



**Ведение.** Актуальность данной работы заключается в исследовании изменения свойств одностенной углеродной нанотрубки от наличия в ней дефектов. А именно электронных свойств структуры. Исследование состоит в эмпирическом обнаружении зависимостей изменения электропроводности от концентрации дефектов с привлечением молекулярного моделирования для построения атомистической модели структуры материала.

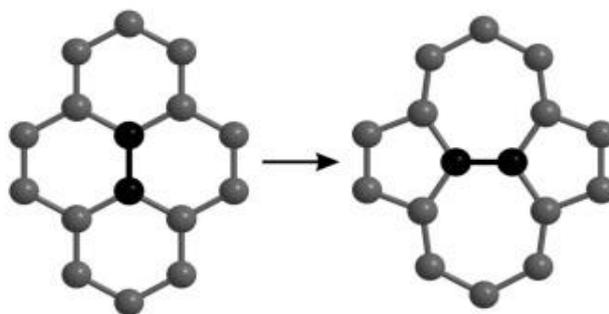
Для расчёта электронных свойств были использованы полуэмпирические методы квантовой химии. Работа состоит из введения, трех разделов, заключения и списка использованной в работе литературы. Во введении обосновывается цель работы и описывается предмет исследования. В разделе “Теоретические данные изучаемой темы” кратко описываются предметы исследования используемые в работе. В следующем разделе “Методы и подходы, используемые в работе” описывается суть методов и приближений, используемых в работе, основные формулы и их получение. Последний раздел работы “Исследование электропроводности в ОУНТ с дефектами” описывает методику построения атомистической модели и дальнейшее исследование электропроводности модели в зависимости от типа и концентрации дефекта. В заключении обобщаются результаты исследования и описываются планы продолжения данной темы.

**Основное содержание работы.** В настоящее время идет развитие такой области электроники, как наноэлектроника и перспективным материалом в этой области являются углеродные структуры. Одной из таких структур является углеродная нанотрубка. На стадии синтеза УНТ или различных манипуляций появляются различные дефекты строения, влияющие на свойства структуры. Объектом исследования была выбрана одностенная углеродная нанотрубка потому, что она является одной из основ для построения сложных структур.

Свойства реальных кристаллов существенно отличаются от свойств идеальных кристаллических структур, благодаря наличию дефектов кристаллического строения (вакансий, межузельных атомов, дислокаций) [1]. Особенностью вышеперечисленных типов дефектов кристаллической структуры является наличие оборванных межатомных связей и нарушение порядка в относительном расположении атомов. Исследование топологических дефектов графеновых представляет интерес, так как они оказывают сильное влияние на электронные, механические и упругие свойства углеродных наноструктур.

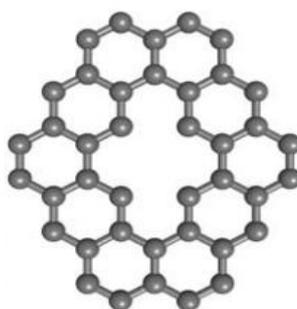
Цель данной работы заключается в том, что необходимо исследовать, как те или дефекты влияют на электронные свойства УНТ, и прогнозировать их изменения.

В данной работе будут рассматриваться дефекты Стоуна-Уэльса (SW-дефект) и двойной вакансии (2V-дефект). SW-дефект представляет собой соединенные углеродные кольца с пятью и семью атомами, возникающие благодаря повороту на 90 градусов соседних атомов углерода относительно их центра.



**Рис. 1** Поворот связи и образование дефекта Стоуна-Уэльса

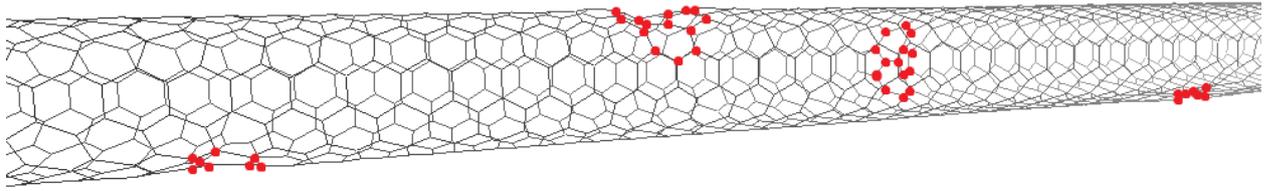
2V-дефект представляет собой отсутствующие два соседних атома углерода в структуре и в следствии появления «дырки».



**Рис.2** 2V-дефект

Для исследования были построены три углеродные нанотрубки киральностью (4,4) и длиной 11 Ангстрем . Первая из них без дефектов, вторая с дефектом Стоуна-Уэльса, третья с дефектом двойной вакансии. Данные структуры были построены в программном комплексе Kvizar [2].

Имея на входе три структуры, мы используем скрипт, написанный на языке python, который транслирует выбранные нами структуры в заданном направлении.



**Рис.3** Отрезок конечной структуры с выделенными SW-дефектами

С помощью метода DFTB рассчитывается гамильтониан, описывающий канал проводимости между стоком и истоком, а так же рассчитываются матрицы взаимодействия контактов в приближении  $\pi$ -электронов для конечной структуры.

Метод функционала плотности в приближении сильной связи (Density Functional based Tight Binding) рассчитывает электронную структуру системы многих частиц описывая электронную подсистему не многоэлектронной волновой функцией, а электронной плотностью в приближении сильной связи.

Формула полной энергии системы:

$$E_{total} = T + E_{ne} + J + K + E_{nn},$$

где  $T$  – кинетическая энергия,  $E_{ne}$  – энергия притяжения электронов к ядрам,  $J$  – кулоновская энергия отталкивания электронов,  $K$  - обменный член,  $E_{nn}$  - энергия межъядерного отталкивания [3].

В свою очередь  $E_{ne}$  и  $J$  могут выражаться через электронную плотность  $\rho$ :

$$E_{ne}[\rho(r)] = -\sum_{\alpha} \sum_i^M \int \varphi_i(r) \frac{Z_{\alpha}}{r} \varphi_i(r) dr = -\sum_{\alpha} \int \frac{Z_{\alpha}}{r} \rho(r) dr$$

$$J_{ij}[\rho(r)] = \frac{1}{2} \int \int |\varphi_i(r_1)|^2 \frac{1}{|r_1 - r_2|} |\varphi_j(r_2)|^2 dr_1 dr_2 = \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2$$

Полученные методом DFTB матрицы для канала проводимости и контактов, использовались для расчета функции пропускания в программном пакете молекулярного моделирования Mizar [4].

Для расчета функции пропускания использовался метод неравновесных функций Грина, который описывает транспорт электронов между контактами по каналу проводимости в проводнике при размерах самого проводника приближающегося к атомному. В таких проводниках имеют место

энтропийные процессы. Поэтому важно использовать метод который учитывал бы и динамические силы и энтропийные.

Формула расчета функции пропускания [5]:

$$el(E) = \text{Trace}[\Gamma_s G_{ch} \Gamma_d G_{ch}]$$

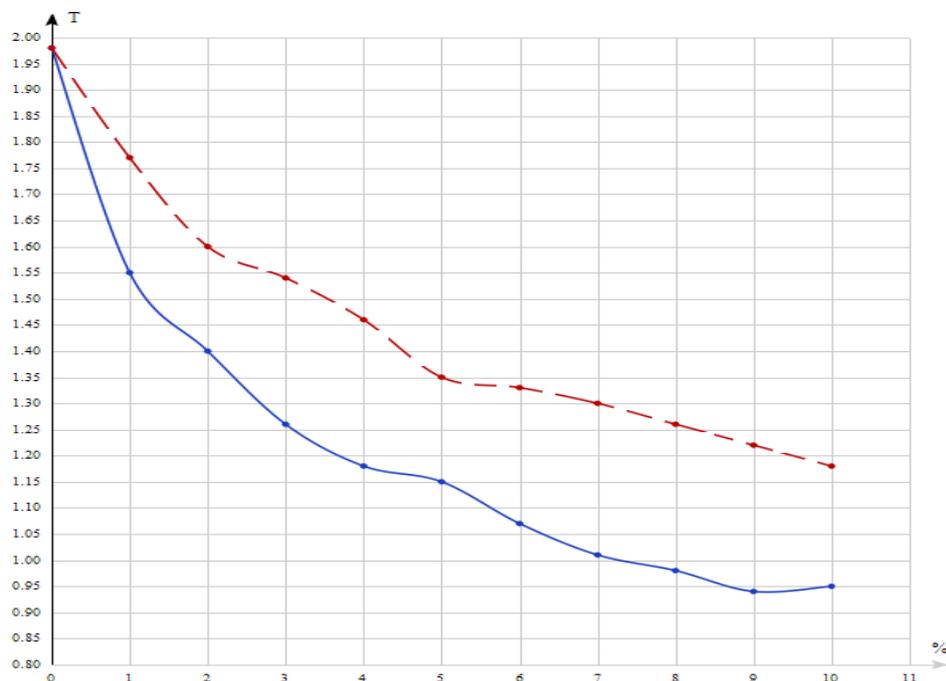
Trace — операция следа матрицы,  $\Gamma_s$  и  $\Gamma_d$  берутся из формулы ниже:

$$\Gamma_{s/d} = i[\Sigma_{s/d} - s/d]$$

где  $\Sigma_{s/d}$  - матрица собственной энергии истока или стока,  $s/d$  - сопряженная ей матрица.

Эмпирически была найдена оптимальная длина конечной структуры – 20000 Ангстрем. Она находилась из необходимости максимального приближения функции пропускания к ступенчатому виду ОУНТ без дефектов.

Далее рассчитывались зависимости функции пропускания от вида и концентрации в конечной структуре дефектов.



— T(%) для 2V-дефекта

- - - T(%) для SW-дефекта

**Рис. 4** Сравнительный график зависимостей функции пропускания от концентрации дефектов в структуре

Как видно из графика, разница в воздействии данных дефектов на электропроводность ОУНТ существенна. Согласно полученным данным дефект двойной вакансии значительно сильнее влияет, чем дефект Стоуна-Уэльса, на электропроводность ОУНТ при малых концентрациях данного дефекта, но при высоких концентрациях его воздействие очень мало. При этом дефект Стоуна-Уэльса стабильно ухудшает электропроводность ОУНТ при равномерном увеличении концентрации данного дефекта.

**Заключение.** В данном исследовании было рассмотрено воздействия дефекта двойной вакансии и дефекта Стоуна-Уэльса на ОУНТ. В ходе работы была построена атомистическая модель ОУНТ длиной 20000 Ангстрем, хиральностью (4,4) и исследованы методы расчета электрических величин в квантовых проводниках. Так же было оценено снижение электропроводности ОУНТ в зависимости от типа в ней дефекта и его концентрации.

## Список использованной литературы

1. Зинатулина Ю.А., Беленков Е.А., Усова М.В., Андреева А.А. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ДЕФЕКТЫ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ. / Челябинский государственный университет
2. О.Е.Глухова, А.С.Колесникова, Г.В.Савостьянов. ПО «KVAZAR» – платформа для прогностического моделирования в области нано- и биомедицинских технологий. — Саратов : Саратовский источник, 2015.
3. КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ. / В.Г. Заводинский, А.А. Гниденко – Хабаровск, 2013 – 49 с.
4. О.Е.Глухова, Г.В.Савостьянов. Многопроцессорный программно-информационный комплекс моделирования молекулярных систем для супер-ЭВМ «Mizar». Свид.No201661289. РФ. — 2016.
5. S. Datta, Quantum Transport: Atom to Transistor (Cambridge: Cambridge University Press: 2005).