

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

УДК 538.915

КОЛЕСНИКОВ

Дмитрий Владимирович

**ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ
НАНОСТРУКТУР РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ**

Специальность: 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Дубна 2008

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им.Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук,
В.А. Осипов

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
Л.А. Фальковский (ИТФ им. Л.Д.Ландау, г. Москва)
доктор физико-математических наук,
В.В. Нестеренко (ЛТФ ОИЯИ, Дубна)

Ведущая организация:

Институт спектроскопии РАН, Троицк

Защита диссертации состоится “___” _____ 2008 г. в ___ на заседании диссертационного совета Д 720.001.01 при Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан “___” _____ 2008 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

А.Б.АРБУЗОВ

Общая характеристика диссертации.

Актуальность темы.

Как хорошо известно, углерод может существовать не только в форме графита или алмаза, но так же и в форме графена- плоского мономолекулярного слоя, а так же различных родственных ему наноструктур- нанотрубок, фуллеренов, наноконусов и др. Простота синтеза углеродных наноструктур, их высокая удельная поверхность и уникальные механические свойства (исключительно высокий из-за прочных углерод-углеродных sp^2 - связей модуль Юнга растяжения) определяют их использование в качестве фильтров и компонент композитных материалов. Электронные свойства углеродных наночастиц также значительно отличаются от свойств твёрдых тел. Малый линейный размер, эффективно низкая размерность наночастиц и структурообразующие топологические дефекты (в-основном дисклинации) приводят к значительным как локальным, так и нелокальным (нанотрубки) изменениям зонной структуры и изменению плотности состояний по сравнению со случаями графита и неискривлённой графитовой плоскости. Поскольку наночастицы с такими электронными свойствами могут быть использованы в различных электронных устройствах (точечные электронные эмиттеры, полевые и обычные диоды и транзисторы, устройства одноэлектроники и - в перспективе - квантовой логики), изучение электронных свойств углеродных наноструктур следует признать актуальным в ближайшей перспективе.

Для приближенного описания электронных свойств вначале графита, а затем и графена при низкой (вблизи энергии Ферми) энергии начиная с работы Ди Винченцо и Меле [1] использовалась теоретико-полевая модель, основанная на $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -приближении, приводящая к эффективному безмассовому стационарному уравнению Дирака. Большинство углеродных наноструктур отличаются от графена только наличием дисклинаций (пяти- или семиугольников) и вызванным ими искривлением поверхности, при этом локально они подобны графену (каждый атом связан с тремя другими в плоскости). В работах Ламмерта

и Креспи [2], Осипова, Кочетова и Пудлака [3], а так же Гонзалеса, Гвинеа и Возмедиано [4] теоретико-полевая модель была модифицирована для применения к различным типам углеродных наноструктур (впоследствии и к многослойным углеродным наноструктурам). Было найдено, что наличие положительных дисклинаций (пятиугольников) приводит к появлению положительной Гауссовой кривизны и увеличению локальной плотности электронных состояний, а наличие отрицательных дисклинаций (семиугольников)- к появлению отрицательной кривизны и уменьшению плотности состояний.

С экспериментальной точки зрения, электронные свойства углеродных наноструктур были исследованы и исследуются в настоящее время.

Целью работы является исследование электронных свойств различных углеродных наноструктур в рамках теоретико-полевого подхода.

Научная новизна и практическая ценность. Электронные свойства углеродных наноструктур важны как с фундаментальной точки зрения (в том числе в качестве моделей, описывающих распространение безмассовых фермионов), так и для многочисленных приложений (наноразмерных электронных устройств на углеродных нанотрубках и нанолентах, устройств, использующих электронную эмиссию с УНС и т.д.). Существуют различные методы расчёта электронных свойств УНС, которые можно разделить на расчёты из первых принципов, эмпирические методы (включая приближение сильной связи) и континуальный теоретико-полевой подход. Ценность последнего подхода состоит в простоте применения и легкости введения дополнительных взаимодействий в модель.

В представленной на защиту диссертации исследованы электронные свойства различных УНС- наноконусов и нанохорнов, графена с отрицательной кривизной, сферических фуллеренов и закрытых углеродных нанотрубок. Показано, что углеродные нанохорны произвольной морфологии обладают локальной металлизацией вблизи острия. Численный расчёт, учитывающий существование нуль-моды, показывает увеличение плотности состояний вблизи вершины и более резкий рост плотности состояний при увеличении энергии (по сравнению с

плоским случаем). Для графена с отрицательной кривизной построена модель "конуса с избытком угла" (surplus-angle cone), для которой задача сводится к решенной ранее задаче для обычного конуса. Для сферических фуллеренов (Ih)-типа построена модель "магнитного монополя" и найдено её точное решение (спектр и собственные функции). Для закрытых углеродных нанотрубок численно найдена плотность состояний, обнаружен эффект размывания Ван-Хововских сингулярностей вблизи вершины нанотрубки. При помощи анализа асимптотического решения эффект связывается с геометрией нанотрубки.

Апробация работы. Результаты, представленные в диссертации, докладывались и обсуждались на научных семинарах Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований (секторный и тематический семинары), а также представлялись и докладывались на: Международной конференции по теоретической физике "Dubna-NANO 2008" (Дубна, 2008); Международной конференции "Condensed Matter Physics in the prime of XXI century" (Łądek Zdrój, Poland, 2007); 9-ой научной конференции молодых ученых и специалистов (Дубна, 2005); 4-й Международной конференции "Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология" (Москва, 2005); Международной конференции "2-nd National Conference on Theoretical Physics and Titeica- Markov Symposium (Constancia, Romania, 2004).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 8 работ.

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения. Общий объем 101 страница, включая 28 рисунков и список литературы из 77 наименований.

Содержание работы

Во введении обсуждается актуальность проводимых исследований. Дано краткое содержание диссертации.

В первой главе даётся введение в теоретико-полевого подход к описанию

электронных свойств углеродных наноструктур. Для плоского случая исходя из $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -формализма находится уравнение, описывающее электронную волновую функцию на двух подрешётках, сводящееся к двумерному стационарному безмассовому уравнению Дирака вида

$$-i\vec{\sigma}\nabla\psi = E\psi,$$

где σ - матрицы Паули, а энергия E отсчитывается от энергии Ферми. Находится дисперсионное соотношение и вычисляется зависимость плотности электронных состояний от энергии для плоского случая (графена). Учёт кривизны поверхности производится при помощи тетрадного формализма. Влияние дисклинаций учитывается введением калибровочных полей двух типов (Абелевого и неабелевого), возникающих соответственно из теории упругости в нерасширительном приближении и вследствие смешивания подрешеток при возникновении дисклинации. Поля являются вихревыми, и их циркуляции вокруг дефектов, которые считаются сводимыми в точку, определяются формулами

$$\oint \vec{a} d\vec{r} = N\frac{\pi}{2}\tau_2, \quad (1)$$

для нечётного числа дефектов, и

$$\oint \vec{a} d\vec{r} = \pi\left(\frac{N}{2} + \frac{2M}{3}\right)\tau_3, \quad (2)$$

для четного, где число M , описывающее эффективный сдвиг, принимает значение $M = 0, \pm 1$.

Второе поле определяется условием

$$\oint \vec{W} d\vec{r} = 2\pi\frac{N}{6}. \quad (3)$$

Основное уравнение модели имеет вид

$$i\gamma^a e_a^\mu (\nabla_\mu - ia_\mu^k - iW_\mu)\psi^k = E\psi^k, \quad (4)$$

где a_μ^k , $k = K, K_-$ и W_μ - калибровочные поля, γ^a - две $su(2)$ - матрицы размерности 2×2 , которые можно выбрать например в виде $\gamma_i = -\sigma_i$, и $\nabla_\mu = \partial_\mu + \Omega_\mu$, где

$$\Omega_\mu = \frac{1}{8}\omega_\mu^{ab}[\gamma_a, \gamma_b]. \quad (5)$$

Обсуждаются ограничения и свойства модели.

Во второй главе исследуются электронные свойства углеродных наноконусов и углеродных нанохорнов. Поверхность модели, описывающая электронные свойства наноконусов и нанохорнов, имеет геометрию одной из частей двухполостного гиперboloида, что связано с необходимостью учесть плавное изменение кривизны вблизи вершины наноконуса. Исследование поведения волновых функций при энергии Ферми показало, что для случая пяти дефектов- для нанохорнов- существует одно нормируемое решение (нуль-мода), что говорит о локальной металлизации нанохорнов вблизи их вершины. Использование найденных нуль-мод позволяет найти приближенное решение вблизи энергии Ферми, что в свою очередь позволяет численно найти волновые функции и плотность состояний (смотри Рис. 1). Также в Главе 2 исследуются элек-

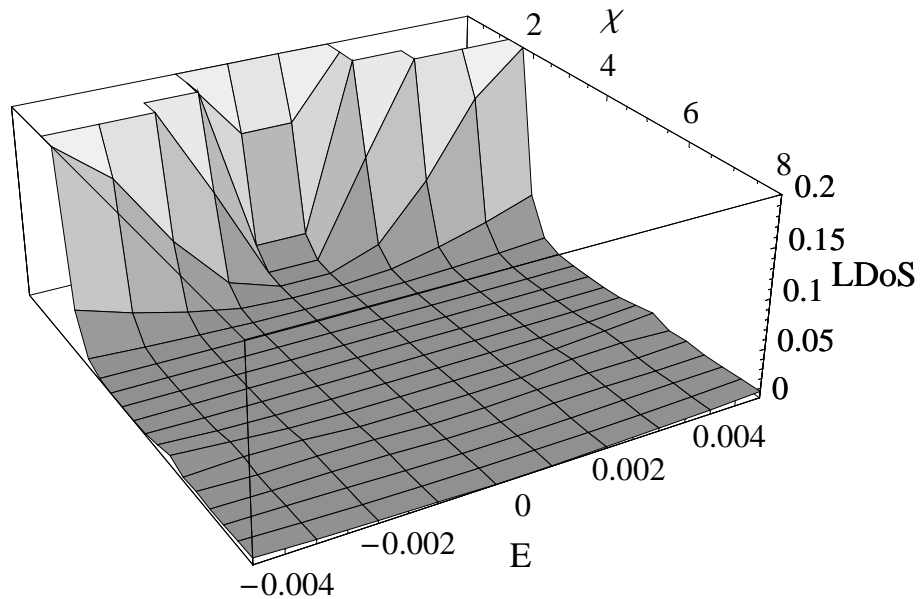


Рисунок 1: Локальная плотность состояний нанохорна в произвольных единицах, зависящая от координаты (в единицах a) и энергии (в единицах $\hbar V_F/a$).

тронные свойства графена с отрицательной кривизной (в присутствии семи- и восьмиугольных колец). Поскольку поверхность считается нерастяжимой, введение отрицательной дисклинации (вставка в неё сектора в 60° или 120°) при-

водит к появлению бесконечной отрицательной Гауссовой кривизны в центре (аналогично положительной кривизне в центре обычного конуса). Используя такую модель "конуса с избытком угла" (surplus-angle cone), а также приближение, учитывающие только угловые компоненты калибровочных полей, удалось свести задачу, не обладающую изначально аксиальной симметрией, к задаче для обычного конуса. Производится сравнение результатов с найденным ранее решением в приближении сильной связи [5].

В третьей главе исследуются электронные свойства сферических фуллеренов и закрытых углеродных нанотрубок. Для сферических фуллеренов, подразделяющихся на два класса по наличию в них зеркальной симметрии (I) и (Ih) классы- исследуются циркуляции поля \vec{a} вокруг групп дефектов. Для фуллеренов (Ih)- типа применяется приближение "размазанного поля", рассмотренное ранее в работе Гонзалеса, Гвинеа и Возмедиано [4]. Отличие от указанной работы состоит в том, что введение приближения производится самосогласовано, путём применения введенной в Главе 1 модели, учитывающей вместе с неабелевым также и абелево поле (аналог упругого поля дисклинации). Поставленная задача решается аналитически, находится спектр и собственные функции модели.

Та же модель расширяется для описания сферической крышки нанотрубок произвольной хиральности, причём крышка может являться также и половиной фуллерена (I)- типа. Для такого случая поля дисклинаций включают в себя ненулевой фактор, связанный с относительным сдвигом пятиугольников, для (Ih)- класса равный нулю. Таким образом, приближение "размазанного поля" перестаёт соответствовать полю магнитного монополя в произвольном случае, как в работе Гонзалеса и др. [4]. Для зоны нанотрубки используется стандартное поле, впервые введённое в работе Кане и Меле[6]. Для обеих областей, как того требует теоретико-полевой подход, вводится единая форма поверхности, качественно описывающая переход от полусферической крышки к трубке. Как и ранее, исследование асимптотического поведения волновой функции вблизи полюса полусферы и вдали от крышки позволило численно найти плотность

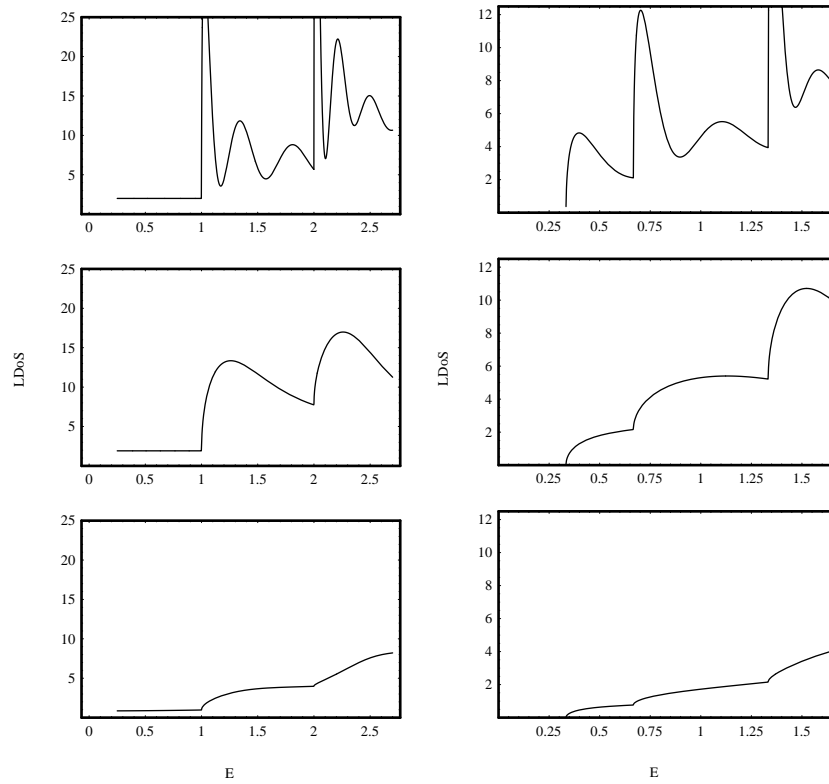


Рисунок 2: Локальная плотность состояний (на единицу площади, в произвольных единицах) в зоне крышки (нижние рисунки), около крышки (в середине) и вдали от крышки (верхние рисунки). Результаты для металлических нанотрубок показаны слева, для полупроводящих- справа. Здесь $1/\alpha=0.9$, и энергия E измерена в единицах $\hbar V_F/R_t$.

состояний (смотри рисунок 2). Основной особенностью поведения плотности состояний при различных энергиях в области трубки является "смазывание" Ван-Хововских сингулярностей (замена их на конечные пики с максимумами при больших энергиях). Смазывание сингулярностей объясняется геометрическим фактором после более пристального исследования асимптотических решений вдали от крышки.

В заключении кратко сформулированы полученные в диссертации результаты, которые выносятся на защиту.

На защиту выдвигаются следующие результаты:

1. Построена модель, описывающая электронные свойства углеродных наноконусов и нанохорнов. Найдено отличие в электронных свойствах принятой в модели геометрии двухполостного гиперboloида и известной модели с конической геометрией. Найдены нуль-моды и асимптотические решения модели.

2. Для случая углеродных нанохорнов использованное низкоэнергетическое приближение позволило численно посчитать волновую функцию и плотность состояний при различных энергиях. Делается вывод о локальной металлизации углеродных нанохорнов.

3. Для случая графена с отрицательной кривизной сформулирована модель "surplus-angle cone". Используя приближение, учитывающее только полярные компоненты калибровочных полей, задачу удалось свести к решенной ранее задаче для обычного конуса.

4. Сформулирована модель, описывающая электронные свойства сферических фуллеренов в приближении "магнитного монополя". Для случая (Ih)- фуллеренов аналитически найден спектр и волновые функции.

5. Сформулирована модель, описывающая свойства углеродных нанотрубок, закрытых половинками сферических фуллеренов. Численно найдена зависимость плотности состояний от энергии и положения, обнаружен и объяснен эффект размывания Ван-Хововской сингулярности вблизи крышки нанотрубки.

По теме диссертации опубликованы следующие работы:

1. D. V. Kolesnikov and V. A. Osipov, Electronic structure of negatively curved graphene, JETP Letters **87**, 487 (2008).
2. D.V.Kolesnikov and V.A.Osipov, Geometry-induced smoothing of van Hove singularities in capped carbon nanotubes, Europhysics letters **78**, 47002 (2007)
3. D.V.Kolesnikov and V.A.Osipov, The continuum gauge field-theory model for low-energy electronic states of icosahedral fullerenes, European Physical Journal B **49**, 465 (2006)

4. D.V. Kolesnikov and V.A. Osipov Electronic structure of carbon nanohorns near the Fermi level, JETP Letters **79**, 660 (2004)
5. V.A. Osipov and D.V. Kolesnikov, Electronic Properties of Curved Carbon Nanostructures, Romanian Journal of Physics, **50** p.457 (2005)
6. Материалы IX научной конференции молодых учёных и специалистов, 31 Янв. - 6 Фев. 2005, Дубна, "Электронная плотность состояний углеродных нанохорнов вблизи уровня Ферми" , с.98
7. Материалы IX научной конференции молодых учёных и специалистов, 31 Янв. - 6 Фев. 2005, Дубна, "Нуль-моды двумерного уравнения Дирака в искривлённом пространстве", с. 247
8. D.V. Kolesnikov and V.A. Osipov, Properties of van Hove singularities in capped carbon nanotubes, Dubna-NANO 2008 (book of abstracts), p.56, Dubna, 2008

Список литературы:

1. D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds, Physical Review B **29**, 1685 (1984).
2. P. E. Lammert and V. H. Crespi, Graphene cones: Classification by fictitious flux and electronic properties, Physical Review B **69**, 035406 (2004).
3. V. A. Osipov, E. A. Kochetov and M. Pudlak, Journal of Experimental and Theoretical Physics **96**, 140 (2003).
4. J. González, F. Guinea and M.A.H. Vozmediano, Continuum Approximation to Fullerene Molecules, Physical Review Letters **69**, 172 (1992).

5. R. Tamura and M. Tsukada, Disclinations of monolayer graphite and their electronic states, *Physical review B* **49**, 7697 (1994).
6. C. L. Kane and E. J. Mele, Size, Shape, and Low Energy Electronic Structure of Carbon Nanotubes, *Physical Review Letters* **78**, 1932 (2007).