E., Schwingenschlögl U. Nanotubes based on monolayer blue phosphorus. *Physical Review B*, 2016, vol. 94, no. 3, pp. 035412.
- [9] Kreupl F., Graham A.P., Duesberg G.S., Steinhögl W., Liebau M., Unger E., Hönlein W. Carbon nanotubes in interconnect applications. *Microelectronic Engineering*, 2002, vol. 64, no. 1–4, pp. 399–408.
- [10] Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S. Physical properties of carbon nanotubes. London, Imperial college press. 1998. 272 p.
- [11] Datta S. Quantum transport: Atom to transistor. New York, Cambridge University Press, 2013. 417 p.
- [12] Ashcroft N.W., Mermin N.D. Solid state physics. Philadelphia, Saunders College Publishing, 1976. 272 p.

- [13] Hasegawa M., Nishidate K., Yoshimoto N. Collapsed armchair single-walled carbon nanotubes as an analog of closed-edged bilayer graphene nanoribbons. *Physical Review B*, 2015, vol. 92, no. 24, pp. 245429.
- [14] Negi S., Warriar M., Chaturvedi S., Nordlund K. Molecular dynamic simulations of a double-walled carbon nanotube motor subjected to a sinusoidally varying electric field. *Computational Materials Science*, 2009, vol. 44, no. 3, pp. 979–987.
- [15] Mylvaganam K., Zhang L.C. Important issues in a molecular dynamics simulation for characterising the mechanical properties of carbon nanotubes. *Carbon*, 2004, vol. 42, no. 10, pp. 2025–2032.

Mosin M.A. — student, Department of Physics, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Scientific advisor — O.S. Erkovich, Cand.Sc. (Phys.-Math.), Assoc. Professor, Department of Physics, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.