

Модель электронной структуры наполненной металлом углеродной нанотрубки

© Н.А. Поклонский, Е.Ф. Кисляков, Г.Г. Федорук, С.А. Вырко

Белорусский государственный университет,
220050 Минск, Белоруссия

E-mail: Poklonski@phys.bsua.unibel.by

(Поступила в Редакцию 12 октября 1999 г.
В окончательной редакции 5 апреля 2000 г.)

Рассматриваются наполненные атомами K, Rb, Cs однослойные углеродные нанотрубки, у которых каждые десять атомов углерода захватывают один электрон легирующих атомов. Предполагается, что положительный заряд в объеме нанотрубки и отрицательный на ее поверхности распределены равномерно, так что потенциальная энергия электрона проводимости внутри нанотрубки квадратично зависит от расстояния до ее центра. В одноэлектронном приближении получена зависимость квазиимпульса Ферми электронов проводимости внутри нанотрубки от их объемной плотности и радиуса трубки для произвольного числа подзон поперечного движения. По формуле Ландауэра рассчитана зависимость проводимости металлической подсистемы нанотрубки от ее радиуса.

Работа поддержана грантом Ф97-246 Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований.

Открытие углеродных нанотрубок [1] предоставило удобные модельные объекты для исследования низкоразмерных структур. В частности, углеродная нанотрубка, заполненная металлом, перспективна для создания квантовой проволоки. Формирование нанотрубок с различными диаметрами и легирование их различными металлами [2,3] позволяет управлять свойствами квантовой проволоки. Поэтому построение модели электронной структуры заполненной металлом нанотрубки является актуальной задачей. Например, в работе [4] рассчитывается электронная структура цепочки из отдельных атомов металла внутри нанотрубки. Взаимодействие между электронами проводимости металла и окружающим их углеродным каркасом нанотрубки моделируется двумерной цилиндрической прямоугольной ямой с бесконечно высокими стенками. Вопрос о происхождении такого потенциала не рассматривается.

В отличие от [4] в настоящей работе предлагается модель, которая учитывает акцепторные свойства углеродного каркаса нанотрубки и приводит к более реалистической форме среднего поля внутри нанотрубки. Атомную структуру металла внутри нанотрубки мы не рассматриваем, а ограничиваемся моделью "желе" для нанотрубок достаточно большого радиуса. Это предположение позволяет получить простые аналитические формулы для расчета спектра электронов проводимости металлической подсистемы внутри нанотрубки. Проводимость углеродного каркаса с избыточными электронами не анализируется.

1. Атомная структура однослойных нанотрубок

Рассмотрим нанотрубку из одного графитового слоя. Существует много возможностей свернуть полосу графитового слоя в цилиндрическую поверхность без раз-

рывов. Каждая такая возможность характеризуется по [5] определенным хиральным вектором (n, m) , указывающим координаты бензольного кольца (в единицах длины базисного вектора графитового слоя), совмещаемого с кольцом, находящимся в начале координат, при сворачивании слоя. Два типа нанотрубок — зигзагообразные (zig-zag) с хиральным вектором $(n, 0)$ и в конфигурации кресла (armchair) с хиральным вектором (n, n) — обладают кроме оси симметрии еще и плоскостью симметрии, перпендикулярной оси нанотрубки. Естественно предположить, что наиболее устойчивыми будут нанотрубки, структура шестиугольных бензольных колец в которых искажена минимальным образом. В случае прямых углерод-углеродных (C–C) связей ни одна нанотрубка не является точно цилиндрически (аксиально) симметричной. К цилиндрически симметричной нанотрубке ближе всего по форме нанотрубка конфигурации zig-zag, у которой две стороны каждого из составляющих ее шестиугольников параллельны оси нанотрубки. Далее рассматриваются нанотрубки типа zig-zag.

Нельзя построить нанотрубку так, чтобы все составляющие ее бензольные кольца были плоскими. Для zig-zag трубок существуют две возможности, которые искажают структуру бензольного кольца минимальным образом. Эти возможности показаны на рис. 1, где штриховыми линиями обозначены линии изгиба графитовой плоскости. В случае *a* все шестиугольники одинаковы и слегка изогнуты по диагонали, так что существуют два типа неэквивалентных C–C-связей. В случае *b* половина составляющих нанотрубку бензольных колец — плоские, а другая половина — изогнутые. Составленные из них слои чередуются по длине нанотрубки, так что имеются три типа неэквивалентных C–C-связей; ширина плоских полос вдоль нанотрубки в 2 раза больше, чем в случае *a*. Периоды трансляции по оси нанотрубки z в случаях *a*

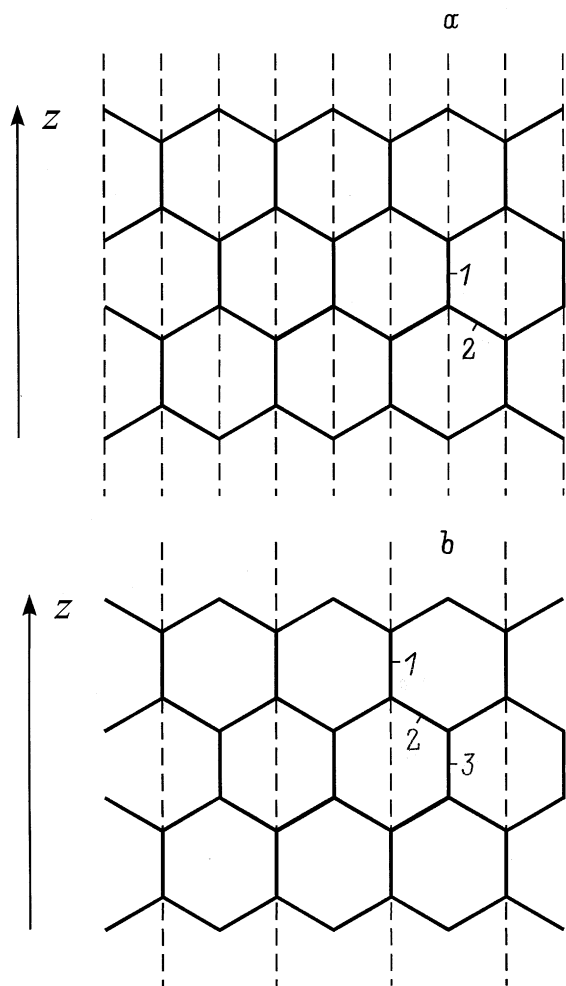


Рис. 1. Две возможные атомные структуры углеродной нанотрубки типа zig-zag; z — ось нанотрубки; штриховые линии — линии изгиба графитового монослоя; 1, 2, 3 — неэквивалентные углерод-углеродные связи.

и b приблизительно одинаковы и равны $3a_0$, где a_0 — средняя длина С–С-связи.

Для того чтобы выяснить, какая из рассматриваемых конфигураций является более устойчивой, необходимы детальные квантово-химические расчеты, которые, насколько нам известно, до сих пор не проводились. Обычно при расчетах все С–С-связи на поверхности нанотрубки считаются одинаковыми и равными по длине связям в плоском графитовом слое $a_0 = 0.142$ нм. Для нанотрубок достаточно большого радиуса такое приближение имеет смысл. Остановимся для определенности на структуре типа a , форма которой наиболее близка к цилиндрической. В этом случае минимальный радиус $a_0\sqrt{3}/2$ имеет нанотрубка, у которой по периметру расположены всего лишь три шестиугольника (шесть атомов углерода) и число атомов в элементарной ячейке равно 12. Увеличение радиуса нанотрубки происходит путем добавления в элементарную ячейку двух атомов углерода и увеличения на единицу числа шестиугольников по периметру нанотрубки.

2. Заполнение нанотрубок атомами К, Rb, Cs

Нанотрубки могут заполняться [6] либо в процессе изготовления, либо путем вскрытия торцов пустых трубок и наполнения их, например, за счет капиллярного эффекта. Для того чтобы проявлялся капиллярный эффект, поверхностное натяжение заполнителя должно быть ≤ 0.2 N/m. Этому условию удовлетворяют расплавы К, Rb, Cs. Их ионные радиусы по Полингу равны соответственно 0.133, 0.148, 0.167 нм [7]. Нанотрубка (12,0) имеет диаметр около 0.9 нм и может содержать в своем поперечном сечении 7 ионов калия (рис. 2). Согласно [8], однослойные нанотрубки имеют диаметры 0.8–3 нм.

Будем рассматривать одиночную нанотрубку, радиус которой R много меньше ее длины L . Детальное обсуждение атомной структуры нанотрубки, содержащей внутри атомы щелочных металлов, не входит в нашу задачу. Для дальнейшего изложения существенно лишь то, что уже нанотрубку с диаметром всего лишь 1 нм с приемлемой степенью точности можно считать цилиндрически симметричной. Такая нанотрубка является простой и достаточно реалистичной моделью квантовой проволоки.

Известно [9], что фуллереноподобные объекты являются акцепторами электронов. По оценкам [10], каждые 10 атомов углерода нанотрубки захватывают один электрон. Предположим, что при заполнении (легировании) нанотрубки щелочными металлами поверхность

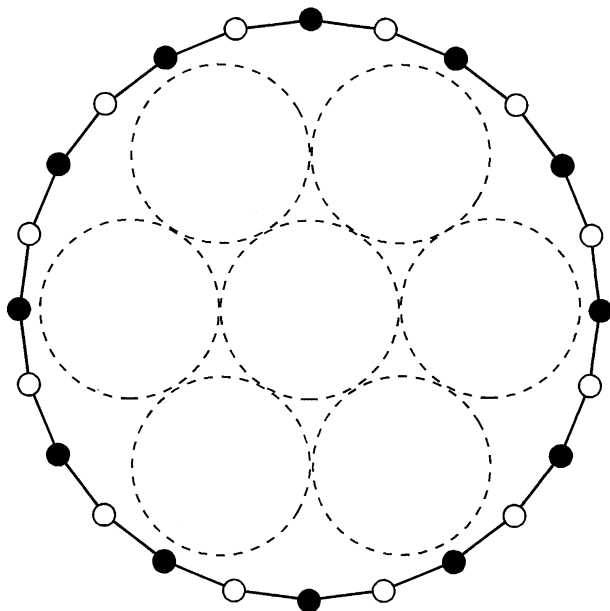


Рис. 2. Поперечное сечение нанотрубки (12,0) диаметром $2R \approx 0.9$ нм, наполненной атомами К (штриховые окружности); белые и черные кружки — атомы углерода в плоскости поперечного сечения и на расстоянии $a_0/2$ от нее (a_0 — длина С–С-связи) соответственно. Сплошные линии — проекции С–С-связей на плоскость рисунка (длина проекции — $a_0\sqrt{3}/2$).

нанотрубки захватывает их валентные электроны так, что все вакантные орбитали боковой поверхности нанотрубки оказываются заполненными. Это предположение подтверждается расчетами [11] монокристаллической цепочки атомов калия внутри нанотрубки (7, 0), которые показывают полный перенос валентных электронов калия на углеродный каркас. В результате поверхность нанотрубки заряжается отрицательно, а ее внутренность — положительно. Считаем, что отрицательный заряд распределен по поверхности нанотрубки равномерно. Углеродная нанотрубка, наполненная металлом, представляет простую модель квантовой проволоки с неоднородным распределением положительных и отрицательных зарядов по ее поперечному сечению. Нанотрубка в целом электронейтральна, поэтому потенциал вне ее равен нулю. Если предположить, что положительный заряд по объему, ограниченному поверхностью нанотрубки, распределен равномерно, то потенциальная энергия электронов проводимости внутри нанотрубки квадратично зависит от расстояния $r < R$ до центра нанотрубки (см., например, [12])

$$U(r) = \begin{cases} e\alpha \left(\frac{r^2}{R^2} - 1 \right), & r \leq R, \\ 0, & r > R, \end{cases} \quad (1)$$

где e — модуль заряда электрона, α — модуль поверхностного заряда на единицу длины нанотрубки радиуса $R \ll L$.

Поскольку ионные остовы атомов щелочных металлов практически не поляризуются [13], относительную диэлектрическую проницаемость внутри нанотрубки будем полагать равной 1. Глубина потенциальной ямы $U(0) = -e\alpha$ связана с радиусом нанотрубки R простым соотношением, следующим из условия, что десять атомов углерода захватывают один электрон [10]. Тогда α равна числу атомов углерода на единицу длины нанотрубки, умноженному на e и деленному на 10. Если пренебречь различием между длиной окружности $2\pi R$ и периметром $2Rn \sin(\pi/n)$, вписанного в нее n -угольника с атомами углерода в вершинах (рис. 2), то простые геометрические соображения дают

$$\alpha = \frac{e\gamma}{10 \cdot 3a_0} \approx \frac{4\pi e}{15\sqrt{3}} \frac{R}{a_0^2}, \quad (2)$$

где $\gamma \approx 8\pi R/(a_0\sqrt{3})$ — число атомов углерода в аксиально-симметричной элементарной ячейке нанотрубки с периодом трансляции $3a_0$.

Отметим, что потенциальная энергия $U(r)$ является лишь первым приближением к среднему самосогласованному полю, в котором движутся электроны. Проводить полную процедуру самосогласования в рамках предложенной упрощенной структурной модели легированной нанотрубки вряд ли имеет смысл. Ясно лишь, что в силу аксиальной симметрии рассматриваемой системы самосогласованный потенциал также должен обладать этой симметрией.

3. Электрон проводимости внутри легированной нанотрубки

В приближении эффективной массы гамильтониан электрона в цилиндрической системе координат (r, z, φ) имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(r), \quad (3)$$

где m_{\perp} , m_{\parallel} — поперечная и продольная эффективные массы делокализованного в легированной нанотрубке электрона, $U(r)$ — потенциальная энергия электрона на расстоянии r от центра нанотрубки в перпендикулярном оси симметрии z направлении. Для 3D щелочных металлов эффективные массы электронов проводимости (в единицах массы свободного электрона m_0) равны [7]: K — 1.25, Rb — 1.26, Cs — 1.43. Поскольку в поперечном сечении нанотрубки находится небольшое количество атомов, то $m_{\perp} \approx m_0$. Величина m_{\parallel} формируется периодичностью потенциала вдоль нанотрубки, которую мы не исследуем, полагая $m_{\parallel} \approx m_0$.

В приближении среднего поля состояния электронов проводимости наполненной металлом нанотрубки при $r < R$ находятся из решения уравнения Шредингера с потенциальной энергией (1). Размещение электронов по энергетическим уровням проводится в соответствии с принципом Паули.

Операторы проекции квазиимпульса \hat{p}_z и момента импульса \hat{l}_z электрона на ось z коммутируют друг с другом и с гамильтонианом (3), поэтому собственные функции этих операторов имеют вид [14]

$$\Psi_{nm_z p_z} = \frac{1}{\sqrt{4\pi^2 \hbar}} \exp \left[i \left(\frac{p_z z}{\hbar} + m_z \varphi \right) \right] \Psi_{n|m_z|}(r), \quad (4)$$

где волновая функция ”продольного” движения электрона нормирована на δ -функцию от квазиимпульса; $\Psi_{n|m_z|}(r)$ является решением радиального уравнения Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) + \frac{m_z^2}{r^2} \right] \Psi_{n|m_z|} + U(r) \Psi_{n|m_z|} = E_{n|m_z|} \Psi_{n|m_z|}, \quad (5)$$

определяющим энергетический спектр ”поперечного” движения $E_{n|m_z|}$ с главным квантовым числом $n = 0, 1, 2, \dots$ и азимутальным m_z .

Волновой функции (4) отвечает энергия делокализованного внутри нанотрубки электрона

$$E_{n|m_z| p_z} = E_{n|m_z|} + \frac{p_z^2}{2m_0}, \quad (6)$$

где $E_{n|m_z|}$ определяется конкретным видом потенциальной энергии $U(r)$.

Каждому энергетическому уровню дискретного спектра поперечного движения $E_{n|m_z|}$ отвечает либо одна собственная функция (при $m_z = 0$), либо две (при $m_z \neq 0$). Если имеется случайное вырождение, то кратность вырождения уровней может принимать и другие значения. Основное состояние имеет квантовые числа $n = 0$, $m_z = 0$ и является невырожденным.

В аксиально-симметричном случае, так же как и в одномерном, всегда имеется как минимум один уровень с $m_z = 0$. В двумерной прямоугольной яме с постоянной глубиной U и радиусом R число дискретных уровней с $m_z \neq 0$ определяется (см., например, [14]) параметром $\xi = m_0 R^2 |U| \hbar^2$. При $\xi \ll 1$ имеется только один уровень с $n = 0$ и $m_z = 0$, энергия которого мала по сравнению с глубиной ямы. Состояние с $n = 0$ и $|m_z| = 1$ появляется при $\xi \geq 2.88$.

Для оценки числа дискретных уровней энергии электрона в локализуемом потенциале (1) используем параметр ξ , приняв $U = U(0)$.

В соответствии с (2) в нанотрубке с диаметром $2R = 1$ nm, периодом трансляции $3a_0 = 0.426$ nm и глубиной ямы $U(0) = -e\alpha$ параметр $\xi \approx 57$, т.е. яма оказывается достаточно глубокой, так что в ней существует много уровней с $m_z \neq 0$. Условие существования только одного дискретного уровня в нанотрубке выполняется для предельно тонких нанотрубок ($R \leq 0.2$ nm).

В случае поперечного движения электрона в параболической потенциальной яме (1) переменные в уравнении Шредингера разделяются также и в декартовых координатах [14]

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - e\alpha \left(1 - \frac{x^2 + y^2}{R^2} \right) \right\} \times \Psi_{n_1}(x)\Psi_{n_2}(y) = E_{n_1+n_2} \Psi_{n_1}(x)\Psi_{n_2}(y), \quad (7)$$

и спектр "поперечного" движения $E_{n_1+n_2}$ у дна локализуемого потенциала (см. далее) имеет вид спектра гармонического осциллятора

$$E_{n_1+n_2} = E_\nu = (\nu + 1)\hbar\omega - e\alpha, \quad (8)$$

где $\omega = \sqrt{2e\alpha/(R^2 m_0)}$ — частота нулевых колебаний электрона, $\nu = n_1 + n_2$ — номер осцилляторного уровня; $n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots$

Энергетическому уровню E_ν с данным значением ν в соответствии с (7) и (8) отвечают линейно независимые собственные функции двумерного гармонического осциллятора $\Psi_{n_1 n_2}(x, y) = \Psi_{n_1}(x)\Psi_{n_2}(y)$ при $n_1 = 0, 1, \dots, \nu$; $n_2 = \nu, \nu - 1, \dots, 0$, т.е. этот уровень осциллятора $(\nu + 1)$ -кратно вырожден. Полная энергия электрона в состоянии с квантовым числом ν и квазиимпульсом p_z равна

$$E = E_\nu + p_z^2/2m_0. \quad (9)$$

Для ямы конечной глубины с потенциальной энергией (1), вообще говоря, нужно производить шивку

решений уравнения Шредингера при $r = R$ внутри и вне ямы. Однако в случае глубокой ямы низшие дискретные уровни меняются мало по сравнению с чисто осцилляторными (8), и спектр остается приблизительно эквидистантным. Проведем количественные оценки числа и энергий уровней поперечного движения в однослойной легированной нанотрубке с диаметром, близким к минимально возможному. Так, при $2R = 1$ nm глубина ямы $U(0) = -17.27$ eV, и расстояние между уровнями $\hbar\omega = 3.24$ eV, т.е. в такой нанотрубке имеется примерно пять дискретных осцилляторных уровней E_ν . Первый уровень не вырожден и имеет энергию $E_{00} = -14$ eV. Ему отвечает волновая функция $\Psi_{00}(r) = (\pi b^2)^{-1/4} \exp(-r^2/(2b^2))$, где $b = \sqrt{\hbar/(m_0\omega)}$. Второй уровень двукратно вырожден, имеет энергию $E_{01} = E_{10} = -10.8$ eV и две линейно независимые функции $\Psi_{01}(x, y) \propto x \exp(-r^2/(2b^2))$; $\Psi_{10}(x, y) \propto y \exp(-r^2/(2b^2))$. Третий уровень трехкратно вырожден и т.д. Отметим, что глубина ямы $U(0)$ прямо пропорциональна радиусу нанотрубки R , а расстояние между уровнями пропорционально $R^{-1/2}$, т.е. число уровней пропорционально $R^{3/2}$.

4. Плотность одноэлектронных состояний и проводимость

Расчет плотности квазиодномерных состояний $D(E)$ и энергия Ферми $E_F = p_F^2/(2m_0)$ нанотрубки выполним, исходя из формулы (9) для осциллятороподобного спектра поперечного движения электрона проводимости в нанотрубке при температуре $T \rightarrow 0$.

В случае, когда есть только один дискретный уровень (одна подзона), условие для определения квазиимпульса Ферми p_F продольного движения электрона внутри нанотрубки радиуса R и длины L можно записать [7] как $2p_F L/(\pi\hbar) = \pi R^2 L \rho$, где ρ — плотность электронов проводимости. Тогда при размещении электронов только в первой подзоне квазиимпульс Ферми определяется по формуле

$$p_F = \frac{\pi^2 \hbar \rho R^2}{2}, \quad (10)$$

так что условие заполнения электронами только одной подзоны ($E_F < \hbar\omega$) имеет вид

$$\pi^4 \hbar^2 \rho^2 R^4 / (8m_0) < \hbar\omega.$$

Для ориентировки в порядках величин для электронной плотности ρ внутри нанотрубки выберем соответствующие значения для 3D металлов [7]. Тогда в случае калия ($\rho = 14$ nm⁻³) радиус нанотрубки, у которой электроны размещены только в одной подзоне, $R \leq 0.38$ nm. Для рублидия ($\rho = 11.5$ nm⁻³) и цезия ($\rho = 9.1$ nm⁻³) имеем соответственно $R \leq 0.41$ и 0.46 nm, т.е. в случае интересующих нас нанотрубок с $2R \geq 1$ nm оказываются заполненными только низшие уровни поперечного движения, для которых отличим потенциала (1) от чисто осцилляторного можно пренебречь.

Из-за одномерного характера движения электронов вдоль нанотрубки их значения квазиимпульсов в первой подзоне принадлежат отрезку $[-p_F; p_F]$, а поверхность Ферми вырождается в две изолированные точки $E_F(p_F)$ и $E_F(-p_F)$. Для уровня Ферми, находящегося посередине между первым и вторым уровнями поперечного движения, имеем $E_F = p_F^2/(2m_0) = \hbar\omega/2$. При этом значение квазиволнового вектора Ферми $k_F = p_F/\hbar$ для $R \approx 0.45$ nm равно $k_F = 6.7$ nm $^{-1}$. В то же время максимальное значение квазиволнового вектора акустического фонона q в одномерной цепочке из атомов углерода с периодом трансляции $3a_0 = 0.426$ nm есть $q = \pi/3a_0 \approx 7.38$ nm $^{-1}$. Поскольку $q < 2k_F$, то процессы переброса, по крайней мере, при $T \rightarrow 0$ и размещении электронов только в первой подзоне не могут реализоваться. Это приводит к тому, что при низких температурах вероятность неупругого рассеяния электронов на акустических фононах мала. По этой же причине мала и вероятность электрон-электронного рассеяния, что позволяет использовать для описания электронов внутри нанотрубки одноэлектронное приближение.

С изменением радиуса нанотрубки и/или концентрации электронов проводимости электроны начинают размещаться и во второй подзоне, число состояний увеличивается на $2(p_F - \sqrt{2m_0\hbar\omega})L/(\pi\hbar)$ и условие для определения квазиимпульса Ферми принимает вид $\pi^2\hbar\rho R^2/2 = p_F + 2(p_F - \sqrt{2m_0\hbar\omega})$, где множитель 2 в правой части равенства учитывает двукратное вырождение второго осцилляторного уровня. Тогда квазиимпульс Ферми в первой подзоне с учетом размещения электронов в двух подзонах есть

$$p_F = \frac{\pi^2\hbar\rho R^2}{6} + \frac{2}{3}\sqrt{2m_0\hbar\omega}. \quad (11)$$

Обобщая рассуждения, приведшие к формулам (10) и (11), на случай произвольного числа подзон $N(R)$, в которых размещены электроны, находим, что зависимость $N(R)$ и квазиимпульса Ферми $p_F(R)$ в первой подзоне от радиуса нанотрубки R определяется из двух уравнений

$$p_F = \frac{\pi^2\hbar\rho R^2}{N(N+1)} + \frac{2\sqrt{2m_0\hbar\omega}}{N(N+1)} \sum_{j=0}^{N-1} (j+1)\sqrt{j},$$

$$\frac{p_F^2}{2m_0} = N\hbar\omega, \quad (12)$$

где $\omega^2 \approx 0.967e^2/(m_0a_0^2R)$, $a_0 = 0.142$ nm.

Например, рассчитанные по (12) значения радиусов нанотрубок, наполненных атомами K, Rb, Cs, при которых электроны размещены в $N = 7$ подзонах, равны соответственно 1.44, 1.58, 1.75 nm.

Число состояний для одной подзоны с квантовым числом ν в интервале энергий dE равно $D_\nu(E)dE = 4(\nu+1)Ldp_z/(2\pi\hbar)$, где одному значению E соответствуют два значения квазиимпульса $\pm p_z$ (см., например, [15]). С учетом того, что полная энергия электрона $E = E_\nu + p_z^2/(2m_0)$, плотность одноэлектронных

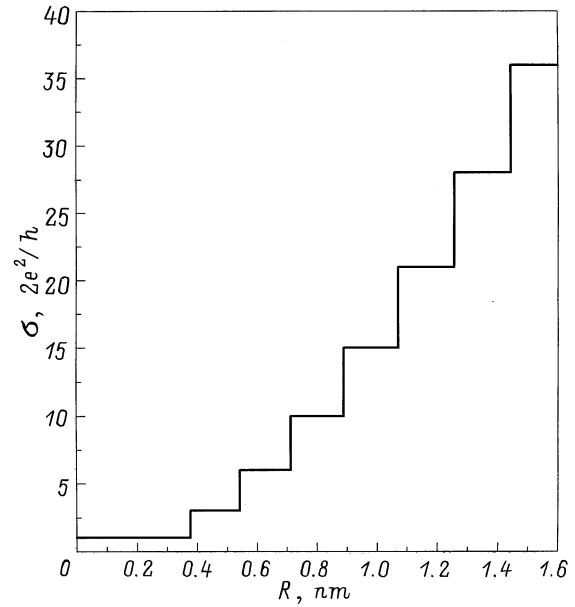


Рис. 3. Зависимость проводимости (в единицах $2e^2/h$) нанотрубки, наполненной атомами калия при электронной плотности $\rho = 14$ nm $^{-3}$, от ее радиуса R по формуле (13) для $T \rightarrow 0$.

состояний в нанотручке имеет вид

$$D(E) = L \frac{\sqrt{2m_0}}{\pi\hbar} \sum_{E_\nu < E} (\nu+1)(E - E_\nu)^{-1/2},$$

где $E_\nu = (\nu+1)\hbar\omega - e\alpha$ — энергия дискретного уровня ν поперечного движения.

В соответствии с теорией Ландауэра [16] проводимость внутренней части нанотрубки в единицах кванта проводимости $2e^2/h$ на постоянном токе при $T \rightarrow 0$ равна числу открытых бездиссипативных каналов переноса электронов. В нашем случае число открытых каналов равно числу подзон, в которых размещены электроны, с учетом кратности вырождения подзоны, равной ее номеру $N(R)$. Число каналов переноса электронов есть $N(R)[N(R)+1]/2$. Тогда электропроводность легированной нанотрубки радиуса R принимает вид

$$\sigma(R) = \frac{2e^2}{h} \frac{N(R)[N(R)+1]}{2}, \quad (13)$$

где $N(R)$ находится из уравнений (12).

Ступенчатый график зависимости проводимости $\sigma(R)$ от радиуса R нанотрубки, заполненной калием, приведен на рис. 3 и отражает дискретный характер $N(R)$. Итак, предложена модель электронной структуры наполненной атомами щелочного металла одиночной однослойной углеродной нанотрубки. Модель основана на приближении невзаимодействующих электронов и параболического локализирующего потенциала. Найдена зависимость плотности состояний, энергии Ферми и числа заполненных дискретных уровней ”поперечного” движения электронов от радиуса нанотрубки. Сделаны численные оценки

для нанотрубок, заполненных атомами K, Rb, Cs. Показано, что в нанотрубке с радиусом около 1 nm расстояние между уровнями составляет единицы eV. Дана простая формула для расчета энергии Ферми электронной системы внутри легированной нанотрубки при произвольном числе заполненных ее энергетических подзон. По формуле Ландауэра рассчитана зависимость проводимости на постоянном токе внутри заполненной калием нанотрубки от ее радиуса при температуре $T \rightarrow 0$.

Таким образом, в предложенной модели легко рассчитывается зависимость энергии Ферми и числа заполненных энергетических подзон от радиуса R и плотности электронов проводимости ρ в нанотрубке. Это позволяет анализировать явления переноса электронов в легированных нанотрубках. Возможное проявление проводимости по отрицательно заряженному углеродному каркасу нанотрубки может быть включено в модель в качестве параллельного канала.

Список литературы

- [1] S. Iijima. *Nature (London)* **354**, 6348, 56 (1991).
- [2] А.В. Елецкий. *УФН* **167**, 9, 945 (1997).
- [3] А.Л. Ивановский. *Успехи химии* **68**, 2, 119 (1999).
- [4] О.М. Кепп, П.Н. Дьячков. *ДАН* **365**, 3, 365 (1999).
- [5] N. Hamada, S. Sawada, A. Oshiyama. *Phys. Rev. Lett.* **68**, 10, 1579 (1992).
- [6] J. Cook, J. Sloan, M.L.H. Green. *Fullerene Science and Technology* **5(4)**, 695 (1997).
- [7] Ч. Киттель. *Введение в физику твердого тела*. Наука, М. (1978). [C. Kittel. *Introduction to solid state physics*, 7-th ed. Wiley, N. Y. (1995)].
- [8] J.-C. Charlier, J.-P. Issi. *Appl. Phys.* **A67**, 1, 79 (1998).
- [9] R.C. Haddon. *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **343**, 1667, 53 (1993).
- [10] M.F. Lin, K.W.-K. Shung. *Phys. Rev.* **B52**, 11, 8423 (1995).
- [11] Y. Miyamoto, A. Rubio, X. Blase, M.L. Cohen, S.G. Louie. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 15, 2993 (1995).
- [12] В.В. Батыгин, И.Н. Топтыгин. *Сборник задач по электродинамике*. Наука, М. (1970).
- [13] А. Анималу. *Квантовая теория кристаллических твердых тел*. Мир, М. (1981).
- [14] В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. *Задачи по квантовой механике*. Наука, М. (1981).
- [15] P.Y. Yu, M. Cardona. *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*. Springer, Berlin (1999).
- [16] R. Landauer. *IBM J. Res. Develop.* **32**, 3, 306 (1988).