

# Теоретическое исследование структурных элементов одностенной золотой нанотрубки хиральности (5, 3) в модели Хаббарда

Е.Р. Филиппова, Г.И. Миронов

*Марийский государственный университет, г. Йошкар-Ола, 424002, Россия*

E-mail: 31aisha1986@rambler.ru

Статья поступила в редакцию 15 ноября 2010 г., после переработки 20 декабря 2010 г.

С использованием метода статических флуктуаций в рамках модели Хаббарда проведено теоретическое исследование нанокластеров одностенной золотой нанотрубки хиральности (5, 3), состоящих из  $N = 15, 20, 23$  и 40 атомов золота. Вычислены фурье-образы антикоммутирующих функций Грина, корреляционные функции наносистем и построены энергетические спектры.

З використанням методу статичних флуктуацій у рамках моделі Хаббарда проведено теоретичне дослідження нанокластерів одностінної золотої нанотрубки хіральності (5, 3), які складаються з  $N = 15, 20, 23$  та 40 атомів золота. Вчислено фур'є-образи антикомутаторних функцій Гріна, кореляційні функції наносистем та побудовано енергетичні спектри.

PACS: 71.10.Fd Модели решеточных фермионов (модель Хаббарда и т.д.);

75.10.Jm Квантовые спиновые модели, включая квантовую спиновую фрустрацию.

Ключевые слова: одностенная золотая нанотрубка (SWGТ), нанокластер, модель Хаббарда.

## 1. Введение

Золото — необычное природное вещество и по своему внешнему виду, и по свойствам. Природные и синтезированные наноструктуры золота открывают широкие возможности для развития различного рода направлений нанотехнологий. На уровне нанометра возникают качественно новые эффекты, свойства и процессы, определяемые квантовой механикой, размерным квантованием в малых структурах и рядом других факторов. Свойства наночастиц резко отличаются от свойств макропорций того же вещества. Наноструктуры золота являются эффективнейшим катализатором, предоставляя ученым ранее неизвестные химические, механические, электрические и магнитные свойства, которых нет в физическом макром мире. На базе этих знаний можно будет создавать новые электрические или химические сенсоры, а также сверхточную электронику [1].

Длинные одностенные золотые нанотрубки (5, 3) (в последующем SWGT) с диаметром около 2 нм были экспериментально синтезированы с помощью UHV-ТЕМ при 150 К [2]. Синтез золотой нанотрубки был

мотивирован необходимостью миниатюризации электронных устройств. Благодаря своим уникальным электрофизическим, физико-химическим и геометрическим свойствам они являются весьма перспективным материалом для применения в различных областях науки и техники.

SWGТ (5, 3) подобна углеродной нанотрубке (CNT) за исключением того, что сотовидная сеть углеродистых атомов в CNT заменена треугольной сетью золотых атомов. Геометрическая модель SWGT, состоящая из пяти атомных рядов, спирально закрученных вокруг оси трубки, показана на рис. 1.

Для теоретического исследования и анализа кластеров одностенной золотой нанотрубки, состоящих из атомов переходных металлов, в которых электроны находятся частично в локализованном, частично в делокализованном состояниях, мы будем использовать модель Хаббарда [3].

Настоящая работа посвящена вычислению и исследованию функций Грина, корреляционных функций, построению спектров в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций [4] в случае, когда кластер состоит из 15, 20, 23 и 40 атомов.

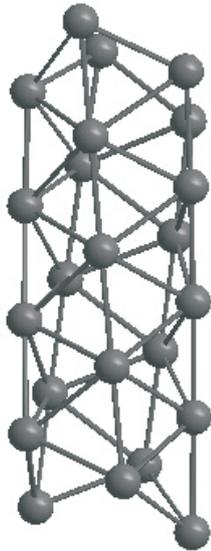


Рис. 1. Геометрическая структура SWGT (5, 3) из двадцати атомов.

### 2. Структурный элемент SWGT (5, 3) из пятнадцати атомов

Оператор полной энергии или гамильтониан Хаббарда имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (1)$$

$$\hat{H}_0 = \varepsilon \sum_{i=1}^{15} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_{i \neq j, \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}),$$

$$\hat{V} = U \sum_{i=1}^{15} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow},$$

где  $\varepsilon$  — собственная энергия электрона,  $B$  — интеграл переноса, учитывающий перескоки электрона с узла на узел,  $U$  — энергия кулоновского отталкивания электронов, оказавшихся на одном узле,  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$  — оператор числа частиц на  $i$ -узле решетки;  $a_{i\sigma}^+$ ,  $a_{i\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов на узле  $i$  решетки со спином  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . Оператор  $\hat{H}_0$  в выражении (1) описывает поведение электронов, когда на узле нанокластера имеется один электрон и перескоки электронов с узла на узел. Оператор  $\hat{V}$  описывает кулоновское отталкивание двух электронов с противоположными проекциями спинов, оказавшихся на одном узле наносистемы.

Для расщепления системы дифференциальных уравнений воспользуемся представлением вида

$$n_{i\downarrow} = \langle n_{i\downarrow} \rangle + \Delta n_{i\downarrow}, \quad (2)$$

т.е. распишем оператор числа частиц в виде суммы среднего числа частиц  $\langle n_{i\downarrow} \rangle$  и оператора флуктуации частиц  $\Delta n_{i\downarrow}$ . Тогда система уравнений движения для операторов рождения частиц  $a_{i\sigma}^+$  в представлении Гейзенберга  $a_{j\sigma}^+(\tau) = e^{\hat{H}\tau} a_{j\sigma}^+(0) e^{-\hat{H}\tau}$  ( $\hat{H}$  — гамильтониан, описывающий поведение квантовой системы, величина  $\tau$  — мнимое время:  $\tau = it$ ) будет иметь следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{d}{d\tau} a_{1\sigma}^+(\tau) = (\varepsilon + U \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle) a_{1\sigma}^+ + B(a_{2\sigma}^+ + a_{4\sigma}^+ + a_{5\sigma}^+ + a_{13\sigma}^+ + a_{14\sigma}^+) + U \Delta n_{1\bar{\sigma}} a_{1\sigma}^+, \\ \frac{d}{d\tau} a_{2\sigma}^+(\tau) = (\varepsilon + U \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle) a_{2\sigma}^+ + B(a_{1\sigma}^+ + a_{3\sigma}^+ + a_{5\sigma}^+ + a_{6\sigma}^+ + a_{14\sigma}^+ + a_{15\sigma}^+) + U \Delta n_{2\bar{\sigma}} a_{2\sigma}^+, \\ \dots \\ \frac{d}{d\tau} a_{15\sigma}^+(\tau) = (\varepsilon + U \langle n_{15\bar{\sigma}} \rangle) a_{15\sigma}^+ + B(a_{2\sigma}^+ + a_{3\sigma}^+ + a_{11\sigma}^+ + a_{12\sigma}^+ + a_{14\sigma}^+) + U \Delta n_{15\bar{\sigma}} a_{15\sigma}^+. \end{cases} \quad (3)$$

Эти дифференциальные уравнения представляют собой систему дифференциальных уравнений для определения операторов  $a_{j\sigma}^+$  и  $n_{j\sigma} a_{j\sigma}^+$ . Применяв представление типа представления взаимодействия, эту систему уравнений можно превратить в замкнутую систему уравнений движения для операторов. Получившуюся систему уравнений можно решить методом преобразований Лапласа.

Решив систему (3) с использованием представления «типа представления взаимодействия», определяем фурье-образ антикоммутирующей функции Грина:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{1\uparrow}^+ | a_{1\uparrow} \rangle\rangle_E &= \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{0,1 \langle n_{1\downarrow} \rangle}{E - \varepsilon - U + 2,3B} + \frac{0,1(1 - \langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E - \varepsilon + 2,3B} + \frac{0,1 \langle n_{1\downarrow} \rangle}{E - \varepsilon - U + 1,5B} + \frac{0,1(1 - \langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E - \varepsilon + 1,5B} + \right. \\ &+ \frac{0,001 \langle n_{1\downarrow} \rangle}{E - \varepsilon - U + 0,8B} + \frac{0,001(1 - \langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E - \varepsilon + 0,8B} + \frac{0,1 \langle n_{1\downarrow} \rangle}{E - \varepsilon - U - 0,6B} + \frac{0,1(1 - \langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E - \varepsilon - 0,6B} + \frac{0,2 \langle n_{1\downarrow} \rangle}{E - \varepsilon - U - 2,3B} \\ &+ \frac{0,2(1 - \langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E - \varepsilon - 2,3B} + \frac{0,01 \langle n_{1\downarrow} \rangle}{E - \varepsilon - U - 2,7B} + \frac{0,01(1 - \langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E - \varepsilon - 2,7B} + \frac{0,08 \langle n_{1\downarrow} \rangle}{E - \varepsilon - U + 2,4B} + \frac{0,08(1 - \langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E - \varepsilon + 2,4B} \\ &+ \left. \frac{0,15 \langle n_{1\downarrow} \rangle}{E - \varepsilon - U + 1,5B} + \frac{0,15(1 - \langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E - \varepsilon + 1,5B} + \frac{0,01 \langle n_{1\downarrow} \rangle}{E - \varepsilon - U + 1,2B} + \frac{0,01(1 - \langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E - \varepsilon + 1,2B} + \frac{0,01 \langle n_{1\downarrow} \rangle}{E - \varepsilon - U + 0,3B} + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{0,01\langle n_{1\downarrow} \rangle}{E-\varepsilon+0,3B} + \frac{0,1\langle n_{1\downarrow} \rangle}{E-\varepsilon-U-B} + \frac{0,1(1-\langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E-\varepsilon-B} + \frac{0,02\langle n_{1\downarrow} \rangle}{E-\varepsilon-U-2,5B} + \frac{0,02(1-\langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E-\varepsilon-2,5B} + \\
 & + \left. \frac{0,07\langle n_{1\downarrow} \rangle}{E-\varepsilon-U-5B} + \frac{0,07(1-\langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E-\varepsilon-5B} + \frac{0,1\langle n_{1\downarrow} \rangle}{E-\varepsilon-U+2B} + \frac{0,1(1-\langle n_{1\downarrow} \rangle)}{E-\varepsilon+2B} \right\}. \quad (4)
 \end{aligned}$$

Значение параметров  $U$ ,  $B$  и  $\varepsilon$  укажем ниже. В выражении (4) числители определяют вероятности нахождения электрона на том или ином энергетическом уровне, знаменатели, или же полюса функций Грина, определяют энергетический спектр наносистемы. Так как электрон может находиться в том или ином энергетическом состоянии, с какой-то долей вероятности, то при сложении всех возможных вероятностей мы должны получить вероятность, равную единице, что и происходит в нашем случае.

Аналогичные формулы можно получить для всех атомов наносистемы. Отметим, что в нашем случае мы будем иметь семь видов уравнений для фурье-образа антикоммутирующей функции Грина, в соответствии с количеством связей с соседними узлами.

Воспользовавшись флуктуационно-диссипационной теоремой, из (4) можно получить выражение для корреляционных функций  $\langle n_{1\uparrow} \rangle$ .

Рассмотрим корреляционные функции следующего вида  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$ ,  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$ , используя численные значения  $x_i$ ,  $y_i$  и  $z_i$ , приведенные в табл. 1:

$$\begin{aligned}
 \langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle = & \langle n_{1\uparrow} \rangle^2 + \left( \langle n_{1\uparrow} \rangle - \langle n_{1\downarrow} \rangle \right)^2 \left[ 0,01 \sum_{i=1}^6 x_i \left( f^+(\varepsilon+U + \sum_{i=1}^6 z_i B) - f^+(\varepsilon + \sum_{i=1}^6 z_i B) \right) + \right. \\
 & \left. + 0,1 \left( f^+(\varepsilon+U + z_{14} B) - f^+(\varepsilon + z_{14} B) \right) + 0,05 \sum_{i=7}^{13} x_i \left( f^+(\varepsilon+U + \sum_{i=7}^{13} z_i B) - f^+(\varepsilon + \sum_{i=7}^{13} z_i B) \right) \right], \quad (5)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle = & 0,5 \sum_{i=1}^6 y_i \left( f^+(\varepsilon+U + \sum_{i=1}^6 z_i B) + f^+(\varepsilon + \sum_{i=1}^6 z_i B) \right) - 0,1 \left( f^+(\varepsilon+U + z_{14} B) + \right. \\
 & \left. + f^+(\varepsilon + z_{14} B) \right) + \sum_{i=7}^{13} y_i \left( f^+(\varepsilon+U + \sum_{i=7}^{13} z_i B) + f^+(\varepsilon + \sum_{i=7}^{13} z_i B) \right), \quad (6)
 \end{aligned}$$

где  $f^+(x) = 1/(1 + e^{\beta x})$  — функция распределения Ферми–Дирака,  $\beta = 1/(kT)$ ,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура.

Таблица 1. Численные значения  $x_i$ ,  $y_i$  и  $z_i$  для корреляционных функций вида  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  и  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$

$z_i$ ( $i=1-14$ )	$x_i$ ( $i=1-13$ )	$y_i$ ( $i=1-13$ )
$z_1 = -2,28$	$x_1 = 1,7$	$y_1 = -0,26$
$z_2 = -1,48$	$x_2 = 1,88$	$y_2 = 0,08$
$z_3 = -0,84$	$x_3 = 0,01$	$y_3 = -0,02$
$z_4 = 0,63$	$x_4 = 0,88$	$y_4 = 0,01$
$z_5 = 2,27$	$x_5 = 3,3$	$y_5 = 0,1$
$z_6 = 2,71$	$x_6 = 0,23$	$y_6 = 0,1$
$z_7 = -2,35$	$x_7 = 1,77$	$y_7 = 0,28$
$z_8 = -1,47$	$x_8 = 3,24$	$y_8 = 1,78$
$z_9 = -1,23$	$x_9 = 0,27$	$y_9 = -0,68$
$z_{10} = -0,33$	$x_{10} = 0,26$	$y_{10} = -0,58$
$z_{11} = 0,93$	$x_{11} = 2,43$	$y_{11} = -1,07$
$z_{12} = 2,5$	$x_{12} = 0,40$	$y_{12} = 0,38$
$z_{13} = 4,96$	$x_{13} = 1,63$	$y_{13} = 1,88$
$z_{14} = -2$		

Зависимость термодинамических средних  $\langle a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow} \rangle$ ,  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  от отношения  $x = -(U/B)$  при  $\beta = 200 \text{ эВ}^{-1}$  ( $\beta = 1/kT$ ) и  $U = 6 \text{ эВ}$  показаны на рис. 2 и 3.

На рис. 2 видно, что электроны в случае слабых корреляций могут перескакивать с узла на узел, причем вероятности перескоков зависят от количества соседних атомов в нанокластере. Самая верхняя линия соответствует термодинамической средней  $\langle a_{2\uparrow}^+ a_{5\uparrow} \rangle$ . Число соседних атомов в этом случае равняется шести, что свидетельствует о вероятности перескока электрона с пятого узла на второй и обратно больше, чем соответствующие вероятности в случае  $\langle a_{3\uparrow}^+ a_{6\uparrow} \rangle$ , где количество ближайших атомов равно трем. При исследовании SWGT (5, 3) из пятнадцати атомов определили семь видов функций:  $\langle a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow} \rangle$ . Отметим, что в области очень сильных корреляций, когда  $U > 10 \text{ В}$ , вероятность обнаружения электрона в данном узле спадает до нуля.

На рис. 3 показано поведение распределения «двоек»  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  аналогично поведению корреляционных

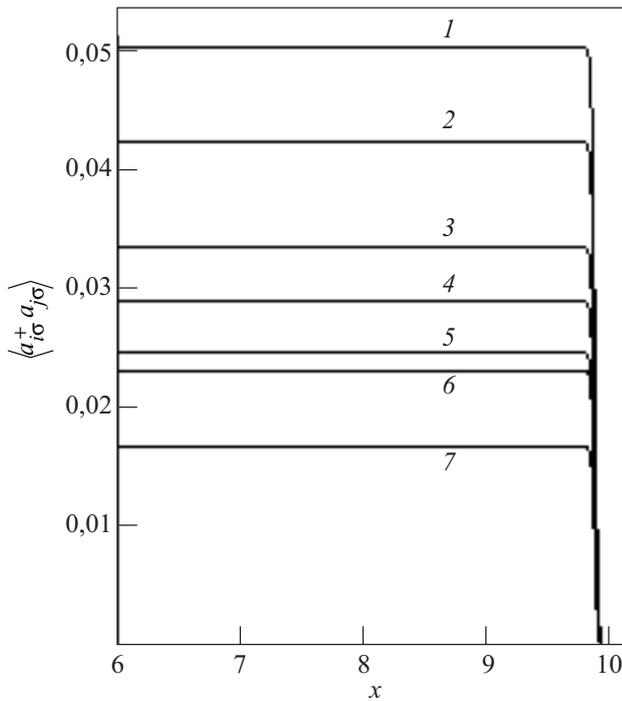


Рис. 2. Зависимость корреляционных функций  $\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle$  от отношения  $x = -(U/B)$ , когда SWGT состоит из  $N = 15$  атомов золота:  $\langle a_{2\sigma}^+ a_{5\sigma} \rangle$  (1),  $\langle a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} \rangle$  (2),  $\langle a_{2\sigma}^+ a_{6\sigma} \rangle$  (3),  $\langle a_{1\sigma}^+ a_{4\sigma} \rangle$  (4),  $\langle a_{7\sigma}^+ a_{8\sigma} \rangle$  (5),  $\langle a_{1\sigma}^+ a_{13\sigma} \rangle$  (6),  $\langle a_{3\sigma}^+ a_{6\sigma} \rangle$  (7).

функций, характеризующих вероятности перескоков (на рис. 2). График термодинамической функции  $\langle n_{5\uparrow} n_{5\downarrow} \rangle$  идет выше, чем  $\langle n_{3\uparrow} n_{3\downarrow} \rangle$ , так как вероятно-

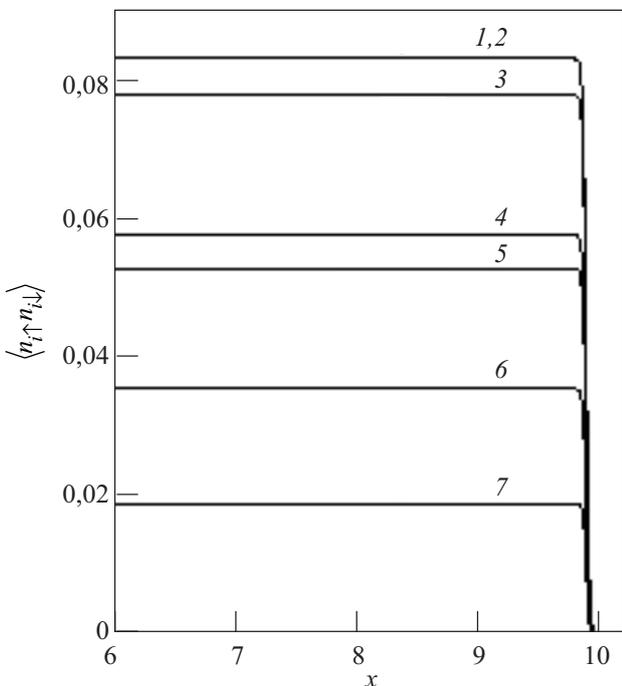


Рис. 3. Зависимость термодинамических средних  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  от отношения  $x = -(U/B)$  при  $N = 15$ :  $\langle n_{5\uparrow} n_{5\downarrow} \rangle$  (1),  $\langle n_{11\uparrow} n_{11\downarrow} \rangle$  (2),  $\langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$  (3),  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  (4),  $\langle n_{10\uparrow} n_{10\downarrow} \rangle$  (5),  $\langle n_{4\uparrow} n_{4\downarrow} \rangle$  (6),  $\langle n_{3\uparrow} n_{3\downarrow} \rangle$  (7).

сти перескоков электронов с противоположными спинами зависят от числа ближайших соседей.

### 3. Структурный элемент SWGT (5, 3) из двадцати атомов

В дальнейшем всю структуру вычисления термодинамических характеристик наносистем не будем рассматривать, так как она соответствует SWGT (5, 3) из пятнадцати атомов. Когда система состоит из двадцати атомов золота, корреляционные функции принимают следующий вид:

$$\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle = \langle n_{1\downarrow} \rangle^2 + 0,25 \times \sum_{i=1}^{20} x_i \left( f^+ (\epsilon + U + \sum_{i=1}^{20} z_i B) - f^+ (\epsilon + \sum_{i=1}^{20} z_i B) \right) (\langle n_{1\uparrow} \rangle - \langle n_{1\uparrow} \rangle^2), \quad (7)$$

$$\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle = 0,1 \sum_{i=1}^{20} y_i \left( f^+ (\epsilon + U + \sum_{i=1}^{20} z_i B) + f^+ (\epsilon + \sum_{i=1}^{20} z_i B) \right). \quad (8)$$

На рис. 4 и 5 представлены зависимости функций  $\langle a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow} \rangle$ ,  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  от отношения кулоновского отталкивания к интегралу перескока. Отметим, что количество видов корреляционных функций  $\langle a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow} \rangle$  не изменяется, и как в случае пятнадцати атомов равняется семи. На рис. 4 видно, что график  $\langle a_{2\uparrow}^+ a_{6\uparrow} \rangle$  расположен выше, чем в случае  $\langle a_{4\uparrow}^+ a_{8\uparrow} \rangle$ . Количество ближайших атомов во втором и шестом узлах соответст-

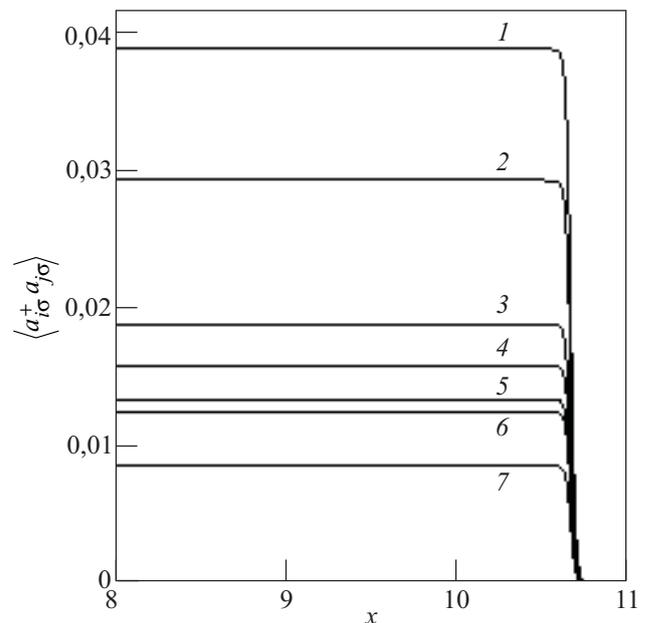


Рис. 4. Зависимость корреляционных функций  $\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle$  от отношения  $x = -(U/B)$  для SWGT из  $N = 20$  атомов золота:  $\langle a_{2\sigma}^+ a_{6\sigma} \rangle$  (1),  $\langle a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} \rangle$  (2),  $\langle a_{3\sigma}^+ a_{8\sigma} \rangle$  (3),  $\langle a_{1\sigma}^+ a_{5\sigma} \rangle$  (4),  $\langle a_{3\sigma}^+ a_{4\sigma} \rangle$  (5),  $\langle a_{1\sigma}^+ a_{17\sigma} \rangle$  (6),  $\langle a_{4\sigma}^+ a_{8\sigma} \rangle$  (7).

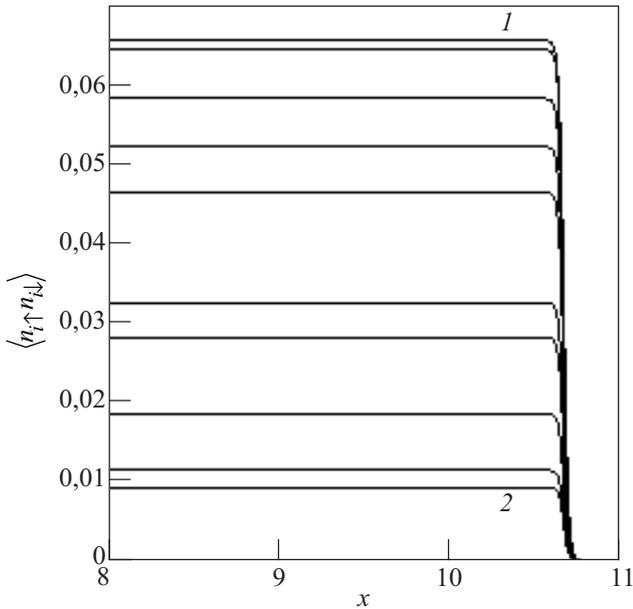


Рис. 5. Зависимость термодинамических средних  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  от отношения  $x = -(U/B)$  при  $N = 20$ ,  $\langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$  (1),  $\langle n_{9\uparrow} n_{9\downarrow} \rangle$  (2).

вует шести — это максимальное значение, и вероятность обнаружения электрона на этих узлах максимальная.

На рис. 5 представлены графики  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ : общее количество таких функций равно десяти, что упрощает решение такой системы. Отметим, что на втором узле наносистемы вероятнее обнаружить два электрона с разными спинами, чем на девятом узле.

#### 4. Структурный элемент SWGT (5, 3) из двадцати трех атомов

Корреляционные функции вида  $\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle$  ( $i \neq j$ ), отвечающие за перескоки электрона с  $j$ -узла на  $i$ -узел, представлены на рис. 6. График для  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{5\uparrow} \rangle$  свидетельствует о том, что вероятность перескока электрона с пятого узла на первый и обратно больше, чем соответствующие вероятности в случае  $\langle a_{9\uparrow}^+ a_{4\uparrow} \rangle$ . Корреляционные функции, описывающие перескоки электронов, уменьшаются до практически нулевого значения в области очень сильных корреляций. Обратим внимание на то, что ступенчатый характер графиков обусловлен относительно малым ( $N = 23$ ) числом атомов в составе нанотрубки.

Рассмотрим термодинамические средние  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  следующего вида (покажем для первого узла):

$$\begin{aligned} \langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle &= \langle n_{1\uparrow} \rangle^2 + 0,25 \times \\ &\times \sum_{i=1}^{23} x_i \left( f^+(\epsilon + U + \sum_{i=1}^{23} z_i B) - f^+(\epsilon + \sum_{i=1}^{23} z_i B) \right) \left( \langle n_{1\uparrow} \rangle - \langle n_{1\uparrow} \rangle^2 \right), \end{aligned} \quad (9)$$

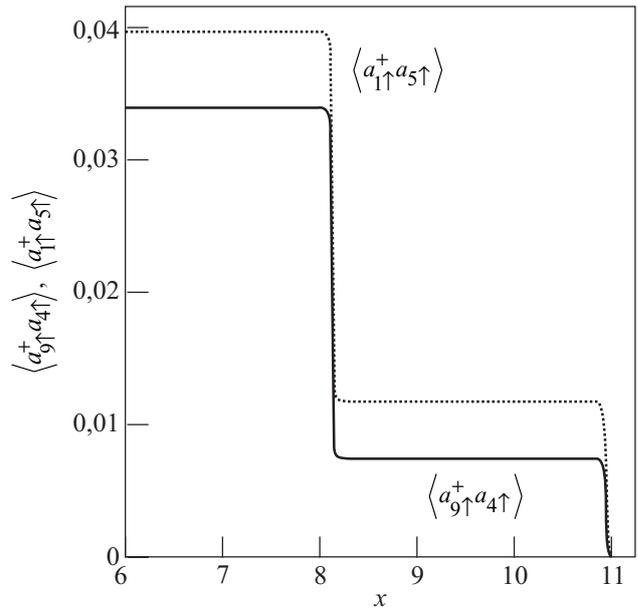


Рис. 6. Зависимость корреляционных функций от  $x = -(U/B)$  при значениях параметров  $U = 6$  эВ,  $\beta = 200$  эВ $^{-1}$ ,  $\epsilon = -U/2$ .

которые характеризуют вероятности нахождения на одном узле системы двух электронов с разными проекциями спинов одновременно. На рис. 7 приведена зависимость  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  от  $x = -(U/B)$ , всего двенадцать видов. Вид корреляционной функции  $\langle n_{20\uparrow} n_{20\downarrow} \rangle$  свидетельствует о том, что вероятность обнаружения пары электронов с противоположными проекциями спинов на 20-м узле больше, чем на девятом (корреляционная функция  $\langle n_{9\uparrow} n_{9\downarrow} \rangle$ ).

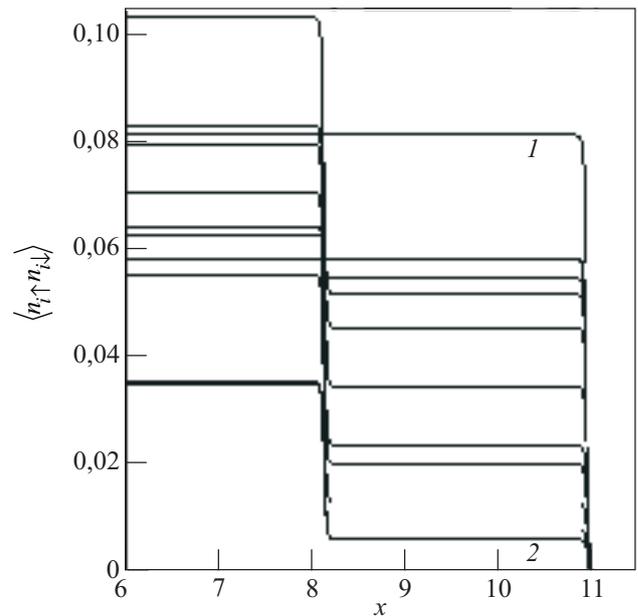


Рис. 7. Зависимость термодинамических средних  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  от отношений  $x = -(U/B)$  при значениях параметров  $U = 6$  эВ,  $\beta = 200$  эВ $^{-1}$ ,  $\epsilon = -U/2$ :  $\langle n_{20\uparrow} n_{20\downarrow} \rangle$  (1),  $\langle n_{9\uparrow} n_{9\downarrow} \rangle$  (2).

**5. Структурный элемент SWGT (5, 3)  
из шорока атомов золота**

Корреляционные функции имеют вид

$$\langle n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} \rangle = \langle n_{1\uparrow} \rangle^2 + \left( \langle n_{1\uparrow} \rangle - \langle n_{1\uparrow} \rangle^2 \right) \left[ 0,06 \sum_{i=1}^{19} x_i \left( f^+(\epsilon + U + \sum_{i=1}^{19} z_i B) - f^+(\epsilon + \sum_{i=1}^{19} z_i B) \right) + 0,07 \left( f^+(\epsilon + U + z_{39} B) - f^+(\epsilon + z_{39} B) \right) + 0,02 \sum_{i=20}^{38} x_i \left( f^+(\epsilon + U + \sum_{i=20}^{38} z_i B) - f^+(\epsilon + \sum_{i=20}^{38} z_i B) \right) \right], \quad (10)$$

$$\langle a_{1\uparrow}a_{2\uparrow} \rangle = 0,06 \sum_{i=1}^{19} y_i \left( f^+(\epsilon + U + \sum_{i=1}^{19} z_i B) + f^+(\epsilon + \sum_{i=1}^{19} z_i B) \right) - 0,04 \left( f^+(\epsilon + U + z_{39} B) + f^+(\epsilon + z_{39} B) \right) + 0,02 \sum_{i=20}^{38} y_i \left( f^+(\epsilon + U + \sum_{i=20}^{38} z_i B) + f^+(\epsilon + \sum_{i=20}^{38} z_i B) \right), \quad (11)$$

где значения  $x_i$ ,  $y_i$  и  $z_i$  числа, которые определяются из фурье-образов антикоммутирующей функции Грина.

На рис. 8 и 9 представлены графики термодинамических средних. Количество видов  $\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle$  сохраняется. График для  $\langle a_{2\uparrow}^+ a_{10\uparrow} \rangle$  расположен выше, чем в случае  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{9\uparrow} \rangle$ .

Функции  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  имеют уже двадцать разновидностей:  $\langle n_{11\uparrow} n_{11\downarrow} \rangle$  лежит выше всех, т.е. обладает наибольшей вероятностью обнаружения двух электронов с противоположными спинами, наименьшей —  $\langle n_{9\uparrow} n_{9\downarrow} \rangle$ .

**6. Заключение**

Анализируя графики зависимости термодинамических функций, отметим, что критическое отношение кулоновского потенциала к интегралу перескока  $x_{cr} = -(U/B)$ , при котором в области низких температур корреляционные функции обращаются в ноль, воз-

растает по мере увеличения количества атомов в нанотрубке. Это связано с тем, что по мере роста нанотрубки степень коллективизации электронов увеличивается, что приводит к увеличению вероятности перескока электронов с узла на узел и к возможности появления двух электронов с противоположно ориентированными проекциями спинов на одном узле наносистемы.

На рис. 10 представлены энергетические спектры для наносистем, состоящих из  $N = 15, 40$ . Нижний и верхний хаббардовские подзоны при рассматриваемых значениях параметров системы практически не разделены, что свидетельствует о том, что система находится в проводящем состоянии, причем проводимость, как показывает исследование корреляционных функций, описывающих переносы электронов, носит баллисти-

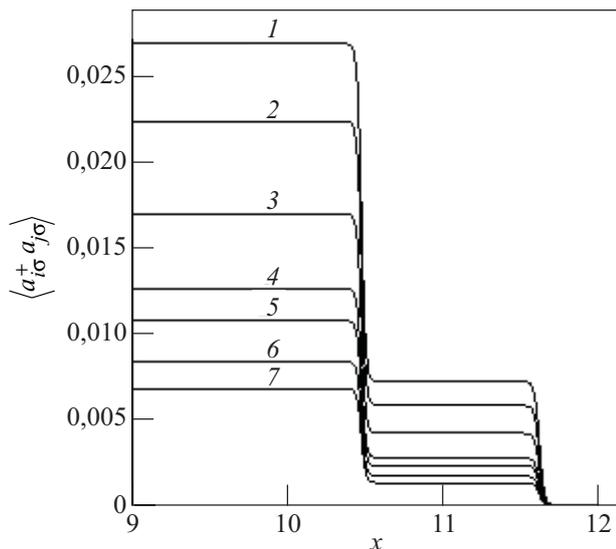


Рис. 8. Зависимость корреляционных функций  $\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle$  от отношения  $x = -(U/B)$ :  $\langle a_{2\sigma}^+ a_{10\sigma} \rangle$  (1),  $\langle a_{3\sigma}^+ a_{32\sigma} \rangle$  (2),  $\langle a_{1\sigma}^+ a_{20\sigma} \rangle$  (3),  $\langle a_{1\sigma}^+ a_{32\sigma} \rangle$  (4),  $\langle a_{9\sigma}^+ a_{10\sigma} \rangle$  (5),  $\langle a_{9\sigma}^+ a_{17\sigma} \rangle$  (6),  $\langle a_{1\sigma}^+ a_{9\sigma} \rangle$  (7).

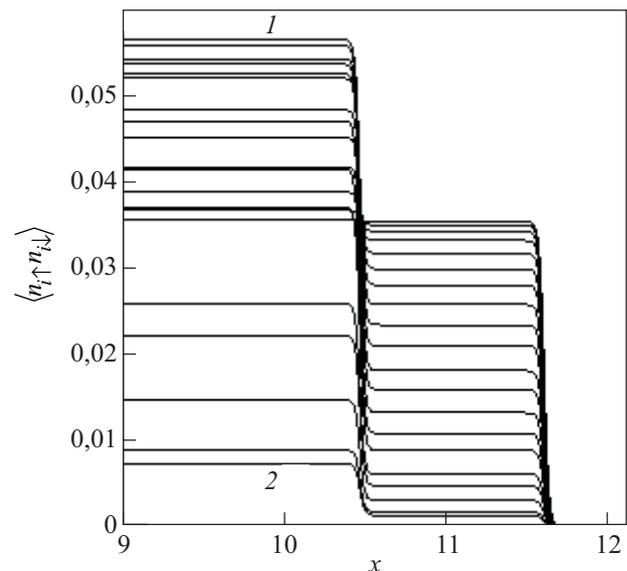


Рис. 9. Зависимость корреляционных функций  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  от отношения  $x = -(U/B)$  для SWGT с  $N = 40$  количеством атомов золота,  $\langle n_{11\uparrow} n_{11\downarrow} \rangle$  (1),  $\langle n_{9\uparrow} n_{9\downarrow} \rangle$  (2).

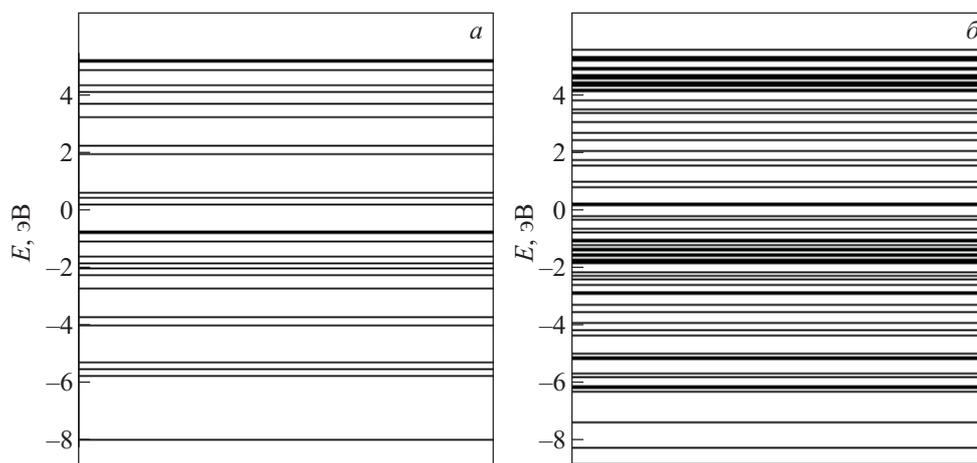


Рис. 10. Энергетические спектры системы из  $N = 15$  (а) и 40 атомов (б) золота при  $U = 6$  эВ,  $V = -1$  эВ,  $\epsilon = -U/2$ .

ческий характер. Такой характер проводимости важен при конструировании различных электронных систем с применением нанотрубок из атомов золота, в общем случае — протяженных золотых нанопроводов.

Рассматривая значения ширины зоны между верхней и нижней хаббардовскими подзонами, приведенные в табл. 2, можно отметить, что она уменьшается, а ширина нижней и верхней хаббардовских подзон увеличивается по мере увеличения количества атомов в нанотрубке.

Таблица 2. Значения ширины зоны между верхней и нижней хаббардовскими подзонами

$N$	Параметры	
	$D$ , эВ	$\Delta$ , эВ
15	7,3	0,95
20	7,9	0,7
23	8,1	0,5
40	8,6	0,4

Предварительные результаты работы были представлены на XVII Всероссийской конференции «Структура и динамика молекулярных систем» [5] и на Международной научно-технической конференции «Нанотехнологии функциональных материалов» [6].

1. M. Haruta, *Gold Bulletin* **37**, 27 (2004).
2. Y. Oshima, A. Onga, and K. Takayanagi, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 205503 (2003).

3. J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London. Ser. A* **276**, 238 (1963).
4. Г.И. Миронов, *ФММ* **102**, 611 (2006).
5. Г.И. Миронов, Е.Р. Филиппова, в сб.: *Структура и динамика молекулярных систем*, Уфа (2010), с. 137.
6. Г.И. Миронов, Е.Р. Филиппова, *1-я Междунар. научн.-техн. конф. «Нанотехнологии функциональных материалов»*, Санкт-Петербург (2010), с. 442.

### Theoretical investigation of structural elements of single-walled gold nanotube of chirality (5, 3) in the Hubbard model

E.R. Filippova and G.I. Mironov

With the use of the method of static fluctuations the single-walled gold nanotubes of chirality (5, 3), consisting of  $N=15, 20, 23$  and 40 atoms of gold are studied theoretically within the limits of the Hubbard model. Fourier-images of anticommutator Green functions, correlation functions of nanosystems are calculated and power spectra are constructed.

PACS: 71.10.Fd Lattice fermion models (Hubbard model, etc.);  
75.10.Jm Quantized spin models, including quantum spin frustration.

Keywords: single-walled gold nanotube (SWGT), nanocluster, the Hubbard model.