

## Энергетический спектр и корреляционные функции кластеров углеродных нанотрубок хиральности (5,5)

© Т.Э. Арутюнова, Г.И. Миронов, А.И. Мурзашев

Марийский государственный университет,  
Йошкар-Ола, Россия

E-mail: nanotubes59@mail.ru

(Поступила в Редакцию 30 августа 2011 г.  
В окончательной редакции 22 января 2012 г.)

В рамках модели Хаббарда получены корреляционные функции и энергетические спектры кластеров углеродных нанотрубок хиральности (5,5), состоящих из 30, 50, 70, 90 и 190 атомов. Сделано предположение, что углеродные нанотрубки такой хиральности при учете хаббардовских корреляций должны быть полупроводниками с запрещенной щелью  $\sim 1$  eV. Это противоречит общепринятому положению, согласно которому углеродные нанотрубки хиральности  $(m, n)$ , если  $m-n$  кратно трем или равно нулю, должны быть металлами. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными по электропроводности и сканирующей туннельной микроскопии углеродных нанотрубок.

### 1. Введение

Несмотря на то что с момента открытия углеродных нанотрубок (УНТ) прошло почти двадцать лет, их изучение остается актуальным до сих пор. Необходимо отметить, что УНТ в отличие от сходных с ними по строению фуллеренов являются очень сложными объектами для экспериментального исследования. Это связано с трудностью получения гомогенных по составу и строению образцов, содержащих УНТ. Даже после очистки от сажи и примесей эти образцы представляют собой смесь различных по длине и хиральности кластеров УНТ. Поэтому экспериментальные данные для них достаточно противоречивы.

В УНТ углерод находится в  $sp^2$ -гибридизованном состоянии, и основной вклад в их свойства вносит  $\pi$ -электронная система [1]. Электроны этой орбитали оказываются частично локализованными.  $\pi$ -электроны из-за перекрытия волновых функций могут перескакивать на соседний узел нанотрубки, вследствие чего на одном узле оказываются два  $\pi$ -электрона с разными проекциями спинов. Поэтому возникает необходимость учета энергии кулоновского отталкивания электронов, оказавшихся на одном узле. В нанотрубках возникает ситуация, напоминающая сильно коррелированные системы. Поэтому все чаще физики, занимающиеся нанотрубками, приходят к выводу, что  $\pi$ -электронная система в нанотрубках представляет собой систему с сильными корреляциями. В ряде работ, например [2,3], отмечается, что экспериментальные данные по УНТ и фуллеренам нельзя объяснить без привлечения концепции сильно коррелированных состояний. Для описания сильно коррелированных систем можно применить модель Шубина–Вонсовского–Хаббарда [4,5].

В [6] в рамках модели Шубина–Вонсовского–Хаббарда изучалась проводимость УНТ. В [7–11] эта модель использовалась для изучения углеродных наносистем, фул-

леренов и УНТ. В [8,9] в рамках данной модели в приближении статических флуктуаций [7] были вычислены корреляционные функции и энергетические спектры  $C_{60}$  и  $C_{24}$ . Настоящая работа посвящена изучению кластеров УНТ хиральности (5,5) конечных размеров в рамках указанной модели.

Считается, что бесконечные УНТ хиральности  $(m, n)$  являются проводниками, если  $m-n$  кратно трем или равно нулю, и полупроводниками в противном случае [12]. Исходя из этого УНТ хиральности (5,5) при числе атомов  $N \rightarrow \infty$  должна проявлять металлические свойства. Предметом нашего исследования является анализ изменения электронных свойств, таких как энергетический спектр и корреляционные функции, кластеров УНТ хиральности (5,5) с их ростом.

### 2. Модель и метод

Для расчетов нами была взята стандартная модель Шубина–Вонсовского–Хаббарда [4]

$$H = \varepsilon \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + B \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (1)$$

Здесь  $\varepsilon$  — собственная энергия электрона,  $U$  — энергия кулоновского взаимодействия электронов на одном узле,  $B$  — интеграл переноса электронов между соседними узлами,  $\hat{n}_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$  — оператор числа частиц на узле  $i$  с проекцией спина  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ , а  $a_{i\sigma}^+$  и  $a_{i\sigma}$  — соответственно операторы рождения и уничтожения электронов на узле  $i$  с проекцией спина  $\sigma$ . Суммирование по  $i$  производится по всем атомам УНТ, а по  $j$  (во втором слагаемом) — по соседним к  $i$  узлам. Мы не стали учитывать кулоновское взаимодействие на соседних узлах, как это делается в некоторых работах, так как в [7], где в рамках модели Хаббарда изучались структурные элементы фуллерена  $C_{60}$ , было показано, что такой учет

приводит лишь к перенормировке  $\varepsilon$  и  $U$  — параметров модели Хаббарда. В дальнейших расчетах мы полагаем, что такая перенормировка выполнена.

Следуя [7], возьмем гамильтониан (1) в представлении Гейзенберга с мнимым временем  $\tau$  и запишем уравнения движения для операторов ( $i = 1, \dots, N$ )

$$\frac{da_{i\sigma}^+(\tau)}{d\tau} = [H, a_{i\sigma}^+(\tau)] = \varepsilon a_{i\sigma}^+(\tau) + B \sum_{j \neq i} a_{j\sigma}^+(\tau) + U \hat{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) a_{i\sigma}^+(\tau), \quad (2)$$

где  $N$  — число узлов в системе, а  $\bar{\sigma} = -\sigma$ . Оператор  $\hat{n}_{i\bar{\sigma}}$  представим как  $\hat{n}_{i\bar{\sigma}} = \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle + \Delta \hat{n}_{i\bar{\sigma}}$  ( $\Delta \hat{n}_{i\bar{\sigma}}$  — оператор флуктуации числа частиц). Тогда (2) переписется в виде

$$\frac{da_{i\sigma}^+(\tau)}{d\tau} = \varepsilon_i a_{i\sigma}^+(\tau) + B \sum_{j \neq i} a_{j\sigma}^+(\tau) + U \Delta \hat{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) a_{i\sigma}^+(\tau). \quad (3)$$

Здесь суммирование по  $j$ , как и в (2), идет по узлам, соседним с  $i$ , а

$$\varepsilon_i = \varepsilon + U \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle. \quad (4)$$

Следуя [7], введем „представление типа представления взаимодействия“

$$\begin{aligned} a_{i\sigma}^+(\tau) &= e^{H\tau} a_{i\sigma}^+(0) e^{-H\tau} \\ &= e^{H_0\tau} (e^{-H_0\tau} e^{H\tau} a_{i\sigma}^+(0) e^{-H\tau} e^{H_0\tau}) e^{-H_0\tau} \\ &= e^{H_0\tau} \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau) e^{-H_0\tau}, \\ \Delta \hat{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) &= e^{H_0\tau} \Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) e^{-H_0\tau}, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$H_0 = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i \hat{n}_{i\sigma} + B \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}). \quad (6)$$

Используя операторное тождество

$$\hat{n}_{i\sigma}^2 = \hat{n}_{i\sigma}, \quad (7)$$

можно показать, что операторы  $\tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau)$  и  $\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}} \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau)$  в „представлении типа представления взаимодействия“ удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau)}{d\tau} = U (\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}} \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau)), \\ \frac{d(\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}} \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau))}{d\tau} = U (1 - 2\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle) (\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}} \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau)) \\ \quad + U (1 - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle) \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau). \end{cases} \quad (8)$$

Решив (8), после перехода с помощью (5) к гейзенберговскому представлению получим

$$\begin{aligned} a_{i\sigma}^+(\tau) &= \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau) \{ (1 - \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle) \exp(-\langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle U \tau) \\ &\quad + \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle \exp((1 - \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle) U \tau) \} + \bar{\Delta} \hat{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau) \\ &\quad \times \{ \exp((1 - \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle) U \tau) - \exp(-\langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle U \tau) \}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь  $\tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau) = \exp(H_0\tau) a_{i\sigma}^+(0) \exp(-H_0\tau)$ , уравнения движения в этом случае имеют вид

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_i \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau) + B \sum_{j \neq i} \tilde{a}_{j\sigma}^+(\tau), \quad (10)$$

где  $i = 1, \dots, N$ , суммирование по  $j$  идет по узлам, соседним с  $i$ .

Система уравнений (10) является замкнутой. Решив систему (10) и подставив решения в равенство (9), можно найти операторы  $a_{i\sigma}^+(\tau)$  для любой системы, а затем на их основе получить антикоммутаторные функции Грина.

Далее описанная выше схема использована для различных кластеров УНТ хиральности (5,5). С помощью изложенного выше метода для этих систем нами были получены выражения для операторов  $a_{i\sigma}^+(\tau)$ , которые ввиду их громоздкости приводить не будем; структура их следующая:

$$\begin{aligned} a_{i\sigma}^+(\tau) &= \sum_{i=1}^K M_i \exp(A_i \tau) a_{i\sigma}^+(0) \\ &\quad + \sum_{i=1}^K Q_i \exp(P_i \tau) \Delta \hat{n}_{i\bar{\sigma}}(0) a_{i\sigma}^+(0). \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь  $K$  — числа (разные для различных кластеров); величины  $M_i$  и  $Q_i$  линейно зависят от среднего числа электронов в узле  $n_{i\bar{\sigma}} = \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle$ ;  $A_i$  и  $P_i$  линейно зависят от параметров модели  $B$ ,  $U$  и  $\varepsilon$ ;  $a_{i\sigma}^+(0)$  — невозмущенные фермиевские операторы. Это позволило получить антикоммутаторные функции Грина. Полюса Фурье-образа антикоммутаторной функции Грина  $\langle \langle a_{i\sigma}^+ | a_{i\sigma} \rangle \rangle_E$  определяют энергетический спектр системы. Значение  $\varepsilon$  находим из уравнения для химического потенциала

$$\sum_{i,\sigma} \langle n_{i\sigma} \rangle = N_e, \quad (12)$$

где  $N_e$  — число электронов в системе, а  $\langle n_{i\sigma} \rangle$  — термодинамические средние, определяющиеся с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы [13] из функций Грина. В кластерах УНТ в отличие от фуллерена  $C_{60}$  не все узлы эквиваленты. Например, в кластере из 30 атомов можно выделить две группы узлов, различающихся симметрией: 10 центральных и 20 крайних (рис. 1). Очевидно, что  $\langle n_{1\sigma} \rangle = n_1$  должны

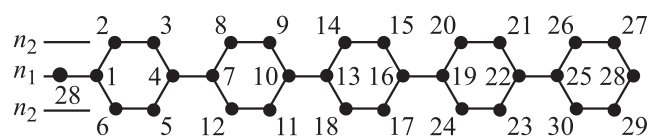


Рис. 1. Развертка кластера УНТ хиральности (5,5), состоящего из 30 атомов.

отличаться от  $\langle n_{2\sigma} \rangle = n_2$ . Поэтому, для нахождения  $n_1$ ,  $n_2$  и  $\varepsilon$  необходимо решить систему из трех уравнений

$$\begin{cases} n_1 = F_1(n_1, n_2), \\ n_2 = F_2(n_1, n_2). \\ N_e/2 = 10n_1 + 20n_2. \end{cases} \quad (13)$$

В (13)  $F_1$  и  $F_2$  — нелинейные функции, помимо  $n_1$  и  $n_2$  зависящие от параметров модели  $U$ ,  $B$  и  $\varepsilon$ . Они имеют следующий вид:

$$F_1(n_1, n_2) = \sum_{i=1}^{24} M_i^{(1)} f(E_i^{(1)}),$$

$$F_2(n_1, n_2) = \sum_{i=1}^{28} M_i^{(2)} f(E_i^{(2)}), \quad (14)$$

где  $f(x) = 1/(1 + \exp(x/kT))$  — функция распределения Ферми. Выражения для  $M_i^{(1)}$ ,  $M_i^{(2)}$ ,  $F_i^{(1)}$ ,  $F_i^{(2)}$  приведены в Приложении. Решая (13) при известных полюсах функций Грина  $\langle \langle a_{i\sigma}^+ | a_{i\sigma} \rangle \rangle_E$ , можно получить всю возможную в рамках нашего метода информацию об исследуемой системе. В настоящей работе такая программа нами была реализована для кластеров УНТ хиральности (5,5), состоящих из 30, 50, 70, 90 и 190 атомов. Прежде чем приступить к изложению полученных результатов, приведем ряд соображений о свойствах рассматриваемых систем. Это позволит более полно и кратко описать полученные результаты.

Для дальнейшего рассмотрения необходимо определиться с параметрами нашей модели:  $U$  и  $B$ . Данные для этих параметров противоречивые: например, в [6] взято  $U = 10.0 \text{ eV}$ ,  $B = -1.4 \text{ eV}$ . Однако ранее в [14] нами было показано, что в фуллеренах параметры модели Шубина–Вонсовского–Хаббарда следующие:  $U = 7.06 \text{ eV}$ ,  $B = -1.0 \text{ eV}$ , именно при этих значениях удается объяснить спектры оптического поглощения фуллерена  $C_{60}$ . Исходя из результатов [14] мы взяли  $U = 7.06 \text{ eV}$ ,  $B = -1.0 \text{ eV}$  ввиду того, что и в фуллеренах, и в УНТ электронной подсистемой, определяющей основные физические свойства, являются  $\pi$ -электроны (мы согласны, с тем, что такой выбор параметров является спорным, но сознательно идем на это). Таким образом, мы изучаем системы в пределе почти сильной связи. В таком состоянии электроны оказываются более локализованными, чем делокализованными в узлах решетки, так как при перескоке электрона с узла на узел, если на последнем находится электрон, возникает сильное кулоновское отталкивание, поэтому электрону при температуре  $T \rightarrow 0$  трудно перейти на этот узел. Отметим, что если энергетические уровни электронов, соответствующие движению без двукратного заполнения одного узла, обозначить через  $E_k$ , то уровни энергии электронов, соответствующие двукратному заполнению одного узла, очевидно будет  $E_k + U$ . Следует ожидать,

что корреляционная функция  $\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle$  (здесь  $i \neq j$ ), характеризующая вероятность перескока с узла  $j$  на узел  $i$ , при  $U$ , большем некоторого критического значения, будет равна нулю. В этом случае, когда система допирована (имеется лишний электрон или дырка), корреляционная функция должна быть отлична от нуля при любом  $U$ . Можно ожидать, что это критическое значение  $U_c$ , при котором корреляционная функция в отсутствие допирования равна нулю, будет зависеть от длины УНТ. Вместе с тем следует ожидать наличия достаточно большой запрещенной зоны между нижней и верхней хаббардовскими подзонами. Подчеркнем, что в сильно коррелированных системах щель между занятыми и незанятыми состояниями находится не вблизи  $\varepsilon$ , а вблизи нуля. Вследствие этого в нижней хаббардовской подзоне на каждом энергетическом уровне с кратностью вырождения, например, 5 будет находиться не пять электронов с ориентацией спина „ $\uparrow$ “ и пять электронов с ориентацией спина „ $\downarrow$ “, а пять электронов с произвольной ориентацией спина [15]. Также вызывает интерес зависимость ширины хаббардовской подзоны от длины УНТ. Все отмеченное выше относится к кластерам УНТ хиральности (5,5) разной длины.

### 3. Результаты

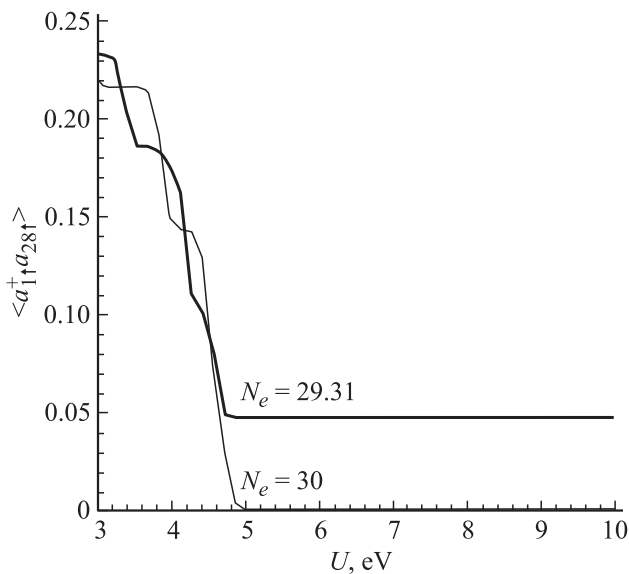
3.1. Система из 30 атомов. На рис. 1 приведена развертка кластера УНТ, состоящего из 30 атомов. Видно, что в изучаемой системе можно выделить группы узлов, различающихся по симметрии:  $\{1, 4, 7, 10, 13, 16, 19, 22, 25, 28\}$  и  $\{2, 3, 8, 9, 14, 15, 20, 21, 26, 27, 5, 6, 11, 12, 17, 18, 23, 24, 29, 30\}$ . Очевидно, что электронная плотность на них должна быть разной: для первой группы —  $n_1$ , для второй —  $n_2$ . Исследование показало, что в случае, когда система не допирована, на всех узлах, несмотря на их неэквивалентность, среднее число электронов равно единице. Очевидное объяснение этого факта следующее: система является сильно коррелированной, и состояния с отличным от единицы числом электронов на узле запрещены. Добавление в систему или удаление из нее электронов приводит к тому, что избыточные электроны (дырки) получают возможность двигаться и распределяются по узлам в соответствии с их симметрией. В результате их средняя плотность на узлах групп с различной симметрией становится

**Таблица 1.** Распределение электронов по слоям и значения  $\varepsilon$  в кластере УНТ хиральности (5,5), состоящем из 30 атомов, при различном числе  $N_e$  электронов в системе

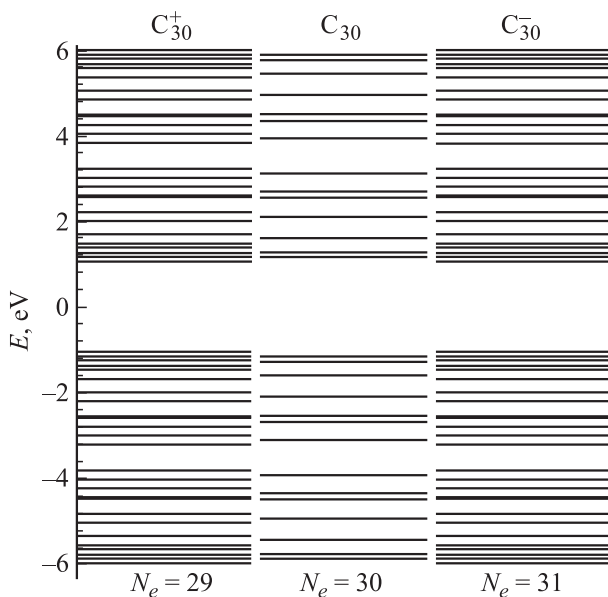
Величина	$N_e = 28$	$N_e = 29$	$N_e = 30$	$N_e = 31$	$N_e = 32$
$n_1$	0.886	0.926	1.0	1.074	1.114
$n_2$	0.957	0.987	1.0	1.013	1.043
$\langle n \rangle$	0.933	0.967	1.0	1.033	1.067
$\varepsilon, \text{eV}$	-2.02	-2.22	-3.53	-4.84	-5.04

разной (табл. 1). Это подтверждается зависимостью корреляционной функции от  $U$  ( $B = \text{const}$ ), которая в случае допирования не обращается в нуль при больших значениях  $U$  (рис. 2). Видно, что при отсутствии допирования она обращается в нуль при  $U = U_c \approx 5.0 \text{ eV}$ . Энергетический спектр изучаемой системы приведен на рис. 3.

Структура энергетического спектра такова, что ниже нуля лежат состояния, значения энергий которых аналитически могут быть представлены выражениями вида



**Рис. 2.** Зависимости корреляционной функции  $\langle a_{1\uparrow}^+ | a_{28\uparrow} \rangle$  от  $U$  в кластере УНТ хиральности (5,5), состоящем из 30 атомов, при  $B = -1.0 \text{ eV}$  и  $N_e = 29, 30, 31$ . Зависимости при  $N_e = 29$  и 31 совпадают (жирная линия).



**Рис. 3.** Энергетический спектр кластера УНТ хиральности (5,5), состоящего из 30 атомов, при  $N_e = 29, 30, 31$ .

**Таблица 2.** Распределение электронов по слоям и значения  $\epsilon$  в кластере УНТ хиральности (5,5), состоящем из 50 атомов, при числе электронов в системе  $N_e = 49$  и 51

Величина	$N_e = 51$	$N_e = 49$
$n_1$	1.047	0.953
$n_2$	1.030	0.970
$n_3$	0.997	1.003
$\langle n \rangle$	1.020	0.980
$\epsilon, \text{ eV}$	-4.5	-2.58

$\epsilon + \alpha_i B$ , а выше нуля — выражениями вида  $\epsilon + U + \alpha_i B$ , где  $\alpha_i$  — некоторые числа. Причем каждому нижнему уровню  $\epsilon + \alpha_i B$  соответствует уровень  $\epsilon + U + \alpha_i B$ .

При допировании некоторые энергетические уровни расщепляются. Это вызвано снятием вырождения вследствие того, что величины  $n_1$  и  $n_2$  начинают различаться, если в систему внедрены или, наоборот, удалены лишние электроны. Верхняя и нижняя хаббардовские подзоны разделены щелью  $\Delta = 2.41 \text{ eV}$ , ширина хаббардовской подзоны составляет  $4.73 \text{ eV}$ .

**3.2. Система из 50 атомов.** В кластере из 50 атомов существуют три группы неэквивалентных узлов. Решение системы, аналогичной (13), при числе электронов, равном числу узлов, дает результат, аналогичный результату для кластера из 30 атомов (табл. 2). Корреляционная функция обращается в нуль при  $U_c = 5.6 \text{ eV}$ . Щель в энергетическом спектре составляет  $1.7 \text{ eV}$ , ширина хаббардовской подзоны —  $5.35 \text{ eV}$ . Так же как и в системе с 30 атомами, при отсутствии допирования среднее число электронов на неэквивалентных узлах одинаково, а допировании — различно.

**3.3. Система из 70 атомов.** Кластер из 70 атомов содержит четыре группы неэквивалентных узлов. Корреляционная функция при  $U_c = 5.8 \text{ eV}$  обращается в нуль. Щель в спектре  $1.48 \text{ eV}$ , ширина хаббардовской подзоны  $5.58 \text{ eV}$ .

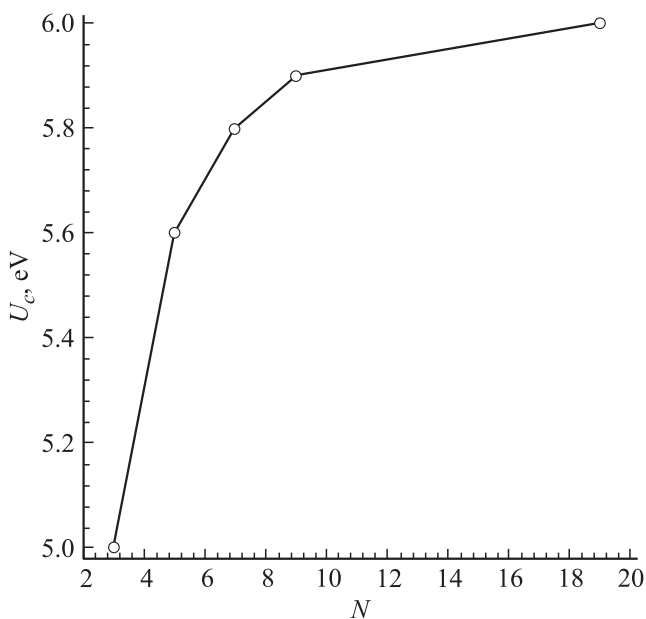
**3.4. Система из 90 атомов.** Кластер из 90 атомов содержит пять неэквивалентных узлов. При  $U_c = 5.9 \text{ eV}$  корреляционная функция при температуре  $T \rightarrow 0$  обращается в нуль. Щель в спектре  $1.37 \text{ eV}$ , ширина хаббардовской подзоны  $5.68 \text{ eV}$ .

**3.5. Система из 190 атомов.** Нами был изучен также кластер, содержащий 190 атомов. Несмотря на то что число атомов в нем по сравнению с предыдущим случаем увеличилось более чем в 2 раза, энергетическая щель в спектре,  $U_c$  и ширина хаббардовской подзоны изменились незначительно. Щель в спектре составляет  $1.22 \text{ eV}$ , ширина хаббардовской подзоны —  $5.83 \text{ eV}$ . При  $U_c = 6.0 \text{ eV}$  корреляционная функция при  $T \rightarrow 0$  обращается в нуль. Наметился выход зависимости этих величин от количества атомов на горизонтальное плато (рис. 4–6).

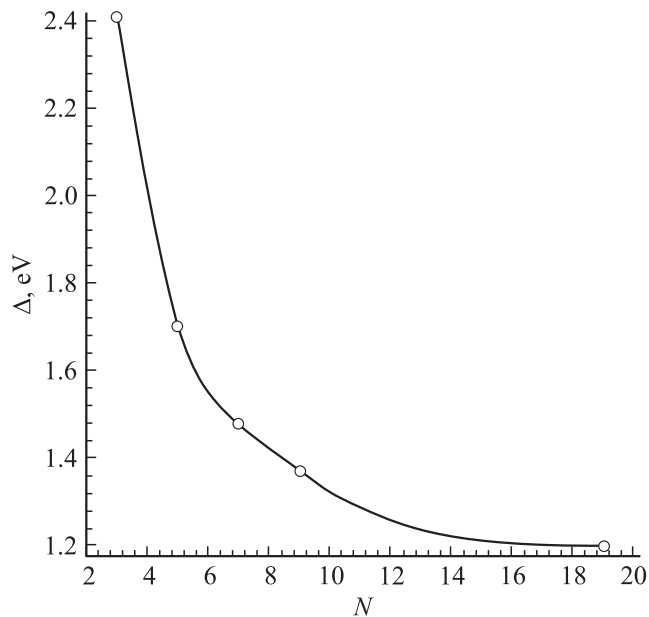
### 4. Обсуждение результатов

На основе полученных нами результатов для отдельных кластеров были построены зависимости основных энергетических характеристик от числа атомов, содержащихся в них. На рис. 4 приведена зависимость критического значения энергии кулоновского отталкивания  $U_c$ , при котором корреляционная функция недопированного кластера обращается в нуль. Эта величина с ростом числа атомов (т.е. длины УНТ) выходит при  $T \rightarrow 0$  на плато ( $\sim 6.0$  eV), повышение температуры приводит к возможности перескоков электронов с узла на узел и при  $U > 6$  eV. С этой зависимостью коррелирует зависимость ширины хаббардовской подзоны от числа атомов (рис. 6). Зависимость хаббардовской щели от числа атомов приведена на рис. 5. Из анализа рисунка следует, что величина щели с ростом числа атомов стремится к величине  $\sim 1.0$  eV.

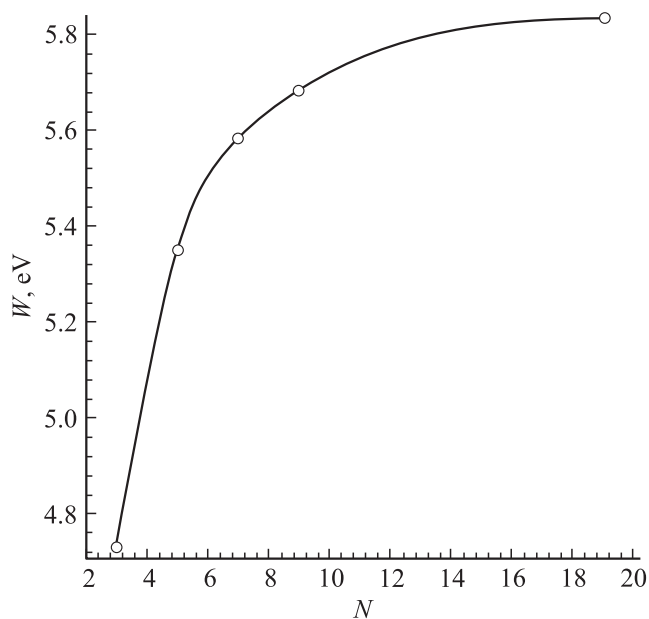
Проанализируем полученные энергетические спектры. В верхней хаббардовской подзоне находятся электронные состояния с энергиями  $\varepsilon + U + \alpha_i B$ , в нижней — с энергиями  $\varepsilon + \alpha_i B$ ; нижние состояния соответствуют случаю, когда на одном узле находится один электрон. Следовательно, в основном состоянии нижняя хаббардовская подзона полностью заполнена, а верхняя пуста, т.е. уровень, разделяющий заполненные и незаполненные состояния (уровень Ферми), находится между верхней и нижней хаббардовскими подзонами. Таким образом, рассмотренные нами системы являются полупроводниками и, по всей видимости, остаются ими и  $N \rightarrow \infty$ , так как щель, разделяющая верхнюю и ниж-



**Рис. 4.** Зависимость критического значения  $U_c$ , при котором корреляционная функция обращается в нуль, от числа атомов (единица на оси абсцисс соответствует 10 атомам) в кластере УНТ.



**Рис. 5.** Зависимость величины щели  $\Delta$  между хаббардовскими подзонами от числа атомов (единица на оси абсцисс соответствует 10 атомам) в кластере УНТ.



**Рис. 6.** Зависимость ширины хаббардовской подзоны  $W$  от числа атомов (единица на оси абсцисс соответствует 10 атомам) в кластере УНТ.

нюю хаббардовские подзоны, в этом пределе стремится к значению  $\sim 1$  eV. Это противоречит общепринятому утверждению, что длинные УНТ, у которых разность индексов хиральности  $\sim m - n$  кратна трем или равна нулю, имеют металлический тип проводимости.

Напомним, что последнее утверждение, которому противоречат результаты нашей работы, сформировались на основе простых зонных расчетов [16–18] бесконечных

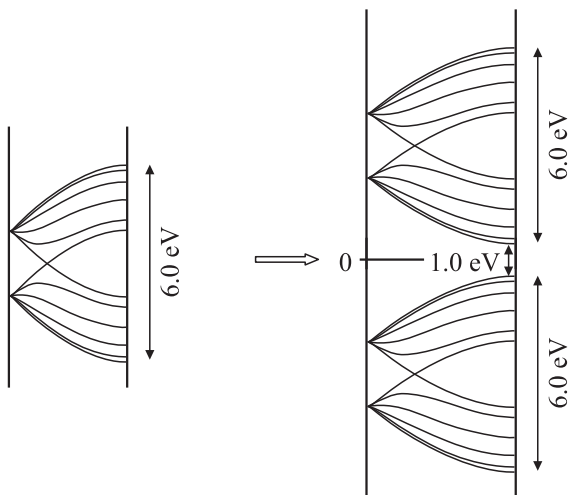


Рис. 7. Модификация энергетического спектра, полученного в [16–18], при учете хаббардовских корреляций.

УНТ, выполненных без учета особенностей сильно коррелированных систем. Их учет, как видно из результатов настоящей работы, приводит к тому, что рассчитанные дисперсионные кривые расщепляются (вместо одной „зоны проводимости“ появляются две хаббардовские подзоны), как показано на рис. 7. На этом рисунке слева показан результат, полученный в [16–18], а справа — модификация, которую, согласно нашим представлениям, должен претерпеть спектр при учете хаббардовских корреляций.

Для того чтобы пояснить механизм такой модификации, вкратце остановимся на анализе зонных расчетов, выполненных в [14–16]. В этих работах электронная структура УНТ была вычислена исходя из более раннего результата Уоллеса [19], который еще в 1947 г. получил дисперсионные соотношения для  $\pi$ -электронов графитовой плоскости

$$E_{2D}(k_x, k_y) = \pm B \times \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}. \quad (15)$$

Дисперсионные соотношения для УНТ различной хиральности получаются подстановкой в (15) граничных условий для волновых векторов  $k_x, k_y$ . Так, для УНТ хиральности  $(m, m)$  условия для волнового вектора  $k_x$  следующие:

$$m\sqrt{3}ak_{x,q} = q2\pi, \quad q = 0, \dots, m. \quad (16)$$

Не вдаваясь в частности, из вида (15) можно заключить, что подобная зона, описываемая (15), будет простирается от  $-3B$  до  $+3B$ . Это следствие того, что максимальное значение квадратного корня в (15) равно трем. Следовательно, ширина подзоны будет составлять  $W = 6B$ . Исходя из изложенного выше учет

хаббардовских корреляций приводит к тому, что каждый энергетический уровень будет описываться выражениями вида  $\varepsilon + \alpha_i B$  для нижней хаббардовской подзоны и  $\varepsilon + U + \alpha_i B$  для верхней хаббардовской подзоны. Следовательно, расстояние между верхним краем нижней хаббардовской подзоны и нижним краем верхней подзоны будет  $U - W = U - 6B$ . Хаббардовская щель в энергетическом спектре бесконечных УНТ равна

$$\Delta = U - 6B \quad (17)$$

или с учетом параметров УНТ, полученных в рамках нашего рассмотрения,  $\Delta \approx 1 \text{ eV}$ . Все отмеченное выше, по всей видимости, относится к бесконечным УНТ любой хиральности, так как хиральность учитывается лишь граничными условиями для  $k_x, k_y$ . Например, для УНТ хиральности  $(m, 0)$  граничные условия имеют вид

$$m\sqrt{3}ak_{y,q} = q2\pi, \quad q = 0, \dots, m. \quad (18)$$

Следует отметить, что наши результаты получены в рамках приближения, используемого в [7], — приближения статических флуктуаций. В связи с этим наши результаты, как и многие результаты, получаемые в рамках модельных гамильтонианов типа (1), в определенной степени носят качественный характер.

Необходимость введения понятия „сильно коррелированная система“ в модели Хаббарда была обусловлена тем, что при зонном расчете системы, состоящие из атомов, содержащих нечетное число электронов (например, один электрон на внешней оболочке), всегда должны были обладать металлическими свойствами. Но даже из качественных соображений понятно, что при достаточно большом межатомном расстоянии, когда волновые функции соседних атомов практически не перекрываются, система должна находиться в диэлектрическом состоянии. Модель Шубина–Вонсовского–Хаббарда позволила разрешить проблемы, связанные с переходом изолятор–металл [20].

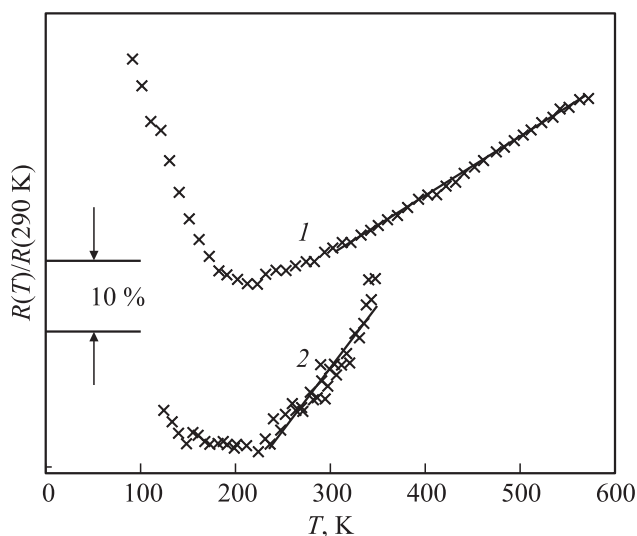
Таким образом, однослойные УНТ, рассчитанные нами, должны быть полупроводниками со щелью порядка 1 eV. Приведенные выше рассуждения дают основание утверждать, что все УНТ независимо от хиральности вследствие хаббардовских корреляций являются полупроводниками со щелью порядка 1 eV. Для сравнения отметим, что в случае чистого полупроводника Si ширина запрещенной зоны  $\Delta = 1.21 \text{ eV}$  [21].

Сопоставим полученные нами результаты с экспериментальными данными по электропроводности УНТ. Достаточно полный обзор этих свойств представлен в [11]. Как уже отмечалось во Введении, исследование свойств УНТ затруднено тем, что сложно получить образцы с контролируемым составом, поэтому экспериментальные данные по электропроводности УНТ очень противоречивы. В частности, сопротивление различных образцов УНТ изменяется от  $34 \Omega$  до  $10 \text{ M}\Omega$ . На наш взгляд, многие противоречия в интерпретации экспериментальных данных по УНТ могут быть сняты, если

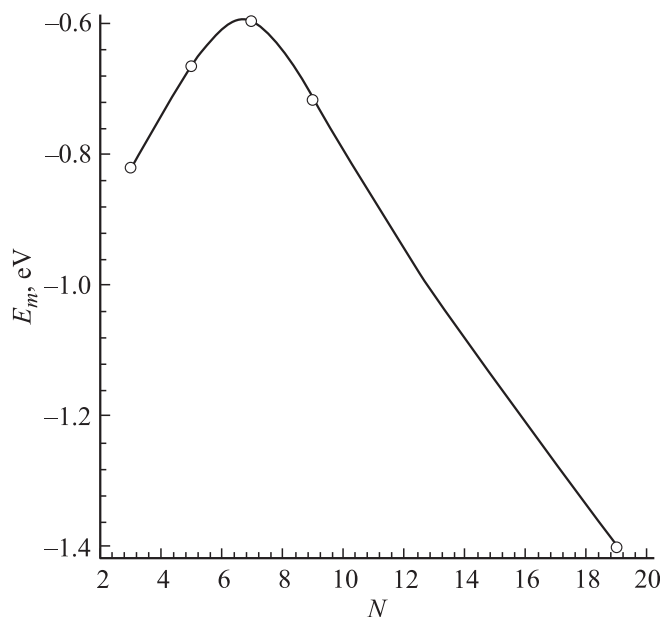
признать, что все УНТ независимо от хиральности являются полупроводниками.

В цитируемых в [12] работах не выявлено существенного различия электропроводности в УНТ разной хиральности. Так, из приведенной в [12] табл. 1, взятой из [22], следует, что величина сопротивления УНТ, относящихся, согласно их хиральности, к разным типам — узкозонный полупроводник, широкозонный полупроводник, металл, не коррелирует с указанными типами. Кроме того, во всех представленных работах в области низких температур, меньших 50–200 К, наблюдается характерный для полупроводников рост электропроводности с температурой [23–25]. С ростом температуры сопротивление падает характерным для полупроводников образом, наблюдаемый рост сопротивления при температурах выше 200 К объясняется фоновым механизмом рассеяния электронов (рис. 8). Тот факт, что многослойные УНТ обладают более высокой проводимостью в рамках нашего подхода, объясняется усилением допирования за счет переноса заряда между слоями [11].

В пользу того что все УНТ независимо от хиральности являются полупроводниками, свидетельствуют результаты работы [26], в которой методом туннельной сканирующей микроскопии изучались „металлические“ УНТ хиральности (9,0), (12,0) и (15,0). Измеренная плотность состояний показала, что в энергетическом спектре на уровне Ферми имеются мини-щели. Очевидно, что это ставит под сомнение правило, согласно которому УНТ должны быть металлами, если разность индексов хиральности кратна трем, и полупроводниками в противном случае. Это позволило в работе [27] сделать вывод, что „нанотрубки (9,0), (12,0) и (15,0), строго говоря, оказываются узкозонными полупроводниками, а не металлами“.



**Рис. 8.** Зависимость сопротивления от температуры в образцах, содержащих однослойные УНТ (данные [22]). Кривые 1 и 2 соответствуют различным образцам [22].



**Рис. 9.** Зависимость средней энергии  $E_m$ , приходящейся на один атом, от числа атомов (единица на оси абсцисс соответствует 10 атомам) в кластере УНТ.

Несмотря на то что вывод, сделанный в [27] на основе анализа экспериментальных результатов [26], коррелирует с нашим выводом, необходимо отметить два момента.

1) Интерпретацию экспериментальных измерений необходимо проводить исходя из того, что имеются две хаббардовские подзоны (вывод, сделанный в [27], проведен без учета этого факта).

2) По нашему мнению мини-щели, о которых идет речь в [26,27], имеют место вблизи  $\epsilon$  в нижней хаббардовской подзоне (и  $\epsilon + U$  в верхней хаббардовской подзоне), при этом величина  $\epsilon$  рассматривалась в данных работах в качестве энергии Ферми (химического потенциала при температуре  $T \neq 0$ ). Но самом деле это не так. В случае  $T = 0$  при числе  $\pi$ -электронов, равном числу узлов нанотрубки, энергия Ферми совпадает с верхним энергетическим уровнем нижней хаббардовской подзоны, т.е. примерно на величину  $|\epsilon|$  выше, чем предполагается в [26,27].

На рис. 9 приведена зависимость энергии, приходящейся на один атом, от числа атомов. В рамках предложенного нами подхода УНТ хиральности (5,5) до числа колец, равного шести (60 атомов), растут, поглощая энергию, и лишь после седьмого кольца их рост становится энергетически выгодным. Очевидно, что, если прекратить подвод тепла, нанотрубки из 60–70 атомов превратятся в фуллерены, то же самое будет наблюдаться, если процесс подвода тепла окажется нестационарным. Это согласуется с результатами работы [28], в которой синтез УНТ проводился методом химического осаждения паров. Наблюдения с помощью сканирующего электронного микроскопа показали, что достаточно длинные УНТ растут до тех пор, пока не

встретят препятствия, или до тех пор, пока процесс их роста поддерживается подачей метана. Интересно, что число атомов в самом устойчивом фуллерене равно 60, т.е. в интервале 60–100 атомов идет конкуренция между образованием фуллеренов (свертывание растущих УНТ в замкнутые структуры) и ростом трубок. После преодоления этого интервала рост трубок становится устойчивым.

## 5. Заключение

Таким образом, мы показали, что вопрос о зависимости проводимости УНТ от хиральных индексов остается открытым и есть все основания полагать, что УНТ независимо от хиральности изначально являются полупроводниками. Это обстоятельство необходимо учитывать при проектировании и создании различных технических устройств на их основе.

## Приложение

$$M_1^{(1)} = -\frac{Un_1^2}{20A} + \frac{1}{20A}(U + Un_2 - A)n_1 - \frac{Un_2}{20A} + \frac{1}{20},$$

$$M_2^{(1)} = \left(\frac{U}{10C_1} - \frac{BU}{5C_1\sqrt{B_2}}\right)n_1^2 + \left(\frac{BUn_2}{5C_1\sqrt{B_2}} + \frac{1}{10} - \frac{Un_2}{10C_1}\right)n_1,$$

$$M_3^{(1)} = \left(\frac{U}{10C_2} + \frac{BUn_2}{5C_2\sqrt{B_2}} + \frac{BU}{5C_2\sqrt{B_2}} - \frac{1}{10} + \frac{Un_2}{10C_2}\right)n_1 - \left(\frac{U}{10C_2} - \frac{BU}{5C_2\sqrt{B_2}}\right)n_1^2 - \frac{Un_2}{10C_2} + \frac{1}{10} - \frac{BUn_2}{5C_2\sqrt{B_2}},$$

$$M_4^{(1)} = \left(\frac{U}{10C_1} - \frac{BUn_2}{5C_2\sqrt{B_2}} - \frac{BU}{5C_1\sqrt{B_2}} - \frac{1}{10} + \frac{Un_2}{10C_1}\right)n_1 + \left(\frac{U}{10C_1} - \frac{BU}{5C_1\sqrt{B_2}}\right)n_1^2 - \frac{Un_2}{10C_1} + \frac{1}{10} + \frac{BUn_2}{5C_1\sqrt{B_2}},$$

$$M_5^{(1)} = -\frac{Un_1^2}{20A} + \frac{1}{20A}(U + Un_2 - A)n_1 - \frac{Un_2}{20A} + \frac{1}{20},$$

$$M_6^{(1)} = \frac{1}{20A}(Un_1 + Un_2 - A)n_1,$$

$$M_7^{(1)} = \frac{1}{10C_2\sqrt{B_2}}[-(2UB + U\sqrt{B_2})n_1^2 - (Un_2\sqrt{B_2} - C_2\sqrt{B_2} + 2BUn_2)n_1],$$

$$M_8^{(1)} = \frac{1}{10C_1\sqrt{B_2}}[(U\sqrt{B_2} - 2UB)n_1^2 + (2BUn_2 + 2BU - Un_2\sqrt{B_2} - C_1\sqrt{B_2} - U\sqrt{B_2})n_1 + Un_2\sqrt{B_2} - 2BUn_2 + C_1\sqrt{B_2}],$$

$$M_9^{(1)} = \frac{1}{10C_1\sqrt{B_2}}[(2UB - U\sqrt{B_2})n_1^2 - (2BUn_2 - Un_2\sqrt{B_2} - C_1\sqrt{B_2})n_1],$$

$$M_{10}^{(1)} = \frac{1}{20A}[Un_1^2 - (U + Un_2 + A)n_1 + A + Un_2],$$

$$M_{11}^{(1)} = \frac{1}{20A}(Un_2 + A - Un_1)n_1,$$

$$M_{12}^{(1)} = \frac{1}{20A}(Un_2 + A - Un_1)n_1,$$

$$M_{13}^{(1)} = \frac{1}{20A}[Un_1^2 - (U + Un_2 + A)n_1 + A + Un_2],$$

$$M_{14}^{(1)} = \frac{1}{10C_3\sqrt{B_1}}[(2UB - U\sqrt{B_1})n_1^2 - (Un_2\sqrt{B_1} + C_3\sqrt{B_1} - 2BUn_2)n_1],$$

$$M_{15}^{(1)} = \frac{1}{10C_3\sqrt{B_1}}[(U\sqrt{B_1} - 2UB)n_1^2 - (U\sqrt{B_1} - 2BUn_2 - 2BU + Un_2\sqrt{B_1} + C_3\sqrt{B_1})n_1 + Un_2\sqrt{B_1} - 2BUn_2 + C_2\sqrt{B_1}],$$

$$M_{16}^{(1)} = \frac{1}{10C_2\sqrt{B_2}}[-(2UB + U\sqrt{B_2})n_1^2 + (Un_2\sqrt{B_2} + C_2\sqrt{B_2} + 2BUn_2)n_1],$$

$$M_{17}^{(1)} = \frac{1}{10C_2\sqrt{B_2}}[-(U\sqrt{B_1} + 2UB)n_1^2 - (U\sqrt{B_2} + 2BUn_2 + 2BU + Un_2\sqrt{B_2} + C_2\sqrt{B_2})n_1 + Un_2\sqrt{B_2} + 2BUn_2 + C_2\sqrt{B_2}],$$

$$M_{18}^{(1)} = \frac{1}{10C_4\sqrt{B_1}}[-(2UB + U\sqrt{B_1})n_1^2 - (Un_2\sqrt{B_1} + C_4\sqrt{B_1} + 2BUn_2)n_1],$$

$$M_{19}^{(1)} = \frac{1}{10C_4\sqrt{B_1}}[-(U\sqrt{B_1} + 2UB)n_1^2 - (U\sqrt{B_1} + 2BUn_2 + 2BU + Un_2\sqrt{B_1} + C_4\sqrt{B_1})n_1 + Un_2\sqrt{B_1} + 2BUn_2 + C_4\sqrt{B_1}],$$

$$M_{20}^{(1)} = \frac{1}{10C_3\sqrt{B_1}}[(2UB - U\sqrt{B_1})n_1^2 - (2BUn_2 + 2BU - U\sqrt{B_1} - Un_2\sqrt{B_1} + C_3\sqrt{B_1})n_1 - Un_2\sqrt{B_1} + 2BUn_2 + C_3\sqrt{B_1}],$$

$$M_{21}^{(1)} = \frac{1}{10C_3\sqrt{B_1}}[(U\sqrt{B_1} - 2UB)n_1^2 + (C_3\sqrt{B_1} - Un_2\sqrt{B_1} + 2BUn_2)n_1],$$



$$M_{22}^{(1)} = \frac{1}{10C_4\sqrt{B_1}} [-(U\sqrt{B_1} + 2UB)n_1^2 - (C_4\sqrt{B_1} - U\sqrt{B_1} - 2BU n_2 - 2BU + Un_2\sqrt{B_1})n_1 + C_4\sqrt{B_1} - Un_2\sqrt{B_1} - 2BU n_2],$$

$$M_{23}^{(1)} = \frac{1}{10C_4\sqrt{B_1}} [(U\sqrt{B_1} + 2UB)n_1^2 + (C_4\sqrt{B_1} - Un_2\sqrt{B_1} - 2BU n_2)n_1],$$

$$M_{24}^{(1)} = \frac{1}{20A} (A + Un_1 - Un_2)n_1.$$

$$E_1^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{A}{2} + B,$$

$$E_2^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{C_1}{2} + U,$$

$$E_3^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{C_2}{2},$$

$$E_4^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{C_1}{2},$$

$$E_5^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{A}{2} - B,$$

$$E_6^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{A}{2} - B + U,$$

$$E_7^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{C_2}{2} + U,$$

$$E_8^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} - \frac{C_1}{2} + U,$$

$$E_9^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{C_1}{2} + U,$$

$$E_{10}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} - \frac{A}{2} + B,$$

$$E_{11}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} - \frac{A}{2} + B + U,$$

$$E_{12}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} - \frac{A}{2} - B + U,$$

$$E_{13}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} - \frac{A}{2} - B,$$

$$E_{14}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{C_3}{2} + U,$$

$$E_{15}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} - \frac{C_3}{2},$$

$$E_{16}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} - \frac{C_2}{2} + U,$$

$$E_{17}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} - \frac{C_2}{2},$$

$$E_{18}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} - \frac{C_4}{2} + U,$$

$$E_{19}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} - \frac{C_4}{2},$$

$$E_{20}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{C_3}{2},$$

$$E_{21}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{C_3}{2} + U,$$

$$E_{22}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{C_4}{2},$$

$$E_{23}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{C_4}{2} + U,$$

$$E_{24}^{(1)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} + \frac{Un_2}{2} + \frac{A}{2} + B + U.$$

$$M_1^{(2)} = \frac{1}{4} - \frac{n_2}{4}, \quad M_2^{(2)} = \frac{1}{4} - \frac{n_2}{4},$$

$$M_3^{(2)} = \frac{n_2}{4}, \quad M_4^{(2)} = \frac{n_2}{4},$$

$$M_5^{(2)} = -\left(\frac{U}{20C_2} + \frac{BU}{10\sqrt{B_2}C_2}\right)n_2^2 + \left(\frac{Un_1}{20C_2} + \frac{1}{20} + \frac{BU n_1}{10C_2\sqrt{B_2}}\right)n_2,$$

$$M_6^{(2)} = \left(\frac{U}{20C_2} + \frac{BU}{10\sqrt{B_2}C_2}\right)n_2^2 - \left(\frac{BU}{10C_2\sqrt{B_2}} + \frac{U}{20C_2} + \frac{Un_1}{20C_2} + \frac{1}{20} + \frac{BU n_1}{10C_2\sqrt{B_2}}\right)n_2 + \frac{Un_1}{20C_2} + \frac{1}{20} + \frac{BU n_1}{10C_2\sqrt{B_2}},$$

$$M_7^{(2)} = \left(\frac{BU}{10\sqrt{B_1}C_2} - \frac{U}{20C_3}\right)n_2^2 + \left(\frac{U}{20C_3} - \frac{BU}{10C_3\sqrt{B_1}} + \frac{Un_1}{20C_3} - \frac{1}{20} - \frac{BU n_1}{10C_3\sqrt{B_1}}\right)n_2 - \frac{Un_1}{20C_3} + \frac{1}{20} + \frac{BU n_1}{10C_3\sqrt{B_1}},$$

$$M_8^{(2)} = \left(\frac{U}{20C_3} - \frac{BU}{10\sqrt{B_1}C_3}\right)n_2^2 + \left(\frac{U}{20C_3} - \frac{BU}{10C_3\sqrt{B_1}} + \frac{Un_1}{20C_3} - \frac{1}{20} - \frac{Un_1}{20C_3}\right)n_2 + \frac{Un_1}{20C_3} + \frac{1}{20} - \frac{BU n_1}{10C_3\sqrt{B_1}},$$

$$M_9^{(2)} = -\left(\frac{U}{20C_2} + \frac{BU}{10\sqrt{B_2}C_2}\right)n_2^2 + \left(\frac{U}{20C_2} + \frac{BU}{10C_2\sqrt{B_2}} + \frac{Un_1}{20C_2} - \frac{1}{20} + \frac{BU n_1}{10C_2\sqrt{B_2}}\right)n_2 - \frac{Un_1}{20C_2} + \frac{1}{20} - \frac{BU n_1}{10C_2\sqrt{B_2}},$$

$$M_{10}^{(2)} = \left(\frac{U}{20C_3} + \frac{BU}{10\sqrt{B_1}C_3}\right)n_2^2 + \left(\frac{1}{20} - \frac{Un_1}{20C_3} + \frac{BU n_1}{10C_3\sqrt{B_1}}\right)n_2,$$

$$\begin{aligned}
 M_{11}^{(2)} &= \frac{1}{40A} (Un_1 - Un_2 + A)n_2, \\
 M_{12}^{(2)} &= \frac{1}{40A} [(Un_1 - Un_2 + A + U)n_2 + A - Un_1], \\
 M_{13}^{(2)} &= - \left( \frac{U}{20C_4} + \frac{BU}{10\sqrt{B_1}C_4} \right) n_2^2 + \left( \frac{U}{20C_4} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{BU}{10C_4\sqrt{B_1}} + \frac{Un_1}{20C_4} - \frac{1}{20} + \frac{BUn_1}{10C_4\sqrt{B_1}} \right) n_2 \\
 &\quad - \frac{Un_1}{20C_4} + \frac{1}{20} - \frac{BUn_1}{10C_4\sqrt{B_1}}, \\
 M_{14}^{(2)} &= \frac{1}{40A} [(Un_1 - Un_2 + A + U)n_2 + A - Un_1], \\
 M_{15}^{(2)} &= \frac{1}{40A} (Un_2 - Un_1 + A)n_2, \\
 M_{16}^{(2)} &= \left( \frac{U}{20C_4} + \frac{BU}{10\sqrt{B_1}C_4} \right) n_2^2 \\
 &\quad + \left( \frac{1}{20} - \frac{Un_1}{20C_4} - \frac{BUn_1}{10C_4\sqrt{B_1}} \right) n_2, \\
 M_{17}^{(2)} &= \frac{1}{40A} (Un_2 - Un_1 + A)n_2, \\
 M_{18}^{(2)} &= \frac{1}{40A} [(Un_2 - Un_1 - A - U)n_2 + A + Un_1], \\
 M_{19}^{(2)} &= - \left( \frac{U}{20C_4} + \frac{BU}{10\sqrt{B_1}C_4} \right) n_2^2 \\
 &\quad + \left( \frac{1}{20} + \frac{Un_1}{20C_4} + \frac{BUn_1}{10C_4\sqrt{B_1}} \right) n_2, \\
 M_{20}^{(2)} &= \left( \frac{U}{20C_4} + \frac{BU}{10\sqrt{B_1}C_4} \right) n_2^2 - \left( \frac{U}{20C_4} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{BU}{10C_4\sqrt{B_1}} + \frac{Un_1}{20C_4} - \frac{1}{20} + \frac{BUn_1}{10C_4\sqrt{B_1}} \right) n_2 \\
 &\quad + \frac{Un_1}{20C_4} + \frac{1}{20} + \frac{BUn_1}{10C_4\sqrt{B_1}}, \\
 M_{21}^{(2)} &= \frac{1}{40A} [(Un_2 - Un_1 - A - U)n_2 + A + Un_1], \\
 M_{22}^{(2)} &= \left( \frac{BU}{10\sqrt{B_1}C_3} - \frac{U}{20C_3} \right) n_2^2 \\
 &\quad + \left( \frac{1}{20} + \frac{Un_1}{20C_3} - \frac{BUn_1}{10C_3\sqrt{B_1}} \right) n_2, \\
 M_{23}^{(2)} &= \left( \frac{U}{20C_1} - \frac{BU}{10\sqrt{B_2}C_1} \right) n_2^2 \\
 &\quad + \left( \frac{1}{20} - \frac{Un_1}{20C_1} + \frac{BUn_1}{10C_1\sqrt{B_2}} \right) n_2, \\
 M_{24}^{(2)} &= \frac{1}{40A} (Un_1 - Un_2 + A)n_2,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_{25}^{(2)} &= \left( \frac{U}{20C_1} - \frac{BU}{10\sqrt{B_2}C_1} \right) n_2^2 + \left( \frac{BU}{10C_1\sqrt{B_2}} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{U}{20C_1} - \frac{Un_1}{20C_1} - \frac{1}{20} + \frac{BUn_1}{10C_1\sqrt{B_2}} \right) n_2 \\
 &\quad + \frac{Un_1}{20C_1} + \frac{1}{20} - \frac{BUn_1}{10C_1\sqrt{B_2}}, \\
 M_{26}^{(2)} &= \left( \frac{BU}{10\sqrt{B_2}C_1} - \frac{U}{20C_1} \right) n_2^2 \\
 &\quad + \left( \frac{1}{20} + \frac{Un_1}{20C_1} - \frac{BUn_1}{10C_1\sqrt{B_2}} \right) n_2, \\
 M_{27}^{(2)} &= \left( \frac{BU}{10\sqrt{B_2}C_1} - \frac{U}{20C_1} \right) n_2^2 + \left( \frac{Un_1}{20C_1} - \frac{BU}{10C_1\sqrt{B_2}} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{U}{20C_1} - \frac{1}{20} - \frac{BUn_1}{10C_1\sqrt{B_2}} \right) n_2 \\
 &\quad - \frac{Un_1}{20C_1} + \frac{1}{20} + \frac{BUn_1}{10C_1\sqrt{B_2}}, \\
 M_{28}^{(2)} &= \left( \frac{U}{20C_2} + \frac{BU}{10\sqrt{B_2}C_2} \right) n_2^2 \\
 &\quad + \left( \frac{1}{20} - \frac{Un_1}{20C_2} - \frac{BUn_1}{10C_2\sqrt{B_2}} \right) n_2. \\
 E_1^{(2)} &= \varepsilon - B, \quad E_2^{(2)} = \varepsilon + B, \\
 E_3^{(2)} &= \varepsilon - B + U, \quad E_4^{(2)} = \varepsilon + B + U, \\
 E_5^{(2)} &= \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - \frac{C_2}{2} + U, \\
 E_6^{(2)} &= \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - \frac{C_2}{2}, \\
 E_7^{(2)} &= \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + \frac{C_3}{2}, \\
 E_8^{(2)} &= \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + \frac{C_3}{2}, \\
 E_9^{(2)} &= \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + \frac{C_2}{2}, \\
 E_{10}^{(2)} &= \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + \frac{C_3}{2} + U, \\
 E_{11}^{(2)} &= \varepsilon - \frac{A}{2} + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - B + U, \\
 E_{12}^{(2)} &= \varepsilon + \frac{A}{2} + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - B, \\
 E_{13}^{(2)} &= \varepsilon - \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + \frac{C_4}{2}, \\
 E_{14}^{(2)} &= \varepsilon + \frac{A}{2} + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + B, \\
 E_{15}^{(2)} &= \varepsilon - \frac{A}{2} + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + B + U, \\
 E_{16}^{(2)} &= \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + \frac{C_4}{2} + U,
 \end{aligned}$$

$$E_{17}^{(2)} = \varepsilon + \frac{A}{2} + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - B + U,$$

$$E_{18}^{(2)} = \varepsilon - \frac{A}{2} + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - B,$$

$$E_{19}^{(2)} = \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - \frac{C_4}{2} + U,$$

$$E_{20}^{(2)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - \frac{C_4}{2},$$

$$E_{21}^{(2)} = \varepsilon - \frac{A}{2} + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + B,$$

$$E_{22}^{(2)} = \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - \frac{C_3}{2} + U,$$

$$E_{23}^{(2)} = \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + \frac{C_1}{2} + U,$$

$$E_{24}^{(2)} = \varepsilon - \frac{A}{2} + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + B + U,$$

$$E_{25}^{(2)} = \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - \frac{C_1}{2},$$

$$E_{26}^{(2)} = \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} - \frac{C_1}{2} + U,$$

$$E_{27}^{(2)} = \varepsilon + \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + \frac{C_1}{2},$$

$$E_{28}^{(2)} = \varepsilon - \frac{Un_1}{2} - \frac{Un_2}{2} + \frac{C_2}{2} + U.$$

Здесь

$$A = \sqrt{U^2 n_1^2 - 2U^2 n_1 n_2 + 8B^2 + U^2 n_2^2},$$

$$C_1 = \sqrt{U^2 n_1^2 - 2U^2 n_1 n_2 + U^2 n_2^2 - 4\sqrt{B_2}B + 12B^2},$$

$$C_2 = \sqrt{U^2 n_1^2 - 2U^2 n_1 n_2 + U^2 n_2^2 + 4\sqrt{B_2}B + 12B^2},$$

$$C_3 = \sqrt{U^2 n_1^2 - 2U^2 n_1 n_2 + U^2 n_2^2 - 4\sqrt{B_1}B + 12B^2},$$

$$C_4 = \sqrt{U^2 n_1^2 - 2U^2 n_1 n_2 + U^2 n_2^2 + 4\sqrt{B_1}B + 12B^2},$$

$$B_1 = 3B^2 - 2U^2 n_1 n_2 + \sqrt{5}B^2 + U(n_1^2 + n_2^2),$$

$$B_2 = 3B^2 - 2U^2 n_1 n_2 - \sqrt{5}B^2 + U(n_1^2 + n_2^2).$$

## Список литературы

- [1] П. Харрис. Углеродные нанотрубы и родственные им структуры. Техносфера, М. (2003). 336 с.
- [2] S.G. Louie, E.L. Shirley. J. Phys. Chem. Solids **54**, 1767 (1993).
- [3] Z. Wang, D. Psiachos, R.F. Badilla, S. Mazumdar. J. Phys.: Cond. Matter **21**, 095 009 (2009).
- [4] S.P. Schubin, S.V. Wonsowskii. Proc. Roy. Soc. A **145**, 159 (1934).
- [5] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
- [6] Г.С. Иванченко. ФТТ **49**, 183 (2007).
- [7] Г.И. Миронов. ФТТ **50**, 182 (2008).
- [8] G.I. Mironov. J. Superconductivity Novel Magnetism **20**, 135 (2007).
- [9] Э.Д. Изергин, Г.И. Миронов. ФНТ **33**, 1365 (2007).
- [10] А.И. Мурзашев. ЖЭТФ **135**, 122 (2009).
- [11] А.И. Мурзашев. Изв. вузов. Физика **10**, 47 (2010).
- [12] А.В. Елецкий. УФН **179**, 225 (2009).
- [13] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975). 527 с.
- [14] Г.И. Миронов, А.И. Мурзашев. ФТТ **53**, 2273 (2011).
- [15] Ю.А. Изюмов, Н.М. Плакида, Ю.Н. Скрыбин. УФН **159**, 621 (1989).
- [16] R. Satio, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. Phys. Rev. B **46**, 1804 (1992).
- [17] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus. Carbon **33**, 883 (1995).
- [18] N. Hamad, S. Sawada, A. Oshiyama. Phys. Rev. Lett. **68**, 1579 (1992).
- [19] P.R. Wallace. Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
- [20] Н.Ф. Мотт. Переходы металл-изолятор. Наука, М. (1979). 344 с.
- [21] С. Зи. Физика полупроводниковых приборов. Пер. с англ. Мир, М. (1984). Кн. 1.
- [22] B. Gao, Y.F. Chen, M.S. Fuhrer, D.C. Glatli, A. Bachtold. Phys. Rev. Lett. **95**, 196 802 (2005).
- [23] C.L. Kane, E.J. Metel, R.S. Lee, J.E. Fischer, P. Petit, H. Dai, A. Thess, R.E. Smalley, A.R.M. Verschuere, S.J. Tans, C. Dekker. Europhys. Lett. **41**, 683 (1998).
- [24] H.W.Ch. Postma, M. de J.Z. Yao, C. Dekker. Phys. Rev. B **62**, R 10 653 (2000).
- [25] V. Skákalová, A.B. Kaiser, Y.-S. Woo, S. Roth. Phys. Rev. B **74**, 085 403 (2006).
- [26] M. Ouyang, J.-L. Huang, C.L. Cheung, X.C.M. Lieber. Science **292**, 702 (2001).
- [27] П.Н. Дьячков. Электронные свойства и применение нанотрубок. Бином, М. (2011). С. 44.
- [28] S. Li, Z. Yu, S.-F. Yen, W.C. Tang, P.J. Burke. Nano Lett. **4**, 753 (2004).