**Краевые деформации в графеновых наноструктурах**

**Ульянов А.М.1**

1аспирант

*1****Национальный исследовательский центр ”Курчатовский институт”, Россия, 123182 Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1***E–mail: 1artemulyanov20002@gmail.com

Углеродные нанотрубки являются перспективным наноматериалом. Они являются аллотропными формами углерода, которые можно представлять себе, как скрученные листы графена. Одним из применений углеродных нанотрубок является использование их в качестве жала атомно-силового микроскопа [1].

Потенциальным развитием подобных методов является решение задачи о регистрации быстропеременных магнитных полей на поверхности вещества. Для этого на кончике трубки можно закрепить наночастицу железа, которая под воздействием магнитного поля будет отклоняться в сторону и скручивать трубку. Возникшие в системе крутильные колебания приведут к возникновению вертикальной колебательной моды жала микроскопа, которую можно будет зарегистрировать.

В связи с этим представляет интерес исследование особенностей скручивания коротких нанотрубок, а также точное исследование геометрических особенностей их строения вблизи края.

Главным использованным методом исследования является численное моделирование на основе теории функционала плотности, расчеты проводятся при помощи программного пакета cp2k [2]. Задействованы инструменты для вычисления энергии заданных конфигураций в рамках KS-DFT, проведения симуляций ab initio молекулярной динамики и для релаксации геометрии до равновесного состояния. Использовался псевдопотенциал GTH-PBE-q4 [6] и обменный функционал PBE [7].

В данной работе рассмотрена деформация коротких нанотрубок типов зигзаг и кресло. Выявлены особенности их геометрического строения, вызванные близостью края. В частности, показано удлинение связей у края в нанотрубках типа зигзаг и их укорачивание в нанотрубках типа кресло. Получены характерные молекулярные картины деформаций под воздействием внешней скручивающей силы. Показана энергетическая предпочтительность приподнимания нижележащих атомов в нанотрубках типа зигзаг, что указывает на наличие сокращения длины при скручивании, необходимое для возникновения вертикальной колебательной моды. Найденные геометрические особенности ожидаемо совпадают с известным результатом для случая плоского графенового листа [8], что указывает на независимость найденных эффектов от радиуса нанотрубок.

|  |  |
| --- | --- |
| 8zbe**D:\downloads\ИТЭФ\mag\ломоносов 2025\abe.png** |  |
| ***Рис. 1.*** Слева: равновесные длины связей в углеродной нанотрубке типа зигзаг (8,0) без воздействия внешней силы. Справа: равновесные длины связей в нанотрубке типа кресло (7,7) без воздействия внешней силы. Значения приведены в Å, равновесная длина связей вдали от края равна 1.42Å. | | |

**Литература**

1. N. R. Wilson and J. V. Macpherson, “Carbon nanotube tips for atomic force microscopy,” Nature nanotechnology, vol. 4, no. 8, pp. 483–491, 2009.
2. T. D. Kuhne, M. Iannuzzi, M. Del Ben, V. V. Rybkin, P. Seewald, F. Stein, T. Laino, R. Z. Khaliullin, O. Sch¨utt, F. Schiffmann, et al., “Cp2k: An electronic structure and molecular dynamics software package-quickstep: Efficient and accurate electronic structure calculations,” The Journal of Chemical Physics, vol. 152, no. 19, 2020.
3. K. Capelle, “A bird’s-eye view of density-functional theory,” Brazilian journal of physics, vol. 36, pp. 1318–1343, 2006.
4. P. Hohenberg and W. Kohn, “Inhomogeneous electron gas,” Physical review, vol. 136, no. 3B, p. B864, 1964.
5. M. Krack and M. Parrinello, “Quickstep: make the atoms dance,” High performance computing in chemistry, vol. 25, p. 29, 2004.
6. S. Goedecker, M. Teter, and J. Hutter, “Separable dual-space Gaussian pseudopotentials,” Physical Review B, vol. 54, no. 3, p. 1703, 1996.
7. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, “Generalized gradient approximation made simple,” Physical review letters, vol. 77, no. 18, p. 3865, 1996.
8. P. Koskinen, S. Malola, and H. H¨akkinen, “Self-passivating edge reconstructions of graphene,” Physical review letters, vol. 101, no. 11, p. 115502, 2008.