

**ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ЭНЕРГИИ ОПТИЧЕСКИХ  
ПЕРЕХОДОВ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ТИПА  
ЗИГЗАГ В МОДЕЛИ ХАББАРДА**

Миронов Г.И.

*Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия*

*mirgi@rambler.ru*

Большой интерес к вычислению энергии оптических переходов, энергетического спектра обусловлен возможностью использования полученных данных в экспериментальных методах определения строения углеродных нанотрубок: в фотоэлектронной спектроскопии, сканирующей туннельной спектроскопии, спектроскопии энергетических потерь электронов [1].

Цель нашей работы – теоретическое исследование зонной структуры одностенных нанотрубок типа зигзаг в модели Хаббарда [2] в приближении статических флуктуаций [3], вычисление энергии оптических переходов и объяснение результатов эксперимента [4, 5].

Теоретические вычисления показали, что для нанотрубки (9,0)  $\Delta = 0.078 eV$ . В работе [5] из результатов экспериментов был сделан вывод о том, что для ультрачистой (9,0) нанотрубки величина щели  $0.075 eV \leq \Delta \leq 0.085 eV$ . Для нанотрубки (12,0) наши вычисления показывают, что  $\Delta = 0.045 eV$ , из экспериментов [5] следует, что  $0.038 eV \leq \Delta \leq 0.045 eV$ . Таким образом, построенная в нашей предлагаемой для доклада работе теория одностенных нанотрубок типа зигзаг позволяет объяснить эксперименты по исследованию таких нанотрубок.

1. P. N. D'yachkov, H. Hermann. *J. Appl. Phys.*, 95, 1, 399 (2004)
2. J. Hubbard. *Proc. Roy. Soc. A*, 276, 238 (1963).
3. G.I. Mironov. *J. Superconductivity and Novel Magnetism* **20**, 135 (2007).
4. J.-C. Charlier, X. Blasé, S. Roche, *Rev. Mod. Phys.*, 79, 677 (2007).
5. M. Ouyang, J.-L. Huang, C. Li et al. *Science*, 292, 702 (2001).