

ФОНОННЫЙ СПЕКТР И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КАРБОНОВЫХ НАНОТРУБОК

Минакова К.А.

Национальный технический университет

«Харьковский политехнический институт», г. Харьков

В предлагаемой работе методом якобиевых матриц [1] произведен расчет спектральных плотностей, соответствующих смещениям атомов карбоновой нанотрубки вдоль различных кристаллографических направлений. Силовые постоянные приняты равными силовым постоянным атомов графенового монослоя в графите, определенным в [2].

На Рис. 1 приведены результаты расчета для однослойной нанотрубки *zig-zag*, содержащей 32 атома на поперечном срезе. Спектральные плотности $\rho_l(\omega)$ соответствуют атомным смещениям вдоль оси трубки, спектральные плотности $\rho_\tau(\omega)$ - атомным смещениям в «тангенциальном» направлении, а $\rho_n(\omega)$ - смещениям, нормальным к поверхности трубки. На всех фрагментах Рис. 1 кривые 1 соответствуют спектральным плотностям графита, кривые 2 – биграфена, кривые 3 – карбоновой нанотрубки.

Спектральные плотности карбоновых нанопленок можно рассматривать, как огибающие спектральных плотностей карбоновых нанотрубок. Для фононных спектральных плотностей нанотрубок характерны обусловленные размерным квантованием всплески, аналогичные наблюдаемым в электронных спектрах нанотрубок [3]. Увеличение числа низкочастотных состояний на спектральной плотности $\rho_\tau(\omega)$ обусловлено вкладом крутильных колебаний (одномерные крутильные волны распространяются вдоль оси нанотрубки). В работе также рассчитаны среднеквадратичные амплитуды атомных смещений и определены температурные интервалы динамической устойчивости нанотрубок, а также рассчитана и проанализирована температурная зависимость фононной теплоемкости данных систем.

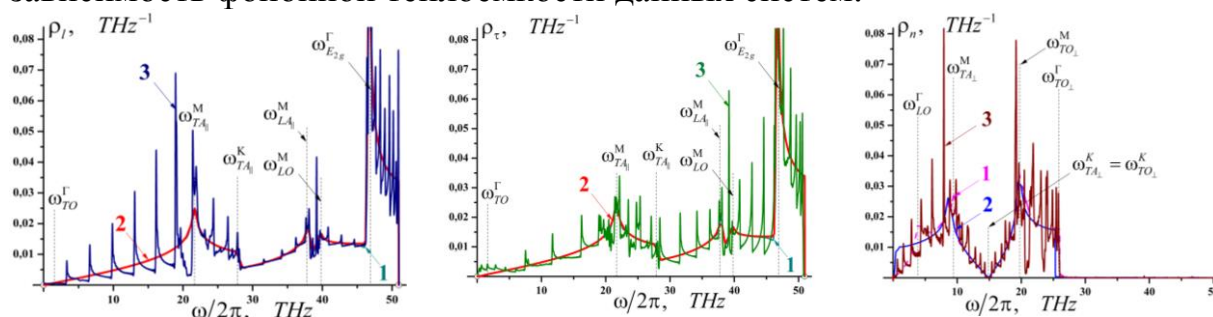


Рис. 1: Фононные спектральные плотности, соответствующие различным смещениям атомов углеродной нанотрубки.

Литература:

- [1] V.I. Peresada, in: *Condensed Matter Physics* [in Russian], FTINT AN Ukr. SSR, Kharkov, **2**, 172 (1968).
- [2] I.A. Gospodarev, K.V. Kravchenko, E.S. Syrkin and S.B. Feodosyev, *Low Temp. Phys.* **35**, 589 (2009) [*Fiz. Nizk. Temp.* **35**, 751 (2009)].
- [3] M.S. Dresselhaus and P.C. Eklund, *Adv. Phys.* **49**, 705, (2000).