

Дискретная и континуальная модели для расчета фононных спектров углеродных нанотрубок

© С.С. Савинский, В.А. Петровский

Удмуртский государственный университет,
426034 Ижевск, Россия

(Поступила в Редакцию 12 июля 2001 г.
В окончательной редакции 19 ноября 2001 г.)

Изучается колебательный спектр идеальных углеродных нанотрубок с использованием двухпараметрического потенциала, который включает в себя парные и тройные межатомные взаимодействия. Этот потенциал, предложенный в работе Китинга, позволяет для ковалентных систем учесть упругость парных межатомных связей, а также упругость, обусловленную изменением угла между направленными межатомными связями. Путем согласования колебательного спектра одиночной графитной плоскости, получаемого из потенциала Китинга, с колебательным спектром кристалла графита вычислены значения параметров потенциала, затем с найденными параметрами проведен расчет фононных спектров идеальных однослойных углеродных нанотрубок. Также обсуждается континуальная модель однослойной нанотрубки, в которой трубка представлена как упругая цилиндрическая оболочка конечной толщины. Континуальная модель позволяет численно рассчитать колебательный спектр нанотрубки в длинноволновом пределе в зависимости от ее радиуса и толщины.

Работа частично финансировалась грантом INTAS N 97 30810.

Экспериментально открытые Иджимой [1] углеродные нанотрубки привлекают внимание благодаря уникальным свойствам: высокой прочности; проводимости, зависящей от индексов хиральности трубки; возможности использования нанотрубок и их соединений в нанoeлектронике. К сожалению, в настоящее время не существует технологий, с помощью которых можно было бы осуществить синтез нанотрубок заданной хиральности, как правило, нанотрубки, получаемые как продукт термического разложения графита, имеют неконтролируемые размеры и хиральность.

Покрытие идеальной углеродной нанотрубки геометрически можно представить как результат действия операторов винтового поворота на элементарный фрагмент трубки: два атома углерода, расположенных на цилиндрической поверхности. Обозначим оператор винтового поворота на поверхности цилиндра через $S(\Delta z, \Delta \varphi)$, результатом его действия на точку с координатами z, φ является преобразование цилиндрических координат точки по правилу $z, \varphi \rightarrow z + \Delta z, \varphi + \Delta \varphi$.

На трубке можно ввести два линейно независимых оператора винтового поворота, $S_1(\Delta z_1, \Delta \varphi_1)$ и $S_2(\Delta z_2, \Delta \varphi_2)$, выбор которых не является однозначным. В силу коммутативности винтовых поворотов оператор $S_1^n S_2^m$, где n, m — любые целые числа, преобразует координаты произвольной точки по правилу $(z, \varphi) \rightarrow (z + n\Delta z_1 + m\Delta z_2, \varphi + n\Delta \varphi_1 + m\Delta \varphi_2)$. При некоторых значениях n, m рассматриваемый оператор может быть кратен единичному, соответственно минимальные кратные значения n и m , называемые индексами нанотрубки, в дальнейшем будут обозначаться через (i_1, i_2) . Вследствие неоднозначности выбора операторов S_1 и S_2 в литературе существует несколько способов задания индексов (i_1, i_2) , которые называются также индексами

хиральности; в дальнейшем будем придерживаться обозначений, указанных на рис. 1.

Поясним, каким образом для идеальной однослойной нанотрубки с заданными индексами хиральности могут быть вычислены параметры операторов винтовых поворотов, показанных на рис. 1. Для этого мысленно разрежем нанотрубку вдоль образующей и развернем трубку в полосу, которая может рассматриваться как полоса на бесконечном графитовом монослое, плотноупакованном правильными углеродными гексагонами со стороной d_0 . Операторам винтовых поворотов трубки S_1 и S_2 на плоскости будут соответствовать векторы элементарных трансляций \mathbf{T}_1 и \mathbf{T}_2 , а индексы хиральности i_1, i_2 определяют вектор $\mathbf{C} = i_1\mathbf{T}_1 + i_2\mathbf{T}_2$, перпендикулярный двум сторонам полосы и по длине равный ширине полосы. В результате параметры $\Delta \varphi_1, \Delta \varphi_2$ легко связать с проекциями векторов \mathbf{T}_1 и \mathbf{T}_2 на вектор \mathbf{C} , а $\Delta z_1, \Delta z_2$ равны величинам проекций \mathbf{T}_1 и \mathbf{T}_2 на направление

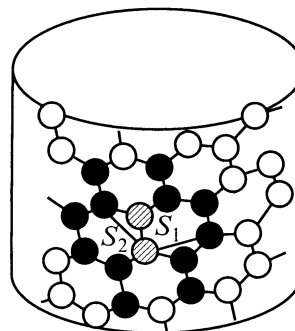


Рис. 1. Схематическое изображение атомной структуры углеродной нанотрубки.

вдоль образующей

$$\Delta\varphi_1 = 2\pi \frac{(\mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{C})}{C^2}, \quad \Delta\varphi_2 = 2\pi \frac{(\mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{C})}{C^2},$$

$$\Delta z_1 = (\mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{e}_z), \quad \Delta z_2 = (\mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{e}_z),$$

где \mathbf{e}_z — единичный вектор, направленный вдоль образующей полосы. Таким образом, задавшись значением d_0 и пользуясь приведенными выше формулами, можно вычислить параметры винтовых поворотов идеальной однослойной нанотрубки с помощью векторов элементарных трансляций \mathbf{T}_1 , \mathbf{T}_2 и вектора \mathbf{C} .

Через введенные нами операторы S_1 , S_2 однозначно определяются координаты атомов углеродной нанотрубки, находящихся на поверхности цилиндра, с помощью трех чисел (n, m, s) , где n, m — любые целые числа, исключая кратные делители индексов трубки i_1, i_2 ; s принимает два значения $s = 0, 1$ и нумерует атомы в „элементарной ячейке“ структуры. Цилиндрические координаты атома с номером (n, m, s) определяются как результат действия оператора $S_1^n S_2^m$ на s -й атом „нулевой ячейки“ структуры. В дальнейшем для удобства обозначений пару чисел (n, m) будем обозначать одним индексом γ и определять положение атома на трубке с помощью пары чисел (γ, s) . Заметим также, что углеродную нанотрубку можно представить как вложенные друг в друга трубки с одним углеродным атомом в соответствующей „элементарной ячейке“ каждой из двух трубок.

1. Дискретная модель

Для численного расчета колебательного спектра нанотрубки использован двухпараметрический потенциал межатомного взаимодействия Китинга [2], с помощью которого можно определить относительную энергию взаимодействия атомов нанотрубки

$$W = \frac{\alpha}{2} \sum_{\gamma s, \gamma' s'} \frac{(\mathbf{r}_{\gamma s, \gamma' s'}^2 - \boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'}^2)^2}{\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'}^2} + \frac{\beta}{2} \sum_{\gamma s, \gamma' s', \gamma'' s''} \frac{(\mathbf{r}_{\gamma s, \gamma' s'} \mathbf{r}_{\gamma s, \gamma'' s''} - \boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'} \boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma'' s''})^2}{\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'} \boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma'' s''}}, \quad (1)$$

где α, β — константы жесткости продольной $C-C$ и изгибной $C-C-C$ связей углеродных атомов; $\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'}$ — равновесный вектор, соединяющий ближайшие атомы (γ, s) и (γ', s') ; $\mathbf{r}_{\gamma s, \gamma' s'}$ — текущий радиус-вектор, соединяющий ближайшие атомы. В первом слагаемом формулы (1) суммирование ведется по различным парам ближайших атомов, во втором — по различным тройкам ближайших атомов. В равновесном положении атомов углерода, геометрически определяемом через векторы $\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'}$, энергия (1) обращается в нуль.

Считая смещение $\mathbf{U}_{\gamma s}$ атома от положения равновесия малым по сравнению с межатомным расстоянием,

разложим функцию W в ряд Тейлора, ограничиваясь слагаемыми второго порядка малости. В результате сила, действующая на выделенный атом (γ, s) , будет линейной функцией по смещениям атомов, и классические уравнения движения атомов в этом приближении примут вид

$$M\ddot{\mathbf{U}}_{\gamma s} = 4\alpha \sum_{\gamma' s'} \frac{(\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'} (\mathbf{U}_{\gamma s} - \mathbf{U}_{\gamma' s'}) \boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'})}{\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'}^2} + \beta \sum_{\gamma' s', \gamma'' s''} \frac{(\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'} (\mathbf{U}_{\gamma' s'} - \mathbf{U}_{\gamma s}) + \boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma'' s''} (\mathbf{U}_{\gamma' s'} - \mathbf{U}_{\gamma s})) (\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'} + \boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma'' s''})}{\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'} \boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma'' s''}} + \beta \sum_{\gamma' s', \gamma'' s''} \frac{(\boldsymbol{\tau}_{\gamma' s', \gamma s} (\mathbf{U}_{\gamma'' s''} - \mathbf{U}_{\gamma' s'}) + \boldsymbol{\tau}_{\gamma' s', \gamma'' s''} (\mathbf{U}_{\gamma s} - \mathbf{U}_{\gamma' s'})) \boldsymbol{\tau}_{\gamma' s', \gamma'' s''}}{\boldsymbol{\tau}_{\gamma' s', \gamma s} \boldsymbol{\tau}_{\gamma' s', \gamma'' s''}}, \quad (2)$$

где M — масса углеродного атома.

На рис. 1 схематически показаны два атома „нулевой ячейки“ углеродной нанотрубки и атомы, взаимодействующие с „нулевой ячейкой“, ответственные за слагаемые правой части формулы (2) в уравнениях движения атомов с $\gamma = 0, s = 0, 1$. Атомы нулевой ячейки на рис. 1 показаны штриховыми линиями, атомы соседних ячеек, взаимодействующие с нулевой, показаны черным цветом.

Заметим, что для планарной углеродной структуры — графитового монослоя — все векторы $\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'}$ в формуле (1) лежат в одной плоскости, поэтому возвращающая сила, действующая на атомы монослоя, согласно уравнениям движения (2), не имеет составляющей в направлении, перпендикулярном этой плоскости. Для углеродной трубки векторы $\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'}$ не лежат в одной плоскости, и возвращающая сила, действующая на выбранный атом, согласно уравнениям (2), может иметь неравную нулю радиальную составляющую на поверхности трубки.

Будем искать решение системы уравнений (2) в виде

$$\mathbf{U}_{\gamma s} = R_1^n R_2^m \mathbf{A}_s \exp(iqz_\gamma + il\varphi_\gamma - i\omega t). \quad (3)$$

Напомним, что γ — совокупный индекс (n, m) ; R_1, R_2 — матрицы поворота, соответствующие операторам винтовых поворотов S_1, S_2 ; $\mathbf{A}_0, \mathbf{A}_1$ — векторы смещений атомов „нулевой ячейки“; $\hbar q$ — импульс фонона, $\hbar l$ — момент импульса фонона; ω — частота; через z_γ, φ_γ обозначены цилиндрические координаты ячейки с номером γ на поверхности трубки. Подстановка (3) в формулу (2) сводит бесконечную систему дифференциальных уравнений, описывающую движение атомов углеродной нанотрубки, к задаче о собственных векторах и значениях динамической матрицы размером 6×6 . Решение последней задачи позволяет численно рассчитать дисперсионные кривые и поляризацию фононов в нанотрубках.

Для расчетов фононных спектров углеродных нанотрубок необходимо задать численные значения упругих констант α, β и равновесное положение атомов углерода в идеальной однослойной трубке, т.е. определить векторы $\boldsymbol{\tau}_{\gamma s, \gamma' s'}$ в декартовой системе координат. Авторы

полагали, что ось OX декартовой системы координат проходит через нулевую ячейку, атом с индексом $s = 0$ лежит на оси OX , OZ является осью нанотрубки. Путем действия операторов винтовых поворотов S_1 и S_2 на координаты двух атомов нулевой ячейки можно определить декартовы координаты атомов нанотрубки и затем найти компоненты равновесных векторов $\mathbf{r}_{\gamma s, \gamma' s'}$.

Наиболее просто подобрать значения α и β можно, решая задачу о колебаниях атомов (2) углеродного монослоя, представляющего собой одиночную графитовую плоскость, для которой матрицы поворотов в формуле (3) являются единичными матрицами, в результате в плоскости монослоя формула для смещений атомов имеет вид

$$\mathbf{U}_{\gamma s} = \mathbf{A}_s \exp(iq_z z_{\gamma} + iq_x x_{\gamma} - i\omega t), \quad (4)$$

где q_x, q_z — проекции волнового вектора двумерного фонона на оси системы координат OX и OZ , совпадающей с плоскостью монослоя. Подстановкой решения (4) в уравнение (2) бесконечная система дифференциальных уравнений сводится к задаче на собственные векторы и значения динамической матрицы размером 4×4 , решая которую можно определить дисперсионные кривые и поляризацию двумерных фононов в графитовом монослое. Заметим, что размерность динамической матрицы для углеродного монослоя связана со свойством потенциала Китинга, для которого в линейном приближении возвращающая сила, действующая на атом, смещенный в перпендикулярном к плоскости направлении, обращается в нуль, поэтому вектор смещения атомов в формуле (4) имеет нулевую составляющую на направление нормали к плоскости монослоя. Подбор параметров α и β для графитового монослоя проводится из следующих предположений: частота „оптических“ колебаний в точке Γ зоны Бриллюэна графитового монослоя должна быть равной 1582 cm^{-1} [3] и соответственно ход дисперсионных кривых фононов для направлений симметрии $\Gamma M, \Gamma K, MK$ должен быть близок к экспериментальным данным, взятым из книги [4] по фононным спектрам кристалла графита для фононов, распространяющихся вдоль графитовых плоскостей и имеющих амплитуду смещения атомов, направленную также вдоль плоскостей. Эти предположения оправданы в силу относительной малости взаимодействия в графите плоскостей между собой, в результате двумерные фононы определяются в основном через упругие модули одиночных углеродных монослоев. Численно подобранные нами параметры α и β имели следующие значения: $\alpha = 105216.76 \text{ dyn/cm}$, $\beta = 84489.06 \text{ dyn/cm}$ для равновесной стороны гексагона монослоя $d_0 = 1.418 \text{ \AA}$. Дисперсионные кривые двумерных фононов, рассчитанные для углеродного монослоя, приведены на рис. 2. Из рис. 2 следует, что скорости длинноволновых акустических фононов монослоя равны $V_1 = 14.3 \text{ km/s}$, $V_2 = 20.7 \text{ km/s}$; эти значения достаточно близки к данным работы [3], в которой указываются теоретические значения для скоростей длинноволновых

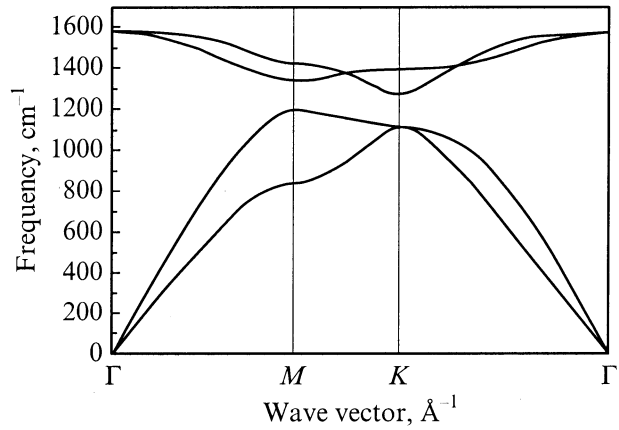


Рис. 2. Фононный спектр одиночного графитового слоя.

фононов в углеродном монослое, равные $V_1 = 15.0 \text{ km/s}$, $V_2 = 21.1 \text{ km/s}$. Заметим, что первые расчеты колебательного спектра графитового монослоя, с использованием потенциала Китинга были проведены в работе [5], результаты которой плохо согласуются с данными [3,4], что связано с плохим выбором параметров α, β в [5].

Для расчета фононных спектров углеродных трубок сделано предположение, что значения параметров α и β в потенциале Китинга трубки можно взять такими же, как и для углеродного монослоя.

Оценочные расчеты проведены для трубки (20, 10), для которой в литературе известны данные о дисперсионных кривых фононов. Так, авторы работы [3] использовали для расчетов фононов трубки (20, 10) только трансляционную симметрию, не выделяя у фононов квантовых чисел: продольный импульс и момент импульса. Рассчитанные дисперсионные кривые для фононов трубки с индексами хиральности (20, 10) приведены на рис. 3. Скорости длинноволновых акустических фононов с орбитальным квантовым числом $l = 0$ оказались равными $V_1 = 14.1 \text{ km/s}$, $V_2 = 20.7 \text{ km/s}$. Это фононы „продольные“, в которых смещение атомов совпадает с направлением оси трубки, и „сдвиговые“, в которых смещение атомов направлено перпендикулярно оси трубки. Кроме того, в трубке существует „дышащая“ фононная мода с предельной частотой, равной $\omega_b = 161.2 \text{ cm}^{-1}$, в которой смещения атомов направлены вдоль радиальной составляющей и обладают цилиндрической симметрией. Анализ дисперсионных кривых на рис. 3 показывает, что вблизи „дышащей“ моды существуют колебания трубки с предельной частотой 228.7 cm^{-1} , соответствующие относительным радиальным колебаниям подрешеток трубки относительно друг друга. В области „оптических“ частот в длинноволновом пределе имеются моды с предельными частотами 1575 и 1583 cm^{-1} , колебания в которых соответствуют смещениям подрешеток трубки друг относительно друга по направлению вдоль оси трубки и относительно повороту подрешеток.

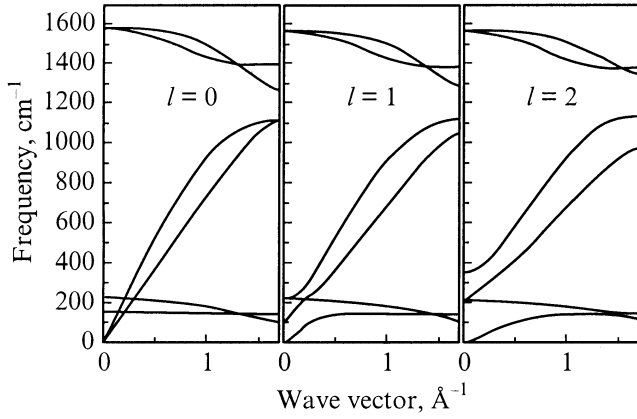


Рис. 3. Фононные спектры углеродной нанотрубки (20,10) в дискретной модели для $l = 0, 1, 2$. Радиус нанотрубки $R = 6.785 \text{ \AA}$.

Для фононов с $l \neq 0$ дисперсионные кривые трансформируются (рис. 3).

Полученные численные данные для частот длинноволновых фононов в трубке (20,10) сравнивались с данными работ [3,6], выполненных по другой методике и с использованием многопараметрического потенциала. Обнаружилось достаточно близкое совпадение в длинноволновом пределе по частоте „дышащей“ моды: $\omega_b = 170 \text{ cm}^{-1}$ [6], $\omega_b = 165 \text{ cm}^{-1}$ [3] с полученным нами значением $\omega_b = 161.2 \text{ cm}^{-1}$.

2. Континуальная модель

В континуальном пределе углеродную нанотрубку можно представить как цилиндрическую упругую оболочку конечной толщины. Это приближение справедливо при выполнении неравенств $qd_0 \ll 1$, $ld_0/R \ll 1$ (R — радиус нанотрубки), соответствующих большой длине волны фонона по сравнению с межатомным расстоянием. Линейные уравнения колебаний упругой тонкой оболочки для смещений, малых по сравнению с ее толщиной, имеют вид [7]

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + \frac{1-\mu}{2R^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial \varphi^2} + \frac{1+\mu}{2R} \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial \varphi \partial z} - \frac{\mu}{R} \frac{\partial u_r}{\partial z} &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2}, \\ \frac{1+\mu}{2R} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial \varphi} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial z^2} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{R^2} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial t^2}, \\ \frac{\mu}{R} \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} - \frac{u_r}{R^2} - \frac{h^2}{12} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)^2 u_r &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial t^2}, \end{aligned} \quad (5)$$

где μ — коэффициент Пуассона; ρ — плотность материала оболочки; E — модуль Юнга; R — радиус серединной поверхности внутри оболочки; h — толщина; z, φ — цилиндрические координаты точки на

серединной поверхности, расположенной внутри оболочки; u_z, u_φ, u_r — цилиндрические компоненты вектора смещения; $c = \sqrt{\frac{E}{\rho(1-\mu^2)}}$.

Если в уравнения (5) подставить решения для компонент вектора смещений в виде

$$\begin{aligned} u_z &= A \exp(-i\omega t + il\varphi + iqz), \\ u_\varphi &= B \exp(-i\omega t + il\varphi + iqz), \\ u_r &= C \exp(-i\omega t + il\varphi + iqz), \end{aligned} \quad (6)$$

где A, B, C — постоянные, получим систему алгебраических уравнений относительно коэффициентов A, B, C , условие существования нетривиальных решений которой определяют дисперсионные соотношения для упругих волн, распространяющихся в оболочке.

Заметим, что уравнения (5) допускают следующие простые частные решения для $l = 0$ в пределе „упругой мембраны“ $h = 0$:

1. $u_z = u_r = 0, u_\varphi = B \exp(-i\omega t + iqz)$. Дисперсионное уравнение в данном случае имеет вид

$$\omega^2 = \frac{E}{2(1+\mu)} \frac{q^2}{\rho} \quad (7)$$

и решение соответствует „волне кручения“, распространяющейся вдоль оболочки.

2. $u_\varphi = 0, u_z = A \exp(i\omega t + iqz), u_r = C \exp(i\omega t + iqz)$. Данное решение соответствует волне, распространяющейся вдоль оболочки. Дисперсионные соотношения для волн в приближении $gh \ll qR \ll 1$ имеют вид

$$\omega_1^2 = c^2 \left(\frac{1}{R^2} + \mu^2 q^2 \right), \quad \omega_2^2 = \frac{q^2 E}{\rho}. \quad (8)$$

Волна с частотой ω_1 в пределе $q = 0$ представляет собой радиальные колебания оболочки ($A = 0, C \neq 0$) и соответствует „дышащей“ моде. Второе дисперсионное соотношение (8) для малых $q \sim 0$ определяет „продольную“ волну $A \neq 0, C = 0$.

В общем случае дисперсионные соотношения для волн в упругой оболочке сводятся к решению кубического уравнения, следующего из уравнений (5), относительно квадратов частоты ω^2 при фиксированных числах q и l .

Значения феноменологических параметров μ и c для углеродной однослойной трубки подбирались путем согласования с длинноволновыми фононными спектрами трубок, полученными на основе дискретной атомной модели, рассмотренной в предыдущем разделе. Значения подобранных подгоночных параметров были следующими: $\mu = 0.065, c = 20.59 \text{ km/s}$.

Численные расчеты фононных спектров углеродной нанотрубки (20,10) в континуальном приближении приведен на рис. 4. Скорости длинноволновых акустических фононов при $l = 0$ имели значения $V_1 = 14.1 \text{ km/s}, V_2 = 20.6 \text{ km/s}$; частота „дышащей“ моды

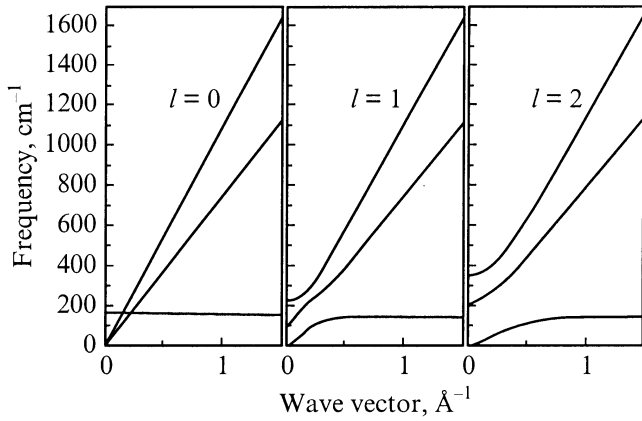


Рис. 4. Фононные спектры углеродной нанотрубки в непрерывной модели для $l = 0, 1, 2$. Радиус нанотрубки $R = 6.785 \text{ \AA}$, толщина стенки трубки равна нулю.

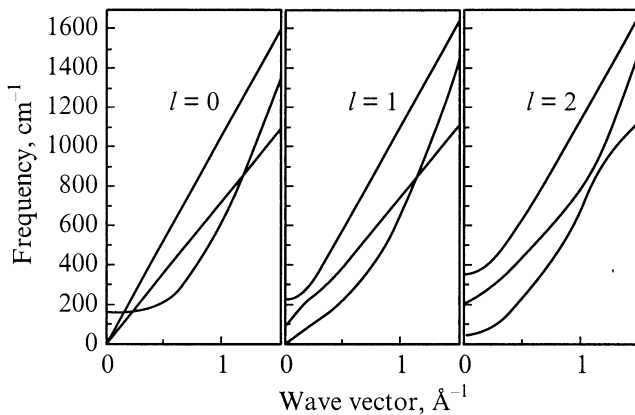


Рис. 5. Фононные спектры углеродной нанотрубки в непрерывной модели для $l = 0, 1, 2$. Радиус нанотрубки $R = 6.785 \text{ \AA}$, отношение толщины стенки к ее радиусу равно 0.295 .

$\omega_b = 161.3 \text{ cm}^{-1}$. Расчет на рис. 4 выполнен в предположении толщины трубки $h = 0$. Проведенные расчеты при $h \neq 0$ показали сильную зависимость дисперсионной кривой „дышащей“ моды от толщины трубки. В качестве примера на рис. 5 показаны численные расчеты дисперсионных кривых фононов углеродной нанотрубки (20, 10) со значением параметра $h/R = 0.295$.

Таким образом, рассмотренные дискретная и непрерывная модели углеродных нанотрубок могут быть полезны для анализа комбинационного рассеяния света на трубках, для оценки фононной теплоемкости одиночной нанотрубки, а также для анализа электрон-фононного взаимодействия в нанотрубках.

Так, при рассеянии оптического фотона на углеродной нанотрубке в ней может возбудиться либо поглотиться фонон; используя законы сохранения энергии, импульса и момента импульса, можно сформулировать правила отбора для фотон-фононного взаимодействия. Фононами трубки, активными при взаимодействии с фотонами,

являются фононы „дышащей“ моды, для которых в непрерывном пределе справедлива формула, следующая из (8) и определяющая зависимость предельной частоты (в cm^{-1}) от радиуса трубки (в \AA):

$$\omega_b = \frac{1093.278}{R}. \quad (9)$$

Численные расчеты частоты „дышащей“ моды в зависимости от радиуса и хиральностей нанотрубок в длинноволновом пределе приведены на рис. 6. Эти данные получены в рамках дискретной модели и, как следует из рис. 6, отклонение от закона (9) наблюдается для трубок малого радиуса и фактически не обнаруживается зависимость частоты „дышащей“ моды от хиральности. Таким образом, формула (9) и данные рис. 6 могут быть полезны для экспериментальной идентификации углеродных нанотрубок по данным рамановского рассеяния света.

Для оценки низкотемпературной теплоемкости нанотрубки можно воспользоваться непрерывной моделью, согласно которой в трубке в низкочастотном пределе существуют акустические фононы с моментом импульса, равным нулю, и фононы с моментом импульса, не равным нулю, частота которых в пределе $q = 0$ не обращается в нуль и зависит от орбитального числа l . Простая оценка для частоты длинноволновых акустических фононов может быть сделана, исходя из формулы

$$\omega_{0l} \approx \frac{lV}{R}, \quad (10)$$

где V — скорость акустического фонона с $l = 0$. В области низких температур при выполнении условий $\hbar\omega_{0l} \approx k_B T$ (k_B — постоянная Больцмана, T — температура) в нанотрубке возбуждаются фононы с различным значением орбитального числа l , что может привести к особенностям в теплоемкости трубки.

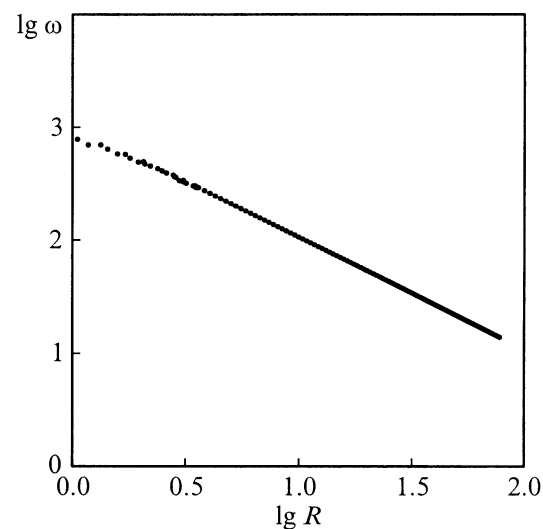


Рис. 6. Зависимость предельной частоты „дышащей“ моды от радиуса нанотрубки, полученная на основе дискретной модели. Частота ω выражена в cm^{-1} , R — в \AA .

Список литературы

- [1] S. Iijima. *Nature (London)* **56**, 354 (1991).
- [2] P.N. Keating. *Phys. Rev.* **B145**, 37 (1966).
- [3] R. Saito, T. Takeya, T. Kimura, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Phys. Rev.* **B57**, 7, 4145 (1998).
- [4] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*. Academic, N.Y. (1996).
- [5] K.C. Hass. *Phys. Rev.* **B46**, 1, 139 (1992).
- [6] V.N. Popov, V.E. Van Doren, M. Balkanski. *Phys. Rev.* **B59**, 13, 8355 (1999).
- [7] А.С. Вольмир. *Оболочки в потоке жидкости и газа (задачи аэроупругости)*. Наука, М. (1976).