

Электронные свойства золотых нанотрубок (5, 3) и (5, 0) в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций

Г.И. Миронов, Е.Р. Созыкина

Марийский государственный университет, пл. Ленина, 1, г. Йошкар-Ола, 424000, Россия
E-mail: mirgi@marsu.ru

Статья поступила в редакцию 19 июня 2018 г., опубликована онлайн 26 ноября 2018 г.

Приведен теоретический анализ электронных свойств одностенных золотых нанотрубок хиральностей (5, 3) и (5, 0) по мере роста нанотрубок. Проведено сравнение результатов исследования одностенных золотых нанотрубок (5, 3) и (5, 0) с результатами работы Х.Р. Yang и J.M. Dong. Используемая нами модель Хаббарда при определенном выборе параметров модели позволяет объяснить данные, которые получены с помощью теории функционала электронной плотности. По нашим результатам получается, что при росте золотых нанотрубок имеет место только переход полупроводник–металл без осцилляций полупроводник–металл–полупроводник–металл, как это следует из работы Х.Р. Yang и J.M. Dong, *Phys. Rev. B* **71**, 233403 (2005).

Ключевые слова: модель Хаббарда, одностенная золотая нанотрубка (SWGT), функция Грина, плотность электронных состояний, запрещенная зона, наносистема, наночастица.

1. Введение

Миниатюризация электронных устройств приводит к необходимости иметь проводящие, практически одномерные системы, сконструированные из атомов благородных металлов, наподобие углеродных нанотрубок, в качестве соединительных элементов.

Реальным прорывом в области нанотехнологий был синтез цепочки из атомов Au между двумя золотыми электродами [1,2]. Длинные золотые нанопроволоки диаметром около 2 нм синтезируют в электронном микроскопе в сверхвысоком вакууме (UHV-TEM) [3]. Эти однослойные трубчатые структуры образованы истончением золотой фольги электронным пучком. Последние эксперименты показали [3–6], что золотые нанопровода представляют собой упорядоченные структуры, напоминающие углеродные нанотрубки, изучению которых уделяется большое внимание [7–9]. Интерес к изучению золотых нанотрубок среди прочих обусловлен тем, что они являются хорошими кандидатами для использования их в качестве контакта между элементами молекулярной электроники.

В работе [10] структура энергетических зон золотых нанотрубок хиральности (8, 0) была рассчитана с использованием метода линеаризованных плоских волн. Расчеты привели к выводу, что уровни энергии s -элект-

ронных состояний находятся ниже энергий d -электронов, так что s -электроны не могут участвовать в электронном транспорте. Анализ плотности состояний d -электронов показал, что зона проводимости соответствует d -электронным состояниям, именно d -электроны участвуют в электронном транспорте.

Исследование зонной структуры золотых нанотрубок хиральности (5,0) продолжено в [11], где был построен энергетический спектр рассматриваемых нанотрубок, исследована плотность электронных состояний.

В работе [12] было проведено исследование (5,3) и (5,0) SWGT исходя из первых принципов. Геометрические структуры исследуемых SWGT приведены на рис. 1. Исследование электронной структуры показало, что по мере увеличения длины SWGT происходит переход полупроводник–металл, при дальнейшем увеличении длины нанотрубки SWGT вновь переходит в полупроводниковое состояние. При еще большей длине нанотрубка снова переходит в металлическое состояние. Хотя подобное поведение, названное «осцилляцией» полупроводник–металл–полупроводник–металл, зафиксировано и ранее [13,14], возникла необходимость подтвердить или опровергнуть расчетами в рамках квантовой теории поля вывод о возможности таких «осцилляций».

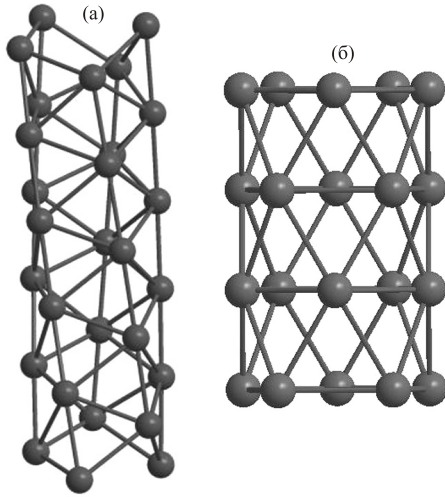


Рис. 1. Геометрические структуры SWGT хиральностей: (а) (5, 3) и (б) (5, 0).

Для описания свойств переходных металлов более полувека назад была предложена модель Хаббарда [15]. Поскольку атом золота относится к подгруппе меди группы переходных металлов, исследование электронных свойств одностенных золотых нанотрубок проведем в рамках модели Хаббарда.

Методика расчетов моделей золотых нанотрубок различных хиральностей, в том числе (5, 3) и (5, 0), с конечным числом атомов в системе подробно изложена в ранее опубликованных нами работах [16–19], поэтому приведем здесь краткие вычисления.

2. Одностенная золотая нанотрубка хиральности (5, 3)

В 2005 г. X. Yang и J. Dong опубликовали результаты исследования нормальных и деформированных одностенных золотых нанотрубок хиральности (5, 3) на основе теории функционала электронной плотности [12]. Оказалось, что атомная и электронная структуры

SWGT более устойчивы к деформациям по сравнению с углеродными нанотрубками. Согласно результатам [12], для деформированных бесконечных золотых нанотрубок отсутствует переход металл–полупроводник, тем не менее SWGT конечной длины, например SWGT (5, 3) (рис. 1(а)) длиной 4,15 нм, является полупроводником с энергетической щелью 0,11 эВ.

Одностенная золотая нанотрубка (5, 3) длиной 4,15 нм состоит из 72 атомов, длина связи между атомами Au равна $a = 2,73 \text{ \AA}$ [12].

Гамильтониан модели Хаббарда для рассматриваемой SWGT имеет вид [15]

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

$$\hat{H}_0 = \varepsilon \sum_{i=1}^{72} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_{i \neq j, \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}),$$

$$\hat{V} = U \sum_{i=1}^{72} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$

Первое слагаемое \hat{H}_0 в этом выражении описывает поведение электронов, когда на узле нанокластера имеется один электрон, а также перескоки электронов с одного узла SWGT на соседний узел (ε — собственная энергия электрона, B — интеграл перескока). Второе слагаемое описывает кулоновское отталкивание двух электронов с противоположными проекциями спинов, оказавшихся на одном узле наносистемы (U — энергия кулоновского взаимодействия электронов с разными проекциями спинов на одном узле). Проекция спина σ принимает два значения: $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ($\bar{\sigma} = \downarrow, \bar{\bar{\sigma}} = \uparrow$).

Система уравнений движения для операторов рождения частиц $a_{i\sigma}^+$ в представлении Гейзенберга $a_{i\sigma}^+(\tau) = \exp(\hat{H}\tau) a_{i\sigma}^+(0) \exp(-\hat{H}\tau)$ (\hat{H} — гамильтониан, описывающий поведение квантовой системы (1), величина τ — мнимое время: $\tau = i \cdot t$) будет иметь следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{d\tau} a_{1\sigma}^+ = \varepsilon a_{1\sigma}^+ + B(a_{2\sigma}^+ + a_{5\sigma}^+ + a_{6\sigma}^+ + a_{10\sigma}^+ + a_{72\sigma}^+) + U n_{1\bar{\sigma}} a_{1\sigma}^+, \\ \frac{d}{d\tau} a_{2\sigma}^+ = \varepsilon a_{2\sigma}^+ + B(a_{1\sigma}^+ + a_{3\sigma}^+ + a_{6\sigma}^+ + a_{7\sigma}^+) + U n_{2\bar{\sigma}} a_{2\sigma}^+, \\ \dots \dots \dots \\ \frac{d}{d\tau} a_{36\sigma}^+ = \varepsilon a_{36\sigma}^+ + B(a_{31\sigma}^+ + a_{32\sigma}^+ + a_{37\sigma}^+ + a_{40\sigma}^+ + a_{41\sigma}^+ + a_{45\sigma}^+) + U n_{36\bar{\sigma}} a_{36\sigma}^+, \\ \dots \dots \dots \\ \frac{d}{d\tau} a_{71\sigma}^+ = \varepsilon a_{71\sigma}^+ + B(a_{66\sigma}^+ + a_{67\sigma}^+) + U n_{71\bar{\sigma}} a_{71\sigma}^+, \\ \frac{d}{d\tau} a_{72\sigma}^+ = \varepsilon a_{72\sigma}^+ + B(a_{1\sigma}^+ + a_{5\sigma}^+) + U n_{72\bar{\sigma}} a_{72\sigma}^+. \end{array} \right. \quad (2)$$

Систему уравнений движения (2) решим в приближении статических флуктуаций [16–19]. Получив все решения для операторов, характеризующих эволюцию квантовой системы, описываемой гамильтонианом (1), можно вычислить фурье-образы антикоммутирующих функций Грина. Для первого узла это выражение примет вид

$$\langle\langle a_{1\uparrow}^+ | a_{1\uparrow} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{\sum_{i=1}^{66} x_i}{E - \varepsilon - U + \sum_{i=1}^{66} z_i B} + \frac{\sum_{i=1}^{66} x_i}{E - \varepsilon + \sum_{i=1}^{66} z_i B} \right\}, \quad (3)$$

где x_i и z_i — численные значения, приведенные в табл. 1.

Аналогичные выражения можем получить и для других узлов наносистемы. Числители соответствующих выражений определяют вероятности нахождения электронов на соответствующем знаменателю дроби энергетическом уровне, полюса функций Грина будут определять энергетический спектр наносистемы. Так как электрон может находиться в том или ином энергетическом состоянии с каким-то определенным значением вероятности, при сложении всех возможных вероятностей мы должны получить вероятность достоверного события, что и происходит в нашем случае — сумма числителей дробей в (3) равна единице.

На рис. 2 представлен энергетический спектр для SWGT (5, 3) из $N = 72$ атомов золота, где нижняя (сплошные линии) и верхняя (пунктирные линии) хаббардовские «подзоны» состоят из 72 уровней.

При значениях параметров модели золотой нанотрубки $U = 8,85$ эВ, $B = -1$ эВ, $\varepsilon = -U/2$ ширина зоны запрещенных энергий между верхней и нижней хаббардовскими подзонами, играющих роль зоны проводимости и валентной зоны, в случае систем с сильными корреляциями, равна 0,11 эВ, в согласии с работой [12]. По типу проводимости данную наносистему можно отнести к полупроводникам, как и сделано в работе [12], так как характерные значения ширины запрещенной зоны в полупроводниках составляют 0,1–4 эВ. Отметим, что проводимость, как показывает исследование корреляционных функций, описывающих транспорт электронов, носит баллистический характер. Такой характер проводимости важен при конструировании различных электронных систем с применением нанотрубок из атомов золота, в общем случае протяженных золотых нанопроводов.

Из анализа энергетического спектра следует, что уровни энергии наиболее плотно лежат в интервалах от -4 до -2 эВ, а также от $+5$ до $+8$ эВ. Для того чтобы более детально понять характер электронной структуры, построим плотность электронного состояния для исследуемой модели SWGT из 72 атомов (рис. 3).

Таблица 1. Численные значения x_i и z_i для выражения (3)

$x_i (i = 1-22)$	$z_i (i = 1-22)$	$x_i (i = 23-44)$	$z_i (i = 23-44)$	$x_i (i = 45-66)$	$z_i (i = 45-66)$
$x_1 = 0,00911$	$z_1 = -0,2797$	$x_{23} = 0,00442$	$z_{23} = 1,52685$	$x_{45} = 0,00210$	$z_{45} = 2,55529$
$x_2 = 0,01809$	$z_2 = 2,23606$	$x_{24} = 0,00508$	$z_{24} = -2,7833$	$x_{46} = 0,00128$	$z_{46} = -3,7875$
$x_3 = 0,00863$	$z_3 = 1,65841$	$x_{25} = 0,01726$	$z_{25} = 2,09759$	$x_{47} = 0,00255$	$z_{47} = -5,6610$
$x_4 = 0,00039$	$z_4 = -3,7833$	$x_{26} = 0,00134$	$z_{26} = -0,3041$	$x_{48} = 0,00911$	$z_{48} = -0,9562$
$x_5 = 0,01332$	$z_5 = 2,44512$	$x_{27} = 0,00313$	$z_{27} = 1,92412$	$x_{49} = 0,00500$	$z_{49} = 1,68772$
$x_6 = 0,00211$	$z_6 = 2,62639$	$x_{28} = 0,00022$	$z_{28} = 2,82798$	$x_{50} = 0,00318$	$z_{50} = -3,2360$
$x_7 = 0,02181$	$z_7 = 1,23606$	$x_{29} = 0,02377$	$z_{29} = -3,3380$	$x_{51} = 0,00179$	$z_{51} = 0,76894$
$x_8 = 0,00484$	$z_8 = 1,31546$	$x_{30} = 0,00795$	$z_{30} = 2,37196$	$x_{52} = 0,00570$	$z_{52} = -5,2517$
$x_9 = 0,01332$	$z_9 = 0,79094$	$x_{31} = 0,02500$	$z_{31} = 1,99999$	$x_{53} = 0,01378$	$z_{53} = -4,0469$
$x_{10} = 0,00066$	$z_{10} = -5,9143$	$x_{32} = 0,00349$	$z_{32} = -3,5885$	$x_{54} = 0,00001$	$z_{54} = 0,48589$
$x_{11} = 0,00508$	$z_{11} = 1,54731$	$x_{33} = 0,02385$	$z_{33} = 1,74723$	$x_{55} = 0,00039$	$z_{55} = 2,54731$
$x_{12} = 0,00833$	$z_{12} = 0,38196$	$x_{34} = 0,02385$	$z_{34} = 1,48882$	$x_{56} = 0,00003$	$z_{56} = 0,62286$
$x_{13} = 0,00152$	$z_{13} = -3,5743$	$x_{35} = 0,00690$	$z_{35} = -2,2360$	$x_{57} = 0,01692$	$z_{57} = -2,8581$
$x_{14} = 0,01451$	$z_{14} = 1,24794$	$x_{36} = 0,00783$	$z_{36} = 0,9625$	$x_{58} = 0,00937$	$z_{58} = -4,7048$
$x_{15} = 0,01209$	$z_{15} = 1,80578$	$x_{37} = 0,02500$	$z_{37} = 1$	$x_{59} = 0,00147$	$z_{59} = -0,4921$
$x_{16} = 0,00091$	$z_{16} = 2,75085$	$x_{38} = 0,00833$	$z_{38} = 0,61803$	$x_{60} = 0,00152$	$z_{60} = 2,33826$
$x_{17} = 0,01647$	$z_{17} = -2,3416$	$x_{39} = 0,00399$	$z_{39} = 0,48882$	$x_{61} = 0,00104$	$z_{61} = 0,40897$
$x_{18} = 0,00104$	$z_{18} = 0,00104$	$x_{40} = 0,00004$	$z_{40} = 0,41177$	$x_{62} = 0,00105$	$z_{62} = 0,24831$
$x_{19} = 0,00738$	$z_{19} = -1,1382$	$x_{41} = 0,00399$	$z_{41} = 2,74723$	$x_{63} = 0,00510$	$z_{63} = 0,85651$
$x_{20} = 0,00833$	$z_{20} = -1,6180$	$x_{42} = 0,00394$	$z_{42} = 0,70659$	$x_{64} = 0,00011$	$z_{64} = 0,15496$
$x_{21} = 0,01197$	$z_{21} = -1,7106$	$x_{43} = 0,01146$	$z_{43} = -2,5012$	$x_{65} = 0,00298$	$z_{65} = 2,45864$
$x_{22} = 0,01346$	$z_{22} = -1,7612$	$x_{44} = 0,00833$	$z_{44} = 2,61803$	$x_{66} = 0,00249$	$z_{66} = 2,25210$

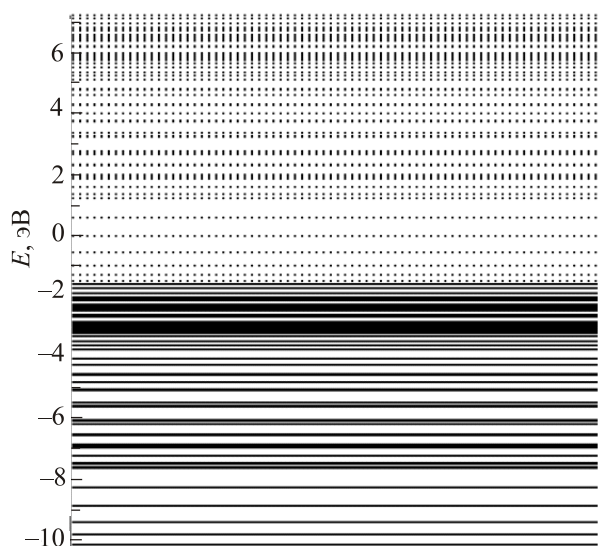


Рис. 2. Энергетический спектр системы (5, 3) из $N = 72$ атомов золота при $U = 8,85$ эВ, $B = -1$ эВ, $\epsilon = -U/2$.

Энергия Ферми соответствует $-1,544$ эВ. Пики на рис. 3 соответствуют сингулярностям Ван Хофа. Три пика плотности электронного состояния выше энергии Ферми соответствуют энергиям $-0,88$, $0,51$ и $1,11$ эВ.

3. Одностенная золотая нанотрубка хиральности (5, 0)

Теперь рассмотрим наносистему SWGT (5, 0) (рис. 1(б)). В работе [12] представлены результаты моделирования свойств нанотрубок SWGT (5, 0) длинами 1,37, 1,83, 2,29, 3,20, и 3,67 нм. Согласно указанной работе, эти наносистемы имеют энергетические щели 0,75, 0,30, 0,16, 0,23 и 0,165 эВ соответственно. По типу проводимости они относятся к полупроводникам, но, как оказалось, нанотрубки длиной 2,75 и 4,12 нм остаются металлами. Это означает, что в случае SWGT конечной длины существует переход металл–полупроводник.

Одностенная золотая нанотрубка (5, 0) длиной 1,37 нм (оригинальная длина нанотрубки 1,5 нм) состоит из 30 атомов Au. Аналогичным образом составляем и решаем систему дифференциальных уравнений с тридцатью неизвестными. Определяем антикоммутирующие функции Грина и строим энергетический спектр для SWGT (5, 0) из $N = 30$ атомов золота (рис. 4).

Ширина запрещенной зоны равна $\Delta = 0,75$ эВ [12], а энергетические характеристики равны: $U = 9,1$ эВ, $B = -1$ эВ, $\epsilon = -U/2$.

Аналогичные расчеты были проведены для SWGT (5, 0) с длинами 1,83, 2,29, 2,75, 3,20, 3,67 и 4,12 нм (см. табл. 2) и проведено сравнение результатов с данными работы [12].

Из анализа табл. 2 следует, что согласия с результатами работы [12] можно добиться, предположив ос-

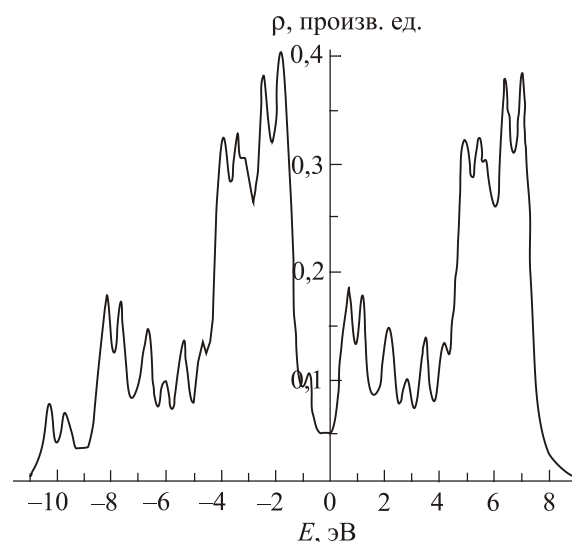


Рис. 3. Плотность электронных состояний (5, 3) из $N = 72$ атомов золота при $U = 8,85$ эВ, $B = -1$ эВ, $\epsilon = -U/2$.

лабление кулоновского отталкивания при увеличении длины нанотрубки. Отметим, что при увеличении энергии кулоновского отталкивания до 9 эВ ширина запрещенной зоны медленно сужается и все системы по типу проводимости остаются полупроводниками. Если следовать результатам численных значений ширины запрещенной зоны работы [12], то значение кулоновского отталкивания колеблется в пределах 1–3% от значения 9 эВ.

Обратим внимание на то, что при росте золотой нанотрубки от 30 до 90 атомов Au, согласно работе [12], наблюдается «осцилляция» полупроводник–металл–полупроводник–металл, похожая на результаты работ

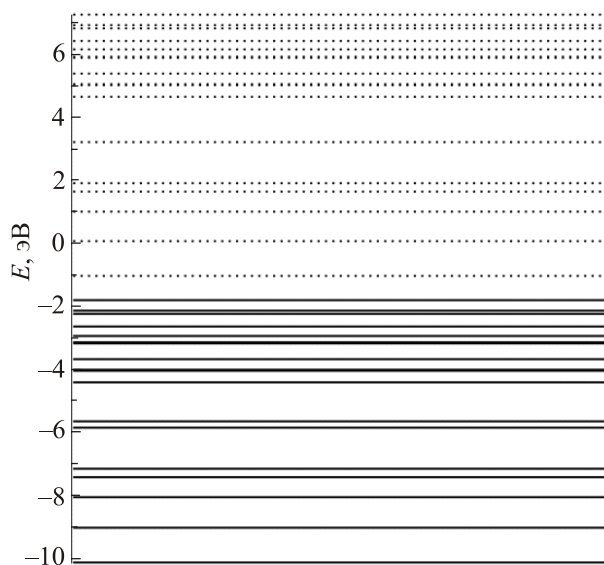


Рис. 4. Энергетический спектр системы (5, 0) из $N = 30$ атомов золота при $U = 9,1$ эВ, $B = -1$ эВ, $\epsilon = -U/2$.

Таблица 2. Зависимость энергетической щели SWGT (5, 0) от ее длины

Оригинальная длина, нм [8]	1,5	2	2,5	3	3,5	4	4,5
Оптимальная длина, нм [8]	1,37	1,83	2,29	2,75	3,20	3,67	4,12
Количество атомов N	30	40	50	60	70	80	90
Полупроводник (п/п) или металл (м) [8]	п/п	п/п	п/п	м	п/п	п/п	м
Запрещенная зона (Δ), эВ [8]	0,75	0,3	0,16	0	0,23	0,165	0
Энергия кулоновского отталкивания (U), эВ	9,1	8,8	8,8	8,7	8,9	8,9	8,8
Запрещенная зона (Δ), эВ	0,75	0,3	0,16	0	0,23	0,16	0
Δ при $U = 9$ эВ	0,66	0,46	0,36	0,29	0,26	0,23	0,22

[13,14]. При этом чисто теоретически такую осцилляцию можно было бы объяснить, изменяя параметры золотой нанотрубки по мере роста идеальной нанотрубки из атомов золота (см. значения кулоновского потенциала в табл. 2). Однако при этом понятно, что такие параметры золотой нанотрубки, как интеграл перескока, кулоновский потенциал, собственная энергия электрона, по мере увеличения длины нанотрубки одной и той же хиральности должны оставаться неизменными и нет причин для «осцилляции» полупроводник–металл–полупроводник–металл. Из анализа энергетического спектра золотой нанотрубки (5, 3) из 72 атомов мы сделали вывод, что энергетической щели $\Delta = 0,11$ эВ соответствуют значения кулоновского потенциала $U = 8,85$ эВ и интеграла переноса $B = -1$ эВ. При этих же значениях параметров мы вычислили энергетический спектр для нанотрубки с 72 атомами золота хиральности (5, 0), ширина щели оказалась также равной 0,11 эВ. При переходе от нанотрубки (5,3) к нанотрубке хиральности (5, 0) параметры модели золотой нанотрубки в рамках гамильтониана Хаббарда можно считать одинаковыми, поскольку кривизна поверхности нанотрубки остается практически неизменной. Мы исследовали изменение величины энергетической щели по мере увеличения длины нанотрубки от нанотрубки, содержащей от 30 до 100 атомов при значениях параметров $U = 8,85$ эВ и $B = -1$ эВ. Эта зависи-

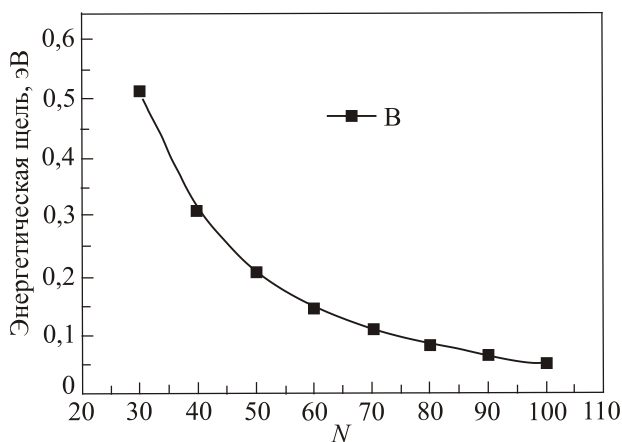


Рис. 5. Зависимость величины энергетической щели от числа атомов конечной SWGT

мость представлена на рис. 5. Из анализа графика следует, что при увеличении числа атомов золота ширина щели монотонно уменьшается.

В районе от 30 до 70 атомов ширина щели соответствует полупроводникам, при 70 атомах наблюдается переход полупроводник–металл, при дальнейшем увеличении числа атомов нанотрубка остается в металлическом состоянии. Таким образом, мы прогнозируем, что экспериментальное исследование электронных свойств золотых нанотрубок при увеличении числа атомов в нанотрубке покажет, что имеет место переход полупроводник–металл без наличия упомянутой выше «осцилляции» полупроводник–металл–полупроводник–металл [12–14].

4. Заключение

В данной работе приведены результаты теоретического исследования золотых нанотрубок (5, 3) и (5, 0) с примерно одинаковой кривизной поверхности нанотрубок, осуществлен сравнительный анализ результатов исследования в рамках модели Хаббарда SWGT (5, 3) и (5, 0) с работой X.P. Yang, и J.M. Dong [12]. Показано, что использованная нами модель при определенном выборе параметров хорошо согласуется с результатами, которые получены с помощью теории функционала электронной плотности [12]. Но последовательное изучение электронной структуры золотых нанотрубок с учетом того, что при росте золотой нанотрубки параметры модели золотой нанотрубки в рамках гамильтониана Хаббарда не должны изменяться, показало, что при росте нанотрубки (5, 0) может наблюдаться переход полупроводник–металл.

1. H. Ohnishi, Y. Kondo, and K. Takayanagi, *Nature (London)* **395**, 780 (1998).
2. A.I. Yanson, G.R. Bollinger, H.E. Brom, N. Agrait, and J.M. Ruitenbeek, *Nature (London)* **395**, 783 (1998).
3. Y. Kondo and K. Takayanagi, *Science* **289**, 606 (2000).
4. Y. Kondo and K. Takayanagi, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3455 (1997).
5. Y. Oshima, A. Onga, and K. Takayanagi, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 205503 (2003).

6. Y. Oshima, K. Mouri, H. Hirayama, and K. Takayanagi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 053705 (2006).
7. В.Г. Бутько, А.А. Гусев, Т.Н. Шевцова, Ю.Г. Пашкевич, *ФНТ* **35**, 1133 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 883 (2009)].
8. В.Г. Бутько, А.А. Гусев, Т.Н. Шевцова, Ю.Г. Пашкевич, *ФНТ* **37**, 1282 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 1021 (2011)].
9. Г.И. Миронов, *ФНТ* **43**, 902 (2017) [*Low Temp. Phys.* **43**, 719 (2017)].
10. П.Н. Дьячков, *Журнал неорганической химии*, **59**, 1045 (2015).
11. Г.И. Миронов, *Журнал неорганической химии*, **63**, 74 (2018).
12. X.P. Yang and J.M. Dong, *Phys. Rev. B*, **71**, 233403 (2005).
13. A. Rubo et al., *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3520 (1999).
14. J. Jiang et al., *Phys. Rev. B* **65**, 245418 (2002).
15. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963).
16. Е.Р. Филиппова, Г.И. Миронов, *ФНТ* **37**, 644 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 511 (2011)].
17. Е.Р. Филиппова, Г.И. Миронов, *ФММ* **113**, 11 (2012).
18. Е.Р. Филиппова, Г.И. Миронов, *ФТТ* **54**, 1600 (2012).
19. Э.Д. Изергин, Г.И. Миронов, *ФНТ* **33**, 1365 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 1038 (2007)].

Електронні властивості золотих нанотрубок (5, 3) та (5, 0) в моделі Хаббарда в наближенні статичних флуктуацій

Г.І. Миронов, Є.Р. Созикіна

Наведено теоретичний аналіз електронних властивостей одношарних золотих нанотрубок з хіральністю (5, 3) і (5, 0) зі зростанням нанотрубок. Проведено порівняння результатів дослідження одношарних золотих нанотрубок (5, 3) і (5, 0) з результатами роботи X.P. Yang та J.M. Dong. Використана нами модель Хаббарда при певному виборі параметрів моделі дозволяє пояснити дані, які отримані за допомогою теорії функ-

ціоналу електронної густини. За нашими результатами виходить, що при зростанні золотих нанотрубок має місце тільки перехід «напівпровідник-метал» без осциляцій «напівпровідник-метал-напівпровідник-метал», як це впливає з роботи [X.P. Yang, J.M. Dong, *Phys. Rev. B* **71**, 233403 (2005)].

Ключові слова: модель Хаббарда, одношарна золота нанотрубка (SWGТ), функція Гріна, щільність електронних станів, заборонена зона, наносистема.

Electronic properties of golden nanotubes (5, 3) and (5, 0) in the Hubbard model in the static fluctuation approximation

G.I. Mironov and E.R. Sozykina

Theoretical analysis of the electronic properties of single-walled gold nanotubes of chiralities (5, 3) and (5, 0) with the growth of nanotubes is given in comparison. The results of the study of single-walled gold nanotubes (5,3) and (5, 0) were compared with the work of Yang X.P. and Dong J.M. (2005). The Hubbard model we used with a certain choice of model parameters allows us to explain the data obtained using the electron density functional theory, but according to our results, with the growth of gold nanotubes, only the semiconductor–metal transition without semiconductor–metal–semiconductor–metal oscillations takes place as it follows from the work of X.P. Yang and J.M. Dong (2005).

Keywords: Hubbard model, single-walled gold nanotubes (SWGТ), Green function, electron density of states, forbidden zone, nanosystem, nanoparticle.