

МЕТОД ЛИНЕАРИЗОВАННЫХ ПРИСОЕДИНЕННЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ВОЛН ДЛЯ РАСЧЕТА ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ НАНОТРУБОК

© 2012 А. В. Чертков¹, Н. С. Переславцева², О. И. Дубровский¹, С. И. Курганский¹

¹ Воронежский государственный университет, Университетская пл. 1, 394006 Воронеж, Россия

² Воронежский государственный технический университет, Московский пр. 14, 394026 Воронеж, Россия

Поступила в редакцию 24.04.2012 г.

Аннотация. В работе предложен новый формализм метода линеаризованных присоединенных цилиндрических волн. Для построения базисных функций электронный потенциал берется сферически симметричным в атомных областях, постоянным в промежуточной области и цилиндрически симметричным в вакуумных областях. Базисные функции метода, получаемые из решения уравнения Шредингера в соответствующих областях, сшиваются на границах МТ-сфер и цилиндрических поверхностях трубки, образуя всюду непрерывные дифференцируемые функции. Для апробации метода были проведены расчеты зонной структуры нехиральной полупроводниковой (10,0) и металлической (6,6) одностенных углеродных нанотрубок.

Ключевые слова: метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн, углеродные нанотрубки, электронная структура, МТ-приближение

1. ВВЕДЕНИЕ

Углеродные нанотрубки были обнаружены Ииджимой в 1991 году как побочные продукты синтеза фуллеренов [1]. Нанотрубки демонстрируют целый спектр самых неожиданных физических свойств, открывающих широкие возможности для их применения в технике. Исследование электронного строения (зонной структуры) нанотрубок позволяет определить тип проводимости, оптические свойства, для полупроводниковых трубок — ширину запрещенной зоны, и ряд других электрофизических свойств. Один из первых расчетов зонной структуры углеродных нанотрубок был произведен в 1992 году в работе [2].

В данной работе излагается метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн (ЛПЦВ) — метод расчета из первых принципов (*ab initio*) электронной структуры атомных систем, имеющих лишь одну трансляционную ось симметрии (нанотрубки, нанопровода). Предлагаемый нами вариант метода ЛПЦВ отличается от формулировки [3, 4], исторически восходящей от объемного метода ЛППВ [5]. В [3, 4] полагают, что на внутренней и внешней цилиндрических поверхностях трубки существует бесконечный потенциальный барьер, в результате чего волновая функция на этих поверхностях обращается в ноль и не проникает в вакуум-

ные области, т.е. движение электронов там запрещено. Положения внутренней и внешней поверхностей (радиусы a и b на рис. 1) являются в [3, 4] варьируемыми параметрами и выбираются из условия совпадения ширины валентной зоны в полученной зонной структуре нанотрубки с шириной валентной зоны графита 22 эВ. В нашей формулировке метода ЛПЦВ эти нефизические ограничения сняты. По аналогии с пленочным методом ЛППВ [6], мы вводим в рассмотрение вакуумные области — области пространства вне цилиндрических поверхностей трубки.

В работе излагается формализм метода ЛПЦВ, обсуждается оптимальный выбор параметров расчета и приводятся результаты расчета зонной структуры углеродных нанотрубок.

2. ФОРМАЛИЗМ МЕТОДА ЛПЦВ

При построении базисных функций метода ЛПЦВ и решении уравнения Шредингера делается предположение о том, что потенциал имеет так называемую цилиндрическую *muffin-tin* (МТ) форму. В этом приближении атомы трубки окружаются непересекающимися атомными сферами, и пространство разделяется на области трех типов: области Ω_s внутри МТ сфер радиуса r_s , центрированных атомами сорта s ; область Ω_l вне МТ сфер

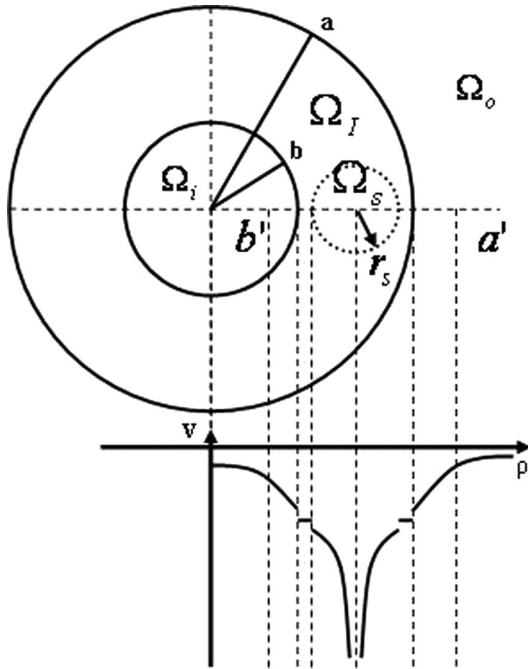


Рис. 1. Поперечное сечение нанотрубки и ход потенциала в цилиндрическом МТ-приближении

между внутренней и внешней цилиндрическими поверхностями трубки — так называемая промежуточная область; две вакуумные области Ω_v вне цилиндрических поверхностей трубки — внутренняя Ω_i и внешняя Ω_o .

Каждая из этих областей характеризуется своим видом одноэлектронного потенциала. Внутри МТ сфер потенциал сферически симметричен; в промежуточной области потенциал постоянен; в вакуумных областях потенциал цилиндрически симметричен. Таким образом, потенциал имеет вид:

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} V(|\mathbf{r} - \tau_s|), & \mathbf{r} \in \Omega_s \\ V(\rho), & \mathbf{r} \in \Omega_v \\ V_c, & \mathbf{r} \in \Omega_i \end{cases}, \quad (1)$$

где τ_s — базисный вектор, указывающий положение атома сорта s в элементарной ячейке. Рис. 1 поясняет введенные обозначения и иллюстрирует ход кристаллического потенциала.

Отметим, что потенциал в цилиндрической muffin-tin форме используется лишь при построении базисных функций. Определив систему базисных функций, мы можем использовать потенциал общего вида при построении матричных элементов гамильтониана.

Рассмотрим вид базисной функции в каждой из трех указанных выше областей.

2.1. БАЗИСНЫЕ ФУНКЦИИ МЕТОДА ЛПЦВ

В промежуточной области базисная функция удовлетворяет уравнению Шредингера для свободной частицы. Внутри МТ-сфер и в вакуумных областях, по аналогии с объемным [5] и пленочным [6] методом ЛППВ, базисная функция берется как линейная комбинация решения уравнения Шредингера и его энергетической производной. Уравнение Шредингера внутри МТ-сфер и в вакуумных областях решается при фиксированных значениях энергии, являющихся параметрами расчета.

Сшивая полученные функции и их нормальные производные на поверхностях МТ-сфер и на цилиндрических поверхностях трубки, получим всюду непрерывную и дифференцируемую базисную функцию.

2.1.1. Промежуточная область

В промежуточной области, где потенциал постоянен и принимается за начало отсчета энергии, базисная функция удовлетворяет уравнению Шредингера для свободного пространства, которое в цилиндрической системе координат имеет вид:

$$-\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \times \Psi(\rho, \phi, z) = E \Psi(\rho, \phi, z) \quad (2)$$

Общее решение этого уравнения может быть записано как:

$$\Psi = \Psi_{\mu MN}(\rho, \phi, z) = \varphi_{\mu}(z) \varphi_M(\phi) R_{MN}(\rho), \quad (3)$$

где функции $\varphi_{\mu}(z)$ и $\varphi_M(\phi)$ описывают свободное движение электронов вдоль оси трансляционной симметрии трубки и свободное вращение вокруг оси симметрии системы, соответственно:

$$\varphi_{\mu}(z) = \frac{1}{\sqrt{c}} e^{ik_{\mu}z}, \quad -\frac{\pi}{c} \leq k \leq \frac{\pi}{c}, \quad (4)$$

$$k_{\mu} = k + \frac{2\pi}{c} \mu, \quad \mu = 0, \pm 1, \dots$$

$$\varphi_M(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iM\phi} \quad M = 0, \pm 1, \dots \quad (5)$$

Здесь e — период решетки вдоль трансляционного направления, k — одномерный волновой вектор электрона, принадлежащий первой зоне Бриллюэна.

Функция $R_{MN}(\rho)$ описывает радиальное движение свободных электронов в промежуточной области, N — радиальное квантовое число. Подставив разложение (3) в (2) с учетом (4) и (5), получим уравнение на функцию $R_{MN}(\rho)$:

$$\left[-\left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{M^2}{\rho^2} - (E - k_\mu^2) \right) \right] R_{MN}(\rho) = 0. \quad (6)$$

Это уравнение имеет форму уравнения Бесселя [7], общее решение которого имеет вид линейной комбинации функций Бесселя первого и второго рода:

$$R_{MN}(\rho) = c_{MN}^J J_M(k_{MN}\rho) + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN}\rho), \quad (7)$$

здесь введено обозначение:

$$k_{MN} = \sqrt{E - k_\mu^2}. \quad (8)$$

Значения k_{MN} (и тем самым значения энергии) и коэффициентов c_{MN}^J и c_{MN}^Y определим, положив $R_{MN}(\rho)$ равной нулю в точках a' и b' ($a' > a$ и $b' < b$, где a и b — внешний и внутренний радиусы нанотрубки соответственно, см. рис. 1):

$$\begin{cases} c_{MN}^J J_M(k_{MN}b') + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN}b') = 0 \\ c_{MN}^J J_M(k_{MN}a') + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN}a') = 0 \end{cases}. \quad (9)$$

Из условия существования нетривиальных решений системы (9) получаем уравнение для нахождения k_{MN} :

$$J_M(k_{MN}b')Y_M(k_{MN}a') - J_M(k_{MN}a')Y_M(k_{MN}b') = 0, \quad (10)$$

которое решается численно.

Из второго уравнения системы (9) выразим:

$$c_{MN}^Y = -\frac{J_M(k_{MN}a')}{Y_M(k_{MN}a')} c_{MN}^J$$

и, используя условие нормировки радиальной части $R_{MN}(\rho)$ на отрезке $[b, a]$:

$$\int_b^a R_{MN}^2(\rho) \rho d\rho = 1,$$

определим коэффициенты c_{MN}^J и c_{MN}^Y .

Окончательно, в промежуточной области базисная функция примет вид:

$$\Psi_l(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi c}} \left[c_{MN}^J J_M(k_{MN}\rho) + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN}\rho) \right] e^{i(k_\mu z + M\phi)}. \quad (11)$$

2.1.2. Вакуумные области

Во внутренней и внешней вакуумных областях, где потенциал обладает цилиндрической симметрией, уравнение Шредингера имеет вид:

$$\left[-\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\rho) \right] \Psi(\rho, \phi, z) = E_v \Psi(\rho, \phi, z) \quad (12)$$

Решение этого уравнения вследствие цилиндрической симметрии потенциала имеет вид:

$$\Psi = \Psi_{\mu M}(\rho, \phi, z) = \phi_\mu(z) \phi_M(\phi) R_{\mu M}(\rho), \quad (13)$$

функции $\phi_\mu(z)$ и $\phi_M(\phi)$ определяются выражениями соответственно (4) и (5), а для функции $R_{\mu M}(\rho)$, описывающей радиальное движение электронов в вакуумной области, подстановкой (13), (4) и (5) в (12) получаем уравнение:

$$\left[-\left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{M^2}{\rho^2} + k_\mu^2 + V(\rho) \right) \right] \times R_{\mu M}(\rho) = E_v R_{\mu M}(\rho) \quad (14)$$

Уравнение (14) численно интегрируется при фиксированном значении энергии E_v , которое является параметром расчета.

Дифференцируя (14) по энергии, получим уравнение для энергетической производной:

$$\left[-\left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{M^2}{\rho^2} + k_\mu^2 - E_v + V(\rho) \right) \right] \times \dot{R}_{\mu M}(\rho) = R_{\mu M}(\rho) \quad (15)$$

В вакуумных областях базисную функцию запишем в виде, подобном пленочному методу ЛППВ [6]:

$$\Psi_v(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi c}} \left[A_{\mu MN}^v R_{\mu MN}^v(E_v, \rho) + B_{\mu MN}^v \dot{R}_{\mu MN}^v(E_v, \rho) \right] e^{i(k_\mu z + M\phi)}. \quad (16)$$

2.1.3. Области МТ-сфер

Внутри МТ сферы s -ого атома потенциал сферически симметричен и базисная функция записывается, как и в методе ЛППВ [5], в виде:

$$\Psi_l^s(\mathbf{r}) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[A_{lm}^s R_l^s(E_l, r) + B_{lm}^s \dot{R}_l^s(E_l, r) \right] \times Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (17)$$

Здесь

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = N_{lm} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

— сферическая гармоника,

$$N_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]$$

— нормировочный множитель,

$$P_l^{|m|}(x) = \frac{(1-x^2)^{|m|/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l$$

— присоединенная функция Лежандра.

$R_l^s(E_l, r)$ — решение радиального уравнения Шредингера внутри s -ой МТ-сферы для энергии E_l , а $\dot{R}_l^s(E_l, r)$ — его энергетическая производная.

2.2. СШИВКА БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ

2.2.1. Поверхность МТ-сфер

Приводя базисную функцию в промежуточной области (11) к локальной сферической системе координат и приравнявая ее значение и нормальную производную на поверхности МТ-сферы к соответствующим величинам для базисной функции внутри МТ-сферы (17), получим систему линейных алгебраических уравнений для нахождения коэффициентов A_{lm}^s и B_{lm}^s :

$$\begin{cases} A_{lm}^s R_l^s(E_l, r_s) + B_{lm}^s \dot{R}_l^s(E_l, r_s) = D_{\mu MN, lms} \times I_1(\mu MN, lms) \\ A_{lm}^s \frac{\partial}{\partial r} R_l^s(E_l, r_s) + B_{lm}^s \frac{\partial}{\partial r} \dot{R}_l^s(E_l, r_s) = D_{\mu MN, lms} \times I_2(\mu MN, lms) \end{cases},$$

где введены следующие обозначения:

$$D_{\mu MN, lms} = \frac{1}{\sqrt{2c}} (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \left[(2l+1) \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} \times \exp(i(k_\mu z_s + M\Phi_s)) (-1)^M \times [c_{MN}^J J_{m-M}(k_{MN} \rho_s) + c_{MN}^Y Y_{m-M}(k_{MN} \rho_s)]$$

$$I_1(\mu MN, lms) = \int_0^\pi e^{ik_\mu r_s \cos \theta} \times$$

$$\times J_m(k_{MN} r_s \sin \theta) P_l^{|m|}(\cos \theta) \sin \theta d\theta$$

$$I_2(\mu MN, lms) = \int_0^\pi e^{ik_\mu r_s \cos \theta} P_l^{|m|}(\cos \theta) \sin \theta \times$$

$$\times \left[\frac{1}{2} k_{MN} \sin \theta (J_{m-1}(k_{MN} r_s \sin \theta) - J_{m+1}(k_{MN} r_s \sin \theta)) + ik_\mu \cos \theta J_m(k_{MN} r_s \sin \theta) \right] d\theta$$

Главный определитель этой системы [6]:

$$\Delta = R_l^s(E_l, r_s) \frac{\partial}{\partial r} \dot{R}_l^s(E_l, r_s) -$$

$$-\dot{R}_l^s(E_l, r_s) \frac{\partial}{\partial r} R_l^s(E_l, r_s) = -\frac{1}{r_s^2},$$

тогда:

$$A_{lm}^s = r_s^2 D_{\mu MN, lms} \left[I_2(\mu MN, lms) \dot{R}_l^s(E_l, r_s) - I_1(\mu MN, lms) \frac{\partial}{\partial r} \dot{R}_l^s(E_l, r_s) \right]$$

$$B_{lm}^s = r_s^2 D_{\mu MN, lms} \left[I_1(\mu MN, lms) \frac{\partial}{\partial r} R_l^s(E_l, r_s) - I_2(\mu MN, lms) R_l^s(E_l, r_s) \right]$$

При расчетах интегралов I_1 и I_2 объем вычислений может быть сокращен в 4 раза при учете

четности подынтегральных выражений относительно замены $\theta \rightarrow \pi - \theta$.

2.2.2. Внутренняя и внешняя цилиндрические поверхности трубки

Коэффициенты $A_{\mu MN}^v$ и $B_{\mu MN}^v$ в выражении (16) для базисной функции во внутренней и внешней вакуумных областях определим, приравняв базисные функции и их радиальные производные в промежуточной области — формула (11) и в соответствующей вакуумной области — формула (16) на поверхности трубки. Получим систему алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} A_{\mu MN}^v R_{\mu MN}^v(E_v, \rho_i^v) + B_{\mu MN}^v \dot{R}_{\mu MN}^v(E_v, \rho_i^v) = \\ = c_{MN}^J J_M(k_{MN} \rho_i^v) + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN} \rho_i^v) \\ A_{\mu MN}^v \frac{\partial}{\partial \rho} R_{\mu MN}^v(E_v, \rho_i^v) + B_{\mu MN}^v \frac{\partial}{\partial \rho} \dot{R}_{\mu MN}^v(E_v, \rho_i^v) = \\ = k_{MN} [c_{MN}^J J'_M(k_{MN} \rho_i^v) + c_{MN}^Y Y'_M(k_{MN} \rho_i^v)] \end{cases}$$

Штрих у функций Бесселя здесь означает дифференцирование по всему аргументу $k_{MN}\rho$. Решая систему, получим:

$$A_{\mu MN}^v = \frac{1}{\Delta^v} \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho} \dot{R}_{\mu MN}^v(E_v, \rho_i^v) \times [c_{MN}^J J_M(k_{MN} \rho_i^v) + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN} \rho_i^v)] - \dot{R}_{\mu MN}^v(E_v, \rho_i^v) k_{MN} [c_{MN}^J J'_M(k_{MN} \rho_i^v) + c_{MN}^Y Y'_M(k_{MN} \rho_i^v)] \right\}$$

$$B_{\mu MN}^v = \frac{1}{\Delta^v} \left\{ R_{\mu MN}^v(E_v, \rho_i^v) k_{MN} \times [c_{MN}^J J'_M(k_{MN} \rho_i^v) + c_{MN}^Y Y'_M(k_{MN} \rho_i^v)] - \frac{\partial}{\partial \rho} R_{\mu MN}^v(E_v, \rho_i^v) [c_{MN}^J J_M(k_{MN} \rho_i^v) + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN} \rho_i^v)] \right\}$$

Здесь Δ^v — главный определитель системы.

На внешней поверхности ($v = o$): $\rho_i^o = a$, $\Delta^o = 1/a$.

На внутренней поверхности ($v = i$): $\rho_i^i = b$, $\Delta^i = -1/b$.

2.3. СЕКУЛЯРНОЕ УРАВНЕНИЕ

Конечные выражения для интегралов перекрытия $\langle \mu_1 M_1 N_1 | \mu_2 M_2 N_2 \rangle$ и матричных элементов гамильтониана $\langle \mu_1 M_1 N_1 | \hat{H} | \mu_2 M_2 N_2 \rangle$ имеют громоздкий вид и здесь не приводятся. Стоит отметить, что интегралы перекрытия и матричные элементы гамильтониана оказываются не зависящими от энергии, что позволяет значительно сократить время расчета собственных значений из секулярного уравнения:

$$\det \left[\left\langle \mu_1 M_1 N_1 \left| \hat{H} \right| \mu_2 M_2 N_2 \right\rangle - \right. \\ \left. - E \left\langle \mu_1 M_1 N_1 \left| \mu_2 M_2 N_2 \right\rangle \right] = 0$$

3. РАСЧЕТЫ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

При расчетах зонной структуры углеродных нанотрубок длину связи мы брали, как и в графене равной 1,42 Å, радиус МТ-сфер атомов углерода — $r_s = 0,71 \text{ Å}$. Область внутри МТ-сфер содержит информацию об атомном потенциале и поэтому естественным является выбор МТ-сфер максимально возможного радиуса, соответствующего касанию МТ-сфер соседних атомов.

Внутренний и внешний радиусы нанотрубки (величины a и b на рис. 1) следует выбирать таким образом, чтобы «межстеночное» пространство было минимальным. Этому соответствует нулевой зазор между поверхностью МТ-сферы и стенками трубки, то есть расстояние от ядра атома до внутренней и внешней поверхностей трубки равно радиусу МТ-сферы. В «межстеночном» пространстве вне МТ-сфер потенциал принимается постоянным, в то время как в вакуумной области он берется зависящим от расстояния до оси трубки (то есть, определяется более строго), поэтому представляется разумным свести к минимуму область постоянного потенциала. Произведенные пробные расчеты (с варьированием параметров a и b) подтверждают данное предположение: наилучший результат (в смысле близости ширины валентной зоны нанотрубки к ширине валентной зоны графита и схожести рассчитанной зонной структуры с результатами, полученными при использовании метода сильной связи [8,9]), получился при $a - b = 2r_s$, то есть при указанном выше выборе внешнего и внутреннего радиусов нанотрубки.

Параметры a' и b' (см. рис.1), фигурирующие в системе (9) мы брали равными:

$$a' = a + r_s, b' = b - r_s, \quad (18)$$

где r_s — радиус МТ-сферы. Результат расчета практически не меняется при малых изменениях параметров a' и b' (при фиксированном количестве базисных функций) вблизи значений (18).

Указанный выбор параметров a' и b' согласуется с пленочным методом ЛППВ. В работе [10] аналогичные точки выбираются на расстоянии одного радиуса МТ-сферы от поверхности пленки. В [11] указывается, что результат расчета зонной структуры мало меняется при изменении расстоя-

ния от данных точек до поверхности пленки в пределах от 0.5 до 1.5 радиуса МТ-сферы.

Энергетические параметры E_l , входящие в (17), выбирались вблизи центра энергетической зоны, соответствующей данному орбитальному квантовому числу l . Энергии вакуумных областей E_v в (16) брались равными 0.75 потенциала на бесконечности (при выборе потенциала в промежуточной области за начало отсчета энергии).

Для апробации метода нами были проведены расчеты зонной структуры нехиральных одностенных углеродных нанотрубок различных типов.

На рис. 2. представлен результат расчета для «кресельной» («armchair») (6,6) нанотрубки. Расчеты, проведенные методом сильной связи [8, 9], предсказывают металлические свойства «кресельных» трубок и пересечение зоны проводимости с валентной зоной в точке $k = \frac{2\pi}{3c}$. Наш расчет приводит к аналогичным результатам.

На рис. 3. представлен результат расчета для «зигзагообразной» («zig-zag») (10,0) нанотрубки. В случае полупроводниковых нанотрубок важнейшим параметром является ширина запрещенной

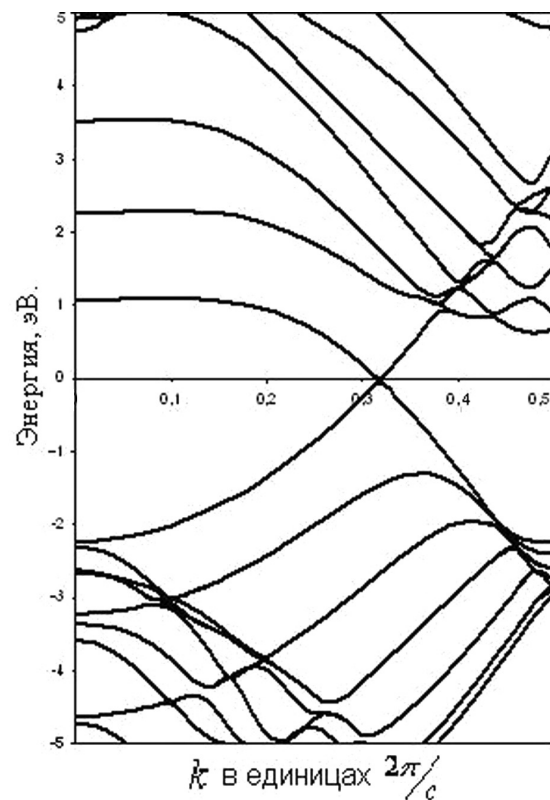


Рис. 2. Зонная структура одностенной углеродной нанотрубки (6,6) (тип «armchair»). По оси абсцисс — волновое число k в единицах $2\pi/c$, по оси ординат — энергия в эВ. Начало отсчета энергии выбрано в уровне Ферми

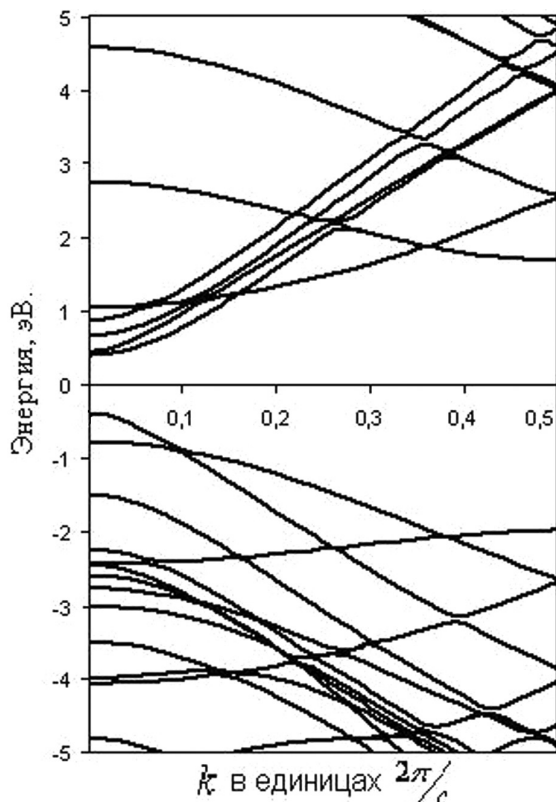


Рис. 3. Зонная структура одностенной углеродной нанотрубки (10,0) (тип «zig-zag»). По оси абсцисс — волновое число k в единицах $2\pi/c$, по оси ординат — энергия в эВ

зоны. Полученное нами значение ширины запрещенной зоны составляет 0.78 эВ и находится в близком соответствии с результатами расчетов в работах [12—15], где для ширины запрещенной зоны получены следующие значения: 0.77 эВ в [12]; 0.75 эВ в [13]; 0.70 эВ в [14] и 0.78 эВ в [15].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод линеаризованных присоединенных цилиндрических волн является обобщением метода

линеаризованных присоединенных плоских волн [6] на случай твердых тел, обладающих цилиндрической симметрией.

В данной работе мы описали метод ЛПЦВ применительно к геометрии нанотрубки. Для нанопроводов, у которых внутренняя вакуумная область отсутствует, описанный выше формализм легко модифицируется (упрощается) исключением соответствующих областей и уравнений.

Введение в рассмотрение вакуумных областей позволяет повысить точность расчета и рациональным образом выбрать параметры расчета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Iijima S., et al.* // Nature (London) 1991. № 354. P. 56.
2. *Mintmire J. M., Dunlap B. I. White C. T.* // Phys. Rev. Letters. №. 68. P. 631.
3. *D'yachkov P. N., Makaev D. V.* // Phys. Rev. B. 2007. № 76. P. 195411.
4. *Дьячков П. Н. Углеродные нанотрубки. Структура, свойства, применения.* М.: Бином, 2006. 293с.
5. *Koelling D. D., Arbman G. O.* // J. Phys F. 1975. № 5. P. 2041.
6. *Krakauer H., Posternak M., Freeman A.* // Phys. Rev. B. 1979. V. 19. № 4. P. 1706.
7. *Ватсон Г. Н. Теория бесселевых функций.* Ч. 1. М.: ИЛ, 1949. 798 с.
8. *Hagen A, Hertel T.* // Nano Lett. 2003. № 3. P. 383.
9. *Popov V., Henrard L.* // Phys. Rev. B. 2004. № 70. P. 115407.
10. *Posternak M., Krakauer H., Freeman A., et al.* // Phys. Rev. B. 1980. V. 21. № 12. P. 5601.
11. *Jepsen O., et al.* // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. № 2. P. 605.
12. *Zolyomi V., Kurti J.* // Phys. Rev. B. 2004. № 70. P. 85403.
13. *Gulseren O., Yildirim T., Ciraci S.* // Phys. Rev. B. 2002. № 65. P. 153405.
14. *Kanamitsu K., Saito S.* // J. Phys. Soc. Jpn. 2002. № 71. P. 483.
15. *Pavan K., et al.* // Phys. Rev. B. 2008. № 78. P. 235430.

Чертков Андрей Владимирович — студент кафедры Физики твердого тела и наноструктур, Воронежский государственный университет; тел.: (903) 6549394, e-mail: andrey.mipt@mail.ru

Переславцева Наталья Сергеевна — к.ф.-мат.н., доцент кафедры Прикладной и теоретической механики, Воронежский государственный технический университет; тел.: (473) 2527480

Chertkov Andrei V. — student, Solid State Physic and Nanostructures chair, Voronezh State University; tel.: (903) 6549394, e-mail: andrey.mipt@mail.ru

Pereslavitseva Natalia S. — PhD (Phys.-Math.), assistant professor of Applied and Theoretical Mechanics chair, Voronezh State Technical University; tel.: (473) 2527480.

Дубровский Олег Игоревич — к.ф.-мат.н., доцент кафедры Физики твердого тела и наноструктур, Воронежский государственный университет; тел.: (920) 4064191

Dubrovskii Oleg I. — PhD (Phys.-Math.), assistant professor of Solid State Physic and Nanostructures chair, Voronezh State University; tel.: (920) 4064191

Курганский Сергей Иванович — д.ф.-м.н., профессор кафедры Физики твердого тела и наноструктур, Воронежский государственный университет; тел.: (473) 2208363

Kurganskii Sergey I. — grand PhD (Phys.-Math.), professor of Solid State Physic and Nanostructures chair, Voronezh State University; tel.: (473) 2208363