

11,12

Зонная структура графеновых нанолент в упругопластическом поле деформаций

© А.С. Бондарь, О.С. Лебедева, Н.Г. Лебедев

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
„Волгоградский государственный университет“,
Волгоград, Россия.

E-mail: nikolay.lebedev@volsu.ru

Поступила в Редакцию 30 апреля 2026 г.

В окончательной редакции 20 июня 2026 г.

Принята к публикации 22 июня 2026 г.

Представлена модель электронного строения графеновых нанолент кресельной и зигзагообразной модификаций при наличии упругопластических деформаций структуры кристаллита. В модели в рамках метода сильной связи учтена неоднородность прыжкового интеграла, обусловленная деформациями различного вида. Скорректированы граничные условия для нанолент обеих модификаций, в которых заложены различия в длинах С-С и С-Н связей и дифференциация длин связей из-за нарушения точечной симметрии структуры. Результаты модели согласуются с литературными данными для недеформированных нанолент с однородными связями и прыжковым интегралом.

Расчеты показали, что можно выделить 6 групп деформированных нанолент кресельного типа, энергия запрещенной зоны которых монотонно убывает с увеличением ее ширины как $\sim 1/N$, где N — число гексагонов в поперечнике. Деформации разного вида (растяжение, сдвиг, смешанные) создают осцилляции энергетической зоны нанолент, амплитуда которых зависит от ширины кристаллита. Зигзагообразные ленты проявляют металлические свойства в недеформированном состоянии и при деформации одноосного растяжения. В их электронном спектре запрещенная зона создается сдвиговыми и смешанными деформациями.

Ключевые слова: графеновые наноленты, метод сильной связи, упругопластические деформации, граничные условия, неоднородный прыжковый интеграл.

DOI: 10.61011/FTT.2026.06.63577.9617

1. Введение

На протяжении более десятилетия графен является одним из самых обсуждаемых в научной литературе аллотропных углеродных материалов. Незатухающий интерес связан с перспективами разработки на его основе материалов с новыми и улучшенными свойствами, которые имеют прикладное значение для развития элементной базы электроники, наноструктурного композитного материаловедения и различной техники. Например, на его основе могут быть разработаны наноструктурные материалы для хранения энергии [1]. Они имеют хорошую удельную емкость, высокий кулоновский КПД, долгий срок службы по сравнению с аналогичными материалами. Также на основе графена могут быть разработаны композитные материалы. В работе [2] показано, что увеличение загрузки графена в композитный материал привело к последовательному улучшению прочности на растяжение, прочности на изгиб и ударопрочности.

Одним из самых перспективных направлений использования графена и подобных ему 2D материалов, таких как силицен, германен, станен и др. [3], это создание более быстрых транзисторов, прозрачных и гибких экранов, аккумуляторов высокой емкости, суперконденсаторов, высокочувствительных датчиков. Однако в некоторых из этих направлений подобный материал

должен представлять собой полупроводник. В чистом виде графен является полуметаллом, хорошим проводником из-за отсутствия запрещенной зоны [4].

Управление свойствами графена осуществляется различными способами. Это конструирование композитных материалов [5,6], гравировка поверхности различными адсорбентами [7], конструирование многослойных структур [8], воздействие внешними электромагнитными полями [9], введением в структуру различных примесей [10] и т. д. Ранее в работе [11] показано, что получить запрещенную зону в графене возможно при различных деформациях его структуры. В работе предложен модифицированный электронный спектр деформированного графена, полученный в рамках метода сильной связи. Результаты управления энергетической зоной с помощью одноосных и двухосных деформаций согласуются с данными, представленными в обзоре [4] которые были получены и в рамках метода сильной связи, и *ab initio* методов. Все представленные теоретические исследования, несмотря на широкий разброс результатов у разных авторов, предсказывают появление запрещенной зоны в графене при одноосной или двухосной деформации.

В теоретических исследованиях графен представляется бесконечной периодической структурой, что позволяет достаточно несложно рассчитать его зонную структуру, в некоторых простых приближениях полу-

читать аналитическое выражение для спектра электронов проводимости. В реальных экспериментах синтезированный графен имеет конечные размеры, а для развития элементной базы электроники предпочтительно использовать протяженные графеновые структуры — наноленты, которые в зависимости от геометрической модификации могут иметь собственную энергетическую зону, проявлять полупроводниковые свойства [12]. В этом же обзоре приведены результаты теоретических расчетов, свидетельствующие о том, что управлять физическими свойствами нанолент, как и графена, можно с помощью деформации их структуры. Теоретические *ab initio* расчеты показали, что ширина запрещенной зоны графеновых нанолент может осциллировать со значительной амплитудой в зависимости от величины относительной деформации растяжения (сжатия). Авторы проведенных расчетов объясняют данный эффект изменением зонной структуры, а именно деформацией зоны Бриллюэна графена и смещением разрешенных значений волновых векторов ленты относительно специальных К-точек зоны.

Пример проявления деформаций структуры в работе [13], в которой исследовано влияние усредненного по объему кристаллита поля пластических деформаций на пьезорезистивные свойства проводящих и полупроводниковых графеновых нанолент. Показано нарушение монотонности зависимости продольной компоненты тензора пьезопроводимости от относительной деформации растяжения (сжатия) в окрестности точки пластической деформации. Кроме того, при наложении деформации наноленты могут терять плоскую форму и становятся волнообразными, как показано в работе [14] на примере бислойной ленты.

Деформацию графена и нанолент экспериментально осуществляют с помощью зонда атомно силового микроскопа или деформации подложки, на которую помещается образец [4]. Комбинируя данные методы, можно создать и одноосную, и двухосную деформацию кристаллита. Однако, результаты экспериментальных исследований, также представленные в обзорах [4,12] свидетельствуют, что открытие запрещенной зоны даже в сильно деформированных графене и лентах не происходит. Авторы упомянутых исследований объясняют это поликристалличностью использованных образцов графена, наличием границ зерен, различных дефектов и адсорбированных примесей [4]. Таким образом, в настоящий момент является проблематичным экспериментально исследовать деформационные свойства идеального листа графена и идеальной наноленты заданной ширины. Вероятнее всего современная тенденция миниатюризации элементной базы электроники в ближайшие годы позволит решить эту экспериментальную задачу. Акцент теоретических исследований свойств двумерных структур смещается в сторону изучения разного рода гетероструктур с участием графена (например, [15,16]).

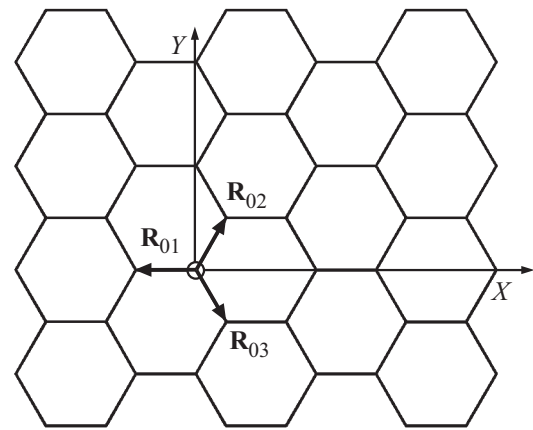


Рис. 1. Геометрическая модель графена.

Целью настоящей работы является разработка модели графеновых нанолент с учетом влияния упругопластических деформации структуры на их электронные свойства.

2. Модель электронного строения деформированного графена

На рис. 1 представлена геометрическая модель 2D гексагональной решетки графена. Ось Ox выбрана вдоль направления „кресло“, ось Oy — направления „зигзаг“. Ось Oz перпендикулярна плоскости рисунка. Векторы $\mathbf{R}_1$, $\mathbf{R}_2$, $\mathbf{R}_3$ соединяют рассматриваемый атом А с ближайшими соседями, их модуль в недеформированном состоянии равен $R_0 = 1.42 \text{ \AA}$. Для идеального недеформированного графена они принимают значения:

$$\mathbf{R}_{01} = (-R_0, 0, 0), \quad \mathbf{R}_{02} = \left(\frac{1}{2} R_0, \frac{\sqrt{3}}{2} R_0, 0 \right),$$

$$\mathbf{R}_{03} = \left(\frac{1}{2} R_0, -\frac{\sqrt{3}}{2} R_0, 0 \right).$$

Вектора основных трансляций $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ и $\mathbf{a}_3$ также выражаются через данные векторы и для недеформированного случая имеют следующий вид:

$$\mathbf{a}_{01} = \mathbf{R}_{02} - \mathbf{R}_{01} = \left(\frac{3}{2} R_0, \frac{\sqrt{3}}{2} R_0, 0 \right),$$

$$\mathbf{a}_{02} = \mathbf{R}_{03} - \mathbf{R}_{01} = \left(\frac{3}{2} R_0, -\frac{\sqrt{3}}{2} R_0, 0 \right), \quad \mathbf{a}_{03} = (0, 0, -c),$$

$$a_{01} = a_{02} = a_0 = \sqrt{3} R_0, \quad c = 3.4.$$

При деформации структуры изменяются длины химических связей, валентные и торсионные углы, т.е. изменяются точечные группы симметрии кристаллита. В общем случае вектор межатомных расстояний $\mathbf{R}_n$

определяется тензором дисторсий по следующей формуле [17]:

$$\mathbf{R}_n = (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})\mathbf{R}_{0n}, \quad (1)$$

где $\mathbf{R}_{0n}$ — начальные вектора между соседними атомами; $\hat{\mathbf{u}}$ — тензор дисторсий, включающий в себя в общем случае и упругую $\hat{\mathbf{u}}_e$, и пластическую часть $\hat{\mathbf{u}}_p$, $\hat{\mathbf{I}}$ — единичный тензор, символ $n = 1, 2, 3$ — индекс векторов расстояния между соседними атомами углерода.

Основные особенности зонной структуры графена описываются в рамках метода сильной связи для π -электронной подсистемы в приближении ближайших соседей. Гамильтониан гексагонального графена в рамках метода вторичного квантования можно представить в виде:

$$H = \sum_{j,n,\sigma} t_n a_{j\sigma}^+ a_{j+n\sigma}, \quad (2)$$

где t_n — интеграл перескока электрона между соседними атомами; $a_{j\sigma}^+$, $a_{j+n\sigma}$ — операторы Ферми рождения и уничтожения электрона на узле с координатами $\mathbf{r}_j$ и спином σ .

Закон дисперсии электронов в кристалле находится диагонализацией гамильтониана (2) после пространственного Фурье-преобразования операторов Ферми:

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\left(\sum_n t_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}\right) \left(\sum_n t_n e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}\right)}, \quad (3)$$

где $\mathbf{k}$ — волновой вектор, задаваемый в пределах двумерной зоны Бриллюэна (ЗБ) графена, содержащего $N \times N$ элементарных ячеек (ЭЯ), с базисными векторами $\mathbf{b}_{01}$ и $\mathbf{b}_{02}$:

$$\mathbf{k} = \frac{n_1}{N} \mathbf{b}_{01} + \frac{n_2}{N} \mathbf{b}_{02}, \quad n_i = -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2}, \quad i = 1, 2,$$

$$\mathbf{b}_{01} = \left(\frac{2\pi}{3R_0}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}R_0}\right), \quad \mathbf{b}_{02} = \left(\frac{2\pi}{3R_0}, -\frac{2\pi}{\sqrt{3}R_0}\right),$$

Деформация структуры обуславливает изменение не только структурного форм-фактора, но и энергетические характеристики электронов, такие как резонансные матричные элементы гамильтониана. Поэтому прыжковые интегралы t_n в общем случае изменяются неоднородно, чтобы учесть все деформационные эффекты в рамках построенной модели. Например, в работе [18] в рамках модели $t - t'$ выявлены интересные эффекты слияния точек Дирака в спектре графена при значении отношения $t/t' = 2$.

Зависимость t_n от длины межатомной связи рассчитана с использованием водородоподобных $2p_z$ орбиталей атома углерода, нормирована на недеформированное литературное значение 2.7 eV и аппроксимирована с использованием тензора деформации следующим образом:

$$t_n = 105.67 \cdot e^{-2.579|(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})\mathbf{R}_{0n}|}. \quad (4)$$

В формуле (4) прыжковый интеграл t_n в плоскости графена изменяется неодинаковым образом в зависимости от направления движения соседних атомов.

Учитывая формулы (1) и (4), выражение (3) для энергии электрона в деформированном графене будет иметь следующий вид:

$$E(\mathbf{k}) = \pm \left(t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 + 2t_1 t_2 \cos(\mathbf{k}(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{02} - \mathbf{R}_{01})) + \right. \\ \left. + 2t_1 t_3 \cos(\mathbf{k}(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{03} - \mathbf{R}_{01})) + \right. \\ \left. + 2t_2 t_3 \cos(\mathbf{k}(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{02} - \mathbf{R}_{03})) \right)^{1/2}, \quad (5)$$

где $\mathbf{k} \in 2D$ ЗБ деформированного графена, содержащего $N \times N$ ЭЯ:

$$\mathbf{k} = \frac{n_1}{N} \mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{N} \mathbf{b}_2, \quad n_i = -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2}, \quad i = 1, 2,$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{v} [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3], \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{v} [\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1], \quad v = \mathbf{a}_3 [\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2],$$

$$\mathbf{a}_1 = (\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{02} - \mathbf{R}_{01}),$$

$$\mathbf{a}_2 = (\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{03} - \mathbf{R}_{01}), \quad \mathbf{a}_3 = (0, 0, c).$$

3. Модель электронного строения графеновых нанолент с учетом полей пластических деформаций

Выше рассмотрены электронные свойства бесконечно го графена. В реальности в экспериментах синтезируются листы графена конечного размера, графеновые ленты, поперечные размеры которых порядка 1 nm (рис. 2). Электронный спектр нанолент выводится из исходного спектра графена (5) наложением условий квантования компоненты волнового вектора, поперечной длине ленты [12]:

$$q = \frac{2\pi s}{H}, \quad (s = 1, 2, \dots), \quad (6)$$

где H — ширина ленты.

Традиционно классификация графеновых нанолент (ГНЛ) осуществляется с помощью одного индекса, смысл которого зависит от геометрической конфигурации кристаллита. Через N -ZGNR обозначают зигзагообразные наноленты, где N равно числу атомов углерода, укладываемых в поперечном разрезе ленты, и N -AGNR — кресельные, для которых индекс N равен числу димеров углерода на срезе. В этой классификации ширина ГНЛ, граничные связи которой насыщены атомами водорода, выражается через индекс N следующей формулой [12]:

$$H = \begin{cases} \left(\frac{3}{2}N - 1\right)R_0 \equiv H_z \\ \frac{\sqrt{3}}{2}(N - 1)R_0 \equiv H_a \end{cases}, \quad (7)$$

где H_z — ширина зигзагообразной ленты, H_a — ширина кресельной ленты.

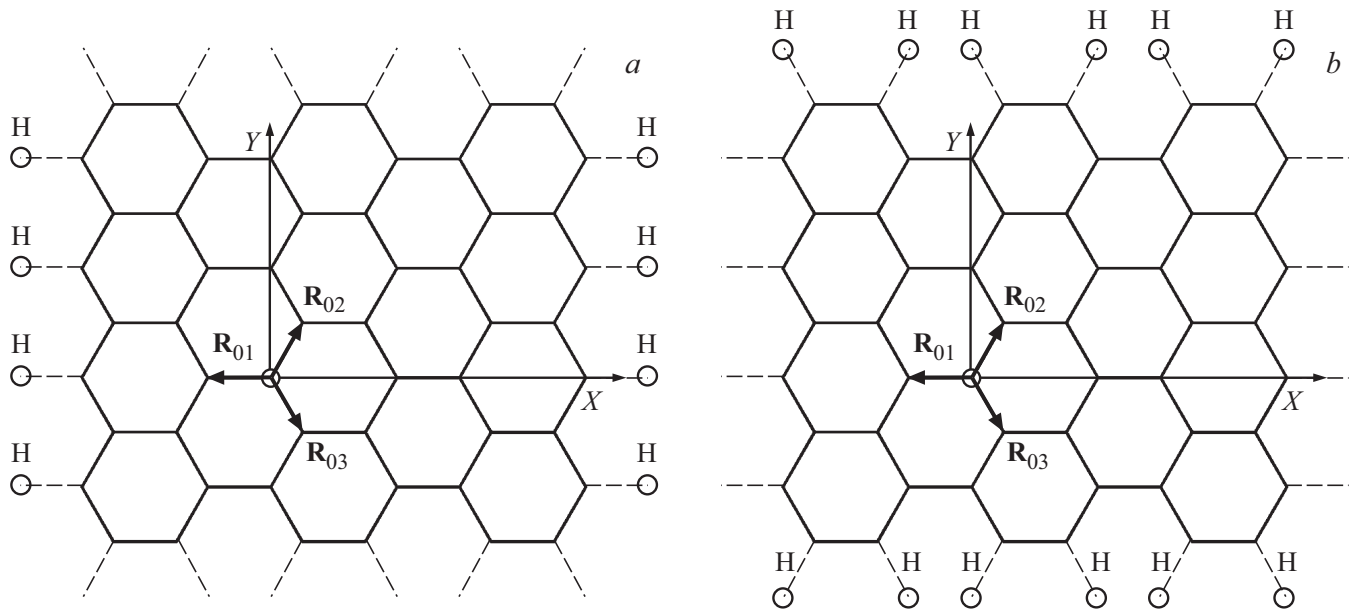


Рис. 2. Геометрическая модель нанолент: а) „zig-zag“, б) „arm-chair“.

Формула (7) удобна для моделирования деформаций растяжения (сжатия), когда тензор дисторсии содержит только диагональные компоненты. Кроме того, она не учитывает тот факт, что длина С-Н связи меньше длины С-С связи. Если моделировать сдвиговые и смешанные деформации ГНЛ, т. е. когда недиагональные компоненты тензора дисторсии отличны от нуля, а также учитывать неоднородность прыжкового интеграла, то целесообразно переопределить ширину ленты следующим образом (см. Приложение):

$$H = \begin{cases} \frac{1}{4} [2N(H_0 + R_{1x}) + 3R_{2x} + R_{3x} \\ \quad + (-1)^N (R_{3x} - R_{2x})] + 2R_{CH} \equiv H_z \\ H_0 \left(\frac{N}{2} + \frac{3}{4} + \frac{(-1)^N}{4} \right) - \\ \quad - R_{3y} \frac{1 + (-1)^N}{2} + 2R_{CH} \equiv H_a \end{cases}, \quad (8)$$

где R_{nx} , R_{ny} — проекции векторов длин связей $\mathbf{R}_n$ (формула (1)) на соответствующие оси выбранной в модели системы координат, N — количество гексагональных ячеек по ширине графена, $R_{CH} = 1.09 \text{ \AA}$ — учитывает замыкание граничных ненасыщенных связей атомами водорода.

Формула (8) сводится к литературной формуле (7), если учитывать только однородный прыжковый интеграл, равенство длин С-С связей и длину С-Н связи считать равной длине углеродной связи.

Модифицируя модель (5) с учетом (6) и (8), можно выразить зависимость энергии электронов от ширины

наноленты и тензора деформаций следующей формулой:

$$E(\mathbf{k}) = \pm \left(t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 + 2t_1t_2 \cos(\mathbf{k}_{z,a}(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{01} - \mathbf{R}_{02})) + 2t_1t_3 \cos(\mathbf{k}_{z,a}(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{01} - \mathbf{R}_{03})) + 2t_2t_3 \cos(\mathbf{k}_{z,a}(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{02} - \mathbf{R}_{03})) \right)^{1/2}, \quad (9)$$

где $\mathbf{k}_{z,a}$ — волновой вектор, задаваемый различным образом для ГНЛ „zig-zag“ и „arm-chair“.

А именно, для нанолент „zig-zag“ и „arm-chair“ волновой вектор $\mathbf{k}_{z,a}$ с учетом квантования поперечной компоненты будет иметь следующий вид:

$$\mathbf{k}_z = \begin{bmatrix} \frac{2\pi s}{H_z} \\ k_y \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{k}_a = \begin{bmatrix} k_x \\ \frac{2\pi s}{H_a} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (10)$$

4. Энергетическая зона в спектре „arm-chair“ нанолент

В рамках рассмотренной модели „arm-chair“ ГНЛ в зависимости от их ширины могут иметь как металлические, так и полуметаллические свойства. Граничные условия, принятые в модели, в виде замыкающих атомов водорода сильно влияют на электронно-энергетические свойства нанолент.

На рис. 3 представлена диаграмма зависимости ширины запрещенной зоны E_g от ширины наноленты (количество гексагональных ячеек N) без замыкания граничных связей атомами водорода и с замыканием. Как видно из диаграммы граничные условия сильно влияют

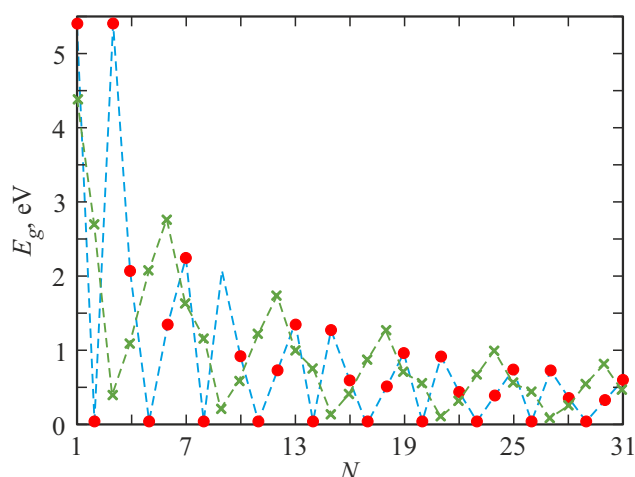


Рис. 3. Диаграмма зависимости ширины запрещенной зоны от количества гексагональных ячеек для „arm-chair“ лент. Символом „крестик“ обозначена лента с учетом замыкания водородом, символом „кружок“ обозначена лента без замыкания водородом

на свойство наноленты. Если сравнивать рассчитанные значения ширины запрещенной зоны с представленными в статьях [13,19,20], то видно, что порядок величины E_g совпадает. Однако в работе [13] замыкание границ с помощью атомарного водорода осуществлено без учета длины С-Н связи, что увеличивало ширину ГНЛ на длину С-С связи. Это аналогично уширению наноленты, но не учитывает краевые эффекты, связанные с различием длины химической связи. В работе [19] учитывались процессы релаксации краевых связей, что приводило к появлению запрещенной зоны у лент, которые ранее их не имели. Аналогичный результат дает построенная в настоящей работе модель (рис. 3). Из рисунка следует, что величина E_g изменяется немонотонно в зависимости от N , но нигде на показанном диапазоне не обращается в ноль. В литературных данных наличие или отсутствие энергетической зоны связано с числом атомов или димеров углерода по боковому срезу ГНЛ, которое кратно $3m-1$, $3m$, $3m+1$, где m целое число. В построенной модели можно выделить 6 групп нанолент, ширина запрещенной зоны которых определяется кратностью следующими числам $6m-5$, $6m-4$, ..., $6m$, где m целое число. Для каждой группы кратностей величина E_g убывает как $\sim 1/N$.

Понятно, что с ростом ширины ленты влияние разницы длин граничных связей уменьшается и для $N > 50$ оказывается уже незначительным. Но для узких лент ($N < 50$), имеющих потенциальное практическое применение в нанометровых элементах электроники, наличие ненулевой энергетической зоны является принципиальным. Учет описанных выше граничных эффектов можно считать более корректным приближением к реальным системам, поэтому далее используется формула ширины ленты (8), учитывающая замыкания границы ГНЛ С-Н

связями. Наноленты, для которых $N < 50$ о которых дальше будет идти речь, весьма малы, но их создание принципиально возможно, что было продемонстрировано в работе [21].

В рамках построенной модели далее рассматриваем поведение электронного строения нанолент в зависимости от типа и величины деформации. Некоторые графики зависимости величины E_g от относительной деформации растяжения-сжатия при одноосной деформации представлены на рис. 4. При одноосной деформации растяжения вдоль Ox ширина запрещенной зоны изменяется следующим образом. Если количество гексагональных ячеек N находится на участке убывания величины E_g , например, на участках 1–3, 7–9 и т.д., что соответствует кратностям $6m-5$, $6m-4$, $6m-3$ (рис. 3), то ширина запрещенной зоны вначале убывает практически до 0, затем снова возрастает и опять убывает (рис. 4, *b*) вплоть до допустимых значений относительной деформации $u_{xx} = 0.27$. При растяжении вдоль Oy (сжатии вдоль Ox) поведение E_g обратно описанному (рис. 4, *a*). Амплитуда колебаний уменьшается с ростом величины деформации.

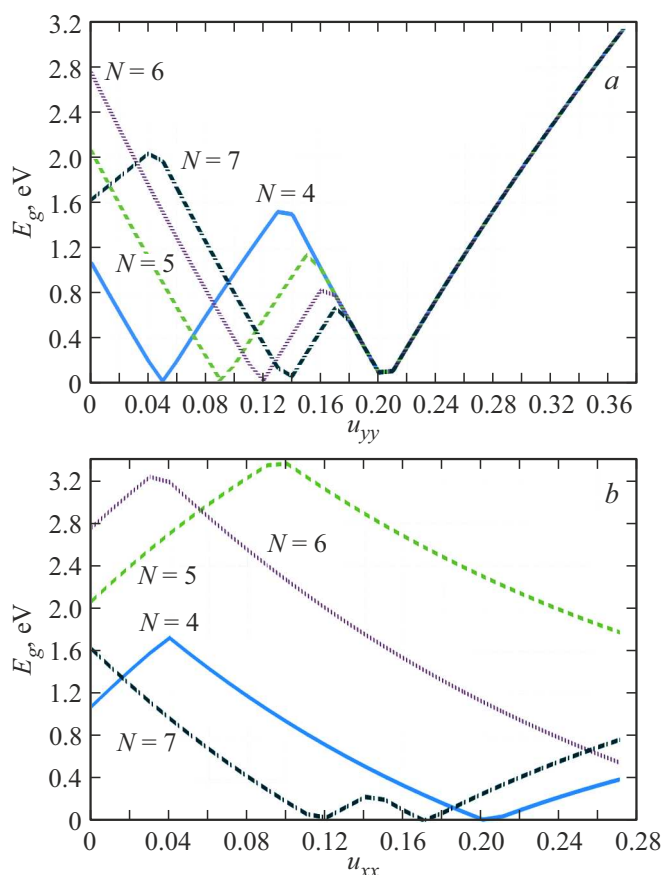


Рис. 4. Графики зависимости ширины запрещенной зоны для „arm-chair“ лент $N = 4, 5, 6, 7$ от деформации а) u_{yy} при растяжении вдоль оси Oy (по ширине ленты), б) u_{xx} — вдоль оси Ox (по длине ленты).

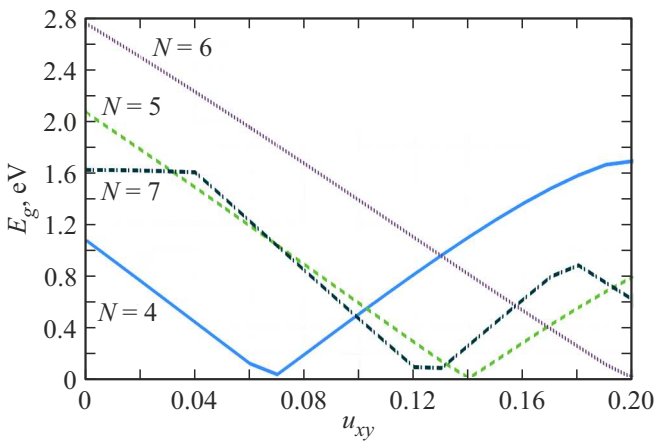


Рис. 5. Графики зависимости ширины запрещенной зоны от относительной деформации сдвига u_{xy} для „arm-chair“ лент с $N = 4, 5, 6, 7$.

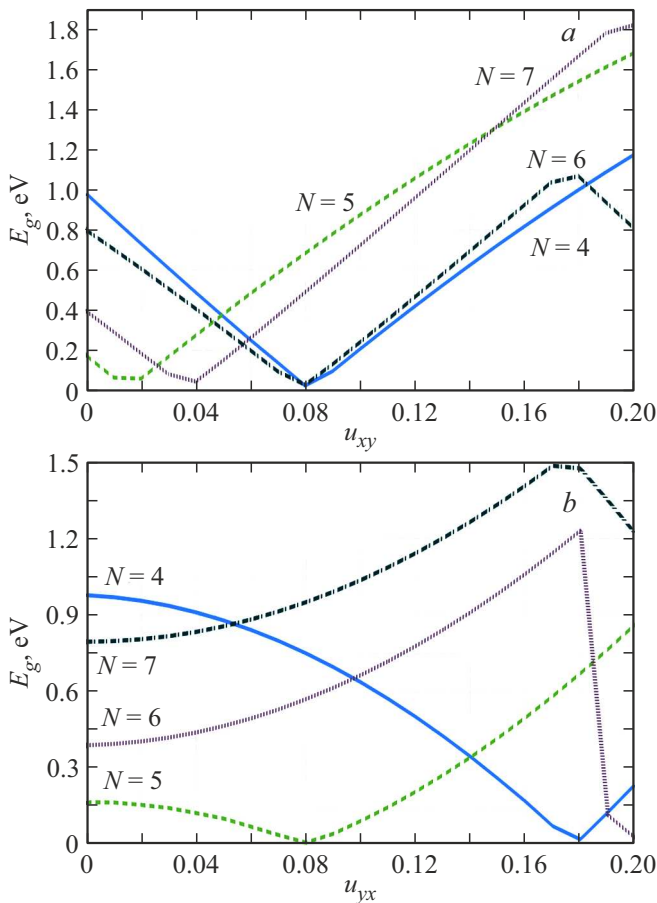


Рис. 6. Графики зависимости ширины запрещенной зоны E_g для „arm-chair“ лент $N = 4, 5, 6, 7$ при фиксированной деформации растяжения $u_{yy} = 0.1$ вдоль ширины ленты (Oy) и деформациях сдвига а) u_{xy} , б) u_{yx} .

При количестве гексагональных ячеек, находящихся на возрастающих участках, например, 4–6, 10–12 и т.д. что соответствует кратностям $6m-2$, $6m-1$, $6m$ (рис. 3), поведение ширины запрещенной зоны обратно опи-

санному выше. Порядок величины запрещенной зоны, полученной в рамках данной модели, подтверждается результатам экспериментальной работы [22].

При одноосной деформации сдвига u_{xy} ширина запрещенной зоны изменяется весьма неоднородно и, в отличие от деформаций растяжения-сжатия, вначале всегда убывает. Зависимость ширины запрещенной зоны от деформации u_{xy} для некоторых „arm-chair“ лент с $N = 4, 5, 6, 7$ представлены на рис. 5.

При смешанных деформациях, как и при деформациях только сдвига, ширина запрещенной зоны меняется также весьма неоднородно. Осциллирующий характер поведения величины E_g сохраняется. На рис. 6 представлены зависимости ширины энергетической зоны некоторых из „arm-chair“ лент с $N = 4, 5, 6, 7$ при различных смешанных деформациях.

В работе [22] измерения методом автоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) показали, что ленты шириной несколько нанометров, выращенные на карбиде кремния и которые должны обладать свойствами полуметалла, имели запрещенную зону 0.5 eV и больше. Авторы [23] исследовали структуру графеновых лент на карбиде кремния методами сканирующей туннельной и просвечивающей электронной микроскопии и выясняли причину широкой локальной запрещенной зоны. Несмотря на то, что полупроводниковые ленты были изогнуты, авторы отвергли вариант появления данной запрещенной зоны из-за деформации, а связали ее с ограниченными размерами лент.

Скорее всего в вышеописанных работах вклад в локальную запрещенную зону вносили и ограничение размеров ленты, и деформация. В случае лент конечной ширины, как показано выше (рис. 5 и 6), при малых деформациях уже наблюдается значительное изменение запрещенной зоны. Ленты, обладающие полупроводниковыми свойствами, при деформации могли испытывать фазовый переход „полупроводник-полуметалл“, и наоборот полуметаллические ленты перейти в полупроводниковые.

5. Энергетическая зона в спектре „zig-zag“ нанолент

ГНЛ „zig-zag“ типа в отличие от „arm-chair“ при отсутствии деформаций проявляют только металлические свойства при любой ширине ленты. Расчеты в рамках построенной модели показали, что у данных лент запрещенная зона также не появляется при одноосных деформациях растяжения-сжатия. При двухосной деформации сдвига запрещенная зона у „zig-zag“ ГНЛ появляется и периодически изменяется в зависимости от величины сдвига u_{xy} (рис. 7).

При увеличении ширины ленты и фиксированной деформации сдвига величина запрещенной зоны уменьшается и стремится к значениям, которые имеют неограниченные листы графена при деформации сдвига (рис. 8).

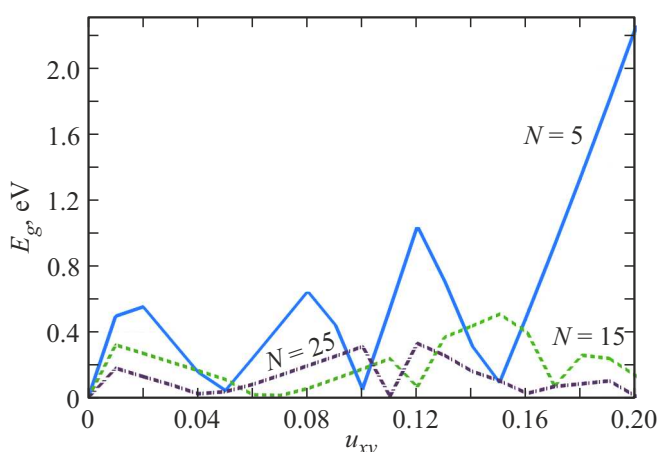


Рис. 7. График зависимости ширины запрещенной зоны E_g „zig-zag“ нанолент с $N = 5, 15, 25$ от относительной деформации сдвига u_{xy} .

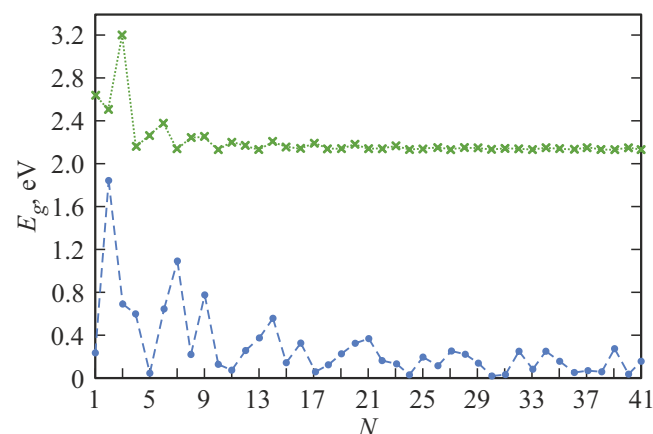


Рис. 8. Диаграмма зависимости величины запрещенной зоны E_g от ширины „zig-zag“ наноленты (количества гексагональных ячеек N) при относительной деформации сдвига $u_{xy} = 0.1$ (символы „точки“), $u_{xy} = 0.2$ (символы „крестики“).

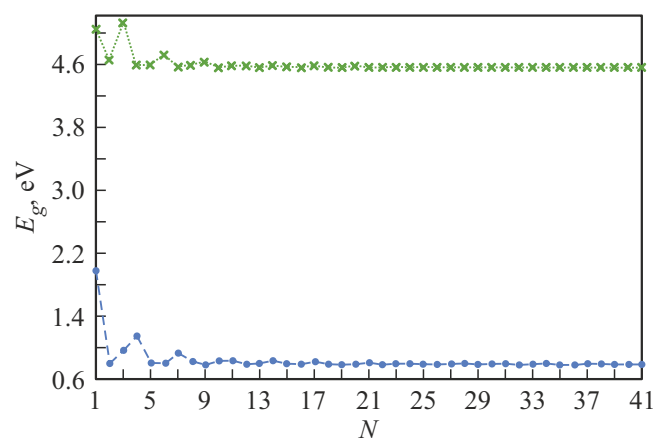


Рис. 9. Диаграмма зависимости величины запрещенной зоны E_g от ширины „zig-zag“ наноленты (количества гексагональных ячеек N) при деформации растяжения-сжатия $u_{xx} = 0.2$ вдоль оси Ox и относительной деформации $u_{xy} = 0.1$ (символы „точки“), $u_{xy} = 0.2$ (символы „крестики“).

При смешанных деформациях „zig-zag“ ГНЛ проявляют следующие свойства. Растяжения-сжатия вдоль оси Oy (по длине ленты) и деформации сдвига немного изменяют максимальную величину E_g и увеличивают частоту ее изменения. Растяжения-сжатия вдоль оси Ox (по ширине ленты) и деформации сдвига сильно увеличивают ширину запрещенной зоны при больших относительных деформациях, а также уменьшают амплитуду осцилляций диаграммы E_g от количества гексагональных ячеек по ширине ленты (рис. 9).

6. Заключение

Сравнивая результаты исследования зонной структуры, полученные в рамках построенной модели, с литературными данными в статьях [4,12,19,20,24] можно сделать следующие выводы.

Аналитическая модель зонной структуры графеновых нанолент построена в рамках метода сильной связи. Отличие от аналогичных моделей, предложенных другими авторами, заключается в неоднородности прыжкового интеграла. Т.е. в модели заложены возможные различия в матричных элементах перехода электрона между соседними атомами углерода. Кроме того, в модели использованы, на наш взгляд, более корректные граничные условия для ГНЛ, учитывающие различие длин связей в кристаллите и на его краю. Поэтому построенная модель предсказывает одинаковую с литературными данными тенденцию поведения запрещенной зоны от ширины „arm-chair“ и „zig-zag“ нанолент без деформаций, одинаковых граничных условиях и однородном прыжковом интеграле. При деформациях структуры кристаллита начинают проявляться различия в результатах из-за учета неоднородности прыжкового интеграла, а также из-за различия в граничных условиях. В отличие от литературных данных, в предлагаемой модели можно выделить 6 групп деформированных нанолент кресельного типа, энергия запрещенной зоны которых монотонно убывает с увеличением ее ширины как $\sim 1/N$, где N — число гексагонов в поперечнике.

Расчеты показали, что ширина запрещенной зоны нанолент меняется весьма немонотонно при деформациях, что является явным препятствием при их внедрении в элементную базу электроники. Однако при стабильных (фиксированных) деформациях в спектре лент появляются запрещенные зоны по величине согласующиеся с величиной E_g современных полупроводников. Как видно из результатов, представленных на рис. 3–9, запрещенной зоной могут обладать как „arm-chair“, так и „zig-zag“ ленты при наличии различных деформаций. Причем можно получить любую ширину E_g варьируя тип ленты и характер деформации, что дает богатый выбор для устройств на основе данных лент.

Приложение

Выведем уравнение ширины ленты от числа гексагональных ячеек для „zig-zag“ наноленты. Минимальную ширину ленты обозначим H_0 и зададим через проекции векторов, соединяющие ближайших соседей R_{ix} (рис. 2):

$$H_0 = R_{1x} + R_{2x} + R_{3x} \quad (\text{П1})$$

При увеличении начальной ширины ленты на одну гексагональную ячейку необходимо добавить R_{1x} и R_{3x} проекции, удлиняя еще на одну ячейку добавляется R_{1x} и R_{2x} . Замечаем, что при дальнейшем увеличении ширины происходит чередования добавляемой пары проекций. Пусть число N обозначает число гексагональных ячеек, тогда при минимальной ширине H_0 число $N = 1$. При различных N ширина ленты представлена в таблице П1.

Таблица П1. Ширина „zig-zag“ ленты при разном количестве гексагональных ячеек

$N = 1$	$H_0 = R_{1x} + R_{2x} + R_{3x}$
$N = 2$	$H = H_0 + R_{1x} + R_{2x}$
$N = 3$	$H = H_0 + R_{1x} + R_{2x} + R_{1x} + R_{3x}$
$N = 4$	$H = H_0 + 2 \cdot (R_{1x} + R_{2x}) + R_{1x} + R_{3x}$
$N = 5$	$H = H_0 + 2 \cdot (R_{1x} + R_{2x}) + 2 \cdot (R_{1x} + R_{3x})$
$N = 6$	$H = H_0 + 3 \cdot (R_{1x} + R_{2x}) + 2 \cdot (R_{1x} + R_{3x})$
$N = 7$	$H = H_0 + 3 \cdot (R_{1x} + R_{2x}) + 3 \cdot (R_{1x} + R_{3x})$
$N = 8$	$H = H_0 + 4 \cdot (R_{1x} + R_{2x}) + 3 \cdot (R_{1x} + R_{3x})$

Из таблицы П1 видно, что при четном номере N добавляется $R_{1x} + R_{2x}$ при нечетном $R_{1x} + R_{3x}$. Учитывая такую периодичность, можно получить соответствующую формулу:

$$H_z = H_0 + \frac{N-1}{2} \cdot \frac{1 - (-1)^N}{2} \cdot (2R_{1x} + R_{2x} + R_{3x}) + \frac{1 + (-1)^N}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot (2(N-1)R_{1x} + NR_{2x} + (N-2)R_{3x}) \quad (\text{П2})$$

После некоторых преобразований можно получить следующее уравнение:

$$H_z = \frac{1}{4} [2N(H_0 + R_{1x}) + 3R_{2x} + R_{3x} + (-1)^N(R_{3x} - R_{2x})] \quad (\text{П3})$$

Теперь получим уравнение для ширины „arm-chair“ ленты. Аналогично случаю с „zig-zag“ лентами N — это число гексагональных ячеек, H_0 — минимальная длина ленты. При различных N ширина ленты представлена в таблице П2.

$$H_0 = R_{2y} + R_{3y}. \quad (\text{П4})$$

Таблица П2. Ширина „arm-chair“ ленты при разном количестве гексагональных ячеек

$N = 1$	$H_0 = R_{2y} + R_{3y}$
$N = 2$	$H = H_0 + R_{2y}$
$N = 3$	$H = H_0 + R_{2y} + R_{3y}$
$N = 4$	$H = H_0 + 2R_{2y} + R_{3y}$
$N = 5$	$H = H_0 + 2R_{2y} + 2R_{3y}$
$N = 6$	$H = H_0 + 3R_{2y} + 2R_{3y}$
$N = 7$	$H = H_0 + 3R_{2y} + 3R_{3y}$
$N = 8$	$H = H_0 + 4R_{2y} + 3R_{3y}$

Заметим из таблицы П2, что при нечетном количестве гексагональных ячеек ширина ленты составляет $H = H_0 + \frac{N-1}{2}H_0$, а при четном количестве будет составлять $H = H_0 + \frac{N}{2}H_0 - R_{3y}$. Учитывая два случая, можно записать ширину ленты в следующем виде:

$$H = H_0 + \frac{1 - (-1)^N}{2} \frac{N-1}{2} H_0 + \frac{1 + (-1)^N}{2} \left(\frac{N}{2} H_0 - R_{3y} \right). \quad (\text{П5})$$

После некоторых преобразований можно получить следующее соотношение:

$$H = H_0 \left(\frac{N}{2} + \frac{3}{4} + \frac{(-1)^N}{4} \right) - R_{3y} \frac{1 + (-1)^N}{2}. \quad (\text{П6})$$

Учитывая уравнения (П3, П6), ширина ленты может быть задана следующим образом:

$$H = \begin{cases} \frac{1}{4} [2N(H_0 + R_{1x}) + 3R_{2x} + R_{3x} + (-1)^N(R_{3x} - R_{2x})] + 2R_{CH} \equiv H_z \\ H_0 \left(\frac{N}{2} + \frac{3}{4} + \frac{(-1)^N}{4} \right) - R_{3y} \frac{1 + (-1)^N}{2} + 2R_{CH} \equiv H_a \end{cases}. \quad (\text{П7})$$

Здесь R_{ix} , R_{iy} — проекции векторов на соответствующие оси, N — количество гексагональных ячеек по ширине графена, $R_{CH} = 1.09$ — учитывает замыкания граничных ненасыщенных связей атомами водорода.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликтов интересов.

Список литературы

- [1] М.Я. Абдулла, Л.Б. Салман, А.С. Обаед, А.М. Джавад, Х.А. Сбхуи. РЭНСИТ: Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии **16**, 6, 779 (2024).
- [2] Ф.А. Абдулкадер, Л.Б. Салман, Ю.Ф. Наср, Б. Боднар, Р. Хикмат. РЭНСИТ: Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии **16**, 5, 605 (2024).
- [3] S. Lebe'gue, T. Bjoerkman, M. Klintonberg, R.M. Nieminen, O. Eriksson. Physical Review X **3**, 3, 031002 (2013).
- [4] И.В. Антонова. УФН **192**, 6, 609 (2022).
- [5] М.М. Слепченков. ФТТ **67**, 7, 1190 (2025).
- [6] М.М. Слепченков, П.В. Барков, О.Е. Глухова. ФТТ **67**, 12, 2430 (2025).
- [7] А.И. Подливаев. ФТТ **67**, 10, 1980 (2025).
- [8] А.В. Савин, А.П. Клинов. ФТТ **67**, 11, 1980 (2025).
- [9] Е.Л. Румянцев, А.В. Германенко. ФТТ **68**, 1, 26 (2026).
- [10] O.S. Lebedeva, N.G. Lebedev, I.A. Lyarkosova. Journal of Physics: Condensed Matter **32**, 14, 145301 (2020).
- [11] А.С. Бондарь, О.С. Лебедева, Н.Г. Лебедев. Математическая физика и компьютерное моделирование **48**, 4, 107 (2025).
- [12] П.Б. Сорокин, Л.А. Чернозатонский. УФН **183**, 2, 113 (2013).
- [13] О.С. Лебедева, Н.Г. Лебедев. ФТТ **66**, 4, 608 (2024).
- [14] О.Е. Глухова, И.В. Кириллова, М.М. Слепченков, В.В. Шуняев. Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Математика. Механика. Информатика **12**, 4, 66 (2012).
- [15] Л.А. Чернозатонский, П.Б. Сорокин, А.А. Артюх. Успехи химии **83**, 3, 251 (2014).
- [16] E. Kano, D.G. Kvashnin, S. Sakai, L.A. Chernozatonskii, P.B. Sorokin, A. Hashimoto, M. Takeguchi. Nanoscale **9**, 3980 (2017).
- [17] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. ФИЗМАТЛИТ, М. (2003). 264 с.
- [18] G. Montambaux, F. Piechon, J.N. Fuchs, M.O. Goerbig. The European Physical Journal B **72**, 509 (2009).
- [19] Ya. Lu, J. Guo. Nano Research **3**, 3, 189 (2010).
- [20] M. Ezawa. Physical review B **73**, 045432 (2006).
- [21] A.J. Way, R.M. Jacobberger, N.P. Guisinger, V. Saraswat, X. Zheng, A. Suresh, J.H. Dwyer, P. Gopalan, M.S. Arnold. Nature Communications **13**, 30563 (2022).
- [22] J. Hicks, A. Tejada, A. Taleb-Ibrahimi, M.S. Nevius, F. Wang, K. Shepperd, J. Palmer, F. Bertran, P. Le Fèvre, J. Kunc, W.A. de Heer, C. Berger, E.H. Conrad. Nature Physics **9**, 49 (2013).
- [23] I. Palacio, A. Celis, M.N. Nair, A. Gloter, A. Zobelli, M. Sicot, D. Malterre, M.S. Nevius, W.A. de Heer, C. Berger, E.H. Conrad, A. Taleb-Ibrahimi, A. Tejada. Nano Letters **15**, 1, 182 (2015).
- [24] Шарин Е.П. Прикладная математика & Физика **58**, 1, 65–71 (2026).

Редактор Ю.Э. Китаев