



DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2017.6.6>

УДК 544.22, 544.034

ББК 24.5

ВЛИЯНИЕ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОГО СТРОЕНИЯ НА ТУННЕЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Наталья Николаевна Конобеева

Кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры информационных систем и компьютерного моделирования,
Волгоградский государственный университет
yana_nn@volsu.ru, infomod@volsu.ru
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

Аннотация. В данной работе исследуется воздействие атомно-молекулярного строения графеновых нанолент на их свойства, а также поведение данных материалов в экстремальных условиях – в электрических и магнитных полях.

Ключевые слова: перенос электрона, атомно-молекулярное строение, графеновые наноленты, примеси, дефекты.

Физико-химические свойства твердых тел всегда привлекали серьезное внимание исследователей. Последние двадцать лет область интересов ученых активно смещается в сторону физики полупроводниковых низкоразмерных структур (наноструктур), чему способствует стремительное развитие технологий, открытие новых материалов, способных заменить существующие аналоги. Ограниченное движение заряда в наноструктурах приводит к размерному квантованию, которое вносит существенные изменения в энергетический спектр носителей заряда, фононов, квазичастиц, и способствует появлению новых явлений и физико-химических свойств вещества. Большое количество исследований связано с изучением графеноподобных материалов, обладающих уникальным набором свойств, который делает их привлекательными с точки зрения современной микро-, нано- и оптоэлектроники (создание транзисторов, нанодиодов, элементов памяти, оптические переключатели и др.).

Одним из главных достоинств наноструктур является то, что изменение конфигурации и геометрических размеров влияет на свойства системы и позволяет управлять этими свойствами [9]. Таким образом, мы можем модифицировать энергетический спектр носителей заряда, тем самым изменяя физико-химические свойства системы.

Целью настоящей работы является исследование сенсорных характеристик углеродных структур на основе туннельного эффекта, в том числе в случае искривленного графена.

1. Туннельные характеристики искривленных графеновых нанолент

Отсутствие щели в зонной структуре графена затрудняет создание приборов на его основе. С этой точки зрения более привлекательными являются графеновые ленты, которые из-за ограниченности в пространстве в одном измерении имеют квантованный энергетический спектр электронов в данном направлении, что приводит к образованию энергетической щели. В то же время

плоская структура графеновых листов неустойчива [12; 13], поэтому важно изучать различные искривленные модификации [10; 21].

Свойства электронов в графеновой наноленте в длинноволновом приближении в окрестности дираковской точки будем описывать на основании обобщения уравнения Дирака для искривленного пространства времени [32]:

$$\gamma^\mu (\partial_\mu - \Omega_\mu) \Psi = 0. \quad (1)$$

Здесь и далее по повторяющимся индексам, если не оговорено обратное, подразумевается суммирование; ∂_μ – ковариантная производная по координате μ ; Ω_μ – компонента спиновой связности; $\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \varphi \end{pmatrix}$ – волновая функция (вектор-столбец), состоящая из волновых функций, описывающих электроны различных подрешеток графена в окрестности дираковской точки K .

Как известно из литературы [1; 32], в случае, если задан метрический тензор:

$$\begin{aligned} ds^2 &= g_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta \\ g_{\alpha\beta} g^{\beta\gamma} &= \delta_\alpha^\gamma \end{aligned} \quad (2)$$

(δ_α^γ – дельта-символ Кронекера), можно определить поля реперы:

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta} &= e_\alpha^a e_\beta^b \eta_{ab} \\ g^{\alpha\beta} &= e_a^\alpha e_b^\beta \eta^{ab}, \\ \eta_{ab} \eta^{bc} &= \delta_a^c \end{aligned} \quad (3)$$

где для двумерной изогнутой поверхности $\eta_{ab} = \text{diag}(1, -1, -1)$. Тогда:

$$\begin{aligned} \Omega_\mu &= \frac{1}{4} \gamma_a \gamma_b e_\lambda^a g^{\lambda\sigma} (\partial_\mu e_\sigma^b - \Gamma_{\mu\sigma}^\lambda e_\lambda^b) \\ \Gamma_{\mu\sigma}^\lambda &= \frac{1}{2} g^{\lambda\nu} (g_{\sigma\nu, \mu} + g_{\nu\mu, \sigma} - g_{\mu\sigma, \nu}) . \\ \gamma^\mu &= e_a^\mu \gamma_a \end{aligned} \quad (4)$$

Вычисляя далее компоненты спиновой связности для определенной искривленной наноленты и подставляя их в уравнение (1), получаем первую поправку к спектру под действием возмущения.

На основании уточненного спектра для искривленной графеновой наноленты рассчитывался туннельный ток для контактов с металлом и квантовыми точками. В рамках теории Кубо плотность тока задается формулой [5]:

$$\begin{aligned} J &= 4\pi e |T|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE v_A(E + eU) v_B(E) (n_f(E) - n_f(E + eU)) \\ v_A(E) &= \sum_p \delta(E - E_p^A); v_B(E) = \sum_q \delta(E - E_q^B) \end{aligned} \quad (5)$$

где $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака; $v_{A(B)}(E)$ – туннельная плотность состояний; $n_f(E)$ – равновесное число фермионов с энергией E . Здесь и далее используется приближение «шероховатого» контакта: $T_{pq} = T$.

В работах [16; 17] показано, что для всех рассмотренных контактов графеновых нанолент наблюдается асимметричность поведения тока, определяемая прикладываемым к контакту напряжением. Прямой участок на вольтамперной характеристике говорит об особенностях электронного строения металла, квантовых точек и графеновых нанолент (аналогичное поведение наблюдается для диодов Ганна). Также изучался случай напряженного графена, который постоянно находится под действием внешней переменной механической силы, действие этой силы приводит к периодическому изменению расстояния между атомами графена. Используя аналогию с искривленным пространством временем, можно сказать, что такая сила приводит к периодическому изменению пространственных интервалов, что, как хорошо известно, описывается в рамках нестационарной модели Фридмана. Также прослеживается асимметричность тока в зависимости от прикладываемого напряжения к контакту, что кроме электронного строения контактирующих материалов обуславливается процессами рекомбинации носителей в переходе, которые при положительном напряжении преобладают над процессами тепловой генерации (аналогичное поведение наблюдается для германиевых, и особенно для кремниевых диодов) [28]. В работе [25] показано, что в искривленном графене имеет место эффект *ZB* (дрожащее движение). Получено, что геометрия образца, в котором происходит распространение волнового пакета, явно влияет на эффект *Zitterbewegung* и определяет максимально значение плотности тока.

2. Туннельные характеристики графеновых структур с примесями

Изучено влияние многоуровневой примеси на туннельный в наноструктурах. Под многоуровневой примесью понимается примесь с несколькими уровнями, которые лежат выше уровня Ферми в графеновой наноленте [27]. Данное направление привлекает все большее внимание исследователей, поскольку такие примеси способны оказывать существенное влияние на электронную структуру вещества и тем самым вызывать изменения свойств полупроводников [26].

Рассмотрим влияние многоуровневой примеси на туннельный и баллистический ток в графеновой наноленте.

Матричная форма гамильтониана рассматриваемой задачи в рамках нашей модели имеет вид:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & f & \alpha_1 & \beta_1 & \gamma_1 & \Delta_1 \\ f^* & 0 & \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & \Delta_2 \\ \alpha_1^* & \alpha_2^* & t_1 & 0 & r & 0 \\ \beta_1^* & \beta_2^* & 0 & t_2 & 0 & 0 \\ \gamma_1^* & \gamma_2^* & r^* & 0 & t_3 & 0 \\ \Delta_1^* & \Delta_2^* & 0 & 0 & 0 & t_4 \end{bmatrix} \quad (6)$$

где r – интеграл переноса электрона между 1-м и 3-м уровнями примеси, остальные обозначения – как в предыдущем пункте.

Гамильтониан (6) можно переписать, используя структуру блочных матриц:

$$H \equiv \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix}, H_{11} = \begin{bmatrix} 0 & f & \alpha_1 & \beta_1 \\ f^* & 0 & \alpha_2 & \beta_2 \\ \alpha_1^* & \alpha_2^* & t_1 & 0 \\ \beta_1^* & \beta_2^* & 0 & t_2 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$H_{12} = \begin{bmatrix} \gamma_1 & \Delta_1 \\ \gamma_2 & \Delta_2 \\ r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, H_{21} = \begin{bmatrix} \gamma_1^* & \Delta_1^* \\ \gamma_2^* & \Delta_2^* \\ r^* & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^T, H_{22} = \begin{bmatrix} t_3 & 0 \\ 0 & t_4 \end{bmatrix}.$$

Переходя далее к длинноволновому приближению, решаем задачу на собственные значения и получаем спектр графеновой ленты с многоуровневой примесью.

В работе [2] рассматривалась нанолента зигзаг-типа с 11 атомами углерода в ширину. Соответствующее значение импульса $p_y = \frac{\sqrt{3}\pi s}{a}$ ($s = 1, 2 \dots m$, a – длина межатомной связи) бралось минимальным, поскольку рассматривался случай низких температур и вклад состояний с большим импульсом обрезан вследствие распределения Ферми. Построены вольтамперные характеристики контакта с металлом, демонстрирующие существенное влияние интеграла перескока между примесными уровнями, а также энергий примеси на туннельный ток в рассматриваемой наноленте. Смещение уровней энергии примеси оказывает существенное влияние на ВАХ контакта, при этом даже исчезает участок с ОДП. Это связано с тем, что примесные уровни оказываются близко к уровням графеновой наноленты. Таким образом, становится возможным определить, какая именно примесь адсорбировалась на ленту.

В работе [24] изучена чувствительность графеновых нанолент, флейков к примесям, основываясь на туннельном контакте данных наноматериалов с металлом и квантовыми точками. Используемые в современных экспериментах образцы графена получают путем микромеханического скалывания с поверхности графита, их называют флейками, хлопьями или чешуйками. Отметим, что подобный способ получения снижает стоимость образцов. В настоящей работе будем исследовать не только электрофизические свойства флейков, но и графеновых нанолент, которые активно изучаются в последние годы как с теоретической [6; 18; 20], так и с практической точек зрения [19; 31]. Также будем исследовать замкнутую графеновую наноленту, так называемое луковое кольцо. Отметим, что в этом случае происходит квантование из-за требования периодичности волновой функции по окружности «лукового кольца».

Хотя сам метод измерения туннельного тока и имеет ряд недостатков (расстояние между образцами определяет ток, степень «шероховатости» образцов и пр.), на наш взгляд, он имеет то преимущество, что позволяет оптимизировать выбор второго образца для достижения наибольшей чувствительности. Так же немаловажное значение имеет и тот факт, что различные типы контактов могут оказаться более оптимальными для определения различных типов примесей.

Гамильтониан для электронов графеновой наноленты можем записать в виде:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} C_i^+ C_j + c.c., \quad (8)$$

где $t = 2,7$ эВ; $C_i^+ C_j$ – операторы рождения и уничтожения электронов на узле i или j , суммирование идет по ближайшим соседям. Двумерный массив атомов углерода перенумеровывается для дальнейшего удобства вычислений в одномерный. Способ такой нумерации для флейка представлен на рисунке 1.

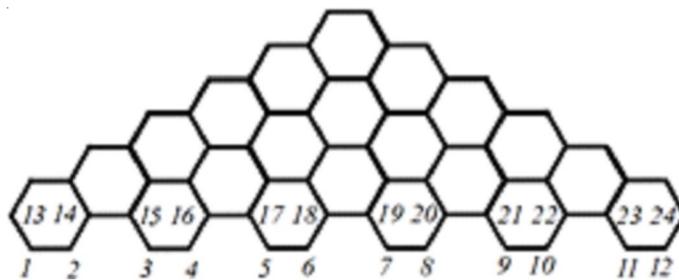


Рис. 1. Способ одномерного упорядочивания атомов углерода

В случае если молекула примеси садится на узел k , то гамильтониан (8) переписывается в виде:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} C_i^+ C_j + \sum_m (V_m C_k^+ C_m + C_m^+ C_m) + c.c., \quad (9)$$

где e_m описывают энергетические уровни примеси; V_m – интегралы перескока между уровнями примеси и графена.

Далее гамильтониан (9) численно диагонализировался. Численная диагонализация проводилась путем нахождения собственных значений матрицы гамильтониана (8) в узельном представлении.

В результате проведенного исследования показано, что данная система оказывается чувствительной не только к нескольким, но и к одной молекуле. Это важно для практических приложений с точки зрения определения наличия примесей разной концентрации, даже очень малой [24]. Имеет место влияние размеров флейка на величину туннельного тока в контакте с металлом и квантовыми точками. При этом чем больше размер чешуйки, тем сильнее отличается зависимость туннельного тока от напряжения по сравнению с беспримесным случаем.

Влияние постоянного электрического поля на проводимость графеновых нанолент демонстрируется в работе [3]. Отметим, что возможность контролировать электронные свойства материала с помощью приложения внешнего поля лежит в основе современной электроники. Так, в работах [15; 30] показано, что с помощью приложенного электрического поля можно управлять свойствами монокристаллических пленок графита.

Геометрия задачи представлена на рисунке 2 для наноленты $N \times M$.

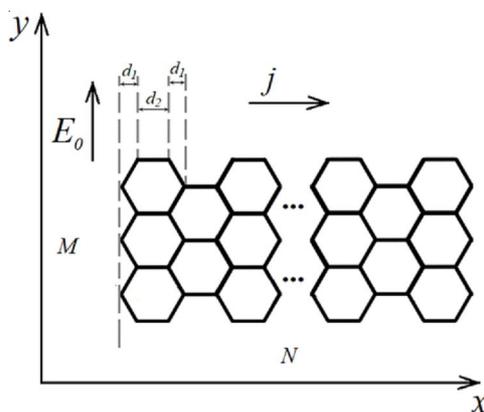


Рис. 2. Геометрия задачи

Расстояния d_1, d_2 могут быть вычислены с помощью расстояния между соседними узлами для графена: $b = 0,142$ нм. Введение постоянного поля E_0 позволяет переписать гамильтониан (8) в виде:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} C_i^+ C_j + \sum_l \Phi_l C_l^+ C_l + c.c., \tag{10}$$

где Φ_l – описывает потенциал запирающего электрического поля на узле l .

Далее на основе собственных значений матрицы нами рассчитывалась плотность состояний для графена ν_A путем прямого подсчета количества энергетических уровней в заданном интервале энергий. Плотность тока контакта вычислялась, как и ранее, в рамках теории Кубо.

Введение запирающего электрического поля наиболее существенно влияет на форму ВАХ для контакта с металлом, что проявляется в увеличении тока в отрицательной области по напряжению.

В работе [22] показано, что введение запирающего электрического поля позволяет гораздо лучше «чувствовать» присутствие даже одной примесной молекулы на графеновой наноленте.

Также было проведено исследование влияния примеси на туннельный ток контакта полиацетилена с квантовыми точками и металлом [4]. Полученные результаты позволяют сделать вывод о возможности применения данной полимерной структуры при обнаружении примесных

молекул как самостоятельно, так и в качестве подложки, например, для графена, который себя уже хорошо зарекомендовал как высокочувствительный сенсор.

3. Влияние дефектов на проводимость графеновых нанолент

Как известно, практически не существует кристаллов, все атомы которых занимали бы положение с минимальной энергией. Выделяют два типа отклонений от идеальных позиций: постоянные и временные. В данной работе мы будем изучать постоянные дефекты, и в частности точечные [8].

Подобные дефекты в кристаллической решетке могут быть созданы намеренно или появляться случайным образом во время синтеза. Такие топологические дефекты за счет перегруппировки межатомных связей оказывают большое влияние на свойства твердых тел. Несмотря на то что структурные дефекты могут ухудшить характеристики устройств на основе графена, зачастую такие отклонения от совершенства могут оказаться полезными в некоторых приложениях, поскольку позволяют достигать новых функциональных возможностей.

В графене, который представляет собой кристалл с гексагональной решеткой, также наблюдаются такие дефекты. Наиболее простой из них – дефект Стоуна – Уэльса [14; 29], который возникает при повороте одной из связей С-С на угол 90° , в результате чего четыре шестиугольных ячейки трансформируются в два пятиугольника и два семиугольника. Такие дефекты являются центрами предпочтительной адсорбции некоторых химических элементов [7; 11]. Это свойство может оказаться полезным при определении примеси и использовании графена в качестве высокочувствительного детектора этих газов.

В работе [23] помимо дефекта Стоуна – Уэльса изучался другой дефект – вакансионного типа при помощи туннельного эффекта, возникающего в контакте графеновой наноленты/флейки с металлом и квантовыми точками.

В рамках предложенного подхода система оказывается способной улавливать присутствие дефектов в ней. Введение дефектов существенно изменяет вольтамперную характеристику контакта как в случае с металлом, так и квантовыми точками. При этом расположение дефекта и их количество (случай с вакансией) не столь существенно влияет на ВАХ. Также показано, что влияние обоих типов дефектов в случае контакта графеновой наноленты с квантовыми точками проявляется слабее, чем для контакта с металлом. И присутствие дефекта как Стоуна – Уэльса, так и типа вакансии легче обнаружить в графеновом флейке, чем в наноленте.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Биррел, Н. Квантованные поля в искривленном пространстве-времени / Н. Биррел, П. Девис. – М. : Мир, 1984. – 356 с.
2. Конобеева, Н. Н. Влияние многоуровневой примеси на туннельный и баллистический ток в графеновой наноленте / Н. Н. Конобеева, М. Б. Белоненко // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, № 1. – С. 104–108.
3. Конобеева, Н. Н. Влияние постоянного электрического поля на проводимость графеновых нанолент / Н. Н. Конобеева, М. Б. Белоненко // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, № 9. – С. 144–148.
4. Конобеева, Н. Н. Моделирование влияния примеси на туннельный ток контакта полимера с квантовыми точками и металлом / Н. Н. Конобеева // Математическая физика и компьютерное моделирование. – 2017. – Т. 20, № 5. – С. 89–93. – DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2017.5.9>.
5. Левитов, Л. С. Функции Грина. Задачи с решениями / Л. С. Левитов, А. В. Шитов. – М. : Физматлит, 2003. – 392 с.
6. Areshkin, D. A. Ballistic Transport in Graphene Nanostrips in the Presence of Disorder: Importance of Edge Effects / D. A. Areshkin, D. Gunlycke, C. T. White // Nano Lett. – 2007. – Vol. 7. – P. 204–210. – DOI: 10.1021/nl062132h.
7. Atomic chemisorption on graphene with Stone – Thrower – Wales defects / L. Chen, H. Hu, Yu. Quyang, H. Z. Pan, Y. Y. Sun, F. Liu // Carbon. – 2011. – Vol. 49. – P. 3356–3361. – DOI: 10.1016/j.carbon.2011.04.043.

8. Banhart, F. Structural Defects in Graphene / F. Banhart, J. Kotakoski, A. V. Krashennnikov // *ACS Nano*. – 2011. – Vol. 5 (1). – P. 26–41. – DOI: 10.1021/nn102598m.
9. Bastard, G. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures / G. Bastard. – Les Ulis : Les Editions de Physique, 1988. – 360 p.
10. Brey, L. Electronic states of graphene nanoribbons / L. Brey, H. A. Fertig // *Physical Review B*. – 2006. – Vol. 73. – P. 235411. – DOI: 10.1103/PhysRevB.73.235411.
11. Chemical functionalization of graphene by H adsorption on Stone-Thrower-Wales defects / L. Chen, J. Li, D. Li, M. Wei, X. Wang // *Solid State Commun.* – 2012. – Vol. 152. – P. 1985. – DOI: 10.1016/j.ssc.2012.04.054.
12. Cortijo, A. Electronic properties of curved graphene sheets / A. Cortijo, M. A. H. Vozmediano // *Europhysics Letters*. – 2007. – Vol. 77. – P. 47002. – DOI: 10.1209/0295-5075/77/47002.
13. Cortijo, A. Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene / A. Cortijo, M. A. H. Vozmediano // *Nuclear Physics B*. – 2007. – Vol. 763. – P. 293–308. – DOI: 10.1016/j.nuclphysb.2006.10.031.
14. Direct Imaging of Lattice Atoms and Topological Defects in Graphene Membranes / J. C. Meyer, C. Kisielowski, R. Erni, M. D. Rossell, M. F. Crommie, A. Zettl // *Nano Lett.* – 2008. – Vol. 8. – P. 3582–3586. – DOI: 10.1021/nl801386m.
15. Electric field effect in atomically thin carbon films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov // *Science*. – 2004. – Vol. 306. – P. 666–669. – DOI: 10.1126/science.1102896.
16. Electronic spectrum and tunneling current in curved graphene nanoribbons / M. B. Belonenko, N. G. Lebedev, N. N. Yanyushkina, A. V. Zhukov, M. Paliy // *Solid State Communications*. – 2011. – Vol. 151. – P. 1147–1150. – DOI: 10.1016/j.ssc.2011.05.022.
17. Electron spectrum and tunneling current of the toroidal and helical Graphene nanoribbon-quantum dots contact / M. B. Belonenko, N. G. Lebedev, A. V. Zhukov, N. N. Yanyushkina // *ISRN Nanotechnology*. – 2011. – Vol. 2011. – P. 1–5. – Article ID 161849. – DOI: 10.5402/2011/161849.
18. Gunlycke, D. Tight-binding energy dispersions of armchair-edge graphene nanostrips / D. Gunlycke, C. White // *Phys. Rev. B*. – 2008. – Vol. 77. – P. 115116. – DOI: 10.1103/PhysRevB.77.115116.
19. Hexagonal Graphene Onion Rings / Zh. Yan, Y. Liu, J. Lin, Zh. Peng, G. Wang, E. Pembroke, H. Zhou, Ch. Xiang, A.-R. O. Raji, E. L. G. Samuel, T. Yu, B. I. Yakobson, J. M. Tour // *J. Am. Chem. Soc.* – 2013. – Vol. 135. – P. 10755–10762. – DOI: 10.1021/ja403915m.
20. Hidden one-electron interactions in carbon nanotubes revealed in graphene nanostrips / C. T. White, J. Li, D. Gunlycke, J. W. Mintmire // *Nano Lett.* – 2007. – Vol. 7. – P. 825–830. – DOI: 10.1021/nl0627745.
21. Kolesnikov, D. V. Electronic structure of negatively curved graphene / D. V. Kolesnikov, V. A. Osipov // *JETP Letters*. – 2008. – Vol. 87. – P. 419–422. – DOI: 10.1134/S0021364008080067.
22. Konobeeva, N. N. Conductivity of impurity graphene nanoribbons and gate electric field / N. N. Konobeeva, M. B. Belonenko // *Modern Physics Letters B*. – 2017. – Vol. 31. – P. 1750340. – DOI: 10.1142/S0217984917503407.
23. Konobeeva, N. N. Defects in graphene nanoribbons and flakes: influence on the conductivity / N. N. Konobeeva // *Journal of nano- and electronic physics*. – 2017. – Vol. 9, № 5. – P. 05049. – DOI: 10.21272/jnep.9(5).05049.
24. Konobeeva, N. N. Sensitivity of graphene flakes and nanorings to impurities / N. N. Konobeeva, M. B. Belonenko // *Physica B: Condensed Matter*. – 2017. – Vol. 514. – P. 51–53. – DOI: 10.1016/j.physb.2017.03.029.
25. Konobeeva, N. N. Zitterbewegung in curved graphene / N. N. Konobeeva, M. B. Belonenko // *Physica B: Condensed matter*. – 2015. – Vol. 456. – P. 115–117. – DOI: 10.1016/j.physb.2014.08.027.
26. Mantsevich, V. N. Different behaviour of local tunneling conductivity for deep and shallow impurities due to Coulomb interaction / V. N. Mantsevich, N. S. Maslova // *Solid State Commun.* – 2010. – Vol. 150. – P. 2072–2075. – DOI: 10.1016/j.ssc.2010.07.051.
27. Numerical simulations of multilevel impurity photovoltaic effect in the sulfur doped crystalline silicon / E. T. Hu, G. Q. Yue, R. J. Zhang, Y. X. Zheng, L. Y. Chen, S. Y. Wang // *Renewable Energy*. – 2015. – Vol. 77. – P. 442–446. – DOI: 10.1016/j.renene.2014.12.049.
28. On the electronic spectrum in curved graphene nanoribbons / A. V. Zhukov, R. Bouffanais, N. N. Konobeeva, M. B. Belonenko // *Pisma v ZhETF*. – 2013. – Vol. 97, iss. 7. – P. 465–468. – DOI: 10.1134/S0021364013070126.
29. Stone, A. J. Theoretical studies of icosahedral C₆₀ and some related species / A. J. Stone, D. J. Wales // *Chem. Phys. Lett.* – 1986. – Vol. 128. – P. 501–503.
30. Two-dimensional electron and hole gases at the surface of graphite / S. V. Morozov, K. S. Novoselov, F. Schedin, D. Jiang, A. A. Firsov, A. K. Geim // *Phys. Rev. B*. – 2005. – Vol. 72. – P. 201401. – DOI: 10.1103/PhysRevB.72.201401.
31. Voltage-dependent conductance of a single graphene nanoribbon / M. Koch, F. Ample, C. Joachim, L. Grill // *Nat. Nanotechnol.* – 2012. – Vol. 7. – P. 713–717. – DOI: 10.1038/nnano.2012.169.

32. Vozmediano, M. A. H. Gauge fields in graphene / M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, F. Guinea // *Physics Reports*. – 2010. – Vol. 496. – P. 109–148. – DOI: 10.1016/j.physrep.2010.07.003.

REFERENCES

1. Birrel N., Davis P. *Kvantovannye polya v iskrivlennom prostranstve-vremeni* [Quantum Fields in Curved Space-Time]. Moscow, Mir Publ., 1984. 356 p.
2. Konobeeva N.N., Belonenko M.B. Vliyanie mnogourovnevnoy primesi na tunnelnyy i ballisticheskiy tok v grafenovoy nanolente [The Influence of a Multilevel Admixture on the Tunnel and Ballistic Current in a Graphene Nanoribbon]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Fizika*, 2017, vol. 60, no. 1, pp. 104-108.
3. Konobeeva N.N., Belonenko M.B. Vliyanie postoyannogo elektricheskogo polya na provodimost grafenovykh nanolent [Influence of a Constant Electric Field on the Conductivity of Graphene Nanoribbons]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Fizika*, 2017, vol. 60, no. 9, pp. 144-148.
4. Konobeeva N.N. Modelirovanie vliyaniya primesi na tunnelnyy tok kontakta polimera s kvantovymi tochkami i metallom [Modeling the Impact of Admixture on the Tunnel Contact Current of a Polymer with Quantum Dots and Metal]. *Matematicheskaya fizika i kompyuternoe modelirovanie*, 2017, vol. 20, no. 5, pp. 89-93. DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2017.5.9>.
5. Levitov L.S., Shitov A.V. *Funktsii Grina. Zadachi s resheniyami* [Green's Functions. Problems with Solutions]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2003. 392 p.
6. Areshkin D.A., Gunlycke D., White C.T. Ballistic Transport in Graphene Nanostrips in the Presence of Disorder: Importance of Edge Effects. *Nano Lett.*, 2007, vol. 7, pp. 204-210. DOI: 10.1021/nl062132h.
7. Chen L., Hu H., Quyang Yu., Pan H.Z., Sun Y.Y., Liu F. Atomic chemisorption on graphene with Stone-Thrower-Wales defects. *Carbon*, 2011, vol. 49, pp. 3356-3361. DOI: 10.1016/j.carbon.2011.04.043.
8. Banhart F., Kotakoski J., Krashennnikov A.V. Structural Defects in Graphene. *ACS Nano*, 2011, vol. 5 (1), pp. 26-41. DOI: 10.1021/nn102598m.
9. Bastard G. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. Les Ulis, Les Editions de Physique, 1988. 360 p.
10. Brey L., Fertig H.A. Electronic states of graphene nanoribbons. *Physical Review B*, 2006, vol. 73, pp. 235411. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.235411.
11. Chen L., Li J., Li D., Wei M., Wang X. Chemical functionalization of graphene by H adsorption on Stone-Thrower-Wales defects. *Solid State Commun.*, 2012, vol. 152, p. 1985. DOI: 10.1016/j.ssc.2012.04.054.
12. Cortijo A., Vozmediano M.A.H. Electronic properties of curved graphene sheets. *Europhysics Letters*, 2007, vol. 77, p. 47002. DOI: 10.1209/0295-5075/77/47002.
13. Cortijo A., Vozmediano M.A.H. Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene. *Nuclear Physics B*, 2007, vol. 763, pp. 293-308. DOI: 10.1016/j.nuclphysb.2006.10.031.
14. Meyer J.C., Kisielowski C., Erni R., Rossell M.D., Crommie M.F., Zettl A. Direct Imaging of Lattice Atoms and Topological Defects in Graphene Membranes. *Nano Lett.*, 2008, vol. 8, pp. 3582-3586. DOI: 10.1021/nl801386m.
15. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 2004, vol. 306, pp. 666-669. DOI: 10.1126/science.1102896.
16. Belonenko M.B., Lebedev N.G., Yanyushkina N.N., Zhukov A.V., Paliy M. Electronic spectrum and tunneling current in curved graphene nanoribbons. *Solid State Communications*, 2011, vol. 151, pp. 1147-1150. DOI: 10.1016/j.ssc.2011.05.022.
17. Belonenko M.B., Lebedev N.G., Zhukov A.V., Yanyushkina N.N. Electron spectrum and tunneling current of the toroidal and helical Graphene nanoribbon-quantum dots contact. *ISRN Nanotechnology*, 2011, vol. 2011, pp. 1-5. DOI: 10.5402/2011/161849.
18. Gunlycke D., White C. Tight-binding energy dispersions of armchair-edge graphene nanostrips. *Phys. Rev. B*, 2008, vol. 77, pp. 115116. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.115116.
19. Yan Zh., Liu Y., Lin J., Peng Zh., Wang G., Pembroke E., Zhou H., Xiang Ch., Raji A.-R.O., Samuel E.L.G., Yu T., Yakobson B.I., Tour J.M. Hexagonal Graphene Onion Rings. *J. Am. Chem. Soc.*, 2013, vol. 135, pp. 10755-10762. DOI: 10.1021/ja403915m.
20. White C.T., Li J., Gunlycke D., Mintmire J.W. Hidden one-electron interactions in carbon nanotubes revealed in graphene nanostrips. *Nano Lett.*, 2007, vol. 7, pp. 825-830. DOI: 10.1021/nl0627745.
21. Kolesnikov D.V., Osipov V.A. Electronic structure of negatively curved graphene. *JETP Letters*, 2008, vol. 87, pp. 419-422. DOI: 10.1134/S0021364008080067.
22. Konobeeva N.N., Belonenko M.B. Conductivity of impurity graphene nanoribbons and gate electric field. *Modern Physics Letters B*, 2017, vol. 31, pp. 1750340. DOI: 10.1142/S0217984917503407.

23. Konobeeva N.N. Defects in graphene nanoribbons and flakes: influence on the conductivity. *Journal of nano- and electronic physics*, 2017, vol. 9, no. 5, p. 05049. DOI: 10.21272/jnep.9(5).05049.
24. Konobeeva N.N., Belonenko M.B. Sensitivity of graphene flakes and nanorings to impurities. *Physica B: Condensed Matter*, 2017, vol. 514, pp. 51-53. DOI: 10.1016/j.physb.2017.03.029.
25. Konobeeva N.N., Belonenko M.B. Zitterbewegung in curved graphene. *Physica B: Condensed matter*, 2015, vol. 456, pp. 115-117. DOI: 10.1016/j.physb.2014.08.027.
26. Mantsevich V.N., Maslova N.S. Different behaviour of local tunneling conductivity for deep and shallow impurities due to Coulomb interaction. *Solid State Commun.*, 2010, vol. 150, pp. 2072-2075. DOI: 10.1016/j.ssc.2010.07.051.
27. Hu E.T., Yue G.Q., Zhang R.J., Zheng Y.X., Chen L.Y., Wang S.Y. Numerical simulations of multilevel impurity photovoltaic effect in the sulfur doped crystalline silicon. *Renewable Energy*, 2015, vol. 77, pp. 442-446. DOI: 10.1016/j.renene.2014.12.049.
28. Zhukov A.V., Bouffanais R., Konobeeva N.N., Belonenko M.B. On the electronic spectrum in curved graphene nanoribbons. *Pisma v ZhETF*, 2013, vol. 97, iss. 7, pp. 465-468. DOI: 10.1134/S0021364013070126.
29. Stone A.J., Wales D.J. Theoretical studies of icosahedral C₆₀ and some related species. *Chem. Phys. Lett.*, 1986, vol. 128, pp. 501-503.
30. Morozov S.V., Novoselov K.S., Schedin F., Jiang D., Firsov A.A., Geim A.K. Two-dimensional electron and hole gases at the surface of graphite. *Phys. Rev. B*, 2005, vol. 72, pp. 201401. DOI: 10.1103/PhysRevB.72.201401.
31. Koch M., Ample F., Joachim C., Grill L. Voltage-dependent conductance of a single graphene nanoribbon. *Nat. Nanotechnol.*, 2012, vol. 7, pp. 713-717. DOI: 10.1038/nnano.2012.169.
32. Vozmediano M.A.H., Katsnelson M.I., Guinea F. Gauge fields in graphene. *Physics Reports*, 2010, vol. 496, pp. 109-148. DOI: 10.1016/j.physrep.2010.07.003.

INFLUENCE OF THE ATOMIC-MOLECULAR STRUCTURE ON TUNNEL CHARACTERISTICS IN CARBON NANOSTRUCTURES

Nataliya Nikolaevna Konobeeva

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,
Department of Information Systems and Computer Simulation,
Volgograd State University
yana_nn@volsu.ru, infomod@volsu.ru
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

Abstract. In this paper, we investigate the effect of the atomic-molecular structure of graphene nanoribbons on their properties, as well as the behavior of these materials under extreme conditions – in electric and magnetic fields.

The physical and chemical properties of solids have always attracted the serious attention of researchers. Over the last twenty years, the research area has been shifting towards the physics of semiconductor low-dimensional structures (nanostructures), which is facilitated by the rapid development of technology, the discovery of new materials that can replace existing analogues. The limited charge motion in nanostructures leads to a dimensional quantization, which provokes significant changes in the energy spectrum of charge carriers, phonons, quasiparticles, and promotes the appearance of new phenomena and the physical-chemical properties of substance. A greater number of investigations are connected with the study of graphene-like materials possessing a unique set of properties, which makes them attractive from the point of view of modern micro-, nano- and optoelectronics (the creation of transistors, nanodiodes, memory elements, optical switches, etc.).

One of the main advantages of nanostructures is that the change in configuration and geometric dimensions affects the properties of the system and allows managing these properties [9]. Thus, we can modify the energy spectrum of charge carriers, thereby changing the physical-chemical properties of the system.

The purpose of the present research is to study the sensory characteristics of carbon structures on the basis of the tunnel effect, including in the case of curved graphene.

Key words: electron transfer, atomic-molecular structure, graphene nanoribbons, admixtures, defects.