

Электронная структура золотых нанотрубок хиральности (5,0) в модели Хаббарда

Г. И. Миронов¹, А. Г. Пекпатрова²

^{1,2}Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

¹mirgi@marsu.ru, ²apekpatrova@mail.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Экспериментальному и теоретическому изучению нанотрубок из атомов золота в настоящее время уделяется большое внимание в связи с большим потенциалом их применения в различных сферах: материаловедении, катализе, в современной электронике, противоопухолевой медицине. Целью настоящей работы является сравнительное изучение электронных структур открытых и закрытых золотых нанотрубок (5,0), состоящих из конечного числа атомов Au (от 45 до 257) по мере возрастания длины золотой нанотрубки. *Материалы и методы.* Для описания золотой структуры золотых нанотрубок в рамках гамилтониана Хаббарда предложена модель, в которой атомы Au представлены в виде иона Au⁺, вокруг которого движется *d*-электрон, ответственный в нанотрубках за транспортные свойства. В нанотрубках *d*-электроны могут перескакивать от одного атома к соседнему атому, поскольку волновые функции соседних атомов перекрываются. Если в результате перескока электрона на одном узле окажутся два *d*-электрона, необходимо учесть энергии их кулоновского взаимодействия. Система *d*-электронов в нанотрубках из атомов Au является сильно коррелированной системой. *Результаты.* Вычислены фурье-образы гриновской антикоммутирующей функции, полюса которых определяют спектр элементарных возбуждений рассматриваемых наноструктур из атомов Au. Определена плотность электронного состояния исследуемых квантовых систем, получено уравнение на химпотенциал для каждой изучаемой наноструктуры. Проведено сравнение электронных структур открытых и закрытых золотых нанотрубок, показано изменение электронных структур нанотрубок из атомов золота при увеличении количества атомов в нанотрубке. *Выводы.* Из исследований можно сделать вывод о том, что при увеличении длины нанотрубки ширина зоны запрещенных энергий уменьшается. Как открытые, так и закрытые нанотрубки из атомов металла Au, изучаемые в работе, обладают полупроводниковыми свойствами. Добавление двух атомов (узлов), закрывающих нанотрубку, ведет не только к появлению дополнительного уровня энергии, но и к перестройке всего спектра. По мере увеличения размера нанотрубки влияние «шапок» как на перестройку энергетического спектра, так и на плотность состояния электронов постепенно уменьшается. Ширина зоны запрещенных энергий по мере роста нанотрубки постепенно уменьшается и стремится к нулю, когда число атомов в нанотрубке становится порядка 250. По ходу графиков зависимостей мы прогнозируем, что при росте золотых нанотрубок (5,0) имеет место лишь переход полупроводник–металл без явления перехода при увеличении длины нанотрубки обратно в полупроводниковое состояние, как это следует из работы Х. Р. Yang и J. М. Dong (2005).

Ключевые слова: открытая и закрытая золотые нанотрубки, энергетический спектр, химический потенциал, плотность электронного состояния

Для цитирования: Миронов Г. И., Пекпатрова А. Г. Электронная структура золотых нанотрубок хиральности (5,0) в модели Хаббарда // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2021. № 4. С. 140–154. doi:10.21685/2072-3040-2021-4-11

Electronic structure of gold chirality nanotubes (5.0) in the Hubbard model

G.I. Mironov¹, A.G. Pekpatrova²

^{1,2}Mari State University, Yoshkar-Ola, Russia

¹mirgi@marsu.ru, ²apekpatrova@mail.ru

Abstract. *Background.* The experimental and theoretical study of nanotubes made of gold atoms is currently being given great attention due to the great potential of their application in various fields: materials science, catalysis, modern electronics, and antitumor medicine. The aim of this work is a comparative study of the electronic structures of open and closed gold nanotubes (5.0) consisting of a finite number of Au atoms (from 45 to 257) as the length of the gold nanotube increases. *Materials and methods.* To describe the gold structure of gold nanotubes in the framework of the Hubbard Hamiltonian, a model is proposed in which the Au atoms are represented as the Au^+ ion, around which the d-electron moves, which is responsible for the transport properties in nanotubes. In nanotubes, d-electrons can jump from one atom to a neighboring atom because the wave functions of neighboring atoms overlap. If, as a result of an electron jump, there are two d-electrons at the same node, it is necessary to take into account the energies of their Coulomb interaction. The d-electron system of nanotubes made of Au atoms is a strongly correlated system. *Results.* The Fourier images of the Green's anticommutator function are calculated, the poles of which determine the spectrum of elementary excitations of the considered nanostructures made of Au atoms. The density of the electronic state of the quantum systems under study is determined, and an equation for the chemical potential for each nanostructure under study is obtained. The electronic structures of open and closed gold nanotubes are compared, and the electronic structures of gold atom nanotubes change as the number of atoms in the nanotube changes. *Conclusions.* From the studies, it can be concluded that as the length of the nanotube increases, the width of the band gap decreases. Both open nanotubes and closed nanotubes made of Au metal atoms, studied in this work, have semiconductor properties. The addition of two atoms (nodes) covering the nanotube leads not only to the appearance of an additional level of energy, but also to the restructuring of the entire spectrum. As the size of the nanotube increases, the effect of the "caps" on both the rearrangement of the energy spectrum and the density of the electron state gradually decreases. The gap width of the bandgap zone gradually tends to zero as the nanotube grows, when the number of atoms in the nanotube becomes about 250. In the course of the dependence graphs in Figure 2, we predict that with the growth of gold nanotubes (5.0), there is only a semiconductor–metal transition without the transition phenomenon with an increase in the length of the nanotube back to the semiconductor state, as follows from the work of X.P. Yang and J.M. Dong (2005).

Keywords: open and closed the gold nanotubes, the energy spectrum, chemical potential, density of electronic States

For citation: Mironov G.I., Pekpatrova A.G. Electronic structure of gold chirality nanotubes (5.0) in the Hubbard model. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2021;(4):140–154. (In Russ.). doi:10.21685/2072-3040-2021-4-11

Введение

В современной науке о материалах большое внимание уделяется синтезу новых уникальных материалов, в частности, на основе атомов благородного металла – золота. Нанотрубки из атомов Au обладают физико-химическими свойствами, которые важны для практического применения. Эти свой-

ства зависят как от геометрии (хиральности) [1, 2], так и размера нанотрубок, причем по мере роста наблюдается изменение некоторых из этих свойств. Например, золотые наноструктуры характеризуются большой каталитической способностью по сравнению массивными телами, которые практически инертны [3, 4]. Нанотрубки из атомов Au весьма перспективны для использования в качестве соединительных элементов между устройствами молекулярной электроники.

Золотые нанотрубки, которые можно использовать для практических целей, были впервые получены с использованием электронного микроскопа со сверхвысоким вакуумом при температуре 150 К [5] методом истончения тонкой золотой пластины пучком быстрых электронов.

Нанотрубки из атомов золота начинают играть большую роль в диагностике и лечении злокачественных новообразований [6]. Если макроскопические образцы золота, будучи благородным металлом, практически не взаимодействуют с другими материалами, то в изучаемой нами области длин нанотрубок появляется способность нанотрубок «прилипать» к поверхностям раковых клеток при внедрении в живой организм, тогда как со здоровыми клетками золотые нанотрубки практически не взаимодействуют. Поведение нанотрубок, их физические и химические свойства зависят от электронной структуры, поэтому целью настоящей работы является изучение электронной структуры нанотрубок из атомов металлов как электронных систем с сильными корреляциями, тогда как до последнего времени особенности сильно коррелированных систем при изучении электронных структур нанотрубок из атомов золота не учитывались

1. Теоретическая модель

В работе [7] был вычислен спектр элементарных возбуждений нанотрубки из атомов Au. Расчеты в [7] свидетельствовали, что энергетические уровни $6s$ -электронов находятся ниже уровней $5d$ -электронов. В зоне проводимости находятся d -электроны, они принимают участие в транспорте электронов. В работе [8] была предложена модель, в которой d -электрон, ответственный в нанотрубках за транспортные свойства, движется вокруг иона Au^+ . В нанотрубках d -электроны могут перескакивать от одного атома к другому атому, поскольку волновые функции соседних атомов перекрываются. Если в результате перескока электрона на одном узле окажутся два d -электрона, необходимо учесть энергии их кулоновского взаимодействия. Говоря другими словами, система d -электронов в нанотрубках из атомов Au является сильно коррелированной системой.

Построим развернутую модель для незамкнутой и замкнутой золотых нанотрубок (рис. 1).

Оператор полной энергии Хаббарда [9] для Au_{47} запишем следующим образом:

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

$$\hat{H}_0 = \varepsilon \sum_{f=1}^{47} (\hat{n}_{f\uparrow} + \hat{n}_{f\downarrow}) + B \sum_{f \neq f'}^{47} (a_{f\uparrow}^+ a_{f'\uparrow} + a_{f'\uparrow}^+ a_{f\uparrow} + a_{f\downarrow}^+ a_{f'\downarrow} + a_{f'\downarrow}^+ a_{f\downarrow}), \quad (2)$$

$$\hat{V} = U \sum_{f=1}^{47} \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow}. \quad (3)$$

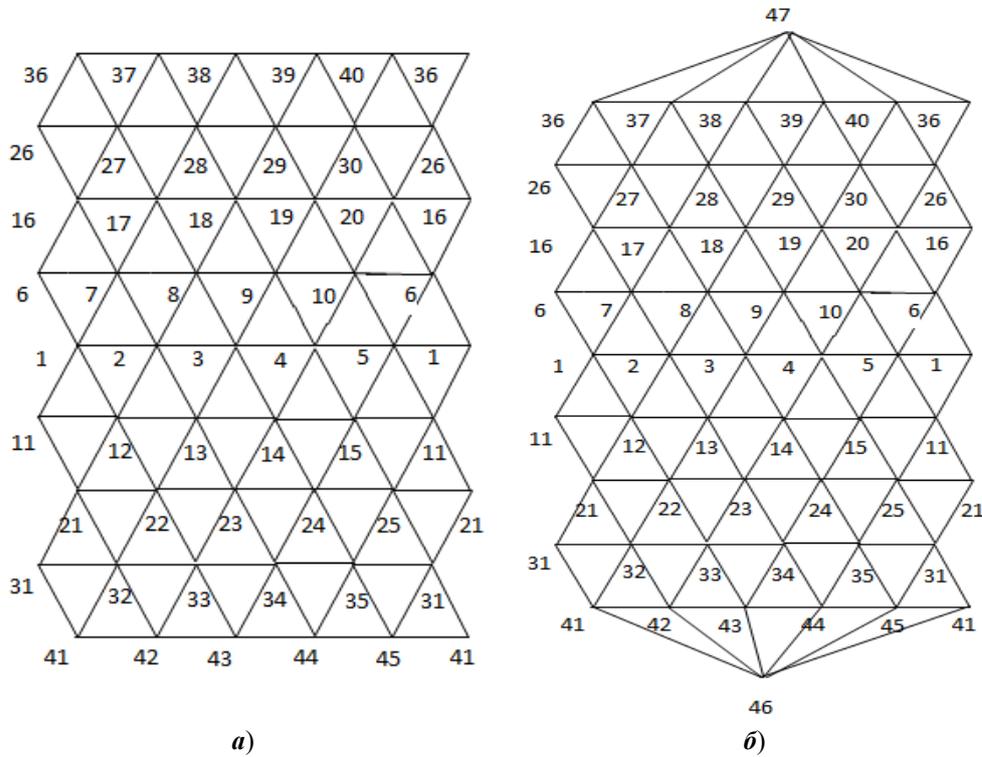


Рис. 1. Модель незамкнутой нанотрубки из 45 атомов Au (а); модель замкнутой нанотрубки из 47 атомов Au (б)

Введя представление Гейзенберга для операторов вторично квантованной механики, получим систему уравнений движения для операторов рождения $5d$ -электронов:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} a_{1\uparrow}^+ &= \varepsilon a_{1\uparrow}^+ + B(a_{2\uparrow}^+ + a_{5\uparrow}^+ + a_{6\uparrow}^+ + a_{10\uparrow}^+ + a_{15\uparrow}^+ + a_{11\uparrow}^+) + U a_{1\uparrow}^+ \hat{n}_{1\downarrow} \\ \frac{d}{d\tau} a_{2\uparrow}^+ &= \varepsilon a_{2\uparrow}^+ + B(a_{1\uparrow}^+ + a_{3\uparrow}^+ + a_{7\uparrow}^+ + a_{6\uparrow}^+ + a_{11\uparrow}^+ + a_{12\uparrow}^+) + U a_{2\uparrow}^+ \hat{n}_{2\downarrow} \\ &\dots \\ \frac{d}{d\tau} a_{47\uparrow}^+ &= \varepsilon a_{47\uparrow}^+ + B(a_{36\uparrow}^+ + a_{37\uparrow}^+ + a_{38\uparrow}^+ + a_{39\uparrow}^+ + a_{40\uparrow}^+) + U a_{47\uparrow}^+ \hat{n}_{47\downarrow}. \end{aligned} \quad (4)$$

2. Энергетический спектр золотых нанотрубок

Решив систему уравнений (4) в «приближении статистических флуктуаций» [10–14], получим следующую формулу для антикоммутирующей функции после преобразования Фурье по времени:

$$\begin{aligned}
 a_{1\uparrow}^+ |a_{1\uparrow} E = \frac{i}{2p} \sum_{\alpha=1}^2 \left\{ \frac{0,04}{E + 2,4596B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,01909}{E - 0,3570B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,04}{E + 1,6180B - \varepsilon_{\alpha}} + \right. \\
 + \frac{0,01756}{E - 5,8495B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,04}{E - 0,6180B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,04}{E - 3,6957B - \varepsilon_{\alpha}} + \\
 + \frac{0,0057}{E + 2,1024B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,04}{E + 0,4425B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,04}{E - 2,5201B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,0185}{E - 2,6621B - \varepsilon_{\alpha}} + \\
 + \frac{0,0212}{E + 1,4588B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,04}{E + 2,7936B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,04}{E + 1,2841B - \varepsilon_{\alpha}} + \\
 \left. \frac{0,04}{E + 2,3446B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,04}{E + 0,8915B - \varepsilon_{\alpha}} + \frac{0,0180}{E - 4,6927B - \varepsilon_{\alpha}} \right\}, \quad (5)
 \end{aligned}$$

где $\varepsilon_{\alpha} = \begin{cases} \varepsilon, & \alpha = 1, \\ \varepsilon + U, & \alpha = 2. \end{cases}$

Сингулярности функции (5) определяют спектр возможных значений энергии d -электронов золотой нанотрубки, они показаны на рис. 2. Для сопоставления рядом показан спектр незамкнутой Au нанотрубки из 45 атомов.

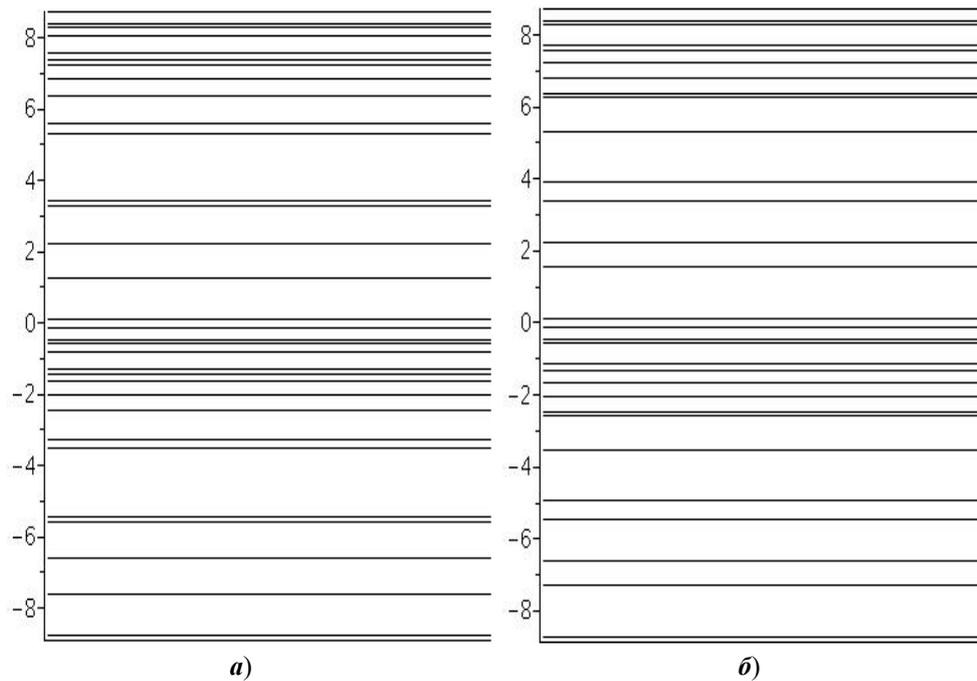


Рис. 2. Энергетические уровни замкнутой (а) и незамкнутой (б) нанотрубок из $N = 47$ и $N = 45$ атомов Au при $B = -1$ эВ, $U = 8,85$ эВ, $\varepsilon = -2,91$ эВ (для замкнутой) и $\varepsilon = -2,92$ эВ (для незамкнутой) хиральности (5,0)

Для закрытой нанотрубки (5,0), состоящей из 47 атомов, энергетический спектр подразделяется на две подзоны. Нижние 16 уровней энергии об-

разуют валентную зону (нижнюю подзону Хаббарда), верхние 16 уровней формируют зону проводимости (верхнюю подзону Хаббарда). Ширина зоны проводимости равна ширине валентной зоны и численно равна 8,644 эВ. Ширина щели между валентной зоной и зоной проводимости Δ равна 0,206 эВ, а это означает, что золотая нанотрубка, состоящая из атомов металла, находится в состоянии полупроводника, что обуславливает коренное отличие свойств золотой нанотрубки от свойств массивного образца золота.

Для незакрытой Au нанотрубки (5,0) из 45 атомов изображенный энергетический спектр состоит из 30 уровней энергии: 15 нижних уровней образуют валентную зону, 15 верхних уровней энергии формируют зону проводимости. Ширины D зоны проводимости и валентной зоны одинаковы и равны 8,598 эВ. Ширина зоны запрещенных энергий Δ между этими зонами равна 0,252 эВ.

Из вида приведенных двух спектров можно сделать вывод, что закрытие нанотрубки двумя добавленными атомами приводит к уменьшению ширины зоны запрещенных энергий на 0,046 эВ и к увеличению ширины подзон. Закрытие золотой нанотрубки приводит, во-первых, к появлению дополнительного уровня энергии как в зоне проводимости, так и в зоне валентных электронов; во-вторых, к сильной перестройке электронной структуры – существенным образом меняется спектр элементарных возбуждений d -электронов.

Также находим спектры для замкнутой нанотрубки из 127 и незамкнутой нанотрубки из 125 атомов Au (рис. 3).

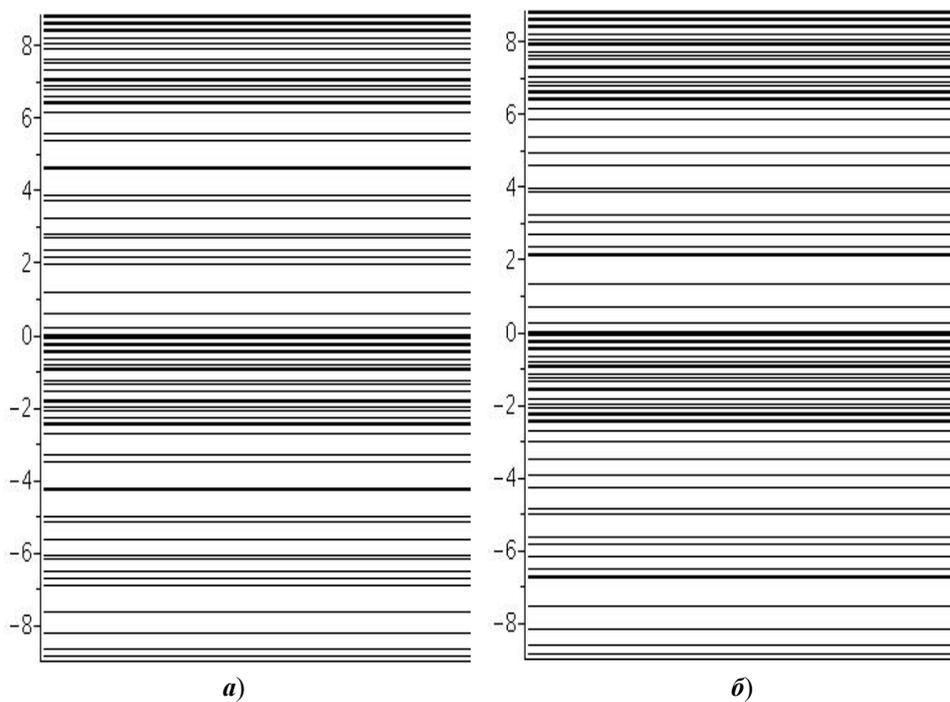


Рис. 3. Энергетические уровни замкнутой (а) и незамкнутой (б) нанотрубок из $N = 127$ и $N = 125$ атомов Au при $\varepsilon = -2,86$ эВ, $U = 8,85$ эВ, $V = -1$ эВ, хиральности (5,0)

Для замкнутой золотой нанотрубки (5,0) из 127 атомов Au подзоны состоят из 40 уровней энергии каждая. Ширины зон свободных и валентных

электронов равны 8,819 эВ. Ширина щели между этими зонами равна 0,031 эВ, начинается постепенный переход от полупроводника к металлу.

Для незамкнутой нанотрубки из Au (5,0) в случае 125 атомов имеются нижняя и верхняя подзоны, состоящие из 39 уровней энергии каждая. Ширины подзон равняются 8,816 эВ. Ширина зоны запрещенных энергий Δ между подзонами равняется 0,034 эВ.

Сравнивая спектры элементарных возбуждений для замкнутой и незамкнутой нанотрубок, состоящих соответственно из 127 и 125 атомов золота, можно сделать вывод, что ширина зон проводимости и валентных электронов в случае нанотрубки из 127 атомов больше, чем в случае нанотрубки из 125 атомов Au на 0,003 эВ, а ширина зоны запрещенных энергий для закрытой нанотрубки из 127 атомов меньше, чем аналогичная ширина в случае открытой нанотрубки из 125 атомов золота на ту же самую величину 0,003 эВ. Количество энергетических уровней в случае нанотрубок из 127 и 125 атомов Au отличается на один уровень энергии как в зоне валентных, так и зоне свободных электронов, закрытие нанотрубки приводит к перестройке структуры энергетического спектра.

Определим спектры для закрытой и открытой нанотрубок из 257 и 255 атомов золота (рис. 4).

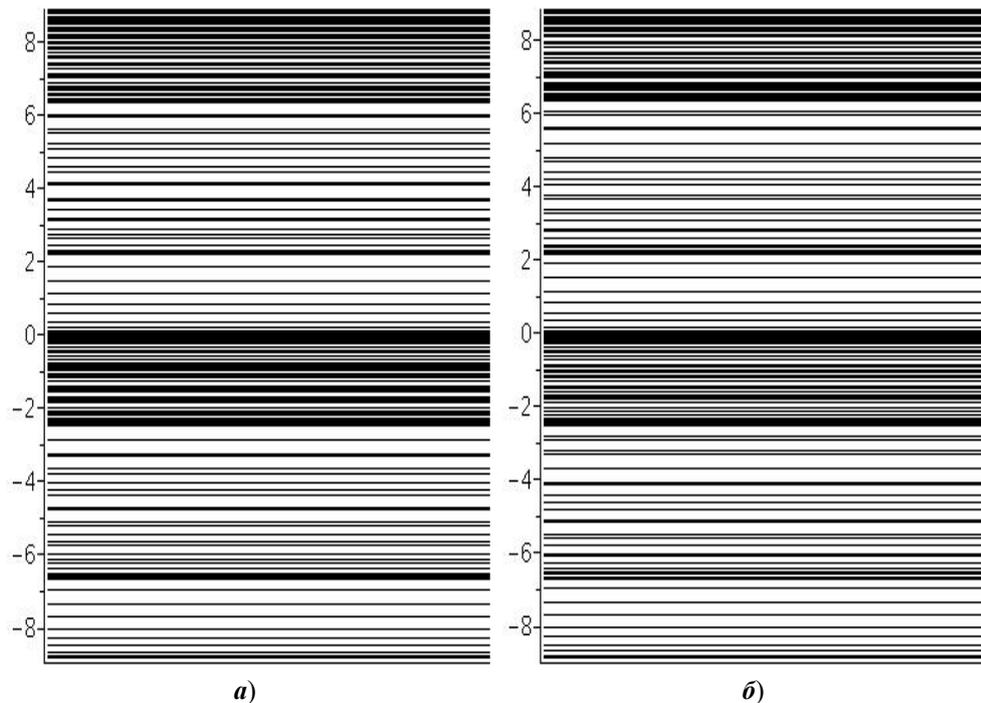


Рис. 4. Энергетические уровни замкнутой (а) и незамкнутой (б) нанотрубок из $N = 257$ и $N = 255$ атомов Au при $U = 8,85$ эВ, $B = -1$ эВ, $\varepsilon = -2,86$ эВ (для незамкнутой) и $\varepsilon = -2,81$ эВ (для замкнутой) хиральности (5,0)

В спектре для замкнутой Au нанотрубки (5,0) из 257 атомов зоны состоят из 79 уровней энергии. Ширины зон валентных и свободных электронов одинаковы и равняются 8,845 эВ. Ширина зоны запрещенных энергий между зонами равняется 0,005 эВ.

В случае открытой нанотрубки Au (5,0) из 255 атомов нижняя и верхняя подзоны также состоят из 79 уровней энергии. Ширины запрещенных зон одинаковы и равняются 8,845 эВ. Ширина зоны между зонами равна 0,005 эВ. Наличие двух дополнительных атомов золота при закупоривании нанотрубки приводит только к перестройке энергетического спектра.

Сравнивая все энергетические спектры, мы приходим к выводам:

1) нанотрубки из атомов Au, несмотря на то, что золото является металлом, находятся в состоянии полупроводника;

2) увеличение количества атомов в нанотрубке приводит к улучшению проводниковых свойств. Это следует из того, что ширина зоны запрещенных энергий плавно уменьшается на рис. 5. При количестве атомов золота 255 (открытая) и 257 (закрытая) нанотрубки практически находятся в металлическом состоянии. На рис. 6 показано, как увеличение количества атомов в нанотрубке сказывается на ширинах зоны проводимости и валентной зоны.

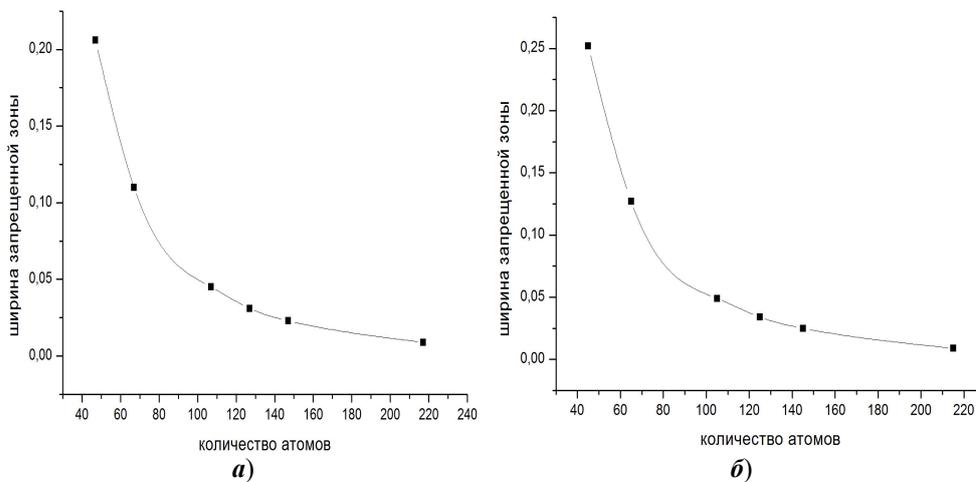


Рис. 5. Графики зависимости ширины запрещенной зоны для закрытой (а) и открытой (б) золотых нанотрубок (5,0) от количества атомов золота в нанотрубке

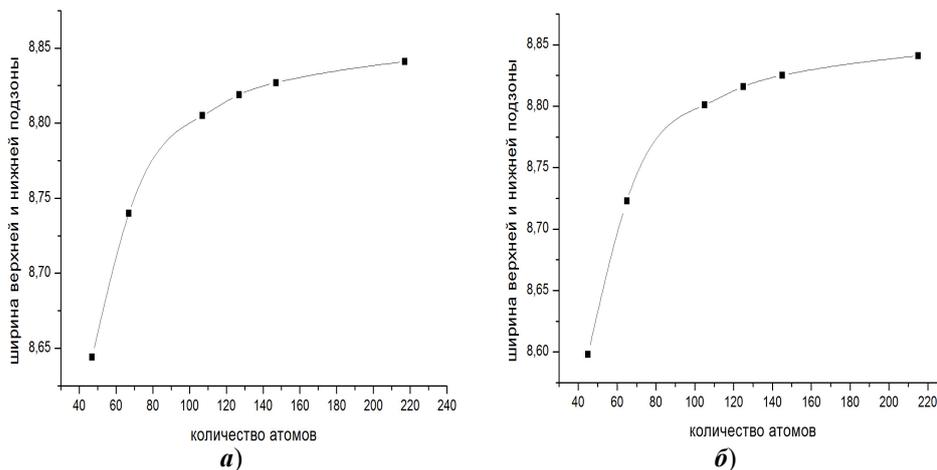


Рис. 6. Графики зависимости ширин верхней и нижней подзон для закрытой (а) и открытой (б) золотых нанотрубок (5,0) от количества атомов в нанотрубке

3. Уравнение на химический потенциал

Обратим внимание, что при определении энергетических спектров мы использовали разные значения собственной энергии электронов ϵ . Дело в том, что разным значениям числа электронов в нанотрубке из атомов золота соответствуют свои определенные значения собственной энергии электронов ϵ . Уравнение $N_e = N_e(\epsilon)$, где N_e – общее количество электронов в нанотрубке, называется уравнением на химический потенциал, поскольку собственная энергия электронов связана с химпотенциалом. Решив, например, графически уравнение на химпотенциал, можем в каждом конкретном случае определить собственную энергию. Для того чтобы проще было рассуждать, уравнение на химпотенциал представим графически, отложив по оси ординат общее количество электронов в нанотрубке, а по оси абсцисс – значение собственной энергии электронов ϵ (по величине оно меньше нуля).

На рис. 7 приведен графический вид уравнения на химпотенциал в случаях 45 и 47 атомов золота в нанотрубке. Для того чтобы лучше было видно, дополнительно нарисованы прямые, соответствующие 46, 47 и 48 электронам в случае нанотрубки из 47 атомов золота. Если в случае 46 электронов решение является однозначным и мы получим единственное значение для ϵ , то в случае 47 и 48 электронов мы получим «ступеньки», в пределах которых при любом значении ϵ мы будем иметь одно и то же количество электронов, в таких случаях резонно за значение ϵ взять значение, соответствующее середине «ступеньки».

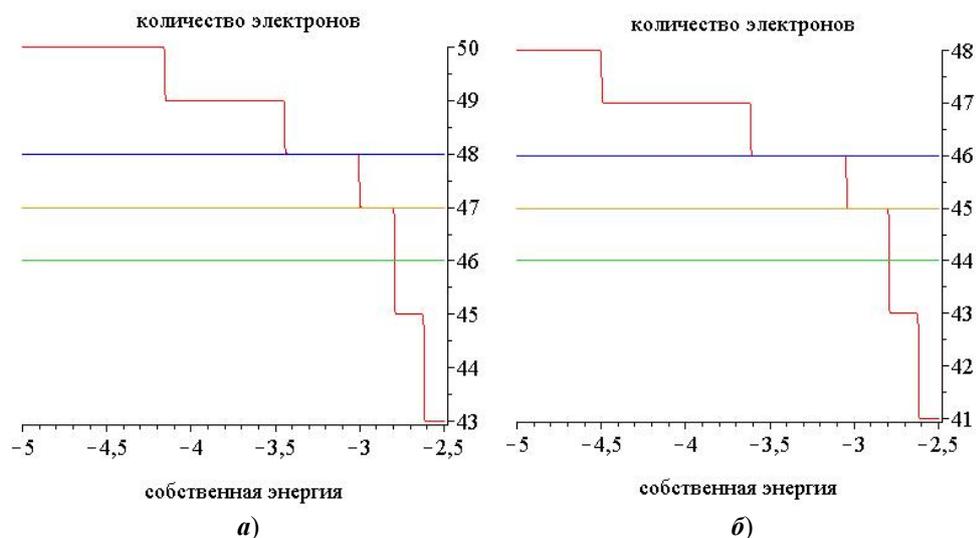


Рис. 7. Графическое представление уравнения на химпотенциал в случае 47 и 45 атомов золота в нанотрубке при $U = 8,85$ эВ, $B = -1$ эВ хиральности (5,0)

По рис. 7 можно заключить, что электроны будут иметь собственную энергию для закрытой золотой нанотрубки из 47 атомов $\epsilon = -2,91$ эВ, а для открытой нанотрубки из 45 атомов $\epsilon = -2,92$ эВ. Добавив к электрически нейтральной структуре из 47 атомов один лишний электрон (получим ион

Au_{47}^-), будем иметь собственную энергию электрона, равную $\varepsilon = -3,22$ эВ. Когда на 47 узлов нанотрубки приходится 46 электронов (Au_{47}^+), ε становится равной $-2,72$ эВ. Если в случае 45 атомов внедрить один лишний электрон, энергия ε становится равной $-3,33$ эВ, а если удалить один электрон из электронейтральной нанотрубки, энергию ε нужно взять равной $-2,8$ эВ.

Изучив рис. 8, можем сделать вывод, что электроны будут иметь собственную энергию для замкнутой и незамкнутой Au нанотрубок из 127 и 125 атомов $\varepsilon = -2,86$ эВ. В случае Au_{127}^- энергия ε электронов уменьшится до $-2,92$ эВ, а в случае, когда Au_{127}^+ , энергия ε становится равной $-2,85$ эВ. В случае иона Au_{125}^- происходит уменьшение энергии ε до $-2,93$ эВ, а при Au_{125}^+ происходит увеличение до $\varepsilon = -2,85$ эВ.

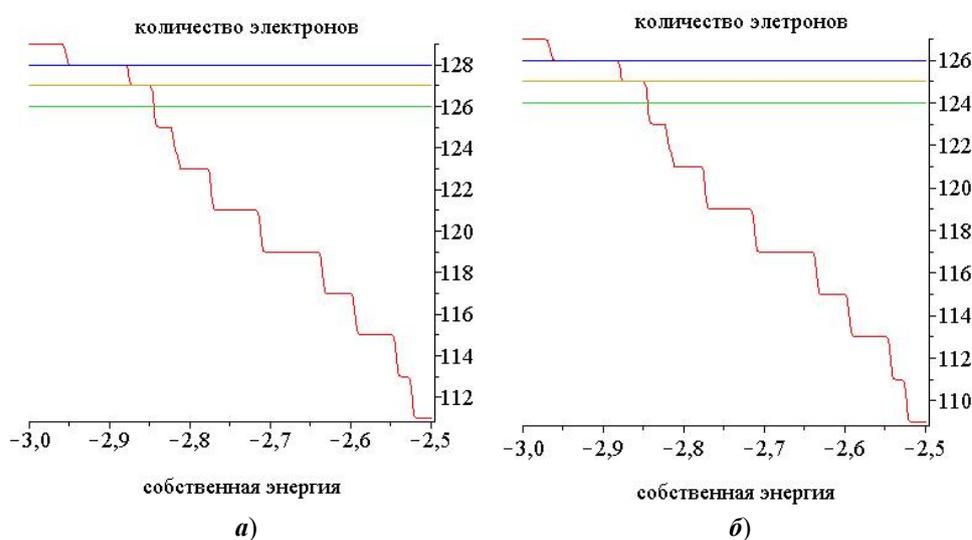


Рис. 8. Графическое представление уравнения на химпотенциал в случае 127 и 125 атомов золота в нанотрубке (5,0) при $B = -1$ эВ, $U = 8,85$ эВ

Таким образом, сделаем вывод, что электроны будут иметь собственную энергию для замкнутой нанотрубки из 257 атомов Au $-2,81$ эВ, а для незамкнутой нанотрубки из 255 атомов Au $-2,86$ эВ. Для 257 атомов в случае Au_{257}^- энергия электронов уменьшается и будет равна $-2,87$ эВ, а для катиона Au_{257}^+ энергия увеличивается и равняется $-2,85$ эВ. Добавляя один электрон к структуре из 255 атомов Au, получим уменьшение собственной энергии до $\varepsilon = -2,82$ эВ, а если удалить один электрон из электронейтральной нанотрубки, то собственная энергия будет равной $-2,8$ эВ (рис. 9).

4. Плотности электронных состояний

Представляет интерес вопрос, насколько плотно расположены энергетические уровни в случае спектров возможных значений энергий электронов, для этого построим плотность состояния электронов для нанотрубки из 45 и

47 атомов Au (рис. 10). Эти графики свидетельствуют о том, что в случае нижней хаббардовской подзоны (аналог валентной зоны) уровни энергии находятся ближе друг к другу (плотность больше) в верхней части подзоны вблизи энергии Ферми. Пики на графиках соответствуют особенностям Ван Хофа.

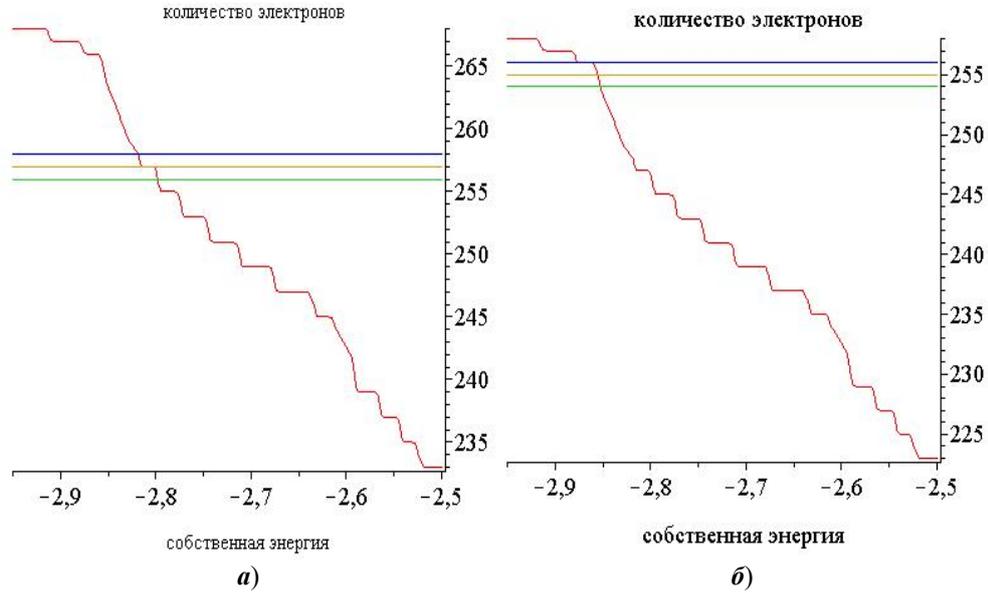


Рис. 9. Графическое представление уравнения на химпотенциал в случае 257 и 255 атомов Au в нанотрубке (5,0) при $B = -1$ эВ, $U = 8,85$ эВ

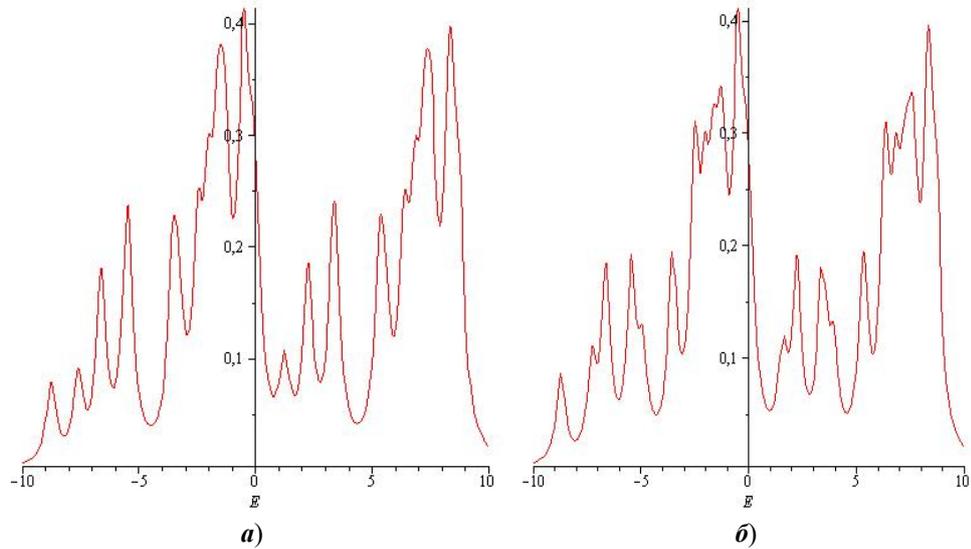


Рис. 10. Плотность состояний d -электронов нанотрубки 47 (а) и 45 (б) атомов Au при значениях параметров модели: $B = -1$ эВ, $U = 8,85$ эВ, $\varepsilon = -2,91$ эВ (для 47 атомов) и $\varepsilon = -2,92$ эВ (для 45 атомов)

Из вида графиков на рис. 10 следует, что в случае замкнутой золотой нанотрубки из 47 атомов пиков меньше, чем при 45 атомах Au для незамкну-

той нанотрубки. Проанализируем пики, которые находятся в пределах отрезка от -10 до -4 эВ. В этом пределе для 47 атомов Au пиков меньше, чем для 45 атомов Au и для 47 (замкнутой) атомов Au второй пик находится намного ниже, чем для 45 (незамкнутой) атомов Au. При анализе пиков в пределах от -3 до 0 эВ на рис. 10 можно заметить, что пики для закрытой нанотрубки из 47 атомов отличаются от незамкнутой Au нанотрубки из 45 атомов.

Из рис. 11 мы видим, что для закрытой нанотрубки, состоящей из 127 атомов, в пределе от -7 до -6 эВ находится всего лишь один пик, а для открытой нанотрубки из 125 атомов Au добавляется еще один пик. Можно посмотреть также пики, которые находятся в пределах от -3 до -2 эВ. В этом случае для закрытой нанотрубки из 127 атомов Au есть два пика, а для открытой нанотрубки из 125 атомов Au только один.

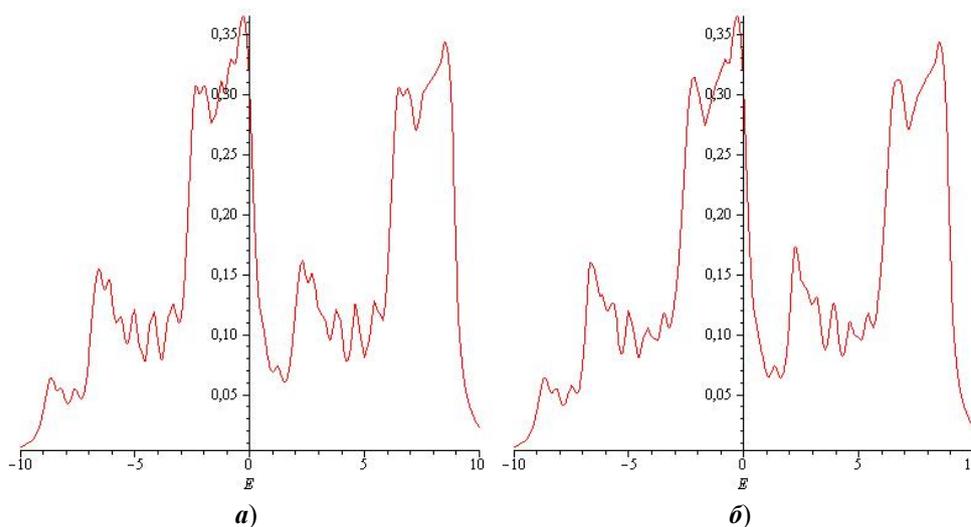


Рис. 11. Плотность состояний d -электронов нанотрубки из 127 (а) и 125 (б) атомов Au при $U = 8,85$ эВ, $V = -1$ эВ, $\varepsilon = -2,86$ эВ

Таким образом, из рис. 12 сделаем вывод, что плотности состояний электронов закрытой и открытой нанотрубок незначительно отличаются друг от друга. С увеличением количества атомов происходит сглаживание пиков. Таким образом, при количестве атомов больше 200 плотности электронных состояний для открытых и закрытых нанотрубок будут практически одинаковыми, поэтому можно ограничиться тем, что рассмотреть только открытые нанотрубки, тогда как при числе узлов меньше 200 атомов золота плотности состояний открытых и закрытых золотых нанотрубок отличаются друг от друга.

Заключение

В работе проведено теоретическое исследование энергетического спектра, плотности электронного состояния, уравнения на химический потенциал закрытых и открытых нанотрубок (5,0) из атомов золота по мере их роста в рамках гамильтониана Хаббарда. Проведено сравнение энергетических спектров закрытых и открытых нанотрубок, оно свидетельствует о том, что до-

бавление двух атомов золота для закрытия нанотрубки сверху и снизу ведет не только к появлению дополнительного уровня энергии, но и к перестройке практически всего энергетического спектра открытой нанотрубки. Этот результат имеет важное значение как с практической, так и научной точек зрения, поскольку практически все работы в исследуемой нами области длин нанотрубок посвящены исследованию свойств только открытых нанотрубок.

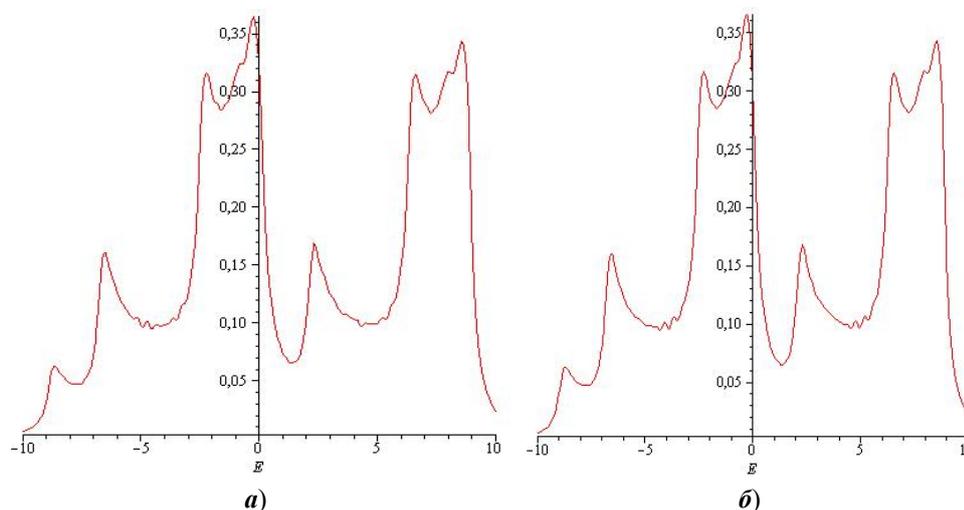


Рис. 12. Плотность состояний d -электронов нанотрубки из 257 (а) и 255 (б) атомов золота при $U = 8,85$ эВ, $B = -1$ эВ, $\varepsilon = -2,86$ эВ (для открытого) и $\varepsilon = -2,81$ эВ (для закрытого)

Изучение электронной структуры исследуемых нанотрубок свидетельствует о том, что пока нанотрубка состоит из небольшого количества атомов золота, она является полупроводником, по мере роста нанотрубки начинают преобладать металлические свойства, имеет место гетеропереход полупроводник–металл.

Список литературы

1. Yarzhemsky V. G., Battocchio C. The Structure of Gold Nanoparticles and Au Based Thiol Self-Organized Monolayers // *Russ. J. Inorgan. Chem.* 2011. Vol. 56, № 14. P. 2147–2159.
2. Oshima Y., Onga A., Takayanagi K. Helical gold nanotube synthesized at 150 K // *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol. 91, № 20. P. 205503-1–205503-2.
3. Haruta M. Gold rush // *Nature.* 2005. Vol. 437. P. 1098–1099.
4. Миронов Г. И. Исследование нанокластеров из атомов золота в рамках модели Хаббарда // *Физика металлов и металловедение.* 2008. Т. 105, № 4. С. 355–365.
5. Миронов Г. И. Вычисление функций Грина для наноструктур в модели Хаббарда в приближении статистических влуктуаций // *Физика металлов и металловедение.* 2006. Т. 102, № 6. С. 611–620.
6. Миронов Г. И. Электронная структура и спектры оптического поглощения золотых фуллеренов Au_{16} и Au_{20} // *Физика твердого тела.* 2019. Т. 61, № 6. С. 1204–1213.
7. Dyachkov P. N. Electronic structure of boron nitride nanotubes intercalated with transition metals // *Russian Journal of Inorganic Chemistry.* 2014. Vol. 59, № 12. P. 1454–1461.

8. Миронов Г. И. Наносистемы в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций // Физика твердого тела. 2006. Т. 48, № 7. С. 1299–1306.
9. Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands // Proceeding of the Royal Society. 1963. Vol. 276. P. 238.
10. Миронов Г. И. Наносиситемы в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций // Физика твердого тела. 2006. Т. 48, № 7. С. 1299–1306.
11. Филиппова Е. Р., Миронов Г. И. Энергетический спектр одностенных углеродных нанотрубок типа зигзаг в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций // Физика низких температур. 2017. Т. 43, № 6. С. 902–908.
12. Миронов Г. И., Филиппова Е. Р. Исследование структурных элементов золотых нанотрубок в Модели Хаббарда // Физика металлов и металловедение. 2012. Т. 113, № 1. С. 11–21.
13. Филиппова Е. Р., Миронов Г. И. Исследование золотых нанотрубок хиральностей (4,3) и (5,3) в модели Хаббарда // Физика твердого тела. 2012. Т. 54, № 8. С. 1600.
14. Изергин Э. Д., Миронов Г. И. Фуллерены C_{24} в модели Хаббарда // Физика низких температур. 2007. Т. 33, № 12. С. 1365–1370.

References

1. Yarzhemsky V.G., Battocchio C. The Structure of Gold Nanoparticles and Au Based Thiol Self-Organized Monolayers. *Russ. J. Inorgan. Chem.* 2011;56(14):2147–2159.
2. Oshima Y., Onga A., Takayanagi K. Helical gold nanotube synthesized at 150 K. *Phys. Rev. Lett.* 2003;91(20):205503-1–205503-2.
3. Haruta M. Gold rush. *Nature.* 2005;437:1098–1099.
4. Mironov G.I. The study of nanoclusters of gold atoms in the framework of the Hubbard model. *Fizika metallov i metallovedenie = Physics of metals and metal science.* 2008;105(4):355–365. (In Russ.)
5. Mironov G.I. Calculation of the Green's function for nanostructures in the Hubbard model in the approximation of statistical fluctuations. *Fizika metallov i metallovedenie = Physics of metals and metal science.* 2006;102(6):611–620. (In Russ.)
6. Mironov G.I. Electronic structure and optical absorption spectra of gold fullerenes Au_{16} and Au_{20} . *Fizika tverdogo tela = Solid state physics.* 2019;61(6):1204–1213. (In Russ.)
7. Dyachkov P.N. Electronic structure of boron nitride nanotubes intercalated with transition metals. *Russian Journal of Inorganic Chemistry.* 2014;59(12):1454–1461.
8. Mironov G.I. Nanosystems in the Hubbard model in the static fluctuation approximation. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics.* 2006;48(7):1299–1306. (In Russ.)
9. Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. *Proceeding of the Royal Society.* 1963;276:238.
10. Mironov G.I. Nanosystems in the Hubbard model in the static fluctuation approximation. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics.* 2006;48(7):1299–1306. (In Russ.)
11. Filippova E.R., Mironov G.I. Energy spectrum of single-walled carbon nanotubes of the zigzag type in the Hubbard model in the approximation of static fluctuations. *Fizika nizkikh temperature = Physics of low temperatures.* 2017;43(6):902–908. (In Russ.)
12. Mironov G.I., Filippova E.R. Study of the structural elements of gold nanotubes in the Hubbard Model. *Fizika metallov i metallovedenie = Physics of metals and metal science.* 2012;113(1):11–21. (In Russ.)
13. Filippova E.R., Mironov G.I. Study of gold nanotubes with chiralities (4.3) and (5.3) in the Hubbard model. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics.* 2012;54(8):1600. (In Russ.)
14. Izergin E.D., Mironov G.I. Fullerenes C_{24} in the Hubbard model. *Fizika nizkikh temperatur = Physics of low temperatures.* 2007;33(12):1365–1370. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Геннадий Иванович Миронов

доктор физико-математических наук,
доцент, профессор кафедры физики
и материаловедения, Марийский
государственный университет
(Россия, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, 1)

E-mail: mirgi@marsu.ru

Gennadiy I. Mironov

Doctor of physical and mathematical
sciences, associate professor, professor
of the sub-department of physics
and materials science, Mari State University
(1 Lenina square, Yoshkar-Ola, Russia)

Анжелика Геннадиевна Пекпатрова

магистрант, Марийский государственный
университет (Россия, г. Йошкар-Ола,
пл. Ленина, 1)

E-mail: apekpatrova@mail.ru

Anzhelika G. Pekpatrova

Master's degree student,
Mari State University
(1 Lenina square, Yoshkar-Ola, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 18.01.2021

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 30.04.2021

Принята к публикации / Accepted 05.06.2021