



УДК 51-76:612
ББК 58

ПРОВОДИМОСТЬ ИЗОГНУТЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПРИБЛИЖЕНИИ ДИРАКА

Колесников Денис Владимирович

Магистрант кафедры теоретической физики и волновых процессов,
Волгоградский государственный университет
denkolesnikof@yandex.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Ключевые слова: физика твердого тела, наноструктуры, проводимость, криволинейные координаты.

Проблема создания наноструктур с определенными свойствами и геометрическими размерами является одной из важнейших научных задач XXI века. Углеродные нанотрубки играют одну из ведущих ролей в современной электронике, поскольку обладают уникальными электронными и механическими свойствами, обладают высокой жесткостью и прочностью, а также высокими показателями электро- и теплопроводности.

В данной работе проводится исследование влияния изменения геометрии на проводимость углеродных наночастиц. Подобные исследования являются весьма актуальными, поскольку одним из важнейших достоинств наноструктур является то, что, изменяя конфигурацию или геометрические параметры наночастиц, мы можем управлять свойствами системы, что крайне важно для возможных практических приложений в электронике.

Дисперсионное соотношение для электронов в нанотрубке в окрестности К-точки имеет линейный характер. Это позволяет применить для описания динамики электронов уравнение Дирака, которое содержит характеристики пространства, определяемые геометрией системы. Для их определения используется обобщение теорий полей со спином S на случай искривленного пространства-времени. Одной из основных моделей для расчета электронной проводимости в теории металли-

ческих систем является однозонная модель Хаббарда. В рамках данной модели гамильтониан содержит только два слагаемых: кинетический член, соответствующий туннелированию частиц между узлами элементарной решетки, и слагаемое, соответствующее внутривузельному взаимодействию частиц.

Учет кривизны поверхности приводит к появлению в энергетическом спектре нанотрубок запрещенной зоны величиной порядка 1-2 eV. При увеличении диаметра нанотрубок ширина запрещенной зоны уменьшается. Таким образом, учет кривизны поверхности может привести к изменению проводящих свойств углеродной нанотрубки.

Расчеты показывают, что распределение электронов не зависит от типа узла решетки. Поправка к проводимости изогнутой нанотрубки убывает с увеличением температуры. Помимо того, величина поправки уменьшается при увеличении радиуса кривизны нанотрубки. Вычисления показывают, что в случае нанотрубок достаточно большого радиуса или малой кривизны поправка к электронной проводимости становится малой и ей зачастую можно пренебречь.

Рассмотренный метод позволяет рассчитывать поправки к удельной электронной проводимости прямых и изогнутых углеродных нанотрубок, а также более сложных по своей геометрической структуре наночастиц.

**CONDUCTIVITY OF CURVED CARBON NANOTUBES
IN DIRAC APPROACH**

Kolesnikov Denis Vladimirovich

Master Student, Department of Theoretical Physics and Wave Processes,
Volgograd State University
denkolesnikof@yandex.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Key words: solid state physics, nanostructures, conductivity, curvilinear coordinates.