Министерство образования и науки Российской Федерации

# ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. **ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра радиотехники и электродинамики

наименование кафедры

### Электронные свойства графеновых нанолент типа zigzag

## АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 421 группы

03.03.03 «Радиофизика» направления

код и наименование направления (специальности)

физического факультета

наименование факультета, института, колледжа

Киселёва Максима Алексеевича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

ассистент кафедры

должность, ученая степень, звание

Консультант

должность, ученая степень, звание

должность, ученая степень, звание

Зав.кафедрой, д.ф.-м. н., проф.

подпись, дата

Глухова О.Е.

инициалы, фамилия

подпись, дата

инициалы, фамилия

Шмыгин Д.С.

Саратов 2018

инициалы, фамилия подпись, дата

### Введение

Развитие наноэлектроники связано с уникальными свойствами углеродных наноструктур, которые используются в качестве элементной базы наноустройств. К таким структурам относятся углеродные нанотрубки, фуллерены, графен (и его аллоторопы) и многие другие. Наноэлектроника стала развиваться с момента использования углеродных нанотрубок в эмиссионной электронике [1-5]. С открытием графена и его модификаций наноэлектроника стала развиваться в новом направлении: гибкой и прозрачной электронике. Это связано с уникальными механическими и электронными свойствами графена [6-11]. Графен имеет двумерную структуру толщиной в один атом, поверхность которой регулярным образом выложена правильными шестиугольниками. Благодаря этому он может применяться при создании нанотранзисторов, плоских сверхтонких дисплеев, спиновых фильтров, суперконденсаторов, элементов памяти, сенсоров [12-15], но чтобы использовать графен в качестве элементной базы электронных наноустройств необходимо управлять электронными свойствами, что является актуальной задачей углеродной наноэлектроники.

Графен - это полупроводник с нулевой энергетической щелью, что серьезно мешает его использованию в устройствах логической электроники. Одно из решений этой проблемы является использование zigzag графеновых нанолент из-за того, что у zigzag графеновых нанолент имеется высокая плотность краевых состояний вблизи уровня Ферми, что делает возможным применять zigzag графеновые наноленты в спиновой электронике [16]. графеновых Размещение нанолент типа zigzag на металлических поверхностях обеспечивает эффективную перестройку внешним электрическим полем магнитных моментов в графеновых нанолентах типа zigzag на s-металлических поверхностях, что объясняется преобладанием электростатического взаимодействия между ними [17]. Для графеновых

нанолент типа zigzag, помещенных на p- и d-металлические поверхности, оказывается менее эффективна настройка электрическим полем, что объясняется сильным взаимодействием между z p -орбиталями углерода и металлической подложкой, происходящим по механизму химической сорбции [17]. В связи с этим, проведение обзора исследований электронных свойств графеновых нанолент типа «zigzag» является актуальной задачей.

Легирование [18-21], дефекты [22-24], а также механическая деформация, гофрирование [25] оказывают значительное влияние на электронные свойства графеновых нанолент. Целью данной работы является изучение электронных свойств графеновых нанолент типа zigzag.

Для достижения цели будут решены следующие задачи:

- изучение атомарного строения графена и его модификаций;
- обзор исследований электронных свойств равномерно гофрированных графеновых нанолент типа zigzag;
- обзор исследований энергетической щели для zigzag графеновых нанолент, имеющих антиферромагнитное состояние и немагнитное состояние;
- обзор теоретических и экспериментальных исследований электронных свойств, гофрированных и плоских zigzag графеновых нанолент с дефектами.

ВКР состоит из введения, 3-х глав, заключения и списка используемой литературы, содержащего 47 ссылок. Общий объём ВКР составляет 36 страниц.

Названия разделов:

1. Синтез гофрированных нанолент;

2. Методы расчёта;

3. Анализ электронных свойств гофрированных графеновых нанолент типа zigzag.

ВКР носит теоретический и обзорный характер, предметом обзора являются статьи отечественных и зарубежных авторов.

#### Основное содержание работы.

В первой главе данной работы, в ходе обзора нескольких статей, описывается классификация гофрированных нанолент.

Графен является двумерным кристаллом, состоящим из одиночного слоя атомов углерода, собранных в гексагональную решётку «пчелиные соты».

**Графеновые наночастицы** — нанообъекты, размеры которого в разных направлениях различаются не более чем в 3 раза и не превышают 100 нм (рис.1).

Графеновые наноленты — это одномерные углеродные структуры, получаемые в результате " разрезания" графенового листа на полосы нанометровой ширины (рис.1).



Графеновые наноленты делятся на два типа: zigzag- наноленты и armchair- наноленты (рис.2). Название наноленты zigzag или armchair определяется из следующего принципа: если удлинялся zigzag край ленты, а ширина оставалась неизменной, то нанолента называется zigzag-нанолентой, в противном случае лента называется armchair-нанолентой [29].



а ширина оставалась неизменной) [30]

Гофрирование [25] оказывают значительное влияние на электронные и магнитные свойства графеновых нанолент, поэтому наиболее подробно рассмотренны работы по исследованию электронных свойств гофрированных нанолент.

Для исследования наноструктур широко применяется компьютерное моделирование и методы численных расчетов. Вторая глава содержит описание этих методов и их сравнение.

Выделяют основные классы методов для исследования наноструктур [34]:

- Методы ab initio
- Метод функционала плотности
- Полуэмпирические методы
- Эмпирические методы

Ab initio методы – квантово-химические методы, основанные на приближенном решение уравнения Шредингера. Методы ab initio - это методы квантовой химии, не включающие параметры, полученные опытным

путем. Эти методы позволяют исследовать систему с помощью многоэлектронной волновой функции. Метод рассчитывает энергетические уровни и волновые функции атомов, молекул, кристаллов. К методам ab initio относятся метод Хартри-Фока, метод конфигурационного взаимодействия, теория возмущений и т.д. [35].

При применении методов ab initio приходится находить множество решений большого количества уравнений. В то время как появились сообщения о расчете больших молекул [36], данные методы вообще ограничиваются структурами, содержащими не более 100 атомов, т.к. для компьютерного расчета требуется очень много времени при современных вычислительных мощностях, а также большой объем памяти для хранения промежуточных результатов вычислений. В связи с этим были развиты методы расчета молекулярных структур и свойств, позволяющие обойти эти ограничения, упрощая отдельные части вычислений. Эта группа методов называется полуэмпирическими квантово-механическими методами.

В настоящее время наиболее распространено применение неэмпирических методов для малых молекул, для которых эти методы позволяют получить практически полное описание с точностью, близкой к эксперименту.

Метод функционала плотности также, как и метод ab initio является квантово-химическим методом. В основе метода функционала плотности лежит модель Томаса – Ферми, в рамках которой расчет энергии атома представляет собой сумму его кинетической энергии, которая представляется в виде функционала электронной плотности, и потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядром и друг с другом, так же представленные через электронную плотность. Модель Томаса – Ферми в дальнейшем была уточнена Полем Дираком, добавлением функционалу энергии слагаемого, описывающего обменное взаимодействие, представленного в виде функционала электронной плотности. Однако, надежное теоретическое

обоснование было введено теоремами Кона – Хоэнберга. Эти теоремы устанавливают точное соответствия между электронной плотностью, внешним потенциалом и волновой функцией.

Полуэмпирические методы, в свою очередь, заключаются в решение Шредингера уравнения для атомов И молекул с использованием приближений и упрощений. Использование экспериментальных данных позволяет сократить время решения за счет исключения вычисления некоторых величин И замены параметры, полученные ИХ на экспериментальным путем (например, потенциал ионизации атомов, энергетическая щель, расстояние между атомами), либо на подобранных с помощью расчетов данные таким образом, чтобы результаты хорошо согласовывались с экспериментальными данными.

В то время как полуэмпирические методы являются менее ресурсоемкими по сравнению с методами ab initio, они все еще остаются достаточно требовательными к мощности вычислительной техники. Вообще, главный недостаток этой группы методов состоит в том, что его применение ограничено системами, для которых могут быть экспериментально получены необходимые для расчета параметры.

К эмпирическим методам относится метод молекулярной механики, позволяющий находить геометрические характеристики И энергии Метод молекулярной механики использует многоатомных систем. классическую механику для описания модели. В рамках метода полная энергия исследуемой структуры представляется суммой энергетических термов: энергии химического взаимодействия, энергия валентных углов, энергия взаимодействия, торсионного энергия ван-дер-вальсового взаимодействия, энергия электростатического взаимодействия.

В отличие от квантово-механических методов, молекулярная механика используется для расчета свойств, не зависящих от электронных эффектов. Так как вычисления не требуют больших ресурсов, то с помощью

молекулярной механики могут быть рассчитаны молекулы, содержащие тысячи атомов. Однако в отличие от ab initio методов, молекулярная механика полностью полагается на экспериментально полученные параметры, так что результаты исследований новых молекулярных структур могут вводить в заблуждение.

Одним из параметров определяющих электронную проводимость наноструктур является плотность состояний (density of states DOS).

В проводятся работы настоящее время по теоретическому исследованию свойств графеновых нанолент типа zigzag с равномерной гофрированностью. Среди многообразия работ в рамках данной темы выделяется направление научных исследований электронной проводимости графеновых нанолент типа zigzag с равномерной гофрированностью [29,40-45]. Гофрированный графен с различными длинами волн строится путем графеновой сжатия плоской наноленты под действием различных механических сил, которые могут быть экспериментально реализованы [39].

Исследование электронной структуры графеновых нанолент типа zigzag с равномерной гофрированностью нанолент на примере наноленты содержащей 550 атомов, длиной 65Å и шириной 19.88Å проводилось в работе [29]. Исследования электронных свойств осуществлялись квантовохимическим методом сильной связи. В Таблице 1 представлены потенциал ионизации IP и энергетический интервал Egap для лент обоих типов разных длин при одинаковой степени сжатия 98%. В скобках приведены значения IP и Egap недеформированной наноленты.

#### Таблица 1.

Количество полуволн	Длина наноленты, Å	ІР,эВ	Egap, <b>ə</b> B
Лента zigzag шириной 19,88 Å			
2	65	6,82 (6,84)	0,04 (0,02)
3	165,18	6,79 (6,81)	0,01(0,01)
4	198,7	6,80 (6,81)	0,01(0,01)

Некоторые параметры электронной структуры нанолент [29]

Из приведенных данных видно, что интервал HOMO-LUMO остается очень малым для всех рассмотренных типов нанолент, а потенциал ионизации при сжатии наноленты на 2% уменьшается.

В работе [29] показано, что для нанолент zigzag при сжатии плотность электронных состояний вблизи интервала [-6 эВ; -5эВ] практически не меняется (рис.3). Вертикальной линией отмечен уровень НОМО (последний заполненный электронами энергетический уровень в энергетическом спектре).

В работе [29] исследовано изменение потенциала ионизации коротких гофрированных нанолент типа zigzag (длина 66.5 Å) [29]. Для графеновых нанолент типа zigzag потенциал ионизации ведет себя немонотонно (рис.4). При переходе от плоской конфигурации к двум изгибам он снижается, а при выходе на одну дугу возрастает. Для деформированного двухслойного графена типа zigzag плотность электронных состояний вблизи энергетической щели практически не меняется по сравнению с плоским двухслойным графеном.



В работе [40] квантово-химическим методом ab initio исследовались транспортные свойства гофрированных zigzag графеновых нанолент. Объектом исследования являются плоская графеновая нанолента типа zigzag, гофрированность в виде ступеньки и дуги (волны) (рис.5). Ширина наноленты, имеющая край armchair, определялась количеством атомов углерода (N=7), лежащих на одной прямой вдоль края armchair. Для нанолент типа zigzag, имеющих гофрированность в виде ступеньки, высота ступеньки составляла 14 Å, а для нанолент типа zigzag, имеющих гофрированность в виде дуги (волны), амплитуда дуги (волны) составляла 17 Å. В результате исследований установлено, что вольт-амперная характеристика для гофрированной графеновой наноленты практически совпадает с вольтамперной характеристикой плоского графеновой наноленты (рис.6). Этот результат согласуется с результатами работы [29], что подтверждается малым изменением значения потенциала ионизации. Исследования осуществлялись в программном пакете VASP с использованием квантовохимического метода ab initio.





В работе [42] исследуются электронные и магнитные свойства гофрированных zigzag графеновых нанолент с дефектами (рис.7). Зонная

структура гофрированных zigzag графеновых нанолент с дефектами представлена на рис. 8. В работе [42] показано, что величина гофрирования в zigzag графеновых нанолентах с дефектами определяется состоянием наноленты (находится ли структура в антиферромагнитном состоянии или в немагнитном состоянии). Соответственно, в этой структуре также может быть реализован взаимный переход между полупроводником и металлом. Более того, для полупроводников энергетическая щель проявляет колебания по мере увеличения величины гофрирования. Эти результаты являются важными для изготовления гибких устройств.





Рисунок 8 - Zigzag наноленты с дефектами и соответствующие плотности состояний зарядов вблизи уровня Ферми для гофрированности на (a) 164°, (b) 163°, (c) 142°, (d) 141°. Красная сплошная линия и синяя пунктирная линия обозначают спин-вверх и спиновые поддиапазоны соответственно. Уровень Ферми обозначается горизонтальным зеленым пунктиром [42].

В этой работе [43] исследуются физические и химические свойства zigzag гофрированных графеновых нанолент с использованием метода ab initio. Объектом гофрированный исследования является графен С периодической волной вдоль одного направления (рис.9). Длина волны гофрированной графеновой наноленты составляет около 25 Å при сжатии на 50%. Расчетные зонные структуры показывают, что конус Дирака практически не изменяется с увеличением сжатия (рис.10), что указывает на то, что они полуметаллические. Проводимость гофрированного графена уменьшается из-за перераспределения заряда при высокой степени сжатия. В работе [43] рассчитаны обменные энергии (разность энергий между антиферромагнитными и ферромагнитные состояниями) также показывают, что zigzag наноленты без сжатия являются антиферромагнитными, потому что энергии антиферромагнитных состояний ниже, чем у ферромагнитных состояний. В то же время в работе [43] найдено, что антиферромагнитное основное состояние асимметричных zigzag нанолент более устойчиво, чем симметричное, из-за относительно более высокой обменной энергии (рис. 11).

![](_page_13_Figure_1.jpeg)

![](_page_13_Figure_2.jpeg)

![](_page_14_Figure_0.jpeg)

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По итогам выполнения данной работы было установлено, что проводимость графеновых нанолент zigzag и armchair при деформации сжатия остается близкой к проводимости металлов.

Деформация сжатия не оказывает существенного влияния на плотность электронных состояний графеновых нанолент zigzag.

При увеличении прикладываемого напряжения внешнего электрического поля ток резко уменьшается в гофрированной наноленте типа zigzag.

Экспериментально установлено, что в графеновых нанолентах типа zigzag с дефектами в узкой полосе вдоль линии дефекта, создается идеальная одномерная металлическая область ("нить"), встроенная в идеальный графеновый лист. В связи с тем, такие наноленты с дефектами могут создавать строительные блоки для атомно-масштабной углеродной электроники. Предполагается, что графеновые наноленты необходимо применять в качестве элементной базы в устройствах, в которых не требуется изменение проводящих свойств на протяжении всего времени работы устройства даже при значительных деформациях.

#### Библиографические ссылки:

[1] Kang, J.S. High-performance carbon-nanotube-based cold cathode electron beam with low thermal-expansion gate electrode / J. S. Kang, J. H. Hong, K. C. Park // J. Vac. Sci. Technol. B. V. 36(2). 2018. P. 1-8.

[2] High current density and low emission field of carbon nanotube array microbundle / Q. Zhang [et al.] // Appl. Phys. Lett. V. 112. 2018. P. 013101-1 – 013101-5.

[3] Highly improved field emission from vertical graphene/carbon nanotube composites / J.-H. Deng [et al.] // Journal of Alloys and Compounds. 2017. V. 723.
P. 75-83.

[4] Bocharov, G. S. Theory of Carbon Nanotube (CNT)-Based ElectronField Emitters/ G. S. Bocharov, A. V. Eletskii // Nanomaterials 2013. V. 3. P. 393-442.

[5] Carbon nanotube based 3-dimensional hierarchicalfield emitter structure/ G.Mittal [et al.] //RSC Adv. 2015. V. 5. P. 21487–21494.

[6] Capacity improvement of the carbon-based electrochemical capacitor by zigzag-edge introduced graphene / Naoki Tamura [et al.] // Applied Surface Science. 2018. V. 428. P. 986-989.

[7] Electronic and optical properties of strained graphene and other strained 2D materials: a review / G. G Naumis [et al.] // Rep. Prog. Phys. 2017. V. 80. P. 096501-1 – 096564.

[8] Effect of ribbon width on electrical transport properties of graphene nanoribbons / K. Bang [et al.] // Nano Convergence. 2018. V. 5 I. 7. P. 1-7.

[9] Transition Metal Sulfides Based on Graphene for Electrochemical Energy Storage / P. Geng [et al.] // Adv. Energy Mater. 2018. P. 1703259-1–1703285-26.

[10] Han, G.-R. An analytic investigation for the edge effect on mechanical properties of graphene Nanoribbons / G.-R. Han, J.-S. Sun, J.-W. Jiang // Journal of Applied Physics. 2018. V. 123. P.064301-1 – 064301-5.

[11] Yoneyama, K. Mechanical properties of graphene nanoribbons under uniaxial tensile strain / K. Yoneyama, A. Yamanaka, S. Okada // Japanese Journal of Applied Physics. 2018. V. 57. P.035101.

[12] Implementation of graphene as hole transport electrode in flexible CIGSsolar cells fabricated on Cu foil/ J. K. Sima [et al.] //Solar Energy. 2018. V. 162. P. 357–363.

[13] Amin, K. R. High-Performance Sensors Based on Resistance Fluctuations of Single-Layer-Graphene Transistors/ K. R. Amin, A. Bid //ACS Appl. Mater. Interfaces. 2015. V. 7. P. 19825–19830.

[14] Heerema, S. J. Graphene nanodevices for DNA sequencing /S. J. Heerema, C. Dekker// Nature Nanotechnology. 2016. V. 11. I. 2. P. 127–136.

[15] Highly Sensitive and Selective Sensor Chips with Graphene-Oxide Linking Layer / Y. V. Stebunov [et al.] // ACS Applied Materials & Interfaces. 2015. V. 7.
I. 39 P. 21727–21734.

[16] Илясов В. В. Ab initio изучение транспортных свойств нанолент графена типа зигзаг для различных спиновых конфигураций. Электронный журнал. 2015, N 2. C. 76. http://pti-nt.ru/ru/issue/publication/110-ab-initio-izuchenietransportnyh-svoiystv-nanolent-grafena-tipa-zigzag-dlya-razlichnyh-spinovyhkonfiguraciiy

[17] Chen J. Tuning the magnetic moments in zigzag nanoribbons: Effects of metal substrates / J. Chen, M. Vanin, Y.Hu, H. Guo // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 86. P. 075146-1 – 075146-6.

[18] Dutta, S. Intrinsic Half-Metallicity in Modified Graphene Nanoribbons /S.
Dutta, A.K. Manna, S.K. Pati// Phys. Rev. Lett. 2009. V. 102. P. 96601-1 – 96601-4.

[19] Rectifying behaviors induced by BN-doping in trigonal graphene with zigzag edges / X. Q. Deng [et al.] //Appl. Phys. Lett. 2012. V. 100 P. 63107-1 – 63107-4.

[20] Hu, X. Gold-embedded zigzag graphene nanoribbons as spin gapless semiconductors/X. Hu, W. Zhang, L. Sun, A.V. Krasheninnikov //Phys. Rev. 2012.
B. 86 P. 195418-1 – 195418-7..

[21] Semiconductor to Metal to Half-Metal Transition in Pt-Embedded Zigzag Graphene Nanoribbons/ X. Hu [et al.]// J. Phys. Chem. C. 2014. V. 118. P. 16133-1-16133-23.

[22] The role of defects and doping in 2D graphene sheets and 1D nanoribbons/ H. Terrones [et al.]// Rep. Prog. Phys. 2012. V. 75 P. 62501-1-62501-30.

[23] Tailoring properties of grapheme with vacancies/ A.V. Pokropivny [et al.]// Phys. Status Solidi. 2014. V. 251. P. 555-558.

[24] Defects in Graphene: Generation, Healing, and Their Effects on the Properties of Graphene: A Review/L. Liu [et al.]// J. Mater. Sci. Technol. 2015. V. 31. P. 599-606.

[25] Zwierzycki, M. Transport properties of rippled graphene / M. Zwierzycki//J. Phys. Condens. Matter. 2014. V.26, №13. P 1246-1249.

[26] Глухова, О. Е. Эмпирическое моделирование продольного растяжения и сжатия графеновых наночастиц и нанолент / О. Е. Глухова, А. С. Колесникова // Физика твердого тела. 2011. Т.53. В.9. С. 1850-1855.

[27] Voltage-dependent conductance of a single graphene nanoribbon / M. Koch [et al.] // Nature nanotechnology. 2012. V. 7. P. 713–717.

[28] Гричук, Е. С. Транспорт электронов и спинов в адиабатическом квантовом насосе на основе графеновых нанолент / Е. С. Гричук, Э. А. Маныкин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2011. Т. 140, вып. 4 (10). С. 801-813.;

[29] Glukhova, O. Influence of the curvature of deformed graphene nanoribbons on their electronic and adsorptive properties: theoretical investigation based on the analysis of the local stress field for an atomic grid/ O Glukhova, M. Slepchenkov // Nanoscale. 2012. V. 4. P. 3335–3344.

[30] Баимова, Ю. А. Структура и физические свойства наноматериалов на основе графена : диссертация на соискание ученой степени доктора физикоматематических наук : 01.04.07 : защищена 03.11.2016 / Юлия Айдаровна Баимова; науч. рук. С. В. Дмитриев; Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, 2016. 308 с.

[31] Wrinkled, wavelength-tunable graphene-based surface topographies for directing cell alignment and morphology. / Z.Wang [et al.]// Carbon 2016. V. 97. P. 14- 24.

[32] Fujita, D. Nanoscale synthesis and characterization of grapheme-based objects/ D. Fujita// Sci. Technol. Adv. Mater. 2011. V. 12. № 4. P. 044611 - 044621.

[33] Bao, W. Controlled ripple texturing of suspended grapheme and ultrathin graphite membranes/ W. Bao, F. Miao, Z. Chen, H. Zhang, W. Jang, C. Dames, C. N. Lau //Nature Nanotechnology. 2009. V. 4. P.562–566.

[34] Глухова, О. Е. Теоретические методы исследования наноструктур. / О. Е. Глухова // Вестник СамГУ. Естественнонаучная серия. 2012. №9. С. 88-99.

[35] Хурсан С. Л. "Квантовая механика и квантовая химия. Конспекты лекций" – Уфа: ЧП Раянов, 2005.– 164 с

[36] Ab Initio Calculations on Large Molecules: Methodology and Applications, Jerzy Cioslowski, in Reviews in Computational Chemistry, VCH Publishers, 1993, vol. 4, Kenny B. Lipkowitz and Donald B. Boyd (editors), pages 1-33.

[37] Molecular Mechanics, Norman L. Allinger and U. Burkert, ACS Monograph177, Washington, DC, American Chemical Society, 1982.

[38] Глухова, О. Е. Тонкие углеродные тубулярные нанокластеры в однородном электростатическом поле / О. Е. Глухова // Нано- и микроситемная техника. 2008. № 7. С.8-12.

[39] Super-elastic graphene ripples for flexible strain sensors. / Y. Wang, [et.al]// ACS Nano 2011. V. 5. P. 3645-3650.

[40] Transport properties of corrugated graphene nanoribbons / Z. Yu [et al.] // Applied Physics Letters. 2010. V. 96. P. 173101-1 – 173101-3.

[41] Hu, X. The Effect of Out-of-Plane Strain on the Electronic Properties of Zigzag Graphene Nanoribbons/ X. Hu, X. Xie, L. Sun // 2013 8th IEEE International Conference. V. 13679118. P.1-4.

[42] Tana X.D. The electronic and magnetic properties of corrugated zigzag graphene nanoribbons with divacancy defects/ X.D.Tana, X.P. Liaoa, L. Suna //Physica E 2017. V. 85. P. 302–307

[43] Pan, H. Ultra-Flexibility and Unusual Electronic, Magnetic and Chemical Properties of Waved Graphenes and Nanoribbons / Hui Pan, Bin Chen // Scientific reports. 2014. V. 4. № 4198. P. 1-8

[44] Pan, H. Waved graphene: Unique structure for the adsorption of small molecules/ H. Pan //Materials Chemistry and Physics. 2017. V. 189. P. 111-117.

[45] Rippling and the external electric field on conductance in corrugated graphene nanoribbons molecular device/ N. Xu [et al.] // Physica B: Condensed Matter. 2011. V. 406. P.756–759.

[46] Lahiri J. An extended defect in graphene as a metallic wire/ J. Lahiri [et al.] // Nature nanotechnology 2010. V 5 N. 5. P. 326-329.

[47] Magda G. Z. Room-temperature magnetic order on zigzag edges of narrow graphene nanoribbons / G. Z. Magda [et al.] // Nature2014 V. 514. P. 608–611