

## ВЛИЯНИЕ РАСТЯЖЕНИЯ И СЖАТИЯ НА ЗОННУЮ СТРУКТУРУ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПО ДАННЫМ МЕТОДА ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ВОЛН

© 2021 г. Е. П. Дьячков<sup>а</sup>, П. Н. Дьячков<sup>а</sup>, \*

<sup>а</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,  
Ленинский пр-т, 31, Москва, 119991 Россия

\*e-mail: p\_dyachkov@rambler.ru

Поступила в редакцию 12.04.2021 г.

После доработки 11.05.2021 г.

Принята к публикации 14.05.2021 г.

Методом линейаризованных присоединенных цилиндрических волн рассчитано влияние одноосной деформации на зонную структуру четырех хиральных ((8,7), (9,6), (10,5), (12,1)) и четырех нехиральных ((7,7), (13,0), (12,0), (13,0)) нанотрубок диаметром  $\sim 10 \text{ \AA}$  с разной геометрией. Результаты сопоставлены с влиянием скручивания нанотрубок на электронные свойства этих соединений. Установлено, что возмущения зонной структуры под действием этих двух типов механических деформаций могут резко различаться. В трубке (7,7) типа “кресло” и трубке (8,7), которую иногда называют трубкой “почти кресло” из-за близости индексов  $n_1 = 8$  и  $n_2 = 7$ , зонная структура резко меняется при скручивании трубки, но почти не возмущается одноосным растяжением и сжатием. Напротив, в полупроводниковых нанотрубках (13,0), (11,0) типа “зигзаг” и (12,1) “почти зигзаг” влияние скручивания трубок очень слабое, а растяжение сопровождается сильными изменениями дисперсионных кривых в области уровня Ферми вплоть до изменения чередования граничных зон. В квазиметаллических нанотрубках (12,0) и (9,6) все типы деформации – растяжение, сжатие и скручивание – индуцируют резкое уширение запрещенной зоны с образованием полупроводников. В полупроводниковой хиральной нанотрубке (10,5) и скручивание, и одноосные деформации приводят к сильным изменениям зонной структуры.

**Ключевые слова:** моделирование, зонная структура, электромеханические свойства, аксиальные деформации

**DOI:** 10.31857/S0044457X21110040

### ВВЕДЕНИЕ

Однослойные нанотрубки – это цилиндрические молекулы, поверхность которых выстроена углеродными шестиугольниками [1, 2], а геометрия определяется диаметром  $d$  и ориентацией шестиугольников относительно оси цилиндра или длиной связи C–C  $1.42 \text{ \AA}$  и двумя положительными целыми числами  $(n_1, n_2)$ , где  $n_1 \geq n_2 \geq 0$ . В зависимости от геометрии нанотрубки обладают различными электрическими свойствами, что находит применение в электронных устройствах нанометрового масштаба. Углеродные нанотрубки являются жесткими и прочными пружинами, но при скручивании нанотрубки вокруг ее оси  $z$ , растяжении или сжатии (рис. 1) ее электронные свойства меняются. При этом могут открываться запрещенные зоны в металлических нанотрубках и варьироваться ширина запрещенных зон в полупроводниковых трубках [3–7]. Электронный отклик на деформацию нанотрубок используется

в нанoeлектромеханических системах, которые представляют собой устройства, сочетающие электрические и механические степени свободы материалов [8–14].

Цель настоящей работы – получение количественной информации об изменении электронной структуры при растяжении и сжатии нанотрубок с помощью неэмпирического метода линейаризованных присоединенных цилиндрических волн (ЛПЦВ). В предыдущей работе этим же методом изучен отклик зонной структуры хиральных и нехиральных нанотрубок на крутильные моды [15]. Ранее влияние отклика зонной структуры трубок изучалось с помощью приближенных аналитических расчетов в рамках  $\pi$ -электронной теории и расширенным методом Хюккеля [16–23].

### МЕТОД РАСЧЕТА

Качественно в методе ЛПЦВ зонная структура нанотрубки определяется свободным движением

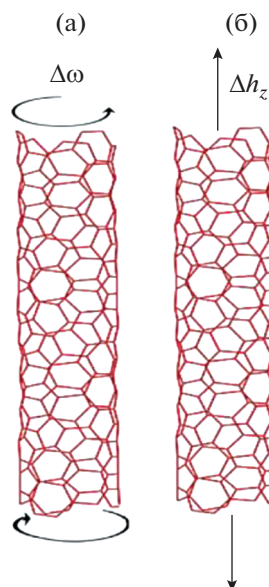


Рис. 1. Скручивание (а) и растяжение (б) нанотрубки.

электронов в моноатомном углеродном цилиндрическом слое и рассеянием электронов на атомных потенциалах. При этом учитываются винтовая и вращательная симметрия нанотрубок, за счет чего истинная элементарная ячейка любой нанотрубки сводится к двум валентно-связанным атомам С. Полностью геометрическая структура нанотрубки определяется повторяющимися поворотами пары атомов С–С на углы  $\omega$  вокруг оси  $z$  с одновременными смещениями на расстояния  $h_z$  вдоль этой оси, а также поворотами  $n$  вокруг оси  $z$  на угол  $\pi/n$ , где  $n$  – наибольший общий делитель индексов  $n_1$  и  $n_2$ . Строгое обоснование метода и явные формулы для базисных функций и секулярных уравнений приведены в предыдущих публикациях [24–26]. Собственные функции  $\Psi_\lambda(r|k, L)$  и собственные энергии  $E_\lambda(k, L)$  электронного гамильтониана зависят от волнового вектора  $k$  из первой зоны Бриллюэна  $0 \leq k \leq \pi/h_z$  и от вращательного квантового числа  $L = 0, 1, \dots, n - 1$ , которое нумерует стоячие электронные волны в направлении вокруг трубки. В качестве входных данных в соответствующей компьютерной программе используются структурные параметры  $h_z$  и  $\omega$  нанотрубки, которые зависят от индексов  $n_1$  и  $n_2$ , а в качестве характеристики аксиальной деформации – величина  $\Delta h_z$ , выраженная в процентах.

## РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Рассмотрим влияние аксиальных деформаций на зонную структуру четырех хиральных ((8,7), (9,6), (10,5), (12,1)) и четырех нехиральных ((7,7), (13,0), (12,0), (13,0)) нанотрубок с диаметрами  $\sim 10$  Å,

но с разной геометрией. Ограничимся амплитудами кручения  $|\Delta h_z| \leq 5\%$ , так как цилиндрическая геометрия нанотрубок сохраняется в этих пределах, а далее она подвергается необратимым искажениям [19–23]. Влияние крутильных мод в диапазоне  $|\Delta \omega| \leq 2$  град/Å на эти трубки описано в [15].

Напомним, что, согласно простой  $\pi$ -электронной модели, электронные свойства недеформированных нанотрубок можно грубо охарактеризовать индексом  $p$ , который определяется как остаток от деления разности  $n_1 - n_2$  на три. Если  $p = 0$ , нанотрубки обладают металлическими свойствами, а при  $p = 1$  или  $-1$  они полупроводниковые. Таким образом, в рассматриваемой серии трубок имеются нехиральные типа “кресло” ( $n, n$ ) и “зигзаг” ( $n, 0$ ) и хиральные, полупроводниковые и металлические трубки со всеми индексами  $p$ .

### Хиральные нанотрубки

Рис. 2 и табл. 1 иллюстрируют результаты расчетов зонной структуры и ее изменения при растяжении и сжатии хиральной (8,7) нанотрубки. Приведены энергии пиков валентной зоны и минимумов зоны проводимости в точках А, ..., Н зоны Бриллюэна и вариации минимального оптического перехода в зависимости от величины и направления одноосной деформации. Уровень Ферми четко разделяет валентную зону и зону проводимости. Нанотрубка является полупроводником с прямым переходом в запрещенной зоне  $E_g(A) = E_c(A) - E_v(A) = 0.76$  эВ, который возрастает до 0.9 эВ при растяжении и уменьшается до 0.66 эВ при сжатии. Слабые вариации электронной структуры этой трубки при одноосных деформациях резко контрастируют с эффектами ее скручивания, которое в зависимости от направления и амплитуды деформации может привести к удвоению щели или ее быстрому уменьшению вплоть до металлизации трубки за счет перекрытия состояний валентной зоны и зоны проводимости.

Рис. 3 и табл. 2 демонстрируют влияние одноосных деформаций на зонную структуру хиральной (10,5) нанотрубки. При  $\Delta h_z = 0$  минимальная щель с энергией  $E_g(G) = 0.66$  эВ расположена в точке G с  $L = 2$ , а вторая щель с энергией  $E_g(D) = 1.6$  эВ – в точке D с  $L = 4$ . При растяжении в диапазоне  $|\Delta h_z| \leq 5\%$  энергия  $E_g(G)$  падает до 0.26 эВ, а при сжатии она почти удваивается. Как показывает рис. 3, вблизи  $\Delta h_z = -5\%$  зависимости  $E_g(G)$  и  $E_g(D)$  от  $\Delta h_z$  пересекаются, и далее значения  $E_g(D)$  оказываются меньше, чем  $E_g(G)$ . В отличие от скручивания, когда нанотрубка может приобретать металлические свойства, перекрытия состояний валентной зоны и зоны прово-

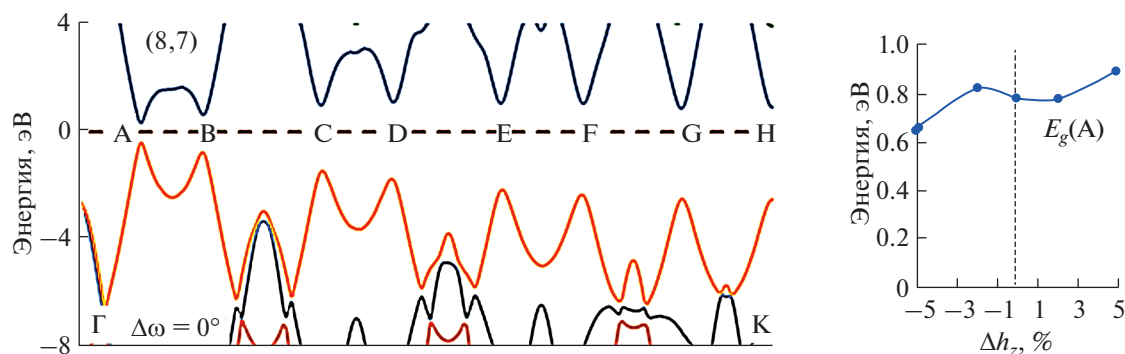


Рис. 2. Зонная структура и изменение энергии минимальной оптической щели при растяжении ( $\Delta h_z > 0$ ) и сжатии ( $\Delta h_z < 0$ ) нанотрубки (8,7).

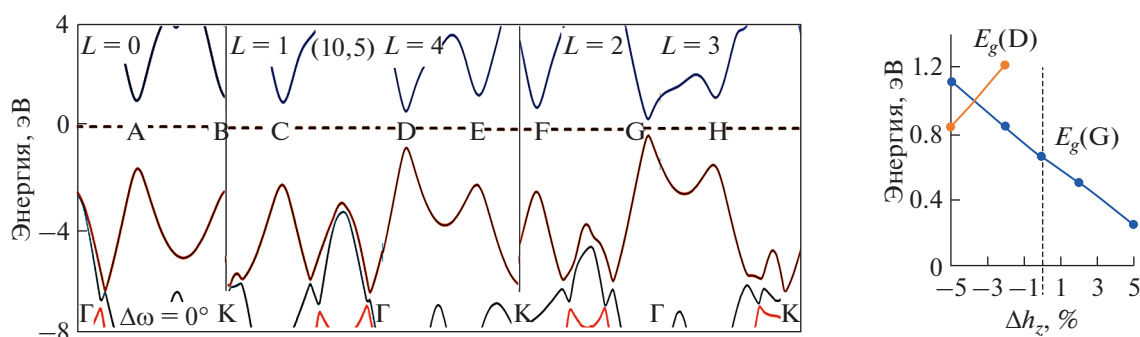


Рис. 3. Зонная структура и изменение энергии двух минимальных оптических щелей при растяжении и сжатии нанотрубки (10,5).

димости при растяжении и сжатии не наблюдается, т.е. нанотрубка сохраняет полупроводниковые свойства, но шириной запрещенной зоны можно эффективно управлять с помощью одноосной нагрузки, поскольку зависимости щелей  $E_g(G)$  и  $E_g(D)$  от  $\Delta h_z$  почти линейные.

Зависимости смещения уровней зонной структуры полупроводниковых нанотрубок (12,1) от линейных деформаций  $\Delta h_z$  в основном аналогичны (10,5). Они определяются разнонаправленным смещением и конкуренцией двух минимальных щелей, а также кратными изменениями их

Таблица 1. Энергии (эВ) максимумов валентной зоны ( $\nu$ ) и минимумов зоны проводимости ( $c$ ) нанотрубки (8,7) в различных точках зоны Бриллюэна в зависимости от величины растяжения и сжатия ( $\Delta h_z$ , %)

| $\Delta h_z$ | Зона  | A     | B     | C     | D     | E     | F     | G     | H     |
|--------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 0            | $c$   | 0.39  | 0.68  | 1.04  | 1.15  | 1.11  | 1.09  | 0.92  | 0.95  |
|              | $\nu$ | -0.39 | -0.74 | -1.43 | -1.73 | -2.24 | -2.33 | -2.48 | -2.57 |
| 2            | $c$   | 0.39  | 0.67  | 1.05  | 1.15  | 1.12  | 1.07  | 0.9   | 0.91  |
|              | $\nu$ | -0.39 | -0.74 | -1.43 | -1.71 | -2.24 | -2.34 | -2.5  | -2.57 |
| 5            | $c$   | 0.45  | 0.68  | 1.06  | 1.14  | 1.10  | 1.01  | 0.88  | 0.4   |
|              | $\nu$ | -0.45 | -0.7  | -1.46 | -1.71 | -2.21 | -2.33 | -2.56 | -2.51 |
| -2           | $c$   | 0.41  | 0.7   | 1.04  | 1.16  | 1.12  | 1.12  | 0.95  | 1.0   |
|              | $\nu$ | -0.41 | -0.77 | -1.41 | -1.74 | -2.1  | -2.32 | -2.45 | -2.58 |
| -5           | $c$   | 0.33  | 0.74  | 1.04  | 1.22  | 1.15  | 1.22  | 0.9   | 1.01  |
|              | $\nu$ | -0.33 | -0.81 | -1.35 | -1.73 | -2.04 | -2.27 | -2.36 | -2.47 |

**Таблица 2.** Энергии максимумов валентной зоны и минимумов зоны проводимости нанотрубки (10,5) в зависимости от  $\Delta h_z$ 

| $\Delta h_z$ | Зона | A     | B     | C     | D     | E     | F     | G     | H     |
|--------------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 0            | c    | 1.05  | 1.16  | 1.01  | 0.64  | 1.26  | 0.77  | 0.33  | 1.14  |
|              | v    | -1.63 | -2.47 | -2.23 | -0.76 | -2.22 | -2.51 | -0.33 | -1.43 |
| 2            | c    | 1.09  | 1.09  | 1.04  | 0.71  | 1.19  | 0.79  | 0.25  | 1.1   |
|              | v    | -1.75 | -2.42 | -2.33 | -0.84 | -2.16 | -2.62 | -0.25 | -1.37 |
| 5            | c    | 1.14  | 0.97  | 1.06  | 0.8   | 1.1   | 0.8   | 0.13  | 1.    |
|              | v    | -1.86 | -2.36 | -2.45 | -0.97 | -2.08 | -2.76 | -0.13 | -1.3  |
| -2           | c    | 1.0   | 1.25  | 0.99  | 0.56  | 1.33  | 0.79  | 0.42  | 1.21  |
|              | v    | -1.54 | -2.52 | -2.13 | -0.66 | -2.25 | -2.4  | -0.42 | -1.51 |
| -5           | c    | 0.97  | 1.38  | 0.97  | 0.47  | 1.46  | 0.75  | 0.61  | 1.35  |
|              | v    | -1.33 | -2.58 | -1.92 | -0.47 | -2.32 | -2.22 | -0.5  | -1.61 |

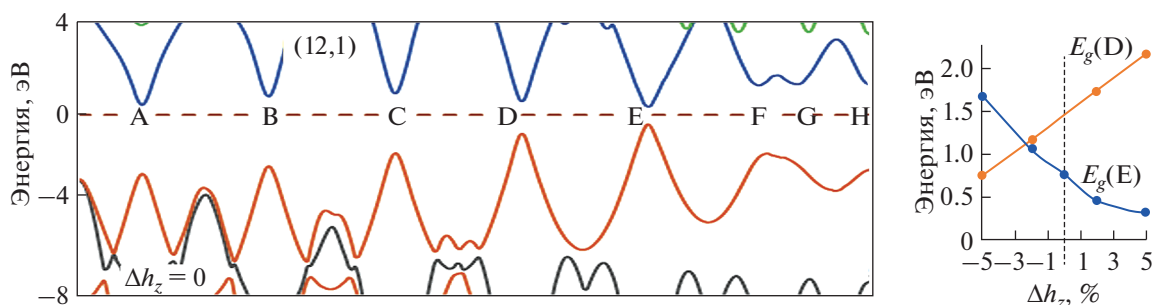
**Таблица 3.** Энергии максимумов валентной зоны и минимумов зоны проводимости нанотрубки (12,1) в зависимости от  $\Delta h_z$ 

| $\Delta h_z$ | Зона | A     | B     | C     | D     | E     | F     | G     | H     |
|--------------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 0            | c    | 0.45  | 0.82  | 0.97  | 0.64  | 0.39  | 1.31  | 1.36  | 1.36  |
|              | v    | -2.54 | -2.2  | -1.66 | -0.83 | -0.39 | -1.67 | -1.89 | -2.38 |
| 2            | c    | 0.55  | 0.92  | 1.08  | 0.77  | 0.23  | 1.22  | 1.31  | 1.28  |
|              | v    | -2.72 | -2.39 | -1.99 | -0.98 | -0.23 | -1.51 | -1.71 | -2.25 |
| 5            | c    | 0.72  | 1.08  | 1.24  | 1.0   | 0.16  | 1.14  | 1.28  | 1.24  |
|              | v    | -2.92 | -2.69 | -2.0  | -1.16 | -0.16 | -1.25 | -1.47 | -2.41 |
| -2           | c    | 0.47  | 0.83  | 0.98  | 0.63  | 0.59  | 1.55  | 1.54  | 1.55  |
|              | v    | -2.24 | -1.94 | -1.35 | -0.54 | -0.47 | -1.73 | -2.03 | -2.41 |
| -5           | c    | 0.31  | 0.67  | 0.8   | 0.36  | 0.92  | 1.7   | 1.62  | 1.67  |
|              | v    | -1.91 | -1.62 | -1.04 | -0.30 | -0.76 | -2.04 | -2.34 | -2.67 |

энергий при растяжении и сжатии (рис. 4, табл. 3). Отклик нанотрубки (12,1) на скручивание существенно более слабый по сравнению с трубкой (10,5).

Рис. 5 и табл. 4 отражают эволюцию зонной структуры и минимальной щели при растяжении и сжатии трубки (9,6). Это металлическая трубка с

мини-щелью  $E_g(F) = 0.035$  эВ в точке F на границе между состояниями с  $L = 1$  и  $2$  и  $k = 0$  [2, 24–26]. И растяжение, и сжатие сопровождаются быстрым увеличением щели  $E_g(F)$  до 0.32 и 0.22 эВ. Щель  $E_g(F)$  отделена от остальных прямых оптических переходов на 2–3 эВ, и они не образуют состояний в области уровня Ферми ни при растяжении,

**Рис. 4.** Зонная структура и изменение энергии двух минимальных оптических щелей при растяжении и сжатии нанотрубки (12,1).

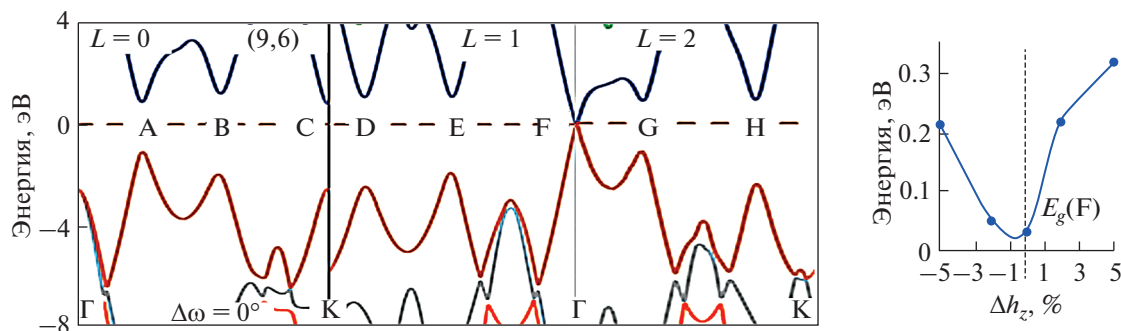


Рис. 5. Зонная структура и изменение энергии минимальной оптической щели при растяжении и сжатии нанотрубки (9,6).

ни при сжатии трубки, в отличие от ее скручивания против винтовой оси трубки, когда щель  $E_g(A)$  быстро убывает и опускается ниже щели  $E_g(F)$  [15].

#### Нанотрубка типа “кресло”

Обсудим теперь нехиральную трубку (7,7) типа “кресло”. Как видно из рис. 6 и табл. 5, в свободном состоянии она обладает металлической зонной структурой из-за пересечения граничных  $\pi$ -полос в точке А с  $L = 0$ , причем ни растяжение, ни сжатие не вызывают расщепления этих вырожденных уровней. Таким образом, металлический тип электронного строения устойчив по отношению к одноосной деформации. Этот результат резко отличается от реакции трубки на ее скручивание вокруг оси  $z$ , которое открывает щель  $E_g(A)$  в запрещенной зоне, которая быстро достигает  $\sim 1$  эВ и индуцирует переход металл–полупроводник.

#### Нанотрубки типа “зигзаг”

Как следует из рис. 7, 8 и табл. 6, 7, отклик зонной структуры полупроводниковых нехиральных нанотрубок типа “зигзаг” (13,0) с  $p = 1$  и (11,0) с  $p = -1$  на одноосные деформации очень сильный. Он определяется быстрым и разнонаправленным изменением двух минимальных щелей. В трубке (13,0) это щели  $E_g(E)$  и  $E_g(F)$ , энергии которых для невозмущенной структуры равны 0.85 и 1.47 эВ. При сжатии трубки (13,0) щель  $E_g(E)$  падает до 0.31 эВ, а при растяжении  $E_g(F)$  убывает до 0.69 эВ. При  $\Delta h_z \approx 2\%$  зависимости энергии этих прямых переходов от  $\Delta h_z$  пересекаются и  $E_g(E) = E_g(F) = 1.25$  эВ. В трубке (11,0) точка пересечения энергии двух минимальных щелей расположена при отрицательном значении  $\Delta h_z \approx -2\%$ , когда значение 1.25 эВ отвечает энергии переходов  $E_g(E)$  и  $E_g(D)$ . Путем растяжения и сжатия минимальную щель  $E_g(E)$  в трубке (11,0) можно варьировать в интервале 0.22–1.25 эВ. В нанотрубках

Таблица 4. Энергии максимумов валентной зоны и минимумов зоны проводимости нанотрубки (9,6) в зависимости от  $\Delta h_z$

| $\Delta h_z$ | Зона     | A     | B     | C     | D     | E     | F      | G     | H     |
|--------------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|-------|-------|
| 0            | <i>c</i> | 0.88  | 1.21  | 0.8   | 1.09  | 1.11  | 0.02   | 0.93  | 0.96  |
|              | <i>v</i> | -1.11 | -2.0  | -2.56 | -2.45 | -1.90 | -0.02  | -1.1  | -2.46 |
| 2            | <i>c</i> | 0.9   | 1.16  | 0.78  | 1.03  | 1.12  | 0.11   | 0.89  | 0.96  |
|              | <i>v</i> | -1.16 | -1.96 | -2.63 | -2.44 | -1.96 | -0.11  | -1.1  | -2.48 |
| 5            | <i>c</i> | 0.97  | 1.11  | 0.79  | 0.96  | 1.15  | 0.16   | 0.85  | 0.97  |
|              | <i>v</i> | -1.24 | -1.9  | -2.72 | -2.38 | -2.05 | -0.16  | -0.98 | -2.55 |
| -2           | <i>c</i> | 0.87  | 1.31  | 0.85  | 1.21  | 1.16  | 0.027  | 1.02  | 1.01  |
|              | <i>v</i> | -1.03 | -1.95 | -2.49 | -2.46 | -1.81 | -0.027 | -1.16 | -2.48 |
| -5           | <i>c</i> | 0.78  | 1.37  | 0.87  | 1.31  | 1.11  | 0.11   | 1.06  | 1.0   |
|              | <i>v</i> | -0.92 | -2.11 | -2.37 | -2.52 | -1.72 | -0.11  | -1.24 | -2.22 |

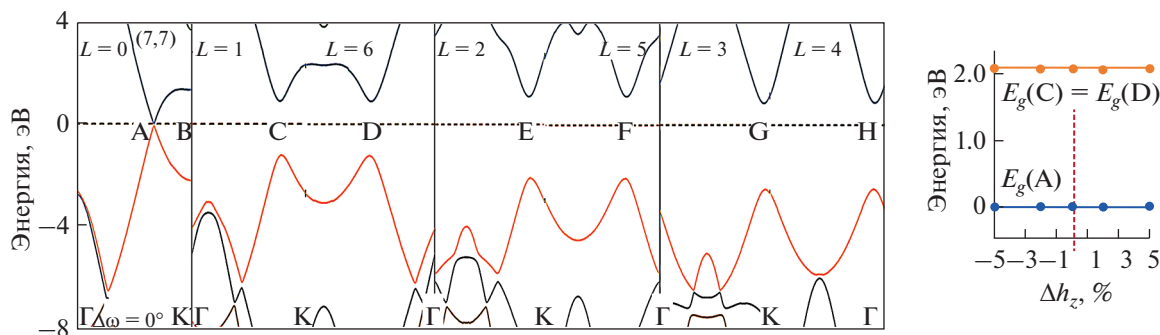


Рис. 6. Зонная структура и изменение энергии двух минимальных оптических щелей при растяжении и сжатии нанотрубки (7,7).

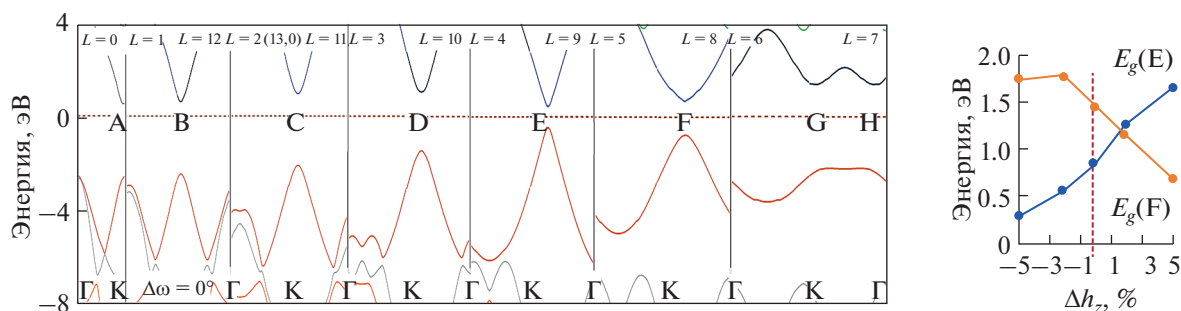


Рис. 7. Зонная структура и изменение энергии двух минимальных оптических щелей при растяжении и сжатии нанотрубки (13,0).

(13,0) и (11,0) изменения энергии прямых переходов с деформацией приближенно линейные. Как установлено в [15], скручивание полупроводниковых трубок (13,0) и (11,0) вызывает лишь очень слабое возмущение зонной структуры: в (13,0) минимальная щель увеличивается от 0.85 до 0.94 эВ, а в трубке (11,0) она убывает от 0.78 до 0.73 эВ, причем изменения энергии других переходов также ограничиваются ~0.1 эВ.

В идеальной квазиметаллической зигзагообразной трубке (12,0) с  $p = 0$  и растяжение, и сжатие приводят к быстрому увеличению мини-щели  $E_g(E)$  в точке E с  $L = 8$  от 0.04 до 0.8–0.9 эВ (рис. 9, табл. 8). Кроме того, вблизи  $\Delta h_z = -5\%$  дно зоны проводимости смещается из точки E в точку A, и минимальным оказывается непрямой переход между состояниями  $E_v(E)$  и  $E_c(A)$ . Напомним, что отклик этой трубки на скручивание также до-

Таблица 5. Энергии максимумов валентной зоны и минимумов зоны проводимости нанотрубки (7,7) в зависимости от  $\Delta h_z$

| $\Delta h_z$ | Зона | A | B     | C     | D     | E     | F     | G     | H     |
|--------------|------|---|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 0            | c    | 0 | 1.32  | 0.89  | 0.89  | 1.09  | 1.09  | 0.87  | 0.87  |
|              | v    | 0 | -2.20 | -1.21 | -1.21 | -2.08 | -2.08 | -2.53 | -2.53 |
| 2            | c    | 0 | 1.31  | 0.93  | 0.93  | 1.09  | 1.09  | 0.86  | 0.86  |
|              | v    | 0 | -1.95 | -1.19 | -1.19 | -2.08 | -2.08 | -2.51 | -2.51 |
| 5            | c    | 0 | 1.0   | 0.92  | 0.92  | 1.06  | 1.06  | 0.8   | 0.8   |
|              | v    | 0 | -1.65 | -1.21 | -1.21 | -2.11 | -2.11 | -2.54 | -2.54 |
| -2           | c    | 0 | 1.34  | 0.93  | 0.93  | 1.14  | 1.14  | 0.94  | 0.94  |
|              | v    | 0 | -2.41 | -1.19 | -1.19 | -2.04 | -2.04 | -2.46 | -2.46 |
| -5           | c    | 0 | 1.29  | 0.95  | 0.95  | 1.20  | 1.20  | 1.02  | 1.02  |
|              | v    | 0 | -1.77 | -1.14 | -1.14 | -1.96 | -1.96 | -2.39 | -2.39 |



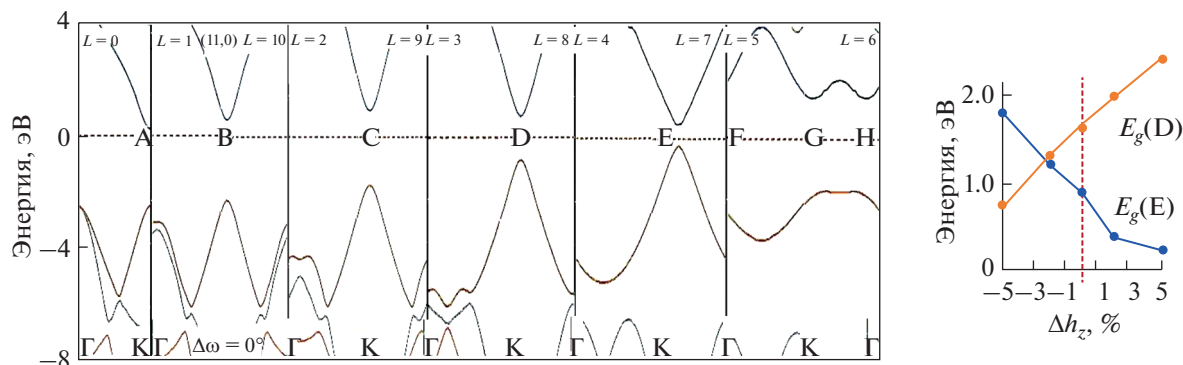


Рис. 8. Зонная структура и изменение энергии двух минимальных оптических щелей при растяжении и сжатии нанотрубки (11,0).

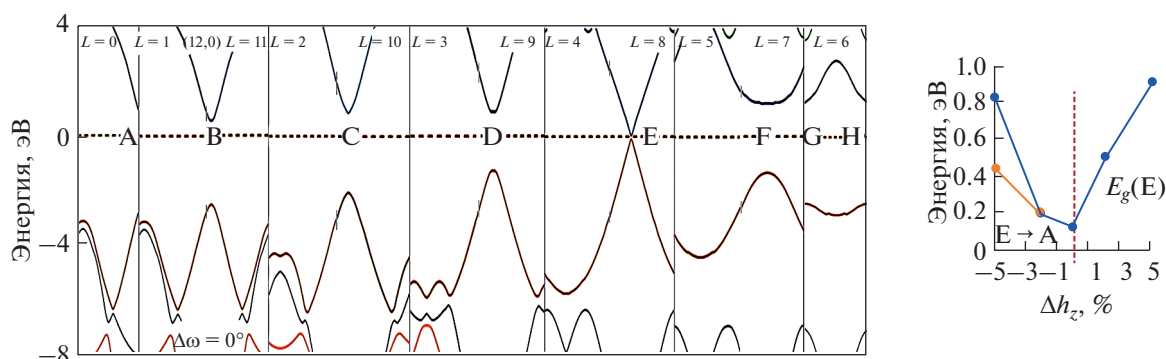


Рис. 9. Зонная структура и изменение энергии минимальной оптической щели при растяжении и сжатии нанотрубки (12,0).

вольно сильный: минимальная щель  $E_g(E)$  возрастает до 0.3 эВ [15]. В рассчитанных нехиральных нанотрубках изменения запрещенной зоны с деформацией приближенно линейные.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассчитано влияние растяжения и сжатия на зонную структуру углеродных нанотрубок. Результаты сопоставлены с электронными эффек-

Таблица 6. Энергии максимумов валентной зоны и минимумов зоны проводимости нанотрубки (13,0) в зависимости от  $\Delta h_z$

| $\Delta h_z$ | Зона | A     | B     | C     | D     | E     | F     | G     | H     |
|--------------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 0            | c    | 0.52  | 0.63  | 0.99  | 1.04  | 0.42  | 0.71  | 1.4   | 1.4   |
|              | v    | -2.64 | -2.48 | -2.10 | -1.46 | -0.43 | -0.76 | -2.16 | -2.16 |
| 2            | c    | 0.64  | 0.75  | 1.11  | 1.13  | 0.68  | 0.58  | 1.36  | 1.36  |
|              | v    | -2.68 | -2.66 | -2.28 | -1.57 | -0.58 | -0.58 | -1.95 | -1.95 |
| 5            | c    | 0.63  | 0.86  | 1.14  | 1.19  | 0.83  | 0.34  | 1.25  | 1.25  |
|              | v    | -3.02 | -2.93 | -2.54 | -1.88 | -0.84 | -0.35 | -1.71 | -1.71 |
| -2           | c    | 0.35  | 0.48  | 0.83  | 0.79  | 0.29  | 0.86  | 1.42  | 1.42  |
|              | v    | -2.53 | -2.47 | -1.94 | -1.30 | -0.28 | -0.94 | -2.39 | -2.39 |
| -5           | c    | 0.17  | 0.43  | 0.64  | 0.57  | 0.16  | 0.51  | 1.11  | 1.6   |
|              | v    | -2.21 | -2.03 | -1.63 | -0.98 | -0.15 | -1.25 | -2.61 | -2.61 |

**Таблица 7.** Энергии максимумов валентной зоны и минимумов зоны проводимости нанотрубки (11,0) в зависимости от  $\Delta h_z$ 

| $\Delta h_z$ | Зона | A     | B     | C     | D     | E     | F     | G     | H     |
|--------------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 0            | c    | 0.27  | 0.64  | 1.01  | 0.81  | 0.52  | 1.99  | 1.48  | 1.48  |
|              | v    | -2.54 | -2.38 | -1.77 | -0.84 | -0.26 | -2.6  | -1.83 | -1.83 |
| 2            | c    | 0.28  | 0.65  | 1.02  | 0.86  | 0.19  | 1.85  | 1.32  | 1.32  |
|              | v    | -2.85 | -2.62 | -2.02 | -1.12 | -0.19 | -2.52 | -1.75 | -1.75 |
| 5            | c    | 0.43  | 0.71  | 1.16  | 1.05  | 0.11  | 1.72  | 1.22  | 1.22  |
|              | v    | -3.1  | -2.1  | -2.29 | -1.36 | -0.11 | -2.31 | -1.52 | -1.52 |
| -2           | c    | 0.31  | 0.69  | 1.06  | 0.83  | 0.9   | 2.2   | 1.73  | 1.73  |
|              | v    | -2.2  | -1.95 | -1.42 | -0.49 | -0.31 | -2.72 | -1.87 | -1.87 |
| -5           | c    | 0.18  | 0.52  | 0.87  | 0.6   | 1.27  | 2.31  | 1.85  | 1.85  |
|              | v    | -1.85 | -1.59 | -1.05 | -0.15 | -0.55 | -2.87 | -2.18 | -2.18 |

**Таблица 8.** Энергии максимумов валентной зоны и минимумов зоны проводимости нанотрубки (12,0) в зависимости от  $\Delta h_z$ 

| $\Delta h_z$ | Зона | A     | B     | C     | D     | E     | F     | G     | H     |
|--------------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 0            | c    | 0.38  | 0.54  | 0.86  | 0.91  | 0.02  | 1.21  | 1.32  | 1.32  |
|              | v    | -2.69 | -2.51 | -2.03 | -1.27 | -0.02 | -1.33 | -2.45 | -2.45 |
| 2            | c    | 0.38  | 0.64  | 1.04  | 1.0   | 0.25  | 1.04  | 1.32  | 1.32  |
|              | v    | -2.81 | -2.77 | -2.24 | -1.34 | -0.25 | -1.16 | -2.27 | -2.27 |
| 5            | c    | 0.56  | 0.82  | 1.15  | 1.16  | 0.45  | 0.9   | 1.29  | 1.29  |
|              | v    | -2.99 | -2.9  | -2.43 | -1.54 | -0.46 | -0.87 | -1.99 | -1.99 |
| -2           | c    | 0.32  | 0.42  | 0.86  | 0.73  | 0.12  | 1.37  | 1.42  | 1.42  |
|              | v    | -2.55 | -2.33 | -1.86 | -1.09 | -0.07 | -1.5  | -2.62 | -2.62 |
| -5           | c    | 0.21  | 0.52  | 0.74  | 0.58  | 0.62  | 1.7   | 1.62  | 1.62  |
|              | v    | -2.08 | -1.86 | -1.38 | -0.58 | -0.21 | -1.65 | -2.75 | -2.75 |

тами скручивания нанотрубок. Установлено, что возмущение зонной структуры под действием механических деформаций может резко различаться в зависимости от геометрии нанотрубок. Полученные результаты можно использовать для управления оптическими и электрическими свойствами материала и дизайна наноэлектромеханических систем на основе углеродных нанотрубок.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОНХ РАН.

#### КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S.* Physical Properties of Carbon Nanotubes. London: Imperial College Press, 1998.
2. *Дьячков П.Н.* Электронные свойства и применение нанотрубок. М.: Лаборатория знаний, 2020. 491 с.
3. *Sazonova V., Yaish Y., Üstünel H. et al.* // Nature. 2004. V. 431. P. 284.  
<https://doi.org/10.1038/nature02905>
4. *Tomblor T.W., Zhou C., Alexseyev L. et al.* // Nature. 2000. V. 405. P. 769.  
<https://doi.org/10.1038/35015519>
5. *Gómez-Navarro C., de Pablo P.J., Gomez-Herrero J.* // Adv. Mater. 2004. V. 16. P. 549.  
<https://doi.org/10.1007/s10854-006-8094-7>
6. *Semet V., Binh V.T., Guillot D.K. et al.* // Appl. Phys. Lett. 2005. V. 87. P. 223103.  
<https://doi.org/10.1063/1.2136229>
7. *Cohen-Karni T., Segev L., Cohen S.R. et al.* // Nature Nanotechnol. 2006. V. 1. P. 36.  
<https://doi.org/10.1038/nnano.2006.57>



8. *Changa T.* // Appl. Phys. Lett. 2007. V. 90. P. 201910. <https://doi.org/10.1063/1.2739325>
9. *Craighead H.G.* // Science. 2000. V. 290. P. 1532. <https://doi.org/10.1126/science.290.5496.1532>
10. *Wang M.Z.* Carbon Nanotube NEMS // Encyclopedia of Nanotechnology / Ed. Bhushan B. Dordrecht: Springer, 2015. P. 11.
11. *Chiu H.Y., Hung P., Postma H.W.C. et al.* // Nano Lett. 2008. V. 8. P. 4342. <https://doi.org/10.1021/nl802181c>
12. *Chaste J., Eichler A., Moser J. et al.* // Nature Nanotechnol. 2012. V. 7. P. 301. <https://doi.org/10.1038/nnano.2012.42>
13. *Moser J., Güttinger J., Eichler A. et al.* // Nature Nanotechnol. 2013. V. 8. P. 493. <https://doi.org/10.1038/ncomms3843>
14. *Jensen K., Weldon J., Garcia H. et al.* // Nano Lett. 2007. V. 7. P. 3508. <https://doi.org/10.1021/nl0721113>
15. *D'yachkov P.N.* // Russ. J. Inorg. Chem. 2021. V. 66. № 6. P. 852. [Дьячков П.Н. // Журн. неорган. химии. 2021. Т. 66. № 6. С. 750. <https://doi.org/10.31857/S0044457X21060088>]
16. *Yang L., Anantram M.P., Han J. et al.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 60. P. 13874. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.13874>
17. *Yang L., Han J.* // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. P. 154. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85>
18. *Kane C.L., Mele E.J.* // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. P. 1932. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.1932>
19. *Bundera J.E., Hill J.M.* // J. Appl. Phys. 2010. V. 107. Art. 023511. <https://doi.org/10.1063/1.3289320>
20. *Heyd R., Charlier A., McRae E.* // Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. 6820. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.6820>
21. *Dmitrović S., Milošević I., Damnjanović M. et al.* // J. Phys. Chem. C. 2015. V. 119. P. 13922. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b10718>
22. *Rocheffort A., Avouris P., Lesage F. et al.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 60. P. 13824. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.13824>
23. *Bailey S.W.D., Tomanek D., Kwon Y.-K. et al.* // Europhys. Lett. 2002. V. 59. P. 75. <https://doi.org/10.1209/epl/i2002-00161-8>
24. *D'yachkov P.N., Makaev D.V.* // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. Art. 195411. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.195411>
25. *D'yachkov P.N.* Quantum chemistry of nanotubes: electronic cylindrical waves. London: CRC Press, Taylor and Francis, 2019. 212 p.
26. *D'yachkov P.N.* // Russ. J. Inorg. Chem. 2018. V. 63. № 1. P. 55. [Дьячков П.Н. // Журн. неорган. химии. 2018. Т. 63. № 1. С. 60.] <https://doi.org/10.1134/S0036023618010072>