

Д.М. Сергеев<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Военный институт Сил воздушной обороны им. Т.Я. Бегельдинова, Актобе;<sup>2</sup>Актюбинский региональный государственный университет им. К. Жубанова, Казахстан  
(E-mail: serdau@rambler.ru)

## Влияние дефектов Стоуна-Уэльса на электрические характеристики одностенной углеродной нанотрубки (9,0)

В рамках теории функционала плотности с применением метода неравновесных гриновских функций и в приближении локальной плотности исследованы электрические характеристики различных конфигураций одностенной углеродной нанотрубки с дефектами Стоуна-Уэльса, возникающими при закалке высокой температурой или при облучении. Расчет реализован в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. Рассчитаны эволюция спектра пропускания с увеличением напряжения смещения, плотность состояний, вольтамперные характеристики и дифференциальная проводимость рассматриваемых наноструктур. Обнаружены особенности плотности электронных состояний дефектных углеродных нанотрубок при энергиях  $\sim 0,5$  эВ и  $-1,92$  эВ выше уровня Ферми, позволяющие идентифицировать дефекты Стоуна-Уэльса. Эти же изменения наблюдаются в спектре пропускания рассматриваемых наноструктур. Показано, что характер тока, протекающий через дефектные углеродные нанотрубки, зависит от протяженности дефектов Стоуна-Уэльса. Выявлено, что углеродная нанотрубка с двумя последовательно соединенными дефектами Стоуна-Уэльса при напряжении смещения  $\pm 2,6$  В имеет отрицательную дифференциальную проводимость  $-170$  мкСм. Полученные результаты могут быть полезными для расчетов новых перспективных электронных приборов нанoeлектроники на основе углеродной нанотрубки.

*Ключевые слова:* углеродная нанотрубка, дефект Стоуна-Уэльса, плотность состояний, вольтамперная характеристика, дифференциальная проводимость, функция (спектр) пропускания, туннелирование.

### Введение

В настоящее время интенсивно исследуются электрические характеристики углеродных нанотрубок (УНТ) (см., напр., [1, 2] и цитируемые в них работы). Это вызвано необходимостью создания новых радиоматериалов с модифицированными свойствами и применения их в целях дальнейшей миниатюризации элементов микро- и нанoeлектроники [3, 4]. В сочетании с хорошей электропроводностью УНТ обладают такими уникальными свойствами, как сверхмалые размеры, полевая эмиссия, высокая химическая стабильность и способность присоединять к себе разнообразные химические радикалы, способствующие созданию перспективных электронных устройств передачи, преобразования и обработки информации.

Известно, что дефекты гексагональной решетки углеродных наноматериалов, возникающие на стадии их получения или внедренные намеренно, оказывают существенное влияние на их электрофизические свойства. Так, в работе [5] показано, что за счет изменения хиральности одностенной УНТ (ОУНТ), путем внедрения в ее структуру дефекта (пары пятиугольник – семиугольник), можно изменить ее электронные свойства. Например, ОУНТ с хиральностью (8,0) является полупроводником с шириной запрещенной зоны  $1,2$  эВ, тогда как ОУНТ с хиральностью (7,1) выступает как полуметалл (с шириной запрещенной зоны, равной нулю). В работе [6] путем внедрения дефекта в структуру ОУНТ получены гетеропереходы полупроводник – полупроводник с различными значениями ширины запрещенной зоны. Аналогичным образом можно получить сверхминиатюрные гетеропереходы полупроводник – металл. Такие переходы на основе УНТ применяются для разработки транзистора, а также солнечных элементов и сенсоров [7].

Одним из простейших топологических дефектов, имеющих место в углеродных наноматериалах, является дефект Стоуна-Уэльса (Stone-Wales, SW) [8]. Он формируется за счет простого поворота пары атомов углерода C-C на  $90^\circ$  (трансформация SW), в результате которого нарушается симметрия гексагональной решетки с появлением в ее структуре двух пятиугольных и двух семиугольных элементов. Такой дефект возникает при закалке на высокой температуре еще на стадии получения углеродного наноматериала или когда он подвергается облучению.

В данной работе предпринята попытка с помощью компьютерного моделирования с применением программы Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab определить электрические характеристики одностенной углеродной нанотрубки (9,0) с дефектом Стоуна-Уэльса.

## Описание объекта и методов исследования

Модельно исследуемые ОУНТ получены из графенового листа путем скручивания с помощью оператора Tube Wrapper (трубная обертка) в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. На рисунке 1 продемонстрирована эволюция формирования обертки углеродной нанотрубки из графена с разными углами обертывания: 120°, 180°, 270°, 360°. Причем дефекты Стоуна-Уэльса были сформированы в графеновых листах до скручивания.

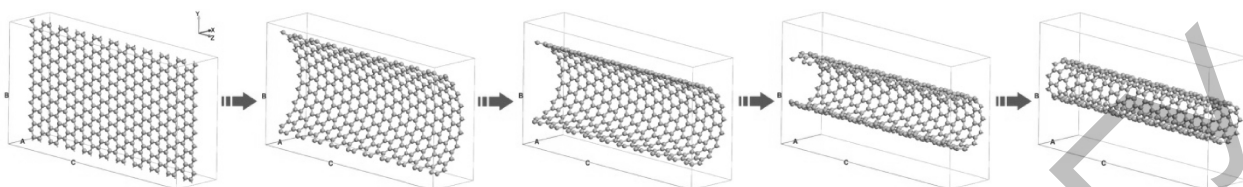


Рисунок 1. Формирование углеродной нанотрубки из графенового листа

Геометрия исследуемой ОУНТ (9,0) с различными конфигурациями дефекта Стоуна-Уэльса приведена на рисунке 2 (а-д). (Для удобства описания каждой конфигурации даны буквенные обозначения А, В, С, D, E.) Длина электродов по оси С варьируется от  $\sim 7,1$  Å до  $\sim 8,53$  Å, а длина исследуемой ОУНТ составляет  $\sim 41,2$  Å. Размер области рассеяния квазичастиц (центральная область) составляет  $\sim 20$  Å.

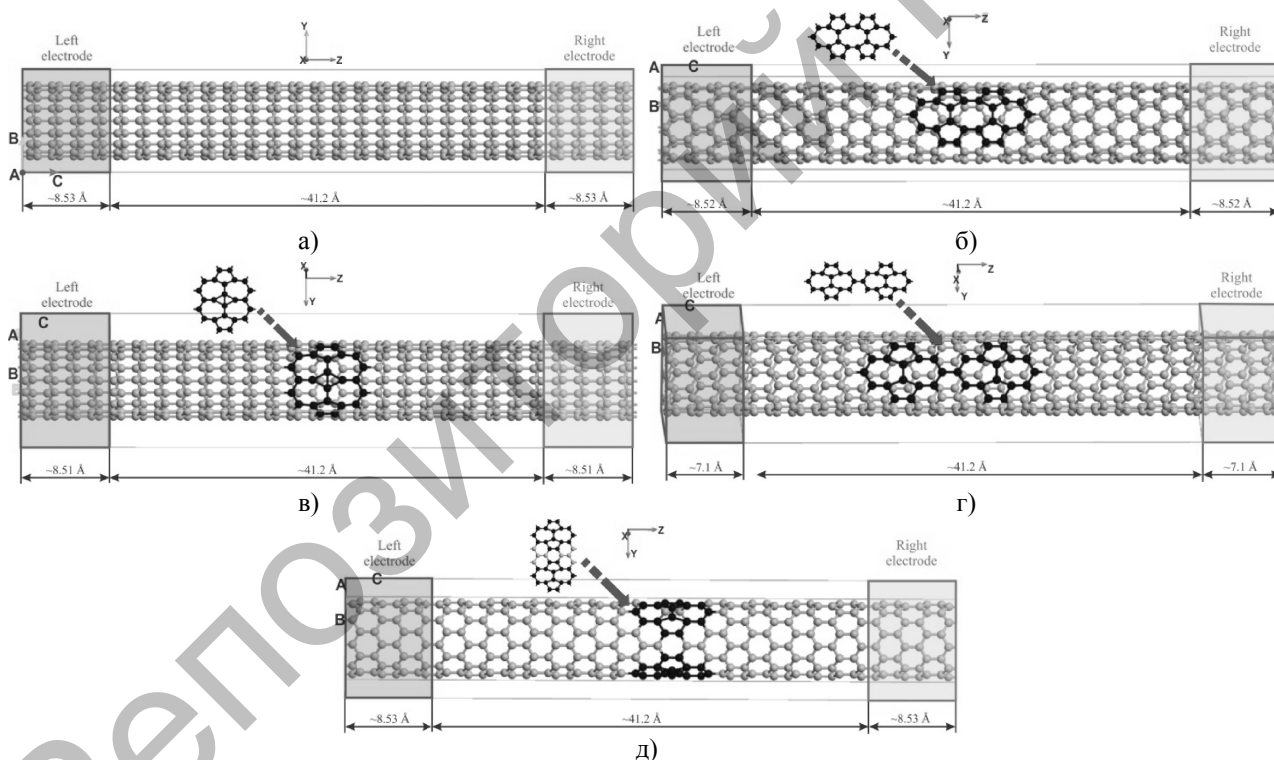


Рисунок 2. Геометрия ОУНТ с дефектами SW:

а) без дефекта (конфигурация А); б) два слитых продольных дефекта SW на одной прямой (по оси Z) (конфигурация В); в) два слитых поперечных дефекта SW (конфигурация С); г) два связанных между собой продольных дефекта SW (конфигурация D); д) два поперечных дефекта SW, взаимодействующих через гексагональный элемент решетки (конфигурация E)

Компьютерное моделирование электрических характеристик дефектной ОУНТ производилось в рамках теории функционала плотности (DFT – Density Functional Theory) с применением метода неравновесных гриновских функций (NEGF – Non-Equilibrium Green's Functions) в приближении локальной плотности (LDA – local-density approximation) [9, 10]. Моделирование электрических характеристик ОУНТ реализовано в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab [11].

(Основные уравнения данного метода подробно описаны в работах [12-14].) Вольтамперные характеристики (ВАХ) нанотрубки рассчитываются на основе известного уравнения Ландауэра, указывающего на фундаментальную связь электрического тока со спектром пропускания [15]:

$$I(V_L, V_R, T_L, T_R) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(\varepsilon) \left[ f\left(\frac{\varepsilon - \mu_R}{k_B T_R}\right) - f\left(\frac{\varepsilon - \mu_L}{k_B T_L}\right) \right] d\varepsilon, \quad (1)$$

где  $e$  — заряд электрона;  $h$  — постоянная Планка;  $\varepsilon$  — энергия;  $T(\varepsilon)$  — функция (спектр) пропускания;  $f(\varepsilon)$  — фермиевская функция распределения квазичастиц по энергиям;  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $T_R, T_L$  — текущие температуры;  $\mu_R, \mu_L$  — электрохимические потенциалы правого и левого электрода.

Для описания межатомного взаимодействия и оптимизации дефектных углеродных нанотрубок использовался потенциал Brenner [16], который хорошо описывает углеродные наноструктуры.

### Описание и анализ результатов

Результаты вычисления плотности состояний (DDOS – Device Density of States) конфигураций дефектных ОУНТ представлены на рисунке 3. В работе [17] исследованы DOS графена с SW-дефектом, где показано, что SW-дефекты приводят к появлению дефектной полосы ~ 0,5 эВ выше уровня Ферми, тогда как в графене без дефекта данная полоса отсутствует. Происхождение дефектной полосы объясняется структурными неустойчивостями в дефектном графене. С увеличением концентрации дефектов увеличиваются как ширина, так и плотность состояний дефектной полосы. Следовательно, эта дефектная полоса оказывается полезной для идентификации SW-дефектов и определения их концентрации в графеновой пленке.

В нашем случае наблюдается дефектная полоса вблизи энергии ~ 0,5 эВ, так как исследуемые ОУНТ получены из SW-дефектного графенового листа путем скручивания. Дефектная полоса ОУНТ с двумя слитыми продольными SW-дефектами (конфигурация В) проявляется при энергии 0,5 эВ с интенсивностью 24 эВ<sup>-1</sup>, а в ОУНТ с двумя слитыми поперечными дефектами (конфигурация С) дефектная полоса возникает при энергии 0,54 эВ с интенсивностью 70,68 эВ<sup>-1</sup>. Присутствие в структуре ОУНТ двух SW-дефектов в виде D- и С-конфигурации приводит к сдвигу дефектной полосы по энергии на 0,42 эВ с интенсивностями 21,5 эВ<sup>-1</sup> и 24,16 эВ<sup>-1</sup> соответственно. Особенностями DDOS В- и С-конфигураций является возникновение полосы при энергии -1,92 эВ с интенсивностями 162,5 эВ<sup>-1</sup> и 70 эВ<sup>-1</sup> соответственно. Полагаем, что полоса, возникающая при энергии -1,92 эВ, может быть полезной при идентификации SW-дефектов ОУНТ.

В интервале энергии от ~ -1,4 эВ до ~ -0,4эВ наблюдается пауза DOS в А- и В-конфигурациях, а в С- и Е-конфигурациях пауза DOS нарушается проявлением интенсивности ~ 15 эВ<sup>-1</sup> при энергии -1,3 эВ.

DDOS D-структуры отличается от других рассматриваемых структур. Наличие в D-конфигурации ОУНТ двух связанных между собой продольных SW-дефектов приводит к появлению интенсивностей DOS 409,58 эВ<sup>-1</sup>, 198,25 эВ<sup>-1</sup> и 116,8 эВ<sup>-1</sup> при энергиях -2,64 эВ, -1,68 эВ и -1,14 эВ соответственно.

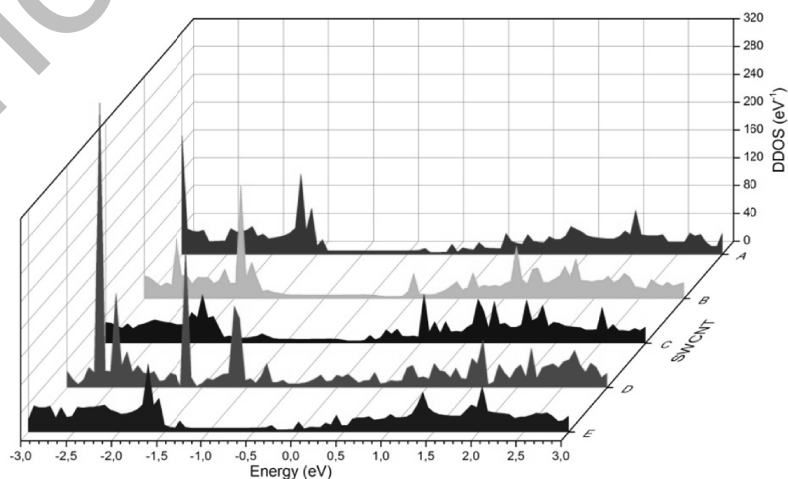


Рисунок 3. Плотность электронных состояний А, В, С, D, Е конфигураций

Эволюция функции (спектра) пропускания SW-дефектной ОУНТ с увеличением напряжения смещения 0 В; 0,1 В; 0,2 В; 0,4 В ... 2 В представлена на рисунке 4 (а-д). Как видно, особенности DOS в виде появления дефектной полосы также проявляются и в спектре пропускания рассматриваемой графеновой структуры при тех же значениях энергии, так как эти величины прямо пропорциональны  $T(\varepsilon) = D(\varepsilon - U)2\pi\gamma_1\gamma_2/\gamma$  (здесь  $U$  — самосогласованный потенциал,  $\gamma$  — параметр Латинжера) [18]. С увеличением напряжения смещения интенсивность спектра пропускания дефектного графена убывает (рис. 4).

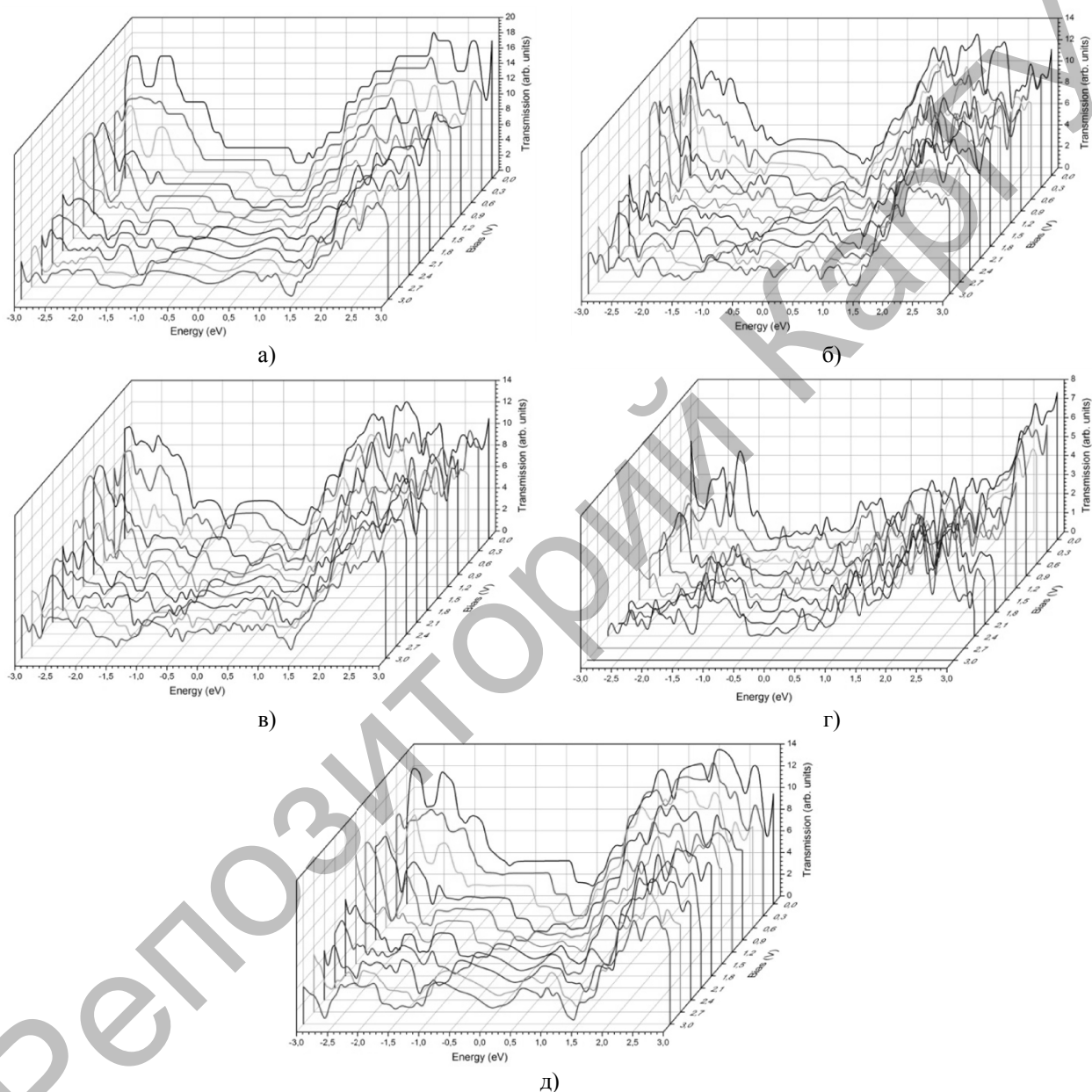


Рисунок 4. Эволюция спектра пропускания SW-дефектной углеродной нанотрубки с увеличением напряжения смещения  $V_{bias}$  (0–2 В) (спектры соответствуют структурам, представленным на рис. 2)

Результаты моделирования вольтамперных характеристик и дифференциальной проводимости приведены на рисунке 5. Введение в структуру ОУНТ дефектов Стоуна-Уэльса, приводящих к образованию В-, С-, Е-конфигураций, радикально не изменяет ВАХ и дифференциальную проводимость углеродного материала. В данных структурах в интервале напряжений от -0,3 В до 0,3 В наблюдается нулевой ток, далее ток монотонно растет (рис. 5 а).

При наличии двух связанных между собой продольных SW-дефектов (конфигурация D) в ОУНТ наблюдается совсем другое поведение ВАХ. В интервале напряжений  $0 \div 0,3$  В ток быстро растет до значения 15 мкА, далее наблюдается медленное квазилинейное нарастание величины тока до 70 мкА при  $V_{bias} = 2,3$  В. В интервале  $V_{bias} \approx 2,3 \div 2,8$  В наблюдается падение тока от 70 мкА до нуля.

Особенности ВАХ рассмотренных углеродных нанотрубок отчетливо проявляются и в их дифференциальной проводимости (рис. 5 б). Из-за симметричности  $dI/dV$ -спектров рассмотрим дифференциальную проводимость наноструктур только при положительных значениях напряжения смещения.

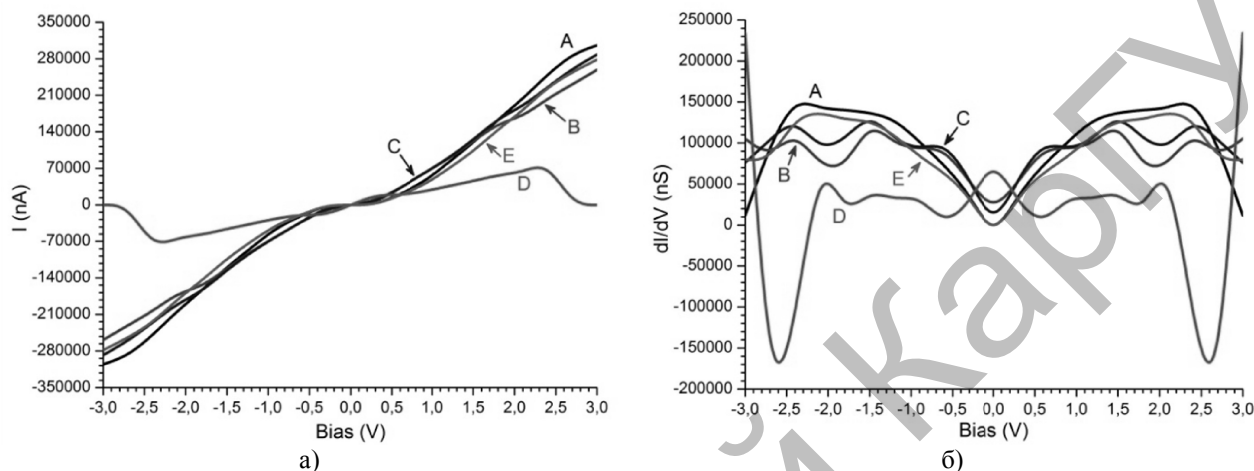


Рисунок 5. Вольтамперные и  $dI/dV$ -характеристики SW-дефектных графеновых структур (буквенные обозначения соответствуют структуре, показанной на рис. 3). Для удобства сравнения кривые дифференциальной проводимости смещены по оси  $dI/dV$

Дифференциальная проводимость А- и Е-структур схожа и имеет максимумы 150 мкСм и 135 мкСм при  $V_{bias} \approx 2,2 \div 2,3$  В соответственно, а при околонулевом значении напряжения смещения  $dI/dV$ -спектр принимает нулевое значение.

$dI/dV$ -Характеристики В- и С-конфигураций схожие, имеют три локальных максимума и минимума (рис. 5 б). Максимумы дифференциальной проводимости этих структур, 100 мкСм и 120 мкСм, проявляются при  $V_{bias} \approx 2,5$  В; 115 мкСм и 130 мкСм — при  $V_{bias} \approx 1,5$  В; 90 мкСм и 88 мкСм — при  $V_{bias} \approx 0,7$  В, соответственно. А минимумы, 70 мкСм, 100 мкСм, наблюдаются при  $V_{bias} \approx 1,9 \div 2$  В; 10 мкСм и 30 мкСм — при нулевом значении напряжения смещения.

Дифференциальная проводимость Е-конфигурации сильно отличается от предыдущих структур наличием трех минимумов: -170 мкСм при  $V_{bias} \approx 2,6$  В, 25 мкСм при  $V_{bias} \approx 1,8$  В; 10 мкСм при  $V_{bias} \approx 0,6$  В и двух выраженных максимумов: 50 мкСм при  $V_{bias} \approx 2$  В и 66 мкСм при околонулевом значении напряжения смещения.

На наш взгляд, сходство электрических характеристик А- и Е-конфигураций, а также В- и С-конфигураций ОУНТ связано с размерами образуемых SW-дефектов. Дефект Е-структуры представляет собой два отдельных SW-дефекта без слияния с размерами  $7,1 \text{ \AA} \times 4,92 \text{ \AA}$ . Известно, что при низких температурах основным механизмом электронного транспорта в ОУНТ является квантовое подбарьерное туннелирование. В таком случае вероятность преодоления барьера, образованного одиночными SW-дефектами, квазичастицами велика, вследствие чего электрические характеристики ОУНТ с параллельно расположенными SW-дефектами напоминают характеристику ОУНТ без дефекта.

Такая же картина наблюдается между характеристиками В- и С-конфигураций ОУНТ. Размер SW-дефектов в В-конфигурации составляет  $5,42 \text{ \AA} \times 10,96 \text{ \AA}$ , а в С-конфигурации –  $12,3 \text{ \AA} \times 7,1 \text{ \AA}$ . Полагаем, что длина прыжка квазичастиц позволяет преодолеть дефектный барьер в рассматриваемых структурах.

Протяженность дефекта D-конфигурации, существующего в виде двух последовательно соединенных SW-дефектов, по оси Z составляет  $15,63 \text{ \AA}$ . Наличие в решетке протяженного дефекта ухудшает электрические характеристики ОУНТ. Это объясняет уменьшение тока в D-структуре в интер-

вале напряжений 2,3÷2,8 В (рис. 5 а). Отметим, что проводимость в такой структуре на порядок ниже, чем в других (рис. 5 б).

Подобные изменения  $I(V)$ ,  $dI/dV$ -характеристик следует учесть при расчетах электронных приборов на основе углеродных наноматериалов, так как не всегда удается получить идеальные одностенные углеродные нанотрубки.

### Выводы

Таким образом, в данной работе в рамках теории функционала плотности модельно исследованы основные электрические характеристики (плотность состояний, ВАХ, дифференциальная проводимость) SW-дефектных ОУНТ. Обнаружены особенности плотности состояний ОУНТ в виде появления дефектной полосы  $\sim 0,5$  эВ и  $\sim -1,9$  эВ выше уровня Ферми, идентифицирующие присутствие дефектов Стоуна-Уэльса и характеризующие их концентрацию в подобных структурах. Показано, что транспортный ток SW-дефектных ОУНТ зависит от протяженности продольных дефектов. Выявлено, что на электрических характеристиках ОУНТ с двумя последовательно соединенными SW-дефектами (D-конфигурация) при напряжении смещения  $\pm 2,6$  В появляется участок отрицательной дифференциальной проводимости. Полученные результаты могут быть полезными для расчетов новых перспективных электронных приборов наноэлектроники на основе УНТ.

### Список литературы

- 1 Tie W. Comparative studies on field-induced stretching behavior of single-walled and multiwalled carbon nanotube clusters / W.Tie, S.S. Bhattacharyya, H.R. Park, J.H. Lee, S.W. Lee, T.H. Lee, et al. // *Phys. Rev. E*. — 2014. — Vol. 90. — P. 012508.
- 2 Geng J., Kim K., Zhang J., Escalada A., Tunuguntla R., Comolli L.R., et al. Stochastic transport through carbon nanotubes in lipid bilayers and live cell membranes // *Nature*. — 2014. — Vol. 514. — P. 612–615.
- 3 Qiu Ch. Scaling carbon nanotube complementary transistors to 5-nm gate lengths / Ch.Qiu, Zh.Zhang, M.Xiao, Y.Yang, D.Zhong, L.-M. Peng // *Science*. — 2017. — Vol. 355. — P. 271–276.
- 4 Mishra A. Dynamic optoelectric trapping and deposition of multiwalled carbon nanotubes / A. Mishra, K.Clayton, V. Velasco, S.J. Williams, S.T. Wereley // *Microsystems & Nanoengineering*. — 2016. — Vol. 2. — P. 16005.
- 5 Chico L. Pure Carbon Nanoscale Devices: Nanotube Heterojunctions / L. Chico, V.H. Crespi, L.X. Benedict, S.G. Louie, M.L. Cohen // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 76. — P. 971.
- 6 Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S. Tunneling conductance of connected carbon nanotubes // *Phys. Rev. B*. — 1996. — Vol. 53. — P. 2044.
- 7 Barkelid M. Photocurrent generation in semiconducting and metallic carbon nanotubes / M. Barkelid, V. Zwiller // *Nat. Photonics*. — 2014. — Vol. 8. — P. 47–51.
- 8 Stone A.J. Theoretical studies of icosahedral C<sub>60</sub> and some related species / A.J. Stone, D.J. Wales // *Chem. Phys. Lett.* — 1986. — Vol. 128. — P. 501–503.
- 9 Brandbyge M. Density-functional method for nonequilibrium electron transport / M. Brandbyge, J.-L. Mozos, P.Ordejon, J. Taylor, K. Stokbro // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Vol. 65. — P. 165401.
- 10 Kryachko E.S. Density functional theory: Foundations reviewed / E.S. Kryachko, E.V. Ludena // *Physics Rep.* — 2014. — Vol. 544. — P. 123–239.
- 11 Atomistix ToolKit. Manual Version 2015.1. — QuantumWise A/S, 2015. — 840 p.
- 12 Сергеев Д.М. Исследование транспортных характеристик наноструктур на основе графена / Д.М. Сергеев, К.Ш. Шункеев // *Известия высших учебных заведений. Сер. Физика*. — 2017. — Т. 60. — №11. — С. 80–87.
- 13 Sergeev D. Computer Simulation of Electrical Characteristics of the Carbon Nanochains / D. Sergeev, K. Shunkeyev // *Journal of Nano- and Electronic Physics*. — 2017. — Vol. 9. — No. 6. — P. 06019.
- 14 Sergeev D., Zhanturina N., Shunkeyev S. Modeling of current–voltage and  $dI/dV$ -characteristics of nanocontact «Niobium — Carbon nanotube (5,5) — Niobium» // 2017 International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON). Proceedings. — Astana: S.Seifullin Kazakh Agrotechnical University. — Kazakhstan, Astana, June 29–30, 2017. IEEE Catalog Number: CFP17794-CDR. ISBN: 978-1-5090-1080-6.
- 15 Landauer R. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices / R. Landauer // *Philosophical Magazine*. — 1970. — 21. — P. 863–867.
- 16 Brenner D.W. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons / D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott // *J. Phys.: Condens. Matter*. — 2002. — Vol. 14. — P. 783–802.
- 17 Shirodkar Sh.N. Electronic and vibrational signatures of Stone-Wales defects in graphene: First-principles analysis / Sh.N. Shirodkar // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Vol. 86. — P. 165401.
- 18 Datta S. Quantum Transport: Atom to Transistor / S. Datta. — Cambridge: Univ. Press, 2005. — 404 p.

## Бірқабырғалы (9,0) көміртекті нанотүтікшелердің электрлік сипаттамаларына Стоун-Уэльс ақауларының әсері

Мақалада функционалдық электрондық тығыздық теориясы аясында тепе-теңсіз Грин функциялары әдісі мен локалды тығыздықтық жуықтауды қолдану арқылы жоғары температуралы шынығудан немесе сәулеленуден пайда болған Стоун-Уэльс ақаулары бар бірқабырғалы көміртекті нанотүтікшелердің әртүрлі конфигурацияларының электрлік сипаттамалары зерттелді. Есептеу Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab бағдарламасында жүзеге асырылды. Қарастырылып отырған нанокұрылымдардың ығысу кернеуінің көбейгендегі өткізу спектрінің эволюциясы, күй тығыздығы, вольтамперлік сипаттамалары мен дифференциалдық өткізгіштігі есептелінді. Стоун-Уэльс ақауларын анықтауға болатын ақаулы көміртекті нанотүтікшелердің электрондық күй тығыздығының ерекшеліктері Ферми деңгейінен жоғары  $\sim 0,5$  эВ және  $-1,92$  эВ энергияларында байқалады. Бұл өзгерістер нанокұрылымдардың өткізу спектрінде де орын алады. Ақаулы көміртекті нанотүтікшелер арқылы өтетін ток сипаты Стоун-Уэльс ақауларының кеңейтіміне байланысты екендігі көрсетілді. Ығысу кернеуі  $\pm 2,6$  В болғанда екі тізбектей байланысқан Стоун-Уэльс ақаулары бар көміртекті нанотүтікшелерде  $-170$  мкСм теріс дифференциалдық өткізгіштігі пайда болатындығы анықталды. Алынған нәтижелер көміртекті нанотүтікшелер негізіндегі наноэлектрониканың жаңа перспективті электрондық аспаптарын есептеуде пайдалы болуы мүмкін.

*Кілт сөздер:* көміртекті нанотүтікше, Стоун-Уэльс ақаулары, күй тығыздығы, вольтамперлік сипаттамалар, дифференциалдық өткізгіштік, өткізу қызметі (спектрі), туннельдеу.

D.M. Sergeyev

## Effect of Stone-Wales defects on electrical characteristics of a single-walled carbon nanotube (9.0)

In the framework of the density functional theory, using the method of nonequilibrium Green's functions and in the local density approximation, the electrical characteristics of various configurations of a single-walled carbon nanotube with Stone-Wales defects arising during high-temperature tempering or irradiation are studied. The calculation is implemented in the Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. The evolution of the transmission spectrum with an increase in the bias voltage, the density of states, the current-voltage characteristics, and the differential conductivity of the nanostructures under consideration are calculated. Specific features of the density of electronic states of defective carbon nanotubes at energies of  $\sim 0.5$  eV and  $-1.92$  eV above the Fermi level are revealed, which allow one to identify Stone-Wales defects. The same changes are observed in the transmission spectrum of the nanostructures under consideration. It is shown that the nature of the current flowing through defective carbon nanotubes depends on the extent of the Stone-Wales defects. It was found that a carbon nanotube with two consecutively connected Stone-Wales defects at a bias voltage of  $\pm 2.6$  V has a negative differential conductivity of  $-170$   $\mu$ S. The obtained results can be useful for calculations of new promising electronic devices of nanoelectronics based on a carbon nanotube.

*Keywords:* carbon nanotube, Stone-Wales defect, state density, current-voltage characteristic, differential conductivity, transmission function (spectrum), tunneling.

## References

- 1 Tie, W., Bhattacharyya, S.S., Park, H.R., Lee, J.H., Lee, S.W., Lee, T.H., & et al. (2014). Comparative studies on field-induced stretching behavior of single-walled and multiwalled carbon nanotube clusters. *Phys. Rev. E*, Vol. 90, 012508.
- 2 Geng, J., Kim, K., Zhang, J., Escalada, A., Tunuguntla, R., Comolli, L.R., & et al. (2014). Stochastic transport through carbon nanotubes in lipid bilayers and live cell membranes. *Nature*, Vol. 514, 612–615.
- 3 Qiu, Ch., Zhang, Zh., Xiao, M., Yang, Y., Zhong, D., Peng, L.-M. (2017). Scaling carbon nanotube complementary transistors to 5-nm gate lengths. *Science*, Vol. 355, 271–276.
- 4 Mishra, A., Clayton, K., Velasco, V., Williams, S.J., & Wereley, S.T. Dynamic optoelectric trapping and deposition of multiwalled carbon nanotubes. *Microsystems & Nanoengineering*, Vol. 2, 16005.
- 5 Chico, L., Crespi, V.H., Benedict, L.X., Louie, S.G., & Cohen, M.L. (1996). Pure Carbon Nanoscale Devices: Nanotube Heterojunctions. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 76, 971.
- 6 Saito, R., Dresselhaus, G., & Dresselhaus, M.S. (1996). Tunneling conductance of connected carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, Vol. 53, 2044.
- 7 Barkelid M., & Zwiller V. (2014). Photocurrent generation in semiconducting and metallic carbon nanotubes. *Nat. Photonics*, Vol. 8, 47–51.

- 8 Stone, A.J., & Wales, D.J. (1986). Theoretical studies of icosahedral C<sub>60</sub> and some related species. *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 128, 501–503.
- 9 Brandbyge, M., Mozos, J.-L., Ordejon, P., Taylor, J., & Stokbro, K. (2002). Density-functional method for nonequilibrium electron transport. *Phys. Rev. B*, Vol. 65, 165401.
- 10 Kryachko, E.S., & Ludena, E.V. (2014). Density functional theory: Foundations reviewed. *Physics Rep.*, 544, 123–239.
- 11 Atomistix ToolKit. Manual Version 2015.1. QuantumWise A/S, 2015.
- 12 Sergeev, D., & Shunkeyev, K. (2017). Issledovanie transportnykh kharakteristik nanostruktur na osnove hrafena [Investigation of transport characteristics of nanostructures based on graphene]. *Izvestiia vysshykh uchebnykh zavedenii. Seriya Fizika – News of higher educational institutions. Series Physics*, Vol. 60, 11, 80–87 [in Russian].
- 13 Sergeev, D., & Shunkeyev, K. (2017). Computer Simulation of Electrical Characteristics of the Carbon Nanochains. *Journal of Nano- and Electronic Physics*, Vol. 9, 6, 06019.
- 14 Sergeev, D., Zhanturina, N., & Shunkeyev, S. (2017). Modeling of current-voltage and dI/dV-characteristics of nanocontact "Niobium – Carbon nanotube (5,5) – Niobium". *International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON)*. Proceedings. Astana: S.Seifullin Kazakh Agrotechnical University. Kazakhstan, Astana, June 29–30, 2017. IEEE Catalog Number: CFP17794-CDR. ISBN: 978-1-5090-1080-6.
- 15 Landauer, R. (1970). Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical Magazine*, 21, 863–867.
- 16 Brenner, D.W., Shenderova, O.A., Harrison, J.A., Stuart, S.J., Ni, B., & Sinnott, S.B. (2002). A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons. *J. Phys.: Condens. Matter*, Vol. 14, 783–802.
- 17 Shirodkar, Sh.N., & Waghmare, U.V. (2012). Electronic and vibrational signatures of Stone-Wales defects in graphene: First-principles analysis. *Phys. Rev. B*, Vol. 86, 165401.
- 18 Datta, S. (2005). *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge: Univ. Press.