

PACS numbers: 63.22.Gh, 71.15.Ap, 71.20.Tx, 71.27.+a, 71.28.+d, 72.10.-d, 72.80.Rj

Оптична провідність вуглецевих нанорурок з домішкою азоту

С. П. Репецький, І. Г. Вишивана, В. В. Шастун, Д. К. Чешківський

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
фізичний факультет,
просп. Акад. Глушкова, 4,
03022 Київ, Україна*

Розвинуто методу розрахунку оптичної провідності низьковимірних неупорядкованих систем. Досліджено вплив домішки азоту на розщеплення енергетичних зон електронів і фононів, що зумовлене нееквівалентними положеннями атомів вуглецю в примітивній комірці вуглецевої нанорурки. Досліджено природу концентраційної залежності оптичної провідності вуглецевих нанорурок з домішкою азоту.

Optical-conductivity calculation method is developed for low-dimensional disordered systems. The influence of nitrogen impurities on splitting of energy bands of electrons and phonons caused by non-equivalent carbon-atom positions in a primitive cell of carbon nanotube is investigated. The carbon-nanotubes conductivity dependence on nitrogen-impurity concentration is studied.

Развит метод расчета оптической проводимости низкоразмерных неупорядоченных систем. Исследовано влияние примеси азота на расщепление энергетических зон электронов и фононов, которое обусловлено неэквивалентными положениями атомов углерода в примитивной ячейке углеродной нанотрубки. Исследована природа концентрационной зависимости электропроводности углеродных нанотрубок с примесью азота.

Ключові слова: вуглецеві нанорурки з домішкою азоту, енергетичний спектр електронів і фононів, оптична провідність.

(Отримано 7 липня 2010 р.)

1. ВСТУП

В системах з сильними електронними кореляціями у зовнішніх електричному та магнетному полях існує крім давно відомого явища

переносу заряду порівняно недавно відкрите явище переносу спінів електронів [1–5]. У кріслоподібних вуглецевих нанорурках, що доповані перехідними металами Cr або V, останнім часом виявлено майже 100% спінову поляризацію [6]. Одним із шляхів цілеспрямованої зміни властивостей вуглецевих нанорурок з метою застосування їх у наноелектроніці та спіновій електроніці є внесення домішок інших елементів. Нееквівалентне розташування атомів вуглецю в примітивній комірниці може спричиняти розщеплення енергетичних зон. Впорядковане розташування домішок може призводити до пониження симетрії кристалічної ґратниці та зняття виродження в енергетичному спектрі електронів і появи додаткових енергетичних щілин, ширина яких залежить від типу домішок та їх концентрації. Однак вплив домішок на електронну структуру та пов'язані з нею властивості вуглецевих нанорурок досліджено недостатньо.

З вищезгаданого випливає, що виконані в даній роботі дослідження впливу домішок на енергетичний спектр та оптичну провідність вуглецевих нанорурок є актуальними.

2. ГАМІЛЬТОНІЯН СИСТЕМИ ЕЛЕКТРОНІВ І ФОНОНІВ НЕВПОРЯДКОВАНОГО КРИСТАЛУ

Гамільтоніян системи електронів і фоновів неспорядкованого кристалу (стопу, неспорядкованого напівпровідника) в представленні Ваннє має вигляд [7]:

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

де Гамільтоніян нульового наближення

$$H_0 = \Phi_0 + H_{f0} + H_{e0} \quad (2)$$

складається з Гамільтоніяна підсистеми не взаємодійних електронів чистого кристалу

$$H_{e0} = \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1 \\ n_2 i_2 \gamma_2}} h_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{(0)} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}, \quad (3)$$

Гамільтоніяна підсистеми не взаємодійних фоновів чистого кристалу

$$H_{f0} = \sum_{n i \alpha} \frac{P_\alpha^2 \binom{n}{i}}{2M_A} + \frac{1}{2} \sum_{n_1 i_1 \alpha_1} \Phi_{\alpha_1 \alpha_2}^{(0)} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix} u_{\alpha_1} \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} u_{\alpha_2} \begin{pmatrix} n_2 \\ i_2 \end{pmatrix} \quad (4)$$

і енергії електростатичної взаємодії йонів у положенні рівноваги

чистого кристалу Φ_0 .

Гамільтоніян збурення у формулі (1)

$$H_{\text{int}} = H_{ei} + H_{ef} + H_{ee} + H_{fi}, \quad (5)$$

складається з Гамільтоніяна електрон-йонної (електрон-домішкової) взаємодії

$$H_{ei} = \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1 \\ n_2 i_2 \gamma_2}} w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}, \quad (6)$$

Гамільтоніяна електрон-фононої взаємодії

$$H_{ef} = \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1 \\ n_2 i_2 \gamma_2}} v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}, \quad (7)$$

Гамільтоніяна парної електрон-електронної взаємодії

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_1 i_1 \gamma_1 \\ n_2 i_2 \gamma_2 \\ n_3 i_3 \gamma_3 \\ n_4 i_4 \gamma_4}} v^{(2)}_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2, n_3 i_3 \gamma_3, n_4 i_4 \gamma_4} a_{n_1 i_1 \gamma_1}^+ a_{n_2 i_2 \gamma_2}^+ a_{n_3 i_3 \gamma_3} a_{n_4 i_4 \gamma_4}, \quad (8)$$

Гамільтоніяна фонон-йонної (фонон-домішкової) взаємодії

$$H_{fi} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_1 i_1 \alpha_1 \\ n_2 i_2 \alpha_2}} \Delta M_{\alpha_1 \alpha_2}^{-1} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix} P_{\alpha_1} \begin{pmatrix} n_1 \\ i_1 \end{pmatrix} P_{\alpha_2} \begin{pmatrix} n_2 \\ i_2 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

де

$$\Delta M_{\alpha_1 \alpha_2}^{-1} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{M_{n_1 i_1}} - \frac{1}{M_A} \right) \delta_{n_1 n_2} \delta_{i_1 i_2} \delta_{\lambda_1 \lambda_2},$$

$a_{ni\gamma}^+$, $a_{ni\gamma}$ — оператори народження і знищення електрона в стані, що описується функцією Ваньє $\phi_{ni\gamma}(\xi) = \langle \xi | ni\gamma \rangle$, $\xi = (\mathbf{r}, s)$; індекс стану γ визначається номером енергетичної зони і проекцією спіну s на вісь z , n — номер примітивної комірки кристалу; i — номер вузла підгранниці в примітивній комірці; $h_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{(0)}$ — матричні елементи одноелектронного Гамільтоніяна чистого кристалу, що складається з атомів сорту A ; $\mathbf{u} \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix}$ — оператор зміщення атома у вузлі (ni) ; $P_\alpha \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix}$ — оператор α -проекції імпульсу атома на Декартові вісі координат;

$\Phi_{\alpha_1 \alpha_2}^{(0)} \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ i_1 & i_2 \end{pmatrix}$ — силові постійні, що пов'язані з потенціальною енергією електростатичної взаємодії відштовхування йонів чистого кристалу.

Оператор потенціальної енергії електрона в полі йонних остовів кристалу $V(\mathbf{r})$ можна представити у вигляді:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{ni} v^{ni}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_{ni}), \quad \mathbf{r}'_{ni} = \mathbf{r}_{ni} + \mathbf{u} \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix},$$

де \mathbf{r} — радіус-вектор електрона, $\mathbf{r}_{ni} = \mathbf{r}_n + \rho_i$ — радіус-вектор рівноважного положення атома у вузлі (ni) кристалічної ґратниці. Випадкова добавка до матричного елемента одноелектронного Гамільтоніана чистого кристалу, пов'язана з наявністю домішки, є

$$w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2} = \sum_{ni} w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{ni}, \quad (10)$$

де

$$w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{ni} = \sum_{\lambda} c_{ni}^{\lambda} w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni}, \quad w_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni} = v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni} - v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{Ani},$$

$$v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni} = \int \Phi_{n_1 i_1 \gamma_1}^*(\xi) v^{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}) \Phi_{n_2 i_2 \gamma_2}(\xi) d\xi.$$

Тут c_{ni}^{λ} — випадкові числа, що приймають значення 1 або 0 залежно від того, знаходиться атом сорту λ у вузлі (ni) чи ні.

У формулі (7) величини $v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}$ виражаються через оператори координат кристалічної ґратниці таким чином:

$$v'_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2} = \sum_{ni\alpha} v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{ni\alpha} u_{\alpha} \begin{pmatrix} n \\ i \end{pmatrix},$$

де

$$v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{ni\alpha} = \sum_{\lambda} c_{ni}^{\lambda} v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni\alpha},$$

а $v_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{\lambda ni\alpha}$ визначається формулою (10), в якій замість $v^{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni})$ стоїть

$$-e_{ni\alpha} \frac{d}{d|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}|} v^{\lambda}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}|),$$

де

$$\mathbf{e}_{ni} = \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ni}|}.$$

3. ГРІНОВІ ФУНКЦІЇ СИСТЕМИ ЕЛЕКТРОНІВ І ФОНОНІВ

Для розрахунку енергетичного спектру електронів і фононів, вільної енергії та електропровідності неупорядкованого кристалу введемо двочасові Грінові функції.

Означимо двочасові загаяну $G_r^{AB}(t, t')$ і випередну $G_a^{AB}(t, t')$ Грінові функції системи [7]:

$$G_r^{AB}(t, t') \equiv \langle \langle \tilde{A}(t) | \tilde{B}(t') \rangle \rangle_r = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \langle [\tilde{A}(t), \tilde{B}(t')] \rangle,$$

$$G_a^{AB}(t, t') \equiv \langle \langle \tilde{A}(t) | \tilde{B}(t') \rangle \rangle_a = \frac{i}{\hbar} \theta(t' - t) \langle [\tilde{A}(t), \tilde{B}(t')] \rangle. \quad (11)$$

Оператор у Гайзенберговому представленні

$$\tilde{A}(t) = e^{i\mathbf{H}t/\hbar} A e^{-i\mathbf{H}t/\hbar},$$

де $\mathbf{H} = H - \mu_e N_e$, а μ_e , N_e — хемічний потенціал і оператор числа електронів відповідно. У виразі (11)

$$[A, B] = AB - \eta BA,$$

де $\eta = 1$ для Бозе-операторів A , B і $\eta = -1$ для Фермі-операторів, а $\theta(t)$ — Хевісайдова функція:

$$\theta(t) = \begin{cases} 1, & t > 0, \\ 0, & t < 0. \end{cases}$$

Хевісайдова функція $\theta(t)$ пов'язана з Діраковою функцією $\delta(t)$ виразом

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(t') dt'.$$

Дужки $\langle \dots \rangle$ в (11) позначають операцію усереднення $\langle A \rangle = \text{Sp}(\rho A)$, $\rho = e^{(\Omega - \mathbf{H})/\Theta}$, де Ω — термодинамічний потенціал системи, $\Theta = k_B T$, T — температура.

Розрахунок двочасових загаяних і випередних Грінових функцій (11) базується на розрахунку температурних Грінових функцій [7]. При цьому використовується відоме співвідношення між спектральними представленнями для загаяної, випередної та температурної Грінових функцій.

Для розрахунку температурних Грінових функцій неупорядкованого кристалу в роботі [7] побудовано діаграмну техніку, що є аналогічною діаграмній техніці для однорідної системи [8]. Одержано наступну систему зв'язаних рівнянь для загаяних Грінових

функцій (індекс r тут і надалі опускаємо) [7, 9]:

$$G^{aa^+}(\varepsilon) = \left[[G_0^{aa^+}(\varepsilon)]^{-1} - (w + \Sigma_{ef}(\varepsilon) + \Sigma_{ee}(\varepsilon)) \right]^{-1}, \quad (12)$$

$$G^{uu}(\varepsilon) = \left[[G_0^{uu}(\varepsilon)]^{-1} - \left(\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \Delta M + \Sigma_{fe}(\varepsilon) \right) \right]^{-1},$$

де

$$\Delta M = \|(M_A - M_{ni})\delta_{nn'}\delta_{ii'}\delta_{\alpha\alpha'}\|, \quad \varepsilon = \hbar\omega.$$

Тут $G^{aa^+}(\varepsilon)$, $G^{uu}(\varepsilon)$ — спектральні представлення одночастинкової Грінової функції підсистеми електронів та Грінової функції «зміщення-зміщення» підсистеми фононів; $\Sigma_{ef}(\varepsilon)$, $\Sigma_{fe}(\varepsilon)$, $\Sigma_{ee}(\varepsilon)$ — масові оператори, що описують відповідно електрон-фононну, фонон-електронну та електрон-електронну взаємодії.

Із рівнянь руху для Грінових функцій нульового наближення $G_0^{aa^+}(\varepsilon)$, $G_0^{uu}(\varepsilon)$ можна одержати:

$$G_0^{aa^+}(\varepsilon) = [\varepsilon - H_0^{(1)}]^{-1}, \quad H_0^{(1)} = \|h_{ni\gamma, n'i'\gamma'}^{(0)}\|,$$

$$G_0^{uu}(\varepsilon) = [\omega^2 M_A - \Phi^{(0)}]^{-1}, \quad \Phi^{(0)} = \|\Phi_{ni\alpha, n'i'\alpha'}^{(0)}\|. \quad (13)$$

При одержанні системи рівнянь (12) нехтувалося членами, що пропорційні другому і більш високому степеням малого параметра:

$$\left(\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \Delta M + \Sigma_{fe}(\varepsilon) \right)_{ni\alpha, n'i'\alpha'} / \Phi_{\alpha\alpha'}^{(0)} \left(\begin{matrix} n & n' \\ i & i' \end{matrix} \right) \ll 1.$$

Використовуючи діаграмну техніку, яка є узагальненням діаграмної техніки для ідеального кристалу [8], в роботі [7, 9] знайдено явні вирази для масових операторів Грінових функцій, що описують багаточастинкові взаємодії в системі.

Для масового оператора, що описує електрон-фононну взаємодію:

$$\Sigma_{efni\gamma, n'i'\gamma'}(\varepsilon) = \sum_{\substack{\lambda_1 n_1 i_1 \\ \lambda_2 n_2 i_2}} c_{n_1 i_1}^{\lambda_1} c_{n_2 i_2}^{\lambda_2} \Sigma_{efni\gamma, n'i'\gamma'}^{\lambda_1 n_1 i_1, \lambda_2 n_2 i_2}(\varepsilon),$$

$$\Sigma_{efni\gamma, n'i'\gamma'}^{\lambda_1 n_1 i_1, \lambda_2 n_2 i_2}(\varepsilon) = -\frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \coth\left(\frac{\varepsilon'}{2\Theta}\right) v_{ni\gamma, n_3 i_3 \gamma_3}^{\lambda_1 n_1 i_1 \alpha_1} \times$$

$$\times \left[G_{n_1 i_1 \alpha_1, n_2 i_2 \alpha_2}^{uu}(\varepsilon') - G_{n_2 i_2 \alpha_2, n_1 i_1 \alpha_1}^{uu*}(\varepsilon') \right] G_{n_3 i_3 \gamma_3, n_4 i_4 \gamma_4}^{aa^+}(\varepsilon - \varepsilon') \Gamma_{n_4 i_4 \gamma_4, n' i' \gamma'}^{\lambda_2 n_2 i_2 \alpha_2}(\varepsilon - \varepsilon', \varepsilon; \varepsilon'). \quad (14)$$

По індексах, що повторюються, виконується підсумовування.

Масовий оператор, що описує фонон-електронну взаємодію має

ВИГЛЯД:

$$\begin{aligned} \Sigma_{fe\ n i\alpha, n' i' \alpha'}(\varepsilon) &= \sum_{\lambda\lambda'} c_{ni}^{\lambda} c_{n'i'}^{\lambda'} \Sigma_{f e n i\alpha, n' i' \alpha'}^{\lambda\lambda'}(\varepsilon), \\ \Sigma_{f e\ n i\alpha, n' i' \alpha'}^{\lambda\lambda'}(\varepsilon) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' f(\varepsilon') v'_{n_2 i_2 \gamma_2, n_4 i_4 \gamma_4}{}^{\lambda n i\alpha} \times \\ &\times \left[\left[G_{n_1 i_1 \gamma_1, n_3 i_3 \gamma_3}^{aa^+}(\varepsilon + \varepsilon') - G_{n_3 i_3 \gamma_3, n_1 i_1 \gamma_1}^{aa^+*}(\varepsilon + \varepsilon') \right] G_{n_2 i_2 \gamma_2, n_4 i_4 \gamma_4}^{aa^+*}(\varepsilon') + \right. \\ &+ G_{n_1 i_1 \gamma_1, n_3 i_3 \gamma_3}^{aa^+}(\varepsilon + \varepsilon') \left[G_{n_4 i_4 \gamma_4, n_2 i_2 \gamma_2}^{aa^+}(\varepsilon') - G_{n_2 i_2 \gamma_2, n_4 i_4 \gamma_4}^{aa^+*}(\varepsilon') \right] \left. \right] \Gamma_{n_3 i_3 \gamma_3, n_4 i_4 \gamma_4}^{\lambda' n' i' \alpha'}(\varepsilon + \varepsilon', \varepsilon; -\varepsilon'). \end{aligned} \quad (15)$$

Масовий оператор для електрон-електронної взаємодії — такий:

$$\begin{aligned} \Sigma_{ee\ n i\gamma, n' i' \gamma'}(\varepsilon) &= \Sigma_{ee\ n i\gamma, n' i' \gamma'}^{(1)} + \Sigma_{ee\ n i\gamma, n' i' \gamma'}^{(2)}(\varepsilon), \\ \Sigma_{ee\ n, n'}^{(1)} &= -\frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' f(\varepsilon') \tilde{v}_{n_1, n'}^{(2) n, n_2} \left[G_{n_1, n_2}^{aa^+}(\varepsilon') - G_{n_2, n_1}^{aa^+*}(\varepsilon') \right], \\ \Sigma_{ee\ n, n'}^{(2)}(\varepsilon) &= -\left(\frac{1}{2\pi i} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_2 \tilde{v}_{n_2, n_1}^{(2) n, n_3} \{ f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \times \\ &\times \left[G_{n_5, n_2}^{aa^+*}(\varepsilon - \varepsilon_1 + \varepsilon_2) G_{n_1, n_4}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{n_2, n_5}^{aa^+}(\varepsilon - \varepsilon_1 + \varepsilon_2) G_{n_4, n_1}^{aa^+*}(\varepsilon_1) \right] \times \\ &\times \left[G_{n_6, n_3}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{n_3, n_6}^{aa^+*}(\varepsilon_2) \right] + f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) \left[G_{n_2, n_5}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{n_5, n_2}^{aa^+*}(\varepsilon_2) \right] \times \\ &\times \left[G_{n_1, n_4}^{aa^+}(\varepsilon_1) G_{n_6, n_3}^{aa^+}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) - G_{n_4, n_1}^{aa^+*}(\varepsilon_1) G_{n_3, n_6}^{aa^+*}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon) \right] \times \\ &\times \Gamma_{n_4, n'}^{n_5, n_6}(\varepsilon_1, \varepsilon - \varepsilon_1 + \varepsilon_2; \varepsilon_2, \varepsilon) \}, \\ \tilde{v}_{n_1, n'}^{(2) n, n_2} &= v_{n_1, n'}^{(2) n, n_2} - v_{n', n_1}^{(2) n, n_2} \quad (n \equiv n i\gamma). \end{aligned} \quad (16)$$

У випадку, коли нехтують перенормуванням вершинних частин діаграм для масових операторів, у виразах (14)–(16) необхідно покласти:

$$\Gamma_{n_4 i_4 \gamma_4, n' i' \gamma'}^{\lambda_2 n_2 i_2 \alpha_2}(\varepsilon - \varepsilon', \varepsilon; \varepsilon') = v_{n_4 i_4 \gamma_4, n' i' \gamma'}^{\lambda_2 n_2 i_2 \alpha_2}, \quad \Gamma_{n_4, n'}^{n_5, n_6}(\varepsilon_1, \varepsilon - \varepsilon_1 + \varepsilon_2; \varepsilon_2, \varepsilon) = \tilde{v}_{n_6, n'}^{(2) n_4, n_5}.$$

У виразах (15)–(16) $f(\varepsilon)$ — функція Фермі, а Ферміїв рівень ε_F системи визначається рівнянням:

$$\langle Z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon, \varepsilon_F) g_e(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (17)$$

де $g_e(\varepsilon)$ задається формулою:

$$g_e(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi v N} \text{Im Sp} \left\langle G^{aa^+}(\varepsilon) \right\rangle_c. \quad (18)$$

У виразах (18) дужки $\langle \dots \rangle_c$ позначають усереднення по різних розташуваннях атомів (конфігураційне усереднення); N — число примітивних комірок; ν — число атомів у примітивній комірці. Для скорочення запису надалі індекс c біля дужки $\langle \dots \rangle$ опускатимемо.

У формулі (17) $\langle Z \rangle = \langle N_e \rangle / \nu N = xZ^A + yZ^B$ — середнє число електронів на атом; Z^A, Z^B — число валентних електронів атомів сорту $\lambda = A, B$ двокомпонентної системи.

Вирази (12) відрізняються від відповідних виразів для Грінової функції одночастинкових Гамільтоніанів неупорядкованої системи лише виглядом масових операторів. У зв'язку з цим для розрахунку Грінової функції (12) скористаємося добре відомими методами теорії неупорядкованих систем [10, 11].

4. ГУСТИНА ЕЛЕКТРОННИХ ТА ФОНОННИХ СТАНІВ

Виконаємо кластерне розвинення для Грінової функцій $G^{aa^+}(\epsilon)$, $G^{uu}(\epsilon)$ у виразах (12), представивши масові оператори (14), (15) у вигляді суми одновузлових операторів і вибравши як нульове одновузлове наближення Грінові функції ефективного середовища [7, 9].

Використовуючи запропоновану в роботах [7, 9] методу кластерного розкладу для Грінових функцій $G(\epsilon)$ (12) та нехтуючи внесками процесів розсіяння електронів на кластерах з трьох і більше атомів, які є малими за деяким малим параметром [7, 11], для густини електронних станів одержимо:

$$g_e(\epsilon) = \frac{1}{\nu} \sum_{i,\gamma,s,\lambda} P_{i0}^\lambda g_{i0\gamma s}^\lambda(\epsilon),$$

$$g_{i0\gamma s}^\lambda(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \tilde{G}_{i0,i0} + \tilde{G}_{i0,i0} t_{i0}^\lambda \tilde{G}_{i0,i0} + \sum_{\substack{(j'l) \neq (i0) \\ \lambda'}} P_{j'l i0}^{\lambda'/\lambda} \times \right.$$

$$\times \left[\tilde{G}_{i0,i0} [I - t_{i0}^\lambda \tilde{G}_{i0,jl} t_{jl}^{\lambda'} \tilde{G}_{jl,i0}]^{-1} t_{i0}^\lambda \tilde{G}_{i0,jl} t_{jl}^{\lambda'} (\tilde{G}_{jl,i0} + \tilde{G}_{jl,i0} t_{i0}^\lambda \tilde{G}_{i0,i0}) + \right.$$

$$\left. \left. + \tilde{G}_{i0,jl} [I - t_{jl}^{\lambda'} \tilde{G}_{jl,i0} t_{i0}^\lambda \tilde{G}_{i0,jl}]^{-1} t_{jl}^{\lambda'} \tilde{G}_{jl,i0} t_{i0}^\lambda (\tilde{G}_{i0,i0} + \tilde{G}_{i0,jl} t_{jl}^{\lambda'} \tilde{G}_{jl,i0}) \right] \right\}^{\gamma s, \gamma s}. \quad (19)$$

Густина фонових станів дається виразом (19), в якому індекс енергетичної зони (γ, s) замінено на індекс проєкції вектора зміщення атома на Декартову вісь координат α [7]:

$$g_f(\epsilon) = \frac{1}{\nu} \sum_{i,\alpha,\lambda} P_{i0}^\lambda g_{i0\alpha}^\lambda(\epsilon),$$

$$g_{i0\alpha}^\lambda(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \tilde{G}_{i0,i0} + \tilde{G}_{i0,i0} t_{i0}^\lambda \tilde{G}_{i0,i0} + \right.$$

$$\begin{aligned}
 & + \sum_{\substack{(j) \neq (i0) \\ \lambda'}} P_{j i 0}^{\lambda' / \lambda} \left[\tilde{G}_{i0, i0} [I - t_{i0}^{\lambda} \tilde{G}_{i0, j l} t_{j l}^{\lambda'} \tilde{G}_{j l, i0}]^{-1} t_{i0} \tilde{G}_{i0, j l} t_{j l} (\tilde{G}_{j l, i0} + \tilde{G}_{j l, i0} t_{i0}^{\lambda} \tilde{G}_{i0, i0}) + \right. \\
 & \left. + \tilde{G}_{i0, j l} [I - t_{j l}^{\lambda'} \tilde{G}_{j l, i0} t_{i0}^{\lambda} \tilde{G}_{i0, j l}]^{-1} t_{j l}^{\lambda'} \tilde{G}_{j l, i0} t_{i0}^{\lambda} (\tilde{G}_{i0, i0} + \tilde{G}_{i0, j l} t_{j l}^{\lambda'} \tilde{G}_{j l, i0}) \right] \}^{\alpha, \alpha}. \quad (20)
 \end{aligned}$$

Грінова функція ефективного середовища для підсистеми електронів у формулі (19) дається виразом:

$$\tilde{G}^{aa^+}(\varepsilon) = \left[\left[G_0^{aa^+}(\varepsilon) \right]^{-1} - \left(\Sigma_{ef}^A(\varepsilon) + \tilde{\Sigma}_{ee}(\varepsilon) + \sigma_e(\varepsilon) \right) \right]^{-1}, \quad (21)$$

де масовий оператор електрон-фононої взаємодії чистого кристалу

$$\Sigma_{ef}^A(\varepsilon) = \sum_{\substack{n_1 i_1 \\ n_2 i_2}} \Sigma_{ef}^{An_1 i_1, An_2 i_2}(\varepsilon).$$

Величини $\Sigma_{ef}^{An_1 i_1, An_2 i_2}(\varepsilon)$ визначаються виразом (14), в якому Грінові функції неупорядкованого кристалу замінені Гріновими функціями ефективного середовища.

Грінова функція ефективного середовища для підсистеми фононів у формулі (20) дається виразом:

$$\tilde{G}^{uu}(\varepsilon) = \left[\left[G_0^{uu}(\varepsilon) \right]^{-1} - \left(\Sigma_{fe}^A(\varepsilon) + \sigma_f(\varepsilon) \right) \right]^{-1}. \quad (22)$$

Величини $\tilde{\Sigma}_{ee}(\varepsilon)$, $\Sigma_{fe}^A(\varepsilon)$ у виразах (21), (22) означені аналогічно $\Sigma_{ef}^A(\varepsilon)$.

У виразах (21), (22) $\sigma_e(\varepsilon)$, $\sigma_f(\varepsilon)$ — потенціали підсистем електронів і фононів ефективного середовища (когерентні потенціали).

У формулі (19) $t^{n_1 i_1}$ — оператор розсіяння на одному вузлі:

$$t^{n_1 i_1} = \left[I - \left(\Sigma^{n_1 i_1} - \sigma^{n_1 i_1} \right) \tilde{G} \right]^{-1} \left(\Sigma^{n_1 i_1} - \sigma^{n_1 i_1} \right), \quad (23)$$

де для підсистеми електронів

$$w + \Sigma_{ef}(\varepsilon) + \Sigma_{ee}(\varepsilon) - \Sigma_{ef}^A(\varepsilon) - \tilde{\Sigma}_{ee}(\varepsilon) = \sum_{(n_1 i_1)} \Sigma_e^{n_1 i_1}(\varepsilon),$$

а для підсистеми фононів

$$\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \Delta M + \Sigma_{fe}(\varepsilon) - \Sigma_{fe}^A(\varepsilon) = \sum_{(n_1 i_1)} \Sigma_f^{n_1 i_1}(\varepsilon).$$

Когерентний потенціал для підсистеми електронів дається формулою [7]

$$\begin{aligned} \sigma_e^{0i_1}(\varepsilon) &= \left\langle \left[\mathbf{1} - \left(\Sigma_e^{0i_1}(\varepsilon) - \sigma_e^{0i_1}(\varepsilon) \right) \tilde{G}^{aa^+}(\varepsilon) \right]^{-1} \right\rangle \times \\ &\times \left\langle \left[\mathbf{1} - \left(\Sigma_e^{0i_1}(\varepsilon) - \sigma_e^{0i_1}(\varepsilon) \right) \tilde{G}^{aa^+}(\varepsilon) \right]^{-1} \Sigma_e^{0i_1}(\varepsilon) \right\rangle, \end{aligned} \quad (24)$$

а для підсистеми фононів — формулою

$$\begin{aligned} \sigma_f^{0i_1}(\varepsilon) &= \left\langle \left[\mathbf{1} - \left(\Sigma_f^{0i_1}(\varepsilon) - \sigma_f^{0i_1}(\varepsilon) \right) \tilde{G}^{uu}(\varepsilon) \right]^{-1} \right\rangle \times \\ &\times \left\langle \left[\mathbf{1} - \left(\Sigma_f^{0i_1}(\varepsilon) - \sigma_f^{0i_1}(\varepsilon) \right) \tilde{G}^{uu}(\varepsilon) \right]^{-1} \Sigma_f^{0i_1}(\varepsilon) \right\rangle. \end{aligned} \quad (25)$$

Виконуючи Фур'є-перетвір у виразах (21), (22), Грінову функцію підсистеми електронів ефективного середовища можна подати у вигляді

$$\tilde{G}_{ni\gamma, n'i'\gamma'}^{aa^+}(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon - H^{(1)}(\mathbf{k}) \right]_{i\gamma, i'\gamma'}^{-1} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}_i - \mathbf{r}_{n'} - \boldsymbol{\rho}_{i'})}, \quad (26)$$

де

$$H^{(1)}(\mathbf{k}) = H_0^{(1)}(\mathbf{k}) + \Sigma_{ef}^A(\mathbf{k}, \varepsilon) + \tilde{\Sigma}_{ee}(\mathbf{k}, \varepsilon) + \sigma_e(\mathbf{k}, \varepsilon),$$

а Грінову функцію підсистеми фононів — у вигляді

$$\tilde{G}_{nia, n'i'\alpha'}^{uu}(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\omega^2 M_A - \Phi(\mathbf{k}) \right]_{ia, i'\alpha'}^{-1} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}_i - \mathbf{r}_{n'} - \boldsymbol{\rho}_{i'})}, \quad (27)$$

де

$$\Phi(\mathbf{k}) = \Phi^{(0)}(\mathbf{k}) + \Sigma_{fe}^A(\mathbf{k}, \varepsilon) + \sigma_f(\mathbf{k}, \varepsilon).$$

У формулах (26), (27) N — число примітивних комірок кристалу; вектор \mathbf{k} змінюється в межах першої Бріллюєнової зони.

Складова матриці силових постійних $\Phi^{(0)}$ чистого кристалу у виразі (27), що зумовлені прямою Кульоновою взаємодією йонів, має вигляд для $(ni) \neq (n'i')$:

$$\Phi_{\alpha\alpha'}^{(0)} \begin{pmatrix} n & n' \\ i & i' \end{pmatrix} = - \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}_i - \mathbf{r}_{n'} - \boldsymbol{\rho}_{i'}|^5} \times \quad (28)$$

$$\times \left[\mathfrak{Z}(r_{n\alpha} + \rho_{i\alpha} - r_{n'\alpha} - \rho_{i'\alpha})(r_{n\alpha'} + \rho_{i\alpha'} - r_{n'\alpha'} - \rho_{i'\alpha'}) - |\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}_i - \mathbf{r}_{n'} - \boldsymbol{\rho}_{i'}|^2 \delta_{\alpha\alpha'} \right].$$

Тут Z — валентність йонів.

Масовий оператор $\Sigma_{fe}^A(\mathbf{k}, \varepsilon)$ описує опосередковану міжатомову взаємодію притягання через валентні електрони.

Величина $\tilde{\Sigma}_{eei\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ у виразі (26) дає поправку до енергії електрона в ефективному середовищі $h_{i\gamma, i'\gamma'}^{(0)}(\mathbf{k}) + \Sigma_{effi\gamma, i'\gamma'}^A(\mathbf{k}, \varepsilon) + \sigma_{ei\gamma, i'\gamma'}(\mathbf{k}, \varepsilon)$, що зумовлена розсіянням електронів на динамічних флюктуаціях електронної густини (плазмонах).

У виразі (19) $P_{i0}^\lambda = \langle c_{i0}^\lambda \rangle$ — ймовірність заповнення вузла ($i0$) атомом сорту λ , $P_{ji0}^{\lambda'/\lambda}$ — умовна ймовірність знайти у вузлі (jl) атом сорту λ' за умови, що у вузлі ($i0$) знаходиться атом сорту λ , а t_{in}^λ — значення матричних елементів одноцентрових операторів розсіяння для випадку, коли у вузлі (in) знаходиться атом сорту λ . Умовні ймовірності $P_{ji0}^{\lambda'/\lambda}$ у формулі визначаються виразами $P_{ji0}^{\lambda'\lambda} = P_{i0}^\lambda P_{ji0}^{\lambda'/\lambda} = \langle c_{ji}^{\lambda'} c_{i0}^\lambda \rangle$.

5. ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ СИСТЕМИ

Із використанням формули Кубо в роботах [9, 12] одержано вираз для електропровідності системи електронів і фононів неупорядкованого кристалу. З нехтуванням внесками процесів розсіяння на кластерах з трьох і більше вузлів для оптичної електропровідності одержано вираз [9, 12]:

$$\begin{aligned}
 & \text{Re } \sigma_{\alpha\beta}(\varepsilon) = \\
 & = \frac{e^2 \hbar}{4\pi\Omega_0 \varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \left[f(\varepsilon_1 + \varepsilon) - f(\varepsilon_1) \right] \sum_{s, s' = +, -} (2\delta_{ss'} - 1) \sum_{\sigma\gamma, i} \left\{ \left[v_\beta \tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) \right]_{i0i0} + \right. \\
 & \quad + \sum_{\lambda} P_{i0}^\lambda \sum_{\substack{jl \neq i0 \\ \lambda'}} P_{jl i0}^{\lambda'/\lambda} \left[\left[\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'}, v_\beta, \varepsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'}) \right]_{i0i0} T_{(i0, jl)}^{(2d)\lambda\lambda'}(\varepsilon_1^{s'}) + \right. \\
 & \quad \quad + \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'} v_\beta, \varepsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'}) \right]_{i0jl} T_{(jl, i0)}^{(2n)\lambda\lambda'}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & \quad \quad + \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) v_\beta \tilde{G}(\varepsilon_1^s) \right]_{i0i0} T_{(i0, jl)}^{(2d)\lambda\lambda'}(\varepsilon_1^s) + \\
 & \quad \quad + \left[\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) v_\beta \tilde{G}(\varepsilon_1^s) \right]_{i0jl} T_{(jl, i0)}^{(2n)\lambda\lambda'}(\varepsilon_1^s) + \\
 & \quad \quad + \tilde{K}_{i0jl}(\varepsilon_1^{s'}, v_\beta, \varepsilon_1^s) (t_{jl}^{\lambda'}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) t_{i0}^\lambda(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & \quad \quad + t_{jl}^{\lambda'}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T_{(i0, jl)}^{(2d)\lambda\lambda'}(\varepsilon_1^{s'}) + T_{(jl, i0)}^{(2d)\lambda\lambda'}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) t_{i0}^\lambda(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & \quad \quad + T_{(jl, i0)}^{(2d)\lambda\lambda'}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T_{(i0, jl)}^{(2d)\lambda\lambda'}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & \quad \quad \left. \left. + T_{(jl, i0)}^{(2n)\lambda\lambda'}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{i0jl}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T_{(jl, i0)}^{(2n)\lambda\lambda'}(\varepsilon_1^{s'}) \right\}^{\sigma\gamma, \sigma\gamma}, \tag{29}
 \end{aligned}$$

де

$$T_{(i0,jl)}^{(2n)\lambda\lambda'} = \left[I - t_{i0}^\lambda \tilde{G}_{(i0,jl)} t_{jl}^{\lambda'} \tilde{G}_{(jl,i0)} \right]^{-1} t_{i0}^\lambda \tilde{G}_{(i0,jl)} t_{jl}^{\lambda'},$$

$$T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda\lambda'} = T_{(i0,jl)}^{(2n)\lambda\lambda'} \tilde{G}_{i0}^\lambda.$$

У виразі (29) $\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) = \tilde{G}(\varepsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'})$, $\tilde{G}(\varepsilon_1^+) = \tilde{G}(\varepsilon_1 + i\delta)$, $\tilde{G}(\varepsilon_1^-) = \tilde{G}(\varepsilon_1 - i\delta)$, $\delta \rightarrow +0$ — загаяна та випередна Грінові функції відповідно; Ω_0 — об'єм примітивної комірки, e — заряд електрона; \hbar — Плянкова стала, $\varepsilon = \hbar\omega$.

Оператор α -проекції швидкості електрона v_α у (29) дорівнює

$$v_{\alpha i, i'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial h_{i, i'}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}.$$

6. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ВИСНОВКИ

Проілюструємо застосування розвинуеної в роботі методи розрахунку енергетичного спектру електронів і фононів та оптичної провідності вуглецевих нанорурок з домішками. Для прикладу оберемо домішки азоту.

На рисунку 1 зображено густину електронних станів вуглецевої нанорурки хіральності (3,0) з домішкою азоту, що розрахована за формулою (19). Матричні елементи Гамільтоніяна (1) в s - p -моделю сильного зв'язку розраховувались з використанням хвильових фу-

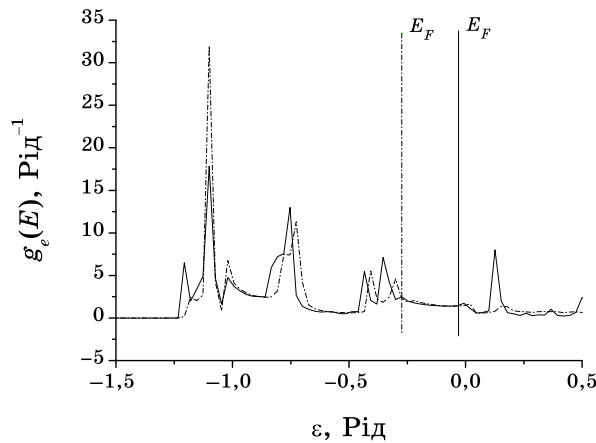


Рис. 1. Густина електронних станів вуглецевої нанорурки з домішкою N для температури $T = 300$ К. Суцільна крива — 5 ат.% N, штрихова — 20 ат.% N.

нкцій і потенціалів ізольованих атомів за методом Слетера–Костера [14]. Ортогоналізація базису виконана за методом Льовдіна [15]. Оскільки в якості базису вибрані хвильові функції нейтральних ізольованих атомів, то валентності йонів у формулі (28) слід покласти рівними $Z = 1$. Розрахунки виконано для температури $T = 300$ К. В розрахунках вважалось, що атоми азоту повністю розпорядковано заміщують атоми вуглецю на вузлах ґратниці. В цьому випадку $P_{i0}^\lambda = P_{i0}^{\lambda'}/\lambda = c$, c — концентрація атомів азоту.

Для порівняння на рис. 2 зображено залежність енергії електрона від хвильового вектора для чистої вуглецевої нанорурки хіральності (3,0), що розрахована з умови для полюсів Грінової функції електронної підсистеми(26):

$$\det[\epsilon - H^{(1)}(\mathbf{k})] = 0,$$

де $\sigma_e(\mathbf{k}, \epsilon)$ покладено рівним $\sigma_e(\mathbf{k}, \epsilon) = -i\delta$, $\delta \rightarrow +0$. Примітивна комірка містить 12 атомів вуглецю. Стала кристалічної ґратниці дорівнює a .

На рисунку 2 видно перекриття та розщеплення енергетичних зон, що зумовлені нееквівалентним положенням атомів вуглецю в примітивній комірці вуглецевої нанорурки.

З рисунків 1, 2 видно, що піки кривої енергетичної залежності густини станів зумовлені перекриттям енергетичних зон.

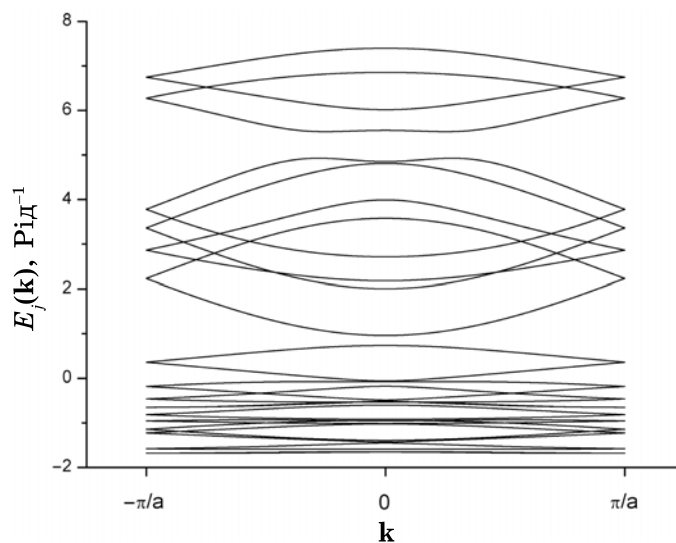


Рис. 2. Залежність енергії електрона від хвильового вектора для чистої вуглецевої нанорурки хіральності (3,0).

Як видно з рис. 1, зі збільшенням концентрації азоту збільшується густина електронних станів в області домішкової зони та розширюються піки кривої енергетичної залежності густини станів, що зумовлені перекриттям енергетичних зон.

На рисунку 3 зображено густину фононних станів вуглецевих на-

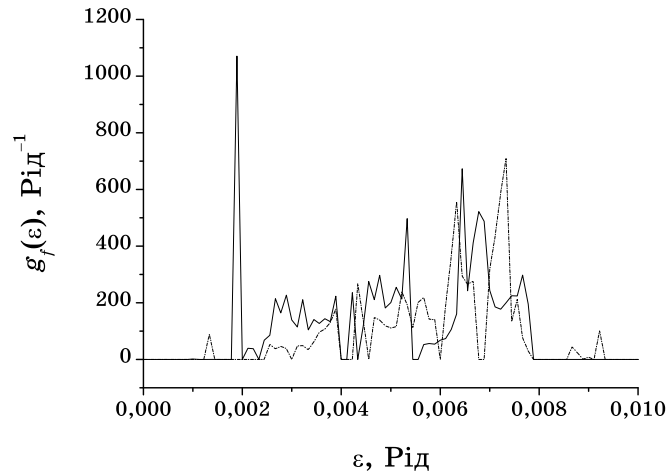


Рис. 3. Густина фононних станів вуглецевої нанорурки з домішкою N для температури $T = 300$ К. Суцільна крива — 5 ат. % N, штрихова — 20 ат. % N.

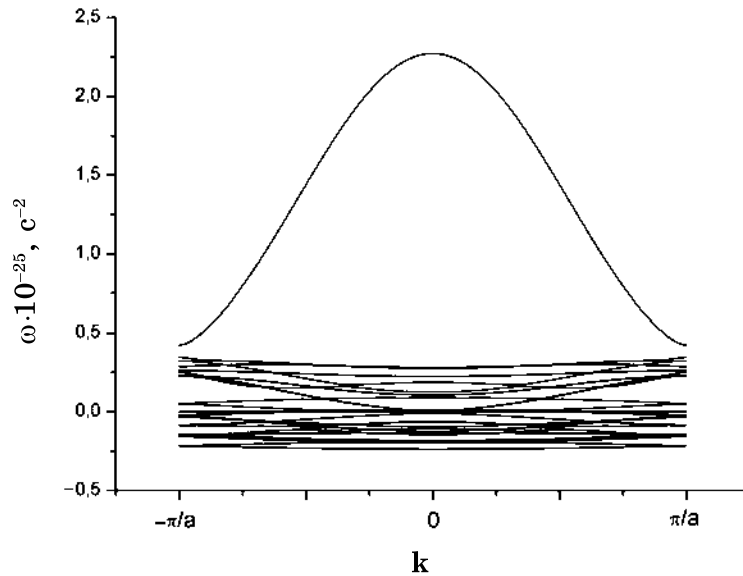


Рис. 4. Залежність квадрата частоти коливань кристалічної ґратниці від хвильового вектора для чистої вуглецевої нанорурки хіральності (3,0).

норурок з домішкою азоту, що розрахована за формулою (20).

Для порівняння на рис. 4 зображено залежність квадрата частоти коливань кристалічної ґратниці від хвильового вектора для чистої нанорурки, що одержана з умови для полюсів Грінової функції фононної підсистеми (27):

$$\det \left| \omega^2 M_A - \Phi(\mathbf{k}) \right| = 0,$$

де $\sigma_f(\mathbf{k}, \varepsilon)$ покладено рівним $\sigma_f(\mathbf{k}, \varepsilon) = -i\delta$ при $\omega > 0$ і $\sigma_f(\mathbf{k}, \varepsilon) = +i\delta$ при $\omega < 0$, $\delta \rightarrow +0$. Частоти коливань кристалічної ґратниці відповідають додатнім розв'язкам.

На рисунку 4 видно перекриття та розщеплення енергетичних зон фононів, що, аналогічно електронному спектру, зумовлені нееквівалентним положенням атомів вуглецю в примітивній комірці вуглецевої нанорурки.

З рисунків 3, 4 видно, що піки кривої енергетичної залежності густини станів зумовлені перекриттям енергетичних зон.

Як видно з рис. 3, зі збільшенням концентрації домішки азоту біля дна енергетичної зони з'являється домішкова зона та розширюються піки кривої енергетичної залежності густини станів, що зумовлені перекриттям енергетичних зон. Положення піків на кривій густини фононних станів добре узгоджується з експериментальними даними по комбінаційному розсіянню світла [16].

На рисунку 5 показано енергетичну залежність оптичної провід-

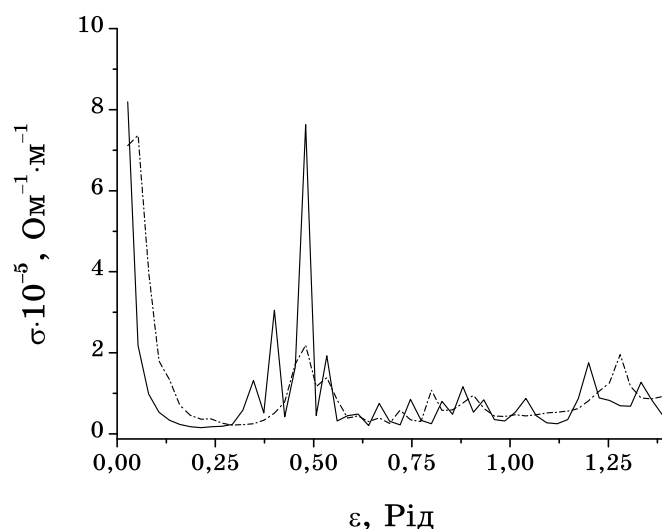


Рис. 5. Енергетична залежність оптичної провідності вуглецевої нанорурки хіральності (3,0) з домішкою азоту для температури $T = 300$ К. Суцільна крива — 5 ат. % N, штрихова — 20 ат. % N.

ности вуглецевої нанорурки хіральності (3,0) для різних концентрацій домішки азоту, що розрахована за формулою (29) для температури 300 К.

З рисунку 5 видно, що піки на кривій енергетичної залежності оптичної провідності відповідають пікам на кривій енергетичної залежності густини електронних станів і пов'язані з перекриттям енергетичних зон, що зумовлено нееквівалентним положенням атомів вуглецю в примітивній комірці вуглецевої нанорурки. Збільшення концентрації домішки азоту призводить розширення піків оптичної провідності.

З наведених вище результатів випливає, що енергетичний спектр та оптична електропровідність вуглецевої нанорурки суттєво залежать від концентрації домішок. Слід чекати, що така концентраційна залежність може стати ще більш суттєвою при зміні характеру домішки та її розподілу на вузлах кристалічної ґратниці (впорядкуванні), коли змінюється симетрія кристалу.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. E. Durgun and S. Ciraci, *Phys. Rev. B*, **74**: 125404 (2006).
2. S. B. Fagan, R. Mota, A. J. R. da Silva, and A. Fazzio, *Phys. Rev. B*, **67**: 205414 (2003).
3. C. K. Yang, J. Zhao, and J. P. Lu, *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 257203 (2003).
4. E. Durgun, S. Dag, V. M. K. Bagci, O. Gülseren, T. Yildirim, and S. Ciraci, *Phys. Rev. B*, **67**: 201401(R) (2003).
5. E. Durgun, S. Dag, S. Ciraci, and O. Gülseren, *J. Phys. Chem. B*, **108**: 575 (2004).
6. C. Yang, J. Zhao, and J. P. Lu, *Nano Lett.*, **4**: 561 (2004).
7. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, *ТМФ*, **131**, № 3: 456 (2002).
8. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (Москва: Физматгиз: 1962).
9. С. П. Репецкий, И. Г. Вышиваная, *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 5: 587 (2007).
10. В. Ф. Лось, С. П. Репецкий, *Методы теории неупорядоченных систем. Электронные свойства сплавов* (Киев: Наукова думка: 1995).
11. V. F. Los' and S. P. Repetsky, *J. Phys.: Condens. Matter*, **6**: 1707 (1994).
12. С. П. Репецкий, И. Г. Вышиваная, *Металлофиз. новейшие технол.*, **26**, № 7: 887 (2004).
13. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, *ФММ*, **96**, № 1: 18 (2003).
14. J. C. Slater and G. F. Koster, *Phys. Rev.*, **94**, No. 6: 1498 (1954).
15. P. O. Löwdin, *J. Chem. Phys.*, **18**, No. 3: 365 (1950).
16. U. Ritter, P. Scharff, C. Siegmund, O. P. Dmytrenko, N. P. Kulish, Yu. I. Prylutskyy, N. M. Biliy, V. A. Gubanov, L. O. Komarova, S. V. Lizunova, V. G. Poroshin, V. V. Shlapatskaya, and H. Bernas, *Carbon*, **44**: 2694 (2006).
17. А. Р. Уббелоде, Ф. А. Льюис, *Графит и его кристаллические соединения* (Москва: Мир: 1965).