

Összefoglalás

Ez a dolgozat számos különböző egyfalú szén nanocső fizikai tulajdonságaira – az optimális geometriára, a teljesen szimmetrikus rezgési módusokra, valamint az elektron-sávszerkezetekre – végzett számolásaink eredményeit foglalja össze egy széles átmérotartományban, elsősorban a kis átmérőjű csövekre helyezve a hangsúlyt. Első ízben hajtottuk végre 40 különböző szén nanocsőnek, beleértve 14 királis csőnek az első elvi szintű szisztematikus analízisét.

A kis átmérőjű szén nanocsövek geometriája jelentősen eltér attól, amit a grafén-feltételezési modell jósol. Az eltérések nőnek ahogy az átmérő (d) csökken, és erős kiralitásfüggést mutatnak, ami a nanocsövek nagyfokú individualitásának köszönhető.

A radiális lélegző módus (RBM) frekvenciája jelentős, *kiralitásfüggő* eltérést mutat a nagy átmérőjű csöveket jól leíró, egyszerű $1/d$ szabályhoz képest. Az RBM csatolódik a teljesen szimmetrikus tangenciális módusokhoz. Ez a csatolás kicsi, de nem elhanyagolható. A teljesen szimmetrikus tangenciális módusok frekvenciája többnyire két ág valamelyikét követi az átmérő függvényében ábrázolva, van azonban néhány kivétel, mely ismét a kis átmérőjű szén nanocsövek individualitását jelzi.

A tiltott sáv viselkedése is jelentősen eltér a zónahajtogatás szerint várttól. Felerősödött "bicsaklás" tapasztalható a cikkcakk csövek esetén, mely azt jelzi hogy az úgynevezett *tri-gonal warping* effektus nagyobb, mint azt az egyszerű szoros illeszkedésű közelítés jósolja. A görbület hatására a zónahajtogatás szerint fémes csövek sávszerkezetében egy másodlagos tiltott sáv nyílik nem-karosszék csövek esetén, míg karosszék csövek esetén csupán a Fermi-hullámszám tolódik lejjebb. A másodlagos tiltott sáv anomális átmérőfüggést mutat, ami feltehetően feloldható sokelektron-effektusok figyelembevételével. A legkisebb átmérőjű csövek esetén a tiltott sáv szinte mindig eltűnik a $\sigma - \pi$ hibridizáció miatt. Itt némi kiralitásfüggés tapasztalható, ami egy újabb jele a kis átmérőjű szén nanocsövek erős individualitásának.