

Elektronske zone ugljeničnih nanotuba

Jovan P. Šetrajčić^{1,2}, Igor J. Šetrajčić

¹ Univerzitet u Novom Sadu, Prirodno-matematički fakultet, Departman za fiziku
Novi Sad, Vojvodina – Srbija

² Univerzitet “Union – Nikola Tesla”, Fakultet za sport,
Novi Beograd, Vojvodina – Srbija
jovan.setrajcic@df.uns.ac.rs, igor.setrajcic@df.uns.ac.rs

Ana J. Šetrajčić-Tomić

Univerzitet u Novom Sadu, Medicinski fakultet,
Departman za farmaciju
Novi Sad, Vojvodina – Srbija
setrajcic.a@gmail.com

Sažetak — Analizom elektronske zonske strukture beskonačnih ugljeničnih nanotuba a metodom Grinovih funkcija, pokazano je da se nanotube mogu podeliti u dve klase: nanotube metalnog i poluprovodničkog karaktera. Dodatno prostorno ograničenje sistema duž ose nanotube dovodi do pojave zabranjene zone, ne samo kod poluprovodničkih, već i kod nanotuba metalnog karaktera. Veličina energetske gepa ima oscilatorno ponašanje i nemonotono opada sa povećanjem dužine tube. Ovi materijali su efikasni i interesantni za potencijalnu upotrebu u optičkim komunikacijama.

Ključne riječi—ugljenične nanotube; Grinove funkcije, elektronske zone; energetske gep

I. UVOD

Teorijska istraživanja ugljeničnih nanotuba, kao nove alotropske modifikacije ugljenika nastale od fullerena C₆₀, veoma su interesantna zbog savim novih i posebnih osobina ovih elektronskih sistema [1–7]. Nastajanje nanotube sa jednom ljuskom može se posmatrati kao rezultat valjanja sloja grafita debljine jednog atoma u cilindar. Hiralnost i dijametar tube mogu se odrediti poznavanjem hiralnog vektora (koji spaja atom ugljenika u koordinantnom početku razvijene nanotube sa svojim ekvivalentom):

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \equiv (n, m), \quad (1)$$

gde su \vec{a}_1 i \vec{a}_2 jedinični vektori heksagonalne rešetke, a n i m celi brojevi koji jedinstveno određuju dužinu hiralnog vektora $|\vec{C}_h|$ i hiralni ugao θ [8,9].

$$|\vec{C}_h| = d \cdot \sqrt{n^2 + m^2 + nm}; \quad d = a \cdot \sqrt{3} \quad (2)$$

$$\sin \theta = \frac{m \cdot \sqrt{3}}{2 \cdot \sqrt{n^2 + m^2 + nm}}; \quad \theta = \angle[(n, m); (n, 0)]$$

Hiralni ugao θ može se menjati u intervalu od 0° do 30°, tj. od *cik-cak* do “*armchair*” strukture. Kvantizacija talasne funkcije duž obima cilindra uvodi ograničenje na dozvoljene vrednosti komponente talasnog vektora duž određenog pravca u heksagonalnoj Brillouinovoj zoni tako da je $\vec{C}_h \cdot \vec{k} = 2\pi j$. U zavisnosti od odnosa brojeva n i m nanotube mogu biti:

A. *metalizirane*:

$$(n, 0) \text{ – za } n = 3q,$$

$$(n, m) \text{ – za } n - m = 3q,$$

$$(n, n)$$

B. *poluprovodničke*:

u svim ostalim slučajevima.

Ova podela je potvrđena merenjima metodom skenirajuće tunelske mikroskopije. [10–12].

II. METALIZIRANE NANOTUBE

Svojstva elektronskog podsistema analiziraćemo u jednoelektronskoj aproksimaciji jake veze gde je toplogija nanotube određena σ vezama [13]. Po svakom ugljenikovom atomu preostaje po jedna polupopunjena π orbitala. Kako je preklapanje π orbitala znatno samo za susedne atome, opravdano je uvesti aproksimaciju najbližih suseda. Kolektivizacijom π elektrona dolazi do stvaranja kontinualnih energetskih zona elektrona.

Polazni model je kvazislobodni elektronski gas u kristalnom polju sa hamiltonijanom u harmonijskoj aproksimaciji [14]:

$$H = \Delta \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - W \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}+\vec{\lambda}} \quad (3)$$

gde vektori $\vec{n} + \vec{\lambda}$ određuju položaje najbližih suseda u odnosu na čvor \vec{n} . Veličine $a_{\vec{n}}^+$ i $a_{\vec{n}}$ predstavljaju kreacione i anihilacione operatore elektrona na čvoru \vec{n} , dok je Δ energija π elektrona lokalizovanog na čvoru \vec{n} , a W je energija elektronskog transfera sa čvora \vec{n} na čvor $\vec{n} + \vec{\lambda}$.

Posmatramo jednočestičnu, dvovremensku, retardovanu antikomutatorsku elektronsku Grinovu funkciju [15]:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = \Theta(t) \langle [a_{\vec{n}}(t), a_{\vec{m}}^+(0)] \rangle \quad (4)$$

sa odgovarajućom jednačinom kretanja:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{\vec{n}, \vec{m}}(t) = i\hbar \delta_{\vec{n}, \vec{m}} \delta(t) + \Theta(t) \langle [a_{\vec{n}}(t), H], a_{\vec{m}}^+(0) \rangle \quad (5)$$

Da bi mogao da se izračuna komutator $[a_{\bar{n}}, H]$ u jednačini (5), potrebno je uvrstiti izraz za elektronski hamiltonijan (4), ali za nanotubu datog dijametra i hiralnosti, tj. za date cele brojeve n i m . U ovom radu ćemo kao konkretan primer analizirati klasu nanotuba sa 12 atoma ugljenika po obimu cilindra, gde je $n + m = 6$.

Nanotube opšte formule (n, n) – “*armchair*” su generalno metalnog karaktera. Ovde ćemo analizirati nanotubu (3,0), čiji su karakteristični parametri: hiralni ugao: $\theta = 30^\circ$, a hiralni vektor $\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$; $|\vec{C}_h| = 3\sqrt{3}d \approx 5.2d$.

Izvršenom vremenskom Furije-transformacijom jednačine (5) dobija se:

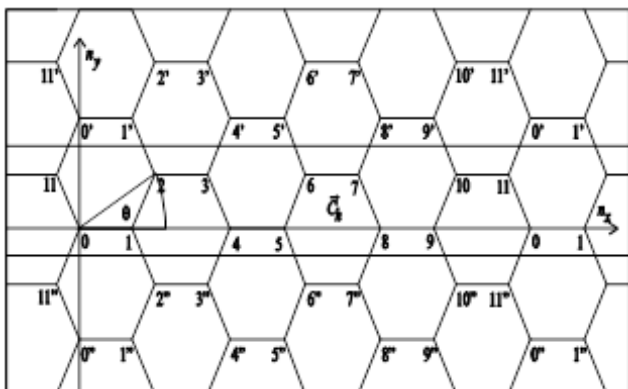
$$\hbar\omega G_{\bar{n};\bar{m}}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\bar{n};\bar{m}} + \Delta G_{\bar{n};\bar{m}}(\omega) + W \sum_{\lambda} G_{\bar{n}+\lambda;\bar{m}}(\omega) \quad (6)$$

Uvodimo cik-cak x osu duž obima nanotube za koju važi ciklični uslov ekvivalentnosti atoma čije se x koordinate razlikuju za $2n = 12$, ($n_x + 12 \equiv n_x$) i linearnu y -osu koja spaja početne atome u ugljenikovim prstenovima $0''-0-0'$ (pri čemu se spiralno pruža oko ose cilindra). Uočava se sa slike 1 da je svaki atom povezan sa atomima u susjednim čvorovima duž x ose. Povezanost sa atomima u susjednim prstenovima ($0''$ i $0'$) ostvaruje se tako da atomi u parnim čvorovima imaju za susede atome čija je x koordinata manja za jedan, dok su atomima u neparnim čvorovima susedi atomi sa x koordinatama većim za jedan ($n_x - (-1)^{n_x}$) [16]. Na osnovu topologije nanotube (slika 1) uvodimo pravilo za određivanje y koordinate najbližeg suseda, koje se ostvaruje po sledećoj šemi povezanosti atoma različitih ugljenikovih prstenova:

$$G_{n_x n_y; m_x m_y} \leftrightarrow G_{n_x - (-1)^{n_x} n_y; m_x m_y}$$

TABELA I. ŠEMA POVEZANOSTI ATOMA C-PRSTENOVA

Mod ₄ (n_x)	0	1	2	3
f_y	-1	-1	+1	+1



Slika 1. Razvijena mreža za (3,3) nanotubu

Ovakvim određivanjem položaja najbližih suseda i prepisivanjem elektronskog hamiltonijana prema izabranim i obrazloženim pravilima, jednačina kretanja za određivanje Grinovih funkcija (6) dobija konkretan oblik:

$$WG_{n_x-1; n_y; m_x m_y} + \hbar\omega G_{n_x; n_y; m_x m_y} + WG_{n_x+1; n_y; m_x m_y} + WG_{n_x-1; n_y; f_y; m_x m_y} = \frac{i\hbar}{2p} d_{n_x n_y; m_x m_y} \quad (7)$$

Nakon delimične prostorne Furije transformacije, kao u [17–19], duž y -pravca dobija se sistem jednačina za određivanje Grinovih funkcija za beskonačnu nanotubu u sledećem obliku:

$$WG_{n_x-1; m_x} + r G_{n_x; m_x} + G_{n_x+1; m_x} + G_{n_x- f_y; m_x} e^{i d k_y f_y} = \frac{i\hbar}{2p} d_{n_x; m_x} \quad (8)$$

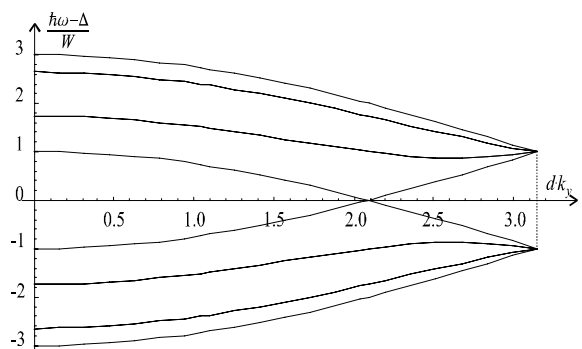
gde je uvedena oznaka $r = (\hbar\omega - D)/W$.

Uslov cikličnosti duž x -ose može se izraziti kao: $G_{n_x+4n; m_x} \equiv G_{n_x; m_x}$. Kada se to iskoristi, onda jednačina (8) prelazi i zapravo predstavlja sistem nehomogenih algebarsko-diferencnih jednačina reda m_x . Iz opšte teorije je poznato da se rešenja traženih Grinove funkcije mogu potražiti u obliku: $G_{n_x; m_x} = D_{n_x} / D_{2n}$, gde D_{n_x} predstavlja odgovarajuću determinantu nepoznate $G_{n_x; m_x}$, a D_{2n} determinantu sistema jednačina.

Određivanje polova Grinovih funkcija, koji definišu spektar mogućih elektronskih energija, svodi se na izračunavanje korena determinante sistema D_{2n} (rešavanje uslova $D_{2n} = 0$, kako je to detaljno objašnjeno u [17–19]).

Tim postupkom, dobija se jedna algebarska jednačina reda $2n$ koja se može rešiti samo upotrebom numeričkih metoda. To smo sami softverski rešili, pazeći pri tome da se mora zadati i dovoljno mali korak promene y komponente talasnog vektora, radi dobijanja dovoljnog broja tačaka za iscrtavanje preciznog grafičkog prikaza disperzionih krivih (slika 2).

Na ovoj slici je grafički predstavljen numerički dobijen zakon disperzije elektrona u posmatranom slučaju. Sa grafika se jasno uočavaju valentna ($\rho < 0$) i provodna zona ($\rho > 0$).



Slika 2. Disperzione krive za (3,3) nanotubu

Nadalje, vidi se da za $k_y = 2\pi/(3d)$ dolazi do preseka valentne i provodne disperzione grane, tj. dolazi do preklapanja valentne i provodne zone. To fizički – fizički znači da je time omogućeno kretanje elektrona i pod dejstvom sasvim slabog spoljašnjeg električnog polja, odnosno, pokazano je uslova za postojanje dobre električne provodnosti. Širina zabranjene zone jednaka je nuli i nanotuba je metalnog karaktera [20,21].

III. POLUPROVODNIČKE NANOTUBE

Kao predstavnik ove klase nanotuba analiziraćemo (4,2) nanotube. Njihove karakteristike, prema podacima iz [22–24], su sledeće:

- hiralni ugao $\theta \approx 19^\circ$ ($\sin \theta = \sqrt{3/28}$),
- hiralni vektor $\vec{C}_h = 4\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2$; $|\vec{C}_h| = d \cdot \sqrt{28} \approx 5.3d$.

Korišćenjem topologije nanotube (slika 3), gde su predstavljene cik-cak x i linearna y osa, možemo napisati šemu povezanosti atoma: $G_{n_x, n_y, m_x, m_y} \leftrightarrow G_{n_x - (-1)^{n_x}, n_y + f_y, m_x, m_y}$, tj.

TABELA II. ŠEMA POVEZANOSTI ATOMA C-PRSTENOVA

Mod ₆ (n_x)	0	1	2	3	4	5
f_y	+1	-1	+1	+1	-1	-1

Na ovom mestu ćemo preskočiti nepotrebna objašnjenja koja su slična kao u malopređašnjem slučaju. Rezultate teorijske analize navodimo taksativno:

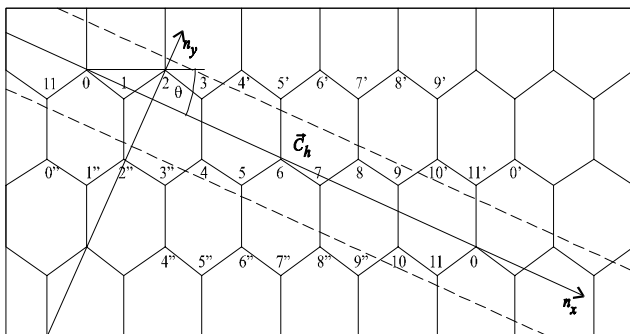
-Jednačina za Grinove funkcije je:

$$WG_{n_x-1, n_y, m_x, m_y} + \hbar\omega G_{n_x, n_y, m_x, m_y} + WG_{n_x+1, n_y, m_x, m_y} + WG_{n_x - (-1)^{n_x}, n_y + f_y, m_x, m_y} = \frac{\hbar}{2p} d_{n_x, n_y, m_x, m_y}; \quad (9)$$

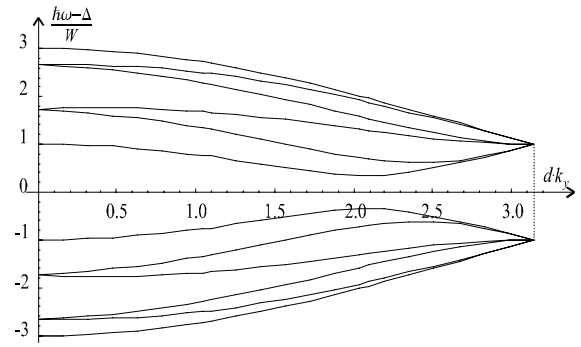
- Transformisana jednačina za Grinove funkcije:

$$WG_{n_x-1, m_x} + r G_{n_x, m_x} + G_{n_x+1, m_x} + G_{n_x - f_y, m_x} e^{idk_y f_y} = \frac{\hbar}{2p} d_{n_x, m_x}; \quad (10)$$

- Uslov cikličnosti po x osi: $G_{n_x+2(n+m)m_x} \equiv G_{n_x, m_x}$.



Slika 3. Razvijena mreža za (4,2) nanotubu



Slika 4. Disperzione krive za (4,2) nanotubu

Istom numeričkom procedurom kao u prethodnom slučaju nalazimo zakon disperzije elektrona i grafički je predstavljamo (slika 4). Odatle se vidi da su valentna i provodna zona, za sve vrednosti k unutar Brillouenove zone, potpuno razdvojene jednom – zabranjenom zonom čija se širina određuje za $k_y = 2\pi/(3d)$. Ova nanotuba je poluprovodničkog karaktera.

IV. DISKRETIZACIJA TALASNOG VEKTORA

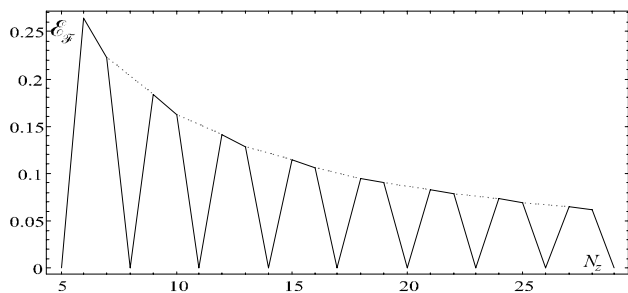
Poznato je da kod niskodimenzionih sistema kao što su ultratanki ili nanotanki filmovi, zatim kvantne gredice ili žice i kvantne tačke, dolazi do nezavisne diskretizacije energetskog spektra i ostalih fizičkih karakteristika na makroskopskom nivou i to duž prostorno pravaca gde postoji prostorno ograničenje. Ovo je tzv. *confinement* efekat ili efekti i to je veoma važno zbog činjenice da, čak i u najnižoj – harmonijskoj aproksimaciji, diskretizacija komponente talasnog vektora duž tog ograničenog pravca ne zavisi od osobina sistema duž druga dva pravca [19], ali ima odlučujući uticaj na sve osobine uzorka.

Po analogiji sa modelom ultratankog kristalnog filma [15–17] može se uvesti pravilo izbora mogućih vrednosti y -komponente talasnog vektora za nanotubu konačne dužine u ovom obliku:

$$k_y(\nu) = \frac{\pi}{d} \frac{\nu}{N_y + 2}; \quad \nu = 1, 2, \dots, N_y + 1 \quad (11)$$

Pri tome se prebrojavanje ugljeničnih prstenova duž y pravca započinje od nultog, te N_y+1 predstavlja ukupan broj prstenova. Navedeni izraz bi opisivao “idealnu” otvorenu nanotubu, dok je za opisivanje realnih nanotuba, zatvorenih kupolastim delovima fullerenskih klastera, potrebno uvesti dodatne granične perturbacione parametre, čime bi se modifikovao izraz za $k_y(\nu)$. Zbog toga ćemo analizirati nanotube kod kojih je, u odnosu na početni fullerenski klaster, dodato barem pet prstenova (u slučaju $n + m = 6$, to je $12(N_y+1) \geq 60$, pa se može zaključiti da linearna dimenzija nanotube sve više dolazi do izražaja kako se povećava njena dužina).

Dakle, elektronski spektar postaje diskretan i sačinjen od tačaka preseka disperzionih krivih beskonačne nanotube i vertikalnih pravih $k_y = k_y(\nu)$. Za analizu ponašanja zabranjene zone od dužine tube bitno je uočiti energetske razlike između



Slika 5. Zavisnost veličine zabranjene zone od dužine (3,3) nanotube

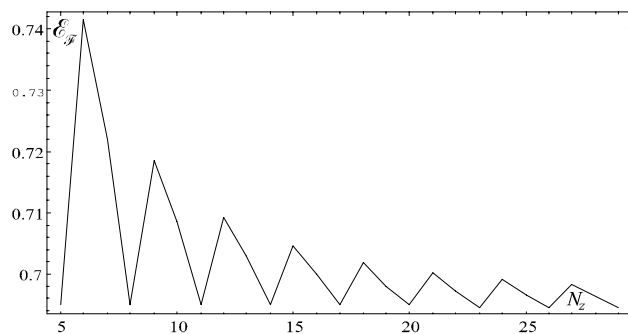
najnižih nepopunjenih i najviših popunjenih diskretnih stanja, tj. između tačaka što leže na šestoj i sedmoj disperzionoj grani (u slučaju $(n + m = 6)$ nanotuba) i odrediti onu koja je među njima minimalna. Na osnovu toga, širina zabranjene zone nanotuba konačne dužine određena je relacijom:

$$\varepsilon_f = \frac{E_f}{W} = \min[\rho_7(k_y(v)) - \rho_6(k_y(v))] \quad (12)$$

Posledica pravilnosti ove formule je da se kod nanotuba metalnog karaktera za $N_y + 2 = 3p$ i određeno $v = 2/3 (N_y + 2)$, dobija $k_y(v) = 2\pi/(3d)$, dok ε_f pada na nulu, tj. na vrednost za beskonačnu nanotubu (slika 2).

Odsustvo perturbacije na krajevima izdvaja jednu klasu nanotuba konačnih dužina koje, uprkos postojanju prostornog ograničenja duž y-pravca, pokazuju metalne osobine. Za ostale vrednosti ($N_y + 2 \neq 3p$) elektronski sistem pokazuje poluprovodničke osobine. Širina zabranjene zone parabolčki opada sa povećanjem dužine i za $N_y + 1 > 30$ praktično se izjednačava sa vrednošću za beskonačnu nanotubu (slika 5). To je ujedno i predstavlja praktičnu granicu za prelaz iz 0D u 1D kvantne sisteme.

Kod poluprovodničkih nanotuba valentna i provodna zona, za sve vrednosti k_y unutar Brillouenove zone, razdvojene su zabranjenom zonom čija se širina određuje za $k_y = 2\pi/(3d)$ (slika 3). Diskretizacijom talasnog vektora dolazi do promene širine zabranjene zone, tj. dobija se oscilatorna kriva



Slika 6. Zavisnost veličine zabranjene zone od dužine (3,3) nanotube

zavisnosti $E_f(N_y)$ [25-27] koja parabolčki teži nenultoj vrednosti za E_f kod beskonačne tube (slika 6).

V. ZAKLJUČAK

1. Energetski spektar elektrona duž ciklično ograničenog x pravca je izrazito diskretan, a duž neograničenog y pravca kontinualan.
2. Zbog konačnosti obima nanotube, mogu da se primene ciklični uslovi na x komponentu elektronskog talasnog vektora; tu 2D kristalna struktura grafitnog lista prelazi u kvazi 1D strukturu nanotube.
3. Preklapanje valentne i provodne zone kod metaliziranih nanotuba javlja se pri $k_y = 2\pi/(3d)$ (to je tzv. K-tačka heksagonalne Brillouenove zone).
4. Na granici prve Brillouenove zone za $k_y = \pi/d$ valentna i provodna zona su $(n+m)/2$ puta degenerisane, tj. svode se na po jedno energetsko stanje.
5. U slučaju nanotube konačne dužine otvara se zabranjena zona čak i za nanotube koje su metalnog karaktera pri beskonačnim dužinama.
6. Veličina zabranjene zone kod poluprovodničkih nanotuba ima oscilatorno ponašanje i nemonotono opada sa povećanjem dužine nanotube.

ZAHVALNICA

Rezultati izneti u ovom radu deo su istraživanja koja su finansijski podržana od strane Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije (ON-171039, TR-34019), Ministarstva nauke i tehnologije Republike Srpske (broj 19/6-020/961-16/15), kao i Sekretarijata za visoko obrazovanje i naučnoistraživačku delatnost APV (142-451-2469/2017-01/02).

LITERATURA

- [1] T.W. Odom, J.-L. Huang, P. Kim, and C.M. Lieber, "Atomic structure and electronic properties of single-walled carbon nanotubes", *Nature*, vol. 391, pp. 62-64, 1998.
- [2] "The Physics of Fullerene-Based and Fullerene-Related Materials", W. Andreoni, Ed., Dordrecht: Springer, 2000.
- [3] J.P. Šetrajčić, "Superconductivity and fullerenes", *Materials Science Forum*, vol. 282-283, pp. 71-82, 1998.
- [4] J.P. Šetrajčić, S.M. Vučenović i I.D. Vragović, "Elektronska struktura nanotuba", *Zbornik radova 47. ETRAN*, tom 4, str. 263-266, 2003.
- [5] D. Backović, V.D. Sajfert, B.S. Tošić, and J.P. Šetrajčić, "Behaviour of electrons in full cylinder without central fiber", *Tehnika - Novi materijali*, vol. 6, no. 15, pp. 1-8, 2006.
- [6] S. Jaćimovski, B.S. Tošić, J.P. Šetrajčić, and V.D. Sajfert, "Charge tunneling in doped quantum rod", *Int. J. Mod. Phys. B*, vol. 24, no.27, pp. 5345-5358, 2010.
- [7] "Fullerene", *Encyclopædia Britannica on-line*: <https://www.britannica.com/science/fullerene>
- [8] S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon", *Nature*, vol. 354, pp. 56-58, 1991.
- [9] N. Hamada, S. Sawada, and A. Oshiyama, "New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 68, pp. 1579-1581, 1992.
- [10] M. Liu, and J.M. Cowley, "Structures of carbon nanotubes studied by HRTEM and nanodiffraction", *Ultramicroscopy*, vol. 53, pp. 333-342,

- 1993; "Structures of the helical carbon nanotubes", *Carbon*, vol. 32, pp. 393-403, 1994.
- [11] S. Amelinckx, D. Bernaerts, X.B. Zhang, G.V. Tandeloo, and J.V. Landuyt, "A structure model and growth mechanism for multishell carbon nanotubes", *Science*, vol. 267, 1334-1338, 1995.
- [12] V. Georgakilas, D. Gournis, V. Tzitzios, L. Pasquato, D.M. Guldie, and M. Prato, "Decorating carbon nanotubes with metal or semiconductor nanoparticles", *J. Mater. Chem.*, vol. 17, pp. 2679-2694, 2007.
- [13] G. Zhang, P. Qi, X. Wang, Y. Lu, X. Li, R. Tu, S. Bangsaruntip, D. Mann, L. Zhang, and H. Dai, "Selective Etching of Metallic Carbon Nanotubes by Gas-Phase Reaction", *Science*, vol. 314, no. 5801, pp. 974-977, 2006.
- [14] G. Mahan, "Many particle physics", New York: Plenum Press, 1990.
- [15] G. Rickayzen: "Green's functions and condensed matter", London: Academic Press, 1980.
- [16] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and R.Saito, "Physic of carbon nanotubes", *Carbon*, vol. 33, no. 7, pp. 883-891, 1995.
- [17] D.Lj. Mirjanić, J.P. Šetrajčić, S.M. Stojković, I.D. Vragović, and S.K. Jaćimovski, "Electron states of ultrathin crystals", *IEEE-Proceedings 21st MIEL*, vol. 1, pp. 121-124; Niš, Serbia, 1997.
- [18] D.Lj. Mirjanić, S.M. Stojković i J.P. Šetrajčić, „Mikroteorijski prilaz analizi fizičkih osobina tankih slojnih struktura“, *Zbornik radova 41. ETRAN*, str. 400-403. 1997.
- [19] I.D. Vragović, R.Furstenberg, S.M.Stojković, J.P.Šetrajčić and D.Lj.Mirjanić, Phonon spectra of quantum wires, 13th Conference of Applied Mathematics, Igalo, Montenegro, 1998.
- [20] P. Petit, E. Jouguelet, N. Paizel, J.E. Fischer, A. Thess and R.E. Smalley, "Electronic properties of single wall carbon nanotubes", in "Molecular nanostructures", H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring, and S. Roth, pp. 435-438, Word Sci. Publ. Co., Proceedings IWEPNM, Kirchberg, Austria, 1997.
- [21] C. Dekker, S.J. Tans, M.H. Devoret, L.J. Geerlings, R.J.A. Groenvelt, L.C. Venema, J.W.G. Wildoer, A.R.M. Verschueren, A. Bezryadin, A. Thess, H. Dai and R.E. Smalley, "Electrical properties of individual single-wall carbon nanotubes", in "Molecular nanostructures", H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring, and S. Roth, pp. 467-471, Word Sci. Publ. Co., Proceedings IWEPNM, Kirchberg, Austria, 1997.
- [22] S. Tatsuura, M. Furuki, Y. Sato, I. Iwasa, M. Tian, H. Mitsu, "Semiconductor Carbon nanotubes as ultrafast switching materials for optical telecommunications", *Advanced Materials*, vol. 15, no. 6, pp. 534-537, 2003.
- [23] J.W.G. Wilder, L.C. Venema, A.G. Rinzler, R.E. Smalley, and C. Dekker, "Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes", *Nature*, vol. 391, pp. 59-62, 1998.
- [24] A. Rochefort, D.R. Salahub, and P. Avouris, "The effects of finite length on the electronic structure of carbon nanotubes", *J. Phys. Chem.*, vol. 103, pp. 641-646, 1999.
- [25] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund, and A.M. Rao, "Carbon nanotubes", pp. 331-379, in: "The physics of fullerene-based and fullerene-related materials", Ed. W. Andreoni, Dordrecht: Springer, 2000.
- [26] M.S. Strano, C.A. Dyke, M.L. Usrey, P.W. Barone, M.J. Allen, H. Shan, C. Kittrell, R.H. Hauge, J.M. Tour, and R.E. Smalley, "Electronic structure control of single-walled carbon nanotube functionalization", *Science*, vol. 301, no. 5639, pp. 1519-1522, 2003.
- [27] M.S. Arnold, A.A. Green, J.F. Hulvat, S.I. Stupp, and M.C. Hersam, "Sorting carbon nanotubes by electronic structure using density differentiation", *Nature Nanotechnology*, vol. 1, pp. 60-65, 2006.

ABSTRACT

By analyzing the electronic zone structure of infinite carbon nanotubes and the Grin's function method, it has been shown that nanotubes can be divided into two layers: nanotubes of metalline and semiconductor characteristics. Additional spatial limitation of the system along the axis of the nanotube leads to the appearance of a forbidden zone, not only for semiconductors, but also for nanotubes of metalline character. The size of the energy gap has an oscillatory behavior and does not monotonous tend to decrease with increasing tube length. These materials are efficient and interesting for potential use in optical communications.

ELECTRON ZONE OF CARBON NANOTUBES

Jovan P. Šetrajčić, Igor J. Šetrajčić, Ana J. Šetrajčić-Tomić