

УДК 544.225.22+25; 544.22.022.384.3; 539.371

*О.С. Лебедева, Н.Г. Лебедев*

Волгоградский государственный университет

## **ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ РАСТЯЖЕНИЯ И СЖАТИЯ НА ПЬЕЗОРЕЗИСТИВНОСТЬ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ**

В работе теоретически изучено влияние деформаций растяжения и сжатия на проводящие свойства углеродных наночастиц (нанотрубок, нанолент) с учетом изменения поперечных размеров образца. Проведен аналитический расчет пьезорезистивных констант углеродных наночастиц с учетом поперечных деформаций. Показано, что тензор эластопроводимости металлических нанотрубок не зависит от их диаметра. Для полупроводниковых трубок получено монотонное возрастание продольной компоненты тензора с ростом диаметра. Показано возрастание или убывание пьезорезистивной константы полупроводниковых нанотрубок с ростом относительного растяжения или сжатия. Проведено сравнение полученных результатов с литературными данными. Дано физическое обоснование для наблюдаемых зависимостей.

ПРИБЛИЖЕНИЕ ХЮККЕЛЯ, МОДЕЛЬ ХАББАРДА, МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА, ТЕНЗОР ЭЛАСТОПРОВОДИМОСТИ.

### **Введение**

Углеродные наночастицы, такие как графен, графеновые ленты и углеродные нанотрубки (УНТ) различных типов и хиральности выступают, за счет уникальных высокопроводящих и пьезорезистивных свойств, одним из основных базовых элементов при разработке пьезоэлектрических сенсоров, причем практически сразу после их открытия [1 – 3].

Электронные характеристики УНТ достаточно чувствительны и по отношению к механическим воздействиям [4 – 6]. Механические деформации наноматериалов приводят к реконструкции атомной кристаллической решетки и геометрической модификации межатомных связей, что в свою очередь способствует изменению их электронного спектра и, как следствие, проводимости. Такое явление называют пьезорезистивным эффектом, и он характеризуется тензорами пьезосопротивления,

эластосопротивления и эластопроводимости [7]. Экспериментально определяются компоненты тензора эластосопротивления [2], в то время как теоретически можно рассчитать тензор эластопроводимости. Численные значения пьезорезистивных констант позволяют судить о количественном изменении проводимости наноматериалов, подвергнутых внешней механической нагрузке.

Теоретическое исследование влияния нагрузок продольного растяжения (сжатия), которые моделировались путем варьирования длин межатомных связей, на пьезорезистивные свойства углеродных наночастиц описано в работе [8]. Такой подход не отражает полной картины изменения энергетического спектра в результате указанных деформаций наночастиц. При внешних механических нагрузках изменяются не только длины связей, но и валентные углы, величина которых модифицируется в результате механического воздействия.

В статье рассматривается атомная реконструкция кристаллической решетки углеродных нанотрубок и геометрическая модификация связей между атомами углерода и валентных углов под действием упругой деформации растяжения (сжатия) с учетом изменения поперечных размеров образца. Рассчитана основная пьезорезистивная константа углеродных наночастиц – продольная компонента тензора эластопроводимости  $M$ , характеризующая изменение их проводимости в результате механических деформаций. Численные оценки пьезоэлектрических констант УНТ необходимы для количественной калибровки сенсоров на основе УНТ, работа которых основана на преобразовании механической энергии в электрическую. Изменение ширины запрещенной зоны УНТ под действием внешней механической нагрузки не дает исчерпывающей информации об изменении их проводимости, поэтому расчет тензора эластопроводимости в контексте поставленной задачи представляется актуальным.

### Выбор модели

Моделирование геометрической структуры углеродных наночастиц (нанотрубок и графеновых лент) начинается с рассмотрения графитовой плоскости, имеющей гексагональную решетку с параметрами

$a_1 = a_2 = a = \sqrt{3}R_0 = 2,46 \text{ \AA}$  и углом  $\alpha_0 = 60^\circ$  (рис. 1). Элементарная ячейка графитового слоя содержит два атома углерода, межатомное расстояние полагается  $R_0 = 1,44 \text{ \AA}$ . Электронная структура углеродных нанотрубок, а также изоспектральных графеновых лент описывается, как правило, в  $\pi$ -электронном приближении Хюккеля [9] и в общем случае выражается хорошо известным соотношением [10, 11]:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) &= \pm \gamma_0 \{3 + 2\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + 2\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2) + \\ &\quad + 2\cos(\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))\}^{1/2} = \\ &= \pm \gamma_0 \left\{ 1 + 4\cos\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2}\right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \cos\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) \right\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где уровень Ферми принят за 0 эВ;  $\gamma_0 = 1,4 \text{ эВ}$  – интеграл перескока (матричный элемент перехода) электрона с одного узла на соседний узел недеформированной УНТ, который оценивается как резонансный параметр квантовохимического полуэмпирического метода MNDO [9];  $\mathbf{k}$  – волновой вектор, одна из компонент которого квантуется вдоль периметра нанотрубки (или ширины графеновой ленты) в зависимости от ее типа, а вторая непрерывна вдоль оси трубки.

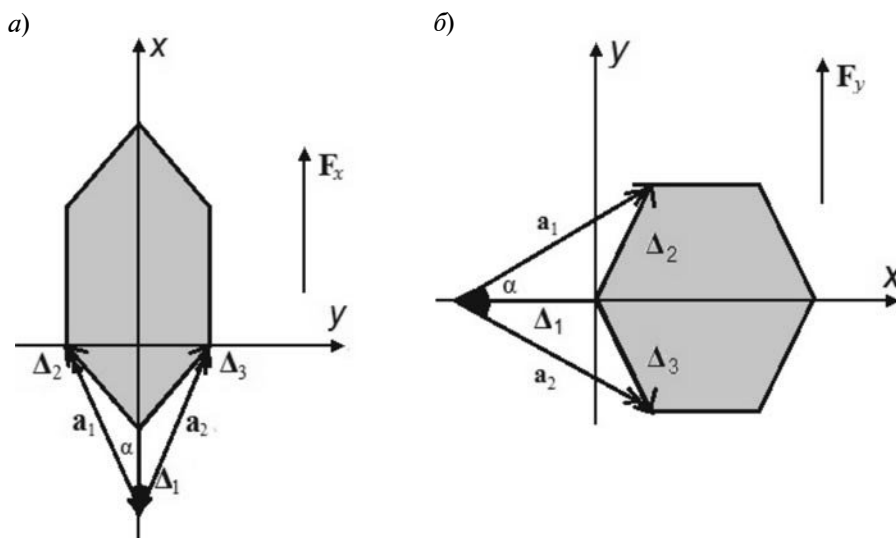


Рис. 1. Деформация растяжения углеродного гексагона для УНТ типов  $(n, 0)$  «zig-zag» (а) и  $(n, n)$  «arm-chair» (б);  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  – векторы трансляции,  $\alpha$  – угол между ними;  $\Delta_1 - \Delta_3$  – векторы углеродной решетки;  $\mathbf{F}_x, \mathbf{F}_y$  – векторы растягивающей силы

Если ось УНТ выбрать вдоль направления вектора  $(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ , то получится зигзагообразная нанотрубка (типа «zig-zag»), а если выбрать эту ось вдоль вектора  $(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)$ , то получится нанотрубка кресельного («arm-chair») типа.

Моделирование упругой механической деформации наночастицы под действием внешней силы  $\mathbf{F}$ , направленной вдоль оси УНТ, осуществляется с помощью варьирования длин межатомных связей на величину их относительного удлинения  $\delta = \Delta R/R_0$  и варьирования валентных углов, что отражается в изменении параметров решетки. Геометрические преобразования углеродного гексагона кристаллической решетки деформированных УНТ двух типов показаны на рис. 1. На нем символами  $\Delta_i$  обозначены длины межатомных связей УНТ, измененные вследствие растяжения или сжатия:

$$\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = R_0(1 + \delta)$$

для УНТ типа «zig-zag»;

$$\Delta_1 = R_0(1 - \delta), \Delta_2 = \Delta_3 = R_0(1 + \delta)$$

для УНТ типа «arm-chair».

За  $R_0$  принято межатомное расстояние в недеформированных УНТ. Векторы основных трансляций гексагональной решетки с учетом принятых обозначений определяются следующим образом:

$$\mathbf{a}_1 = \Delta_2 - \Delta_1; \mathbf{a}_2 = \Delta_3 - \Delta_1.$$

Буквой  $\alpha$  обозначен угол между векторами основных трансляций с исходным значением  $\alpha_0 = 60^\circ$ , модифицированный деформацией.

Изменение поперечных размеров (диаметр и ширина) УНТ и графеновых лент в результате деформации учитывается путем модификации модуля хирального вектора  $\mathbf{C}_h = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$  по следующей формуле:

$$\mathbf{C}_h = (1 - v\delta) \mathbf{C}_{0h}, \quad (2)$$

где  $n, m$  – индексы хиральности (целые числа), с помощью которых осуществляется классификация УНТ типа  $(n, m)$ ;  $v$  – коэффициент Пуассона, значение которого, в соответствии с экспериментальными данными [4], равно 0,19 и 0,27 для УНТ типов «arm-chair» и «zig-zag» соответственно;

$C_{0h}$  – модуль хирального вектора недеформированной УНТ типа  $(n, m)$ ,

$$C_{0h} = a_0 \sqrt{n^2 + m^2 + nm}$$

( $a_0 = \sqrt{3}R_0$  – постоянная решетки недеформированной УНТ).

С учетом изложенного выше и выбора системы координат, показанной на рис. 1, аргументы тригонометрических функций в спектрах (1) деформированных УНТ преобразуются к следующему виду:

1) для УНТ типа  $(n, 0)$  «zig-zag» –

$$\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2} = \frac{\mathbf{k}_x(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2} = k_x R_0(1 + \delta)(1 + \cos \alpha),$$

$k_x \in$  зоне Бриллюэна;

$$\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2} = \frac{\mathbf{k}_y(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2} = k_y R_0(1 + \delta) \sin \alpha = \frac{\pi q}{n}, \quad q = 1, \dots, n,$$

$$\sin \alpha = \left( \frac{1 - v\delta}{1 + \delta} \right) \cos \left( \frac{\alpha_0}{2} \right); \quad (3)$$

2) для УНТ типа  $(n, n)$  «arm-chair» УНТ –

$$\frac{\mathbf{k}_x(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2} = k_x R_0(1 + \delta) \frac{1 + \cos \alpha}{2} \times \left[ 1 + \sqrt{1 + \frac{2}{1 + \cos \alpha} \left( \left( \frac{1 + \delta}{1 - \delta} \right)^2 - 1 \right)} \right] = \frac{\pi q}{n}, \quad q = 1, \dots, n;$$

$$\frac{\mathbf{k}_y(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2} = 2k_y R_0(1 - \delta) \sin \alpha \times \left[ 1 + \sqrt{1 + \frac{2}{1 + \cos \alpha} \left( \left( \frac{1 + \delta}{1 - \delta} \right)^2 - 1 \right)} \right],$$

$k_y \in$  зоне Бриллюэна;

$$\cos \frac{\alpha}{2} = \frac{1}{2 \left( \frac{1 - v\delta}{1 + \delta} \right) \cos \left( \frac{\alpha_0}{2} \right)} \times \left[ \left( \frac{1 - v\delta}{1 + \delta} \right)^2 \cos^2 \left( \frac{\alpha_0}{2} \right) + 1 - \left( \frac{1 + \delta}{1 - \delta} \right)^2 \right]. \quad (4)$$

С учетом соотношений (3) и (4) преобразованный энергетический спектр деформированных УНТ «zig-zag» и «arm-chair» можно представить в виде:

$$\varepsilon_z(\mathbf{k}) = \pm \gamma \left( 1 \pm 4 \cos\left(\frac{\pi q}{n}\right) \times \right. \\ \left. \times \cos[k_x R_0(1 + \delta)(1 + \cos \alpha)] + 4 \cos^2\left(\frac{\pi q}{n}\right) \right)^{1/2}; \quad (5)$$

$$\varepsilon_a(\mathbf{k}) = \pm \gamma \left( 1 \pm 4 \cos\left[\frac{\mathbf{k}_y(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right] \times \right. \\ \left. \times \cos\left(\frac{\pi q}{n}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\mathbf{k}_y(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) \right)^{1/2}, \quad (6)$$

где аргументы в выражении (6) определяются соотношениями (4), знак  $\pm$  под корнем появляется вследствие того, что в элементарной ячейке УНТ и нанолент конечной ширины содержится 4 атома углерода.

Прыжковый интеграл  $\gamma$  также изменяется вследствие изменения межатомного расстояния. Это можно учесть разложением в ряд до второго слагаемого в силу малости относительной деформации  $\delta$ :

$$\gamma \approx \gamma_0 + R_0 \frac{\partial \gamma_0}{\partial R} \delta. \quad (7)$$

С учетом зависимости интеграла перескока  $\gamma_0$  от длины связи  $R$  градиент  $d\gamma_0/dR$  можно оценить по следующей формуле:

$$\frac{\partial \gamma_0}{\partial R} = \beta_c \frac{\partial}{\partial R} S_{pp}, \quad (8)$$

где  $\beta_c$  – резонансный параметр метода MNDO для атома углерода;  $S_{pp}$  – интеграл перекрытия атомных  $p$ -орбиталей соседних атомов углерода.

После взятия производной и последующего численного интегрирования по методу Симпсона [12] градиент принимает значение  $d\gamma_0/dR \approx 2,42$  эВ/Å.

Для расчета основной пьезорезистивной константы и характеристики пьезорезистивного эффекта – тензора эластопроводимости воспользуемся его определением [7]:

$$\frac{\Delta \sigma_{\alpha\beta}}{\langle \sigma \rangle} = \sum_{nm} m_{\alpha\beta, nm} \varepsilon_{nm}, \quad (9)$$

где  $m_{\alpha\beta, nm}$  – компоненты тензора эластопроводимости;  $\varepsilon_{nm}$  – компоненты тензора де-

формации;  $\Delta \sigma_{\alpha\beta}$  – изменение компоненты тензора электропроводности вследствие деформаций;  $\alpha, \beta, n, m = x, y, z$ .

Поскольку симметрия кристалла может понижать число независимых компонент тензоров, то в случае рассмотрения УНТ и графеновых нанолент как одномерных объектов будет произведен расчет только продольной компоненты тензора вдоль оси нанотрубки или длины наноленты соответственно:

$m_{xx,xx} = M, \varepsilon_{xx} = \delta$  для УНТ типа «zig-zag»;

$m_{yy,yy} = M, \varepsilon_{yy} = \delta$  для УНТ типа «arm-chair».

Удельная проводимость деформированной и недеформированной УНТ вычислялась с использованием формулы Кубо – Гринвуда [13] методом функций Грина [14] в рамках модели Хаббарда [15], без учета кулоновского взаимодействия электронов на одном узле. Подробный аналитический вывод расчетной формулы для продольной проводимости УНТ был описан в работе [8].

Окончательная формула для расчета проводимости углеродных наночастиц в однозонном приближении может быть представлена в виде:

$$\sigma_{\alpha\beta} = 2 \frac{i\pi e^2}{k_B T V} \sum_{k,\sigma} \sum_{q,\lambda} v_{\alpha}(\mathbf{k}) v_{\beta}(\mathbf{q}) \langle n_{k\sigma} \rangle \times \\ \times [\langle n_{q\lambda} \rangle + \delta_{kq} \delta_{\lambda\sigma} (1 - \langle n_{k\sigma} \rangle)], \quad (10)$$

где  $\mathbf{k}, \mathbf{q}$  – волновые векторы, лежащие в пределах зоны Бриллюэна;  $\sigma, \lambda$  – спиновые индексы;  $e$  – элементарный заряд;  $k_B$  – константа Больцмана;  $T$  – абсолютная температура;  $V$  – объем кристалла;  $v_{\alpha}(\mathbf{k}) = \nabla_{\alpha} \varepsilon(\mathbf{k})/\hbar$  – компоненты скорости электрона в зоне Бриллюэна,  $\langle n_{k\sigma} \rangle$  – распределение Ферми – Дирака:

$$\langle n_{k\sigma} \rangle = \left[ e^{\frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1 \right]^{-1}, \quad (11)$$

$\varepsilon(\mathbf{k})$  – дисперсионные соотношения деформированных или недеформированных УНТ типов «zig-zag» и «arm-chair», которые выражаются формулами (5) и (6) соответственно.

### Обсуждение результатов

Анализ изменения зонной структуры углеродных нанотрубок, деформированных растяжением и сжатием, подробно проведен в работе [8]. На рис. 2 показан только модифицированный (вследствие 25 %-х деформаций растяжения) энергетический спектр УНТ двух структурных типов: «zigzag» (9, 0) и (10, 0), а также «arm-chair» (5, 5). Качественных изменений, по сравнению с зонной структурой недеформированных УНТ [16], на рис. 2 не наблюдается. Количественный же анализ показывает уменьшение наклона дисперсионных кривых к оси абсцисс и сужение зоны проводимости (ЗП) и валентной зоны (ВЗ) в случае сжатия и увеличение наклона и уширение ЗП и ВЗ при деформации растяжения.

Подставляя выражения (5) и (6) в формулы (10) и (11), а затем в выражение (9), можно провести теоретический расчет продольной компоненты тензора эластопроводимости  $M$  для УНТ разных типов с учетом деформаций в поперечном направлении.

В таблице представлены полученные расчетные значения величины  $M$  для ряда углеродных нанотрубок при различных величинах относительной деформации растяжения (сжатия)  $\delta$ . Результаты были получены при температуре  $T = 300$  К.

Из данных таблицы следует, что для УНТ типа «arm-chair» при наложении деформации растяжения значение продольной компоненты тензора является положительным; это означает одинаковое увеличение проводимости для всех трубок, т. е. проводимость нанотрубки не зависит от ее диаметра и увеличивается с ростом модуля относительной деформации растяжения. Деформация сжатия приводит к уменьшению величины  $M$  с ростом модуля  $\delta$ . Исключение составляет случай максимальной деформации  $\delta = 0,25$ , которая приводит к росту пьезорезистивной константы при сильном сжатии. Такое поведение обусловлено количественным изменением зонной структуры, описанным выше; его следствием является изменение плотности состояний с ростом величины деформации, особенно в области высоких энергий.

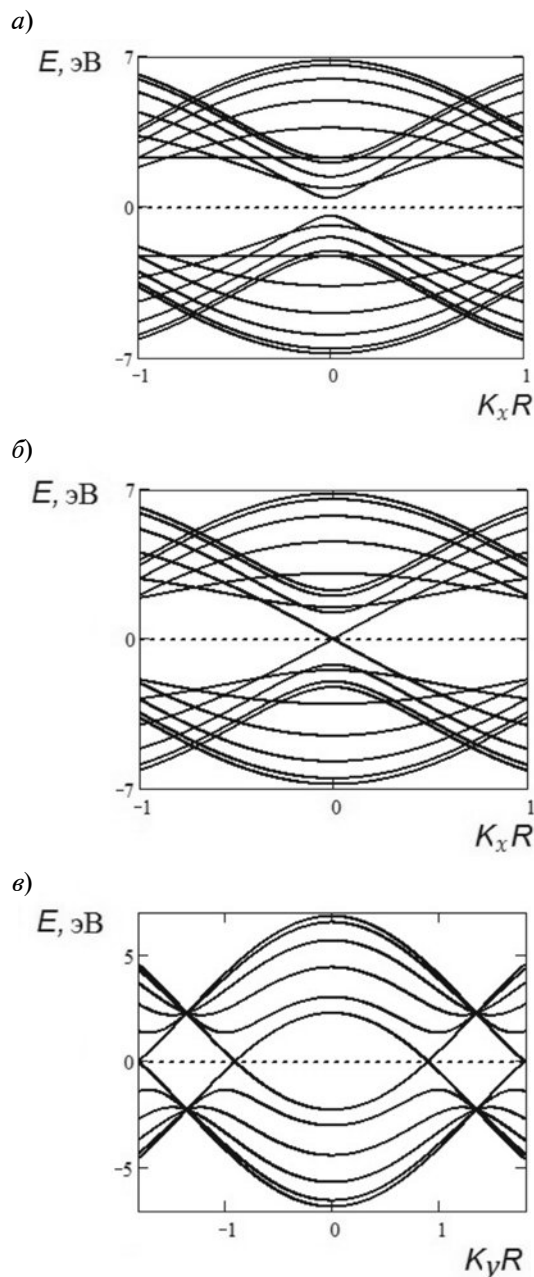


Рис. 2. Дисперсионные соотношения для различных типов УНТ, деформированных растяжением величиной  $\delta = 25$  %, с учетом поперечных деформаций; типы УНТ:  $a - (10, 0)$ ,  $b - (9, 0)$ ,  $c - (5, 5)$

Тепловые флуктуации приводят к заполнению зоны проводимости УНТ электронами, согласно функции распределения Ферми – Дирака. Изменение плотности состояний ведет к изменению удельной проводимости, учитывающей все возмож-

Таблица

Полученные расчетные значения продольной компоненты тензора эластопроводимости УНТ различных типов в зависимости от относительной деформации  $\delta$  с учетом поперечной деформации

Тип УНТ ( $n, m$ )	$M$			
	$\delta_2 = 0,035$	$\delta_3 = 0,069$	$\delta_4 = 0,104$	$\delta_{end} = 0,25$
<i>Растяжение (<math>\delta &gt; 0</math>)</i>				
(5, 5), (6, 6), (9, 9), (10, 10)	4,03	4,13	4,24	11,73
(6, 0), (9, 0), (12, 0), ...	4,85	4,95	5,06	5,54
(4, 0)	-24,01	-1,11	-9,58	-4,00
(10, 0)	-14,47	-10,94	-8,48	-3,98
(20, 0)	-7,60	-6,72	-5,92	-3,65
(50, 0)	-1,21	-1,36	-1,47	-1,63
(100, 0)	1,13	0,97	0,83	0,36
<i>Сжатие (<math>\delta &lt; 0</math>)</i>				
(5, 5), (6, 6), (9, 9), (10, 10)	3,80	3,69	3,58	3,97
(6, 0), (9, 0), (12, 0),...	4,69	4,66	4,88	—
(4, 0)	-147,07	-489,50	$-1,79 \cdot 10^3$	—
(10, 0)	-28,18	-39,80	-52,90	—
(20, 0)	-9,59	-10,34	-9,62	—
(50, 0)	-0,69	-0,22	0,87	—
(100, 0)	1,57	1,89	2,66	—

Примечание. Все типы УНТ ( $n, 0$ ) – «zig-zag», а ( $n, n$ ) – «arm-chair».

ные заполненные электронные состояния, а следовательно, ведет к симбатному росту или снижению величины  $M$  с увеличением или уменьшением  $\delta$ .

Для всех проводящих УНТ типа «zig-zag» (6, 0), (9, 0), (12, 0), ... величина тензора эластопроводимости также положительна и не зависит от диаметра трубки, но оказывается немногим больше, чем у проводящих УНТ типа «arm-chair», в большинстве случаев на величину приблизительно 0,8 (растяжение) и в среднем на 1,0 (сжатие). Количественный анализ зонной структуры проводящих УНТ показывает, что плотность низкоэнергетических состояний у зигзагообразных нанотрубок немного выше, чем такая же плотность у УНТ кресельного типа, поэтому и наблюдается незначительная разница пьезорезистивных констант у проводящих УНТ двух разных структурных модификаций.

Практически у всех рассмотренных полупроводниковых зигзагообразных УНТ (4, 0), (10, 0), (20, 0), (50, 0) пьезорезистивная константа  $M$  – отрицательная (см. таблицу), что свидетельствует об уменьшении удельной проводимости наночастицы вследствие деформации. Кроме того, эта константа увеличивается (уменьшается) с ростом деформации растяжения (сжатия) и возрастает с ростом диаметра трубки. Исключение составляет УНТ большого диаметра, в данном случае (100, 0), у которой величина  $M$  положительна и уменьшается (увеличивается) с ростом деформации растяжения (сжатия).

Увеличение (уменьшение по модулю) величины  $M$  с ростом относительной деформации растяжения  $\delta$  объясняется увеличением энергетической щели в электронном спектре. Плотность электронных

состояний вблизи уровня Ферми, в запрещенной зоне, равна нулю, поэтому основной вклад в удельную проводимость вносят состояния зоны проводимости; заселенность последней экспоненциально убывает в соответствии с фермиевской функцией распределения. Для полупроводниковых УНТ, так же как и для проводящих, наблюдается эффект сжатия зоны проводимости, который ведет к росту плотности состояний. Поэтому, несмотря на увеличение ширины запрещенной зоны, которое должно уменьшать проводимость вещества, возрастание плотности состояний компенсирует изменение величины  $E_g$  и в результате приводит к росту проводимости и константы  $M$ . Для трубки большого диаметра (100, 0) определяющим для проводящих свойств является увеличение ширины запрещенной зоны, которая обратно пропорциональна диаметру трубки. Поэтому поведение пьезорезистивной константы отличается от остальных рассмотренных трубок.

Важно отметить, что на данный момент остается открытым вопрос о «критическом» значении диаметра УНТ, т. е. значении, начиная с которого изменяется тенденция в поведении зависимости константы  $M$  от величины относительной деформации.

Увеличение (уменьшение по модулю) компоненты тензора эластопроводимости с ростом диаметра УНТ можно объяснить следующим образом. В зоне проводимости нанотрубок с увеличением их диаметра растет число дисперсионных кривых, повышающих плотность электронных состояний. Поэтому малые деформации приводят в целом к незначительному изменению плотности состояний, по сравнению с недеформированной УНТ и, как следствие, приводит к малому изменению удельной проводимости. Это и находит отражение в описанном поведении величины  $M$ .

Сравнение представленных результатов с полученными ранее в работе [8], где не были учтены поперечные деформации, показывает, что значения пьезорезистивных констант в нашем случае оказываются больше для «металлических» УНТ примерно на 11 %, а для полупроводниковых эта разница увеличивается с ростом их диаметра

приблизительно от 1 до 50 % для рассмотренного ряда УНТ (см. таблицу).

Количественные оценки тензора эластопроводимости ОУНТ и зависимость его величины от относительной деформации, приведенные в работе, находятся в согласии с экспериментальными данными по калибровочным факторам, полученными для пленок из углеродных нановолокон [2, 17] и многослойных углеродных нанотрубок [18], а также для типичных полупроводников, например, для пленок поликристаллического кремния  $p$ -типа [19].

Представленные выше результаты расчета продольной компоненты тензора эластопроводимости углеродных нанотрубок могут быть распространены и на изоспектральные графеновые ленты, из которых путем сворачивания в цилиндр получают рассмотренные нанотрубки.

### Заключение

Сформулируем основные результаты и выводы проведенного теоретического исследования.

1. В работе выполнено теоретическое моделирование изменения зонной структуры деформированных углеродных нанотрубок и нанолент в  $\pi$ -электронном приближении, вызванного деформацией сжатия и растяжения, с учетом поперечной деформации образца; при этом были выбраны зигзагообразные и кресельные нанотрубки, а также изоспектральные графеновые наноленты.

2. Кратко проанализировано изменение электронного спектра проводящих и полупроводниковых нанотрубок и нанолент вследствие деформаций растяжения и сжатия.

3. В рамках модели Хаббарда с использованием метода функций Грина проведен теоретический расчет продольной компоненты тензора эластопроводимости для зигзагообразных и кресельных углеродных нанотрубок и изоспектральных графеновых нанолент.

4. Показано, что тензор эластопроводимости металлических нанотрубок не зависит от их диаметра. А для полупроводниковых трубок получено монотонное возрастание продольной компоненты тензора с ростом диаметра. Показано возрастание или убы-

вание пьезорезистивной константы полупроводниковых нанотрубок с ростом относительного растяжения или сжатия. Проведено сравнение полученных результатов с литературными данными. Дано фи-

зическое обоснование для наблюдаемых зависимостей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 13-03-97108).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Roman C., Helbling Th., Hierold Ch. Single-walled carbon nanotubes sensors concepts. In book «Springer Handbook of Nanotechnology. Part B». Heidelberg: Springer Berlin, 2010. 403 p.
2. Obitayo W., Liu T. A review: carbon nanotube-based piezoresistive strain sensors// Journal of Sensors. 2012. Vol. 2012, p. 652438 (1–15).
3. Brian R. Burg, Helbling Th., Hierold Ch., Poulidakos D. Piezoresistive pressure sensors with parallel integration of individual single-walled carbon nanotubes// J. Appl. Phys. 2011. Vol. 109. No. 6. P. 064310 (1-6).
4. Rafii-Tabar H. Computation physics of carbon nanotubes. New York: Cambridge University Press, 2008. 493 p.
5. Carbon nanotubes / Edited by J. M. Marulanda. Vukovar: In-Tech, 2010. 776 p.
6. Елецкий А.В. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе // УФН. 2007. Т. 177. № 3. С. 233–274.
7. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.
8. Ляпкосова О.С., Лебедев Н.Г. Пьезорезистивный эффект в однослойных углеродных нанотрубках // Физика твердого тела. 2012. Т. 54 № 7. С. 1412–1416.
9. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001. 519 с.
10. Mintmire J.W., White C.T. Electronic and structural properties of carbon nanotubes // Carbon. 1993. Vol. 33. No. 7, pp. 893-902.
11. Saito R., Dresselhaus M.S., Dresselhaus G. Physical properties of carbon nanotubes. London: Imperial College Press, 1999. 251 p.
12. Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1975. 632 с.
13. Маделунг О.-В. Физика твердого тела. Т. 3. Локализованные состояния. М.: Наука, 1985. 182 с.
14. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975. 528 с.
15. Изюмов Ю.А., Чашин Н.И., Алексеев Д.С. Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала. М.: Изд-во «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. 384 с.
16. Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. М.: Техносфера, 2003. 336 с.
17. Yong Li, Wanlu Wang, Kejun Liano, Chenguang Hu, et. al. Piezoresistive effect in carbon nanotube films// Chinese Science Bulletin. 2003. Vol. 48. No. 2, pp. 125-127.
18. Mohamed N.M., Kou L.M. Piezoresistive effect of aligned multiwalled carbon nanotubes array // J. Appl. Sci. 2011. Vol. 11. No. 8, pp. 1386-1390.
19. Гридчин В.А., Любимский В.М. Пьезосопротивление в пленках поликристаллического кремния *p*-типа // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38. № 8. С. 1013–1017.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ЛЕБЕДЕВА Ольга Сергеевна** — младший научный сотрудник кафедры теоретической физики и волновых процессов Волгоградского государственного университета.  
400062, Россия, г. Волгоград, Университетский пр., 100  
lyarkosovaolga@mail.ru

**ЛЕБЕДЕВ Николай Геннадьевич** — доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики и волновых процессов Волгоградского государственного университета.  
400062, Россия, г. Волгоград, Университетский пр., 100  
lebedev.ng@mail.ru

*Lebedeva O.S., Lebedev N.G. THE INFLUENCE OF THE STRETCHING AND COMPRESSION DEFORMATIONS ON THE PIEZORESISTANCE OF THE CARBON NANOTUBES AND GRAPHENE NANORIBBONS.*

In this article the influence of the stretching and compression on the conducting properties of carbon



nanoparticles (nanotubes, nanoribbons) accounting the changes in the transverse dimensions of the sample is studied theoretically. The analytical calculation of piezoresistive constants of carbon nanoparticles with the account of transverse strain was carried out. It is shown that the elastoconductivity tensor of metallic nanotubes is independent of its diameter. The monotonic increase in the longitudinal component of the tensor with the increasing its diameters of semiconducting nanotubes was obtained. It is shown that increasing or decreasing of the piezoresistive constant of semiconducting nanotubes with the relative tension or compression strain. The results are compared with the literature data. A physical justification of the observed dependence was described.

HUCKEL APPROXIMATION, HUBBARD'S MODEL, GREEN'S FUNCTION METHOD, ELASTOCONDUCTIVITY TENSOR.

## REFERENCES

1. Roman C., Helbling Th., Hierold Ch. Single-walled carbon nanotubes sensors concepts. In book «Springer Handbook of Nanotechnology. Part B». Heidelberg: Springer Berlin, 2010. 403 p.
2. Obitayo W., Liu T. A Review: Carbon Nanotube-Based Piezoresistive Strain Sensors. *Journal of Sensors*, 2012, Vol. 2012, P. 652438 (1-15).
3. Brian R. Burg, Helbling Th., Hierold Ch., Poulidakos D. Piezoresistive pressure sensors with parallel integration of individual single-walled carbon nanotubes. *J. Appl. Phys.*, 2011, Vol. 109, No. 6, P. 064310 (1-6).
4. Ruffi-Tabar H. Computation physics of carbon nanotubes. New York: Cambridge University Press, 2008. 493 p.
5. Carbon nanotubes / Edited by Jose Mauricio Marulanda. Vukovar: In-Tech, 2010. 776 p.
6. Eletsii A.V. Mekhanicheskie svoystva uglerodnykh nanostruktur i materialov na ih osnove // *UFN*. 2007. Vol. 177. No. 3. S. 233-274.
7. Bir G.L., Pikus G.Ye. Simmetriya i deformatsionnye efekty v poluprovodnikah. M.: Nauka, 1972. 584 s.
8. Lyapksova O.S., Lebedev N.G. Pyezorezistivnyi effekt v odnosloynnykh uglerodnykh nanotrubbakh // *Fizika tverdogo tela*. 2012. Vol. 54 No. 7. С. 1412- 1416.
9. Stepanov N.F. Kvantovaya mehanika i kvantovaya himiya. M.: Mir, 2001. 519 s.
10. Mintmire J.W., White C.T. Electronic and structural properties of carbon nanotubes. *Carbon*, 1993, Vol. 33, No. 7, pp. 893-902.
11. Saito R., Dresselhaus M.S., Dresselhaus G. Physical properties of carbon nanotubes. London: Imperial College Press, 1999. 251 p.
12. Bahvalov N.S. Chislennyye metody (analiz, algebra, obyknovennyye differentsialnyye uravneniya). M.: Nauka, 1975. 632 s.
13. Madelung O-V. Fizika tverdogo tela. T. 3. Lokalizovannyye sostoyaniya. M.: Nauka, 1985. 182 s.
14. Tyablikov S.V. Metody kvantovoy teorii magnetizma. M.: Nauka, 1975. 528 s.
15. Izyumov Yu.A., Chashchin N.I., Alekseyev D.S. Teoriya silno korrelirovannykh sistem. Metod proizvodyaschego funktsionala. M.: Izd-vo «Regulyarnaya i haoticheskaya dinamika», 2006. 384 s.
16. Harris P. Uglerodnye nanotrubby i rodstvennyye struktury. Novyye materialy XXI veka. M.: Tehnosfera, 2003. 336 s.
17. Yong Li, Wanlu Wang, Kejun Liano, Chenguo Hu, et. al. Piezoresistive effect in carbon nanotube films. *Chinese Science Bulletin*. 2003, Vol. 48, No. 2, pp. 125-127.
18. Mohamed N.M., Kou L.M. Piezoresistive effect of aligned multiwalled carbon nanotubes array. *J. Appl. Sci.*, 2011, Vol. 11, No. 8, pp. 1386-1390.
19. Gridchin V.A., Lyubimskiy V.M. Pyezosoprotivleniye v plenkah polikristallicheskogo kremniya p-tipa // *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*. 2004. Vol. 38. No. 8. S. 1013-1017.

## THE AUTHORS

**LEBEDEVA Olga S.**

*Volgograd State University,*  
100 University Avenue, Volgograd, 400062, Russia.  
lyapksovaolga@mail.ru

**LEBEDEV Nikolay G.**

*Volgograd State University,*  
100 University Avenue, Volgograd, 400062, Russia.  
lebedev.ng@mail.ru