

Компьютерное моделирование электрических характеристик графенового кластера с дефектами Стоуна-Уэльса

Д.М. Сергеев^{1,2*}

¹ Актюбинский региональный государственный университет им. К. Жубанова,
пр. Молдагуловой, 34, 030000 Актюбе, Казахстан

² Военный институт Сил воздушной обороны им. Т.Я. Бегельдинова,
пр. Молдагуловой, 39, 030012 Актюбе, Казахстан

(Получено 22.02.2018; в отредактированной форме – 05.06.2018; опубликовано online 25.06.2018)

В рамках теории функционала плотности с применением метода неравновесных гриновских функций и в приближении локальной плотности исследованы электрические характеристики различных конфигураций графена с дефектом Стоуна-Уэльса. Расчет реализован в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. Рассчитаны вольтамперные, dI/dV -характеристики, спектр пропускания и плотность состояний рассматриваемых наноструктур. При энергии $\sim 0,5$ эВ на плотности состояний возникает полоса, состоящая из двух пиков, характерные для дефектов Стоуна-Уэльса. Эта «дефектная полоса» может быть полезной для распознавания подобных дефектов, а также для определения их концентрации в графеновой пленке. Показано, что на вольтамперных характеристиках дефектных графеновых структур проявляется участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением, возможно обусловленный резонансным туннелированием квазичастиц. Эти же изменения наблюдаются и на dI/dV -характеристике. Полученные результаты могут быть полезными для расчетов новых перспективных электронных приборов наноэлектроники на основе графена.

Ключевые слова: Графен, Дефект Стоуна-Уэльса, Плотность состояний, Вольтамперная характеристика, Дифференциальная проводимость, Функция (спектр) пропускания.

DOI: [10.21272/jnep.10\(3\).03018](https://doi.org/10.21272/jnep.10(3).03018)

PACS numbers: 73.63. – b, 61.72.J –

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что одним из простейших топологических дефектов, содержащихся в графеноподобных 2D-материалах является дефект Стоуна-Уэльса (Stone-Wales, SW) [1]. Он формируется за счет простого поворота пары атомов углерода C-C на 90° (трансформация SW), в результате которого нарушается

симметрия графеновой гексагональной решетки с появлением в ее структуре двух пятиугольных и двух семиугольных элементов (рис. 1). (Далее межуглеродную связь C-C, которая подвергается повороту, будем называть корой, как это названо в работе [2]). Такой дефект возникает при закалке графена на высокой температуре еще на стадии его получения или когда графен подвергается облучению.

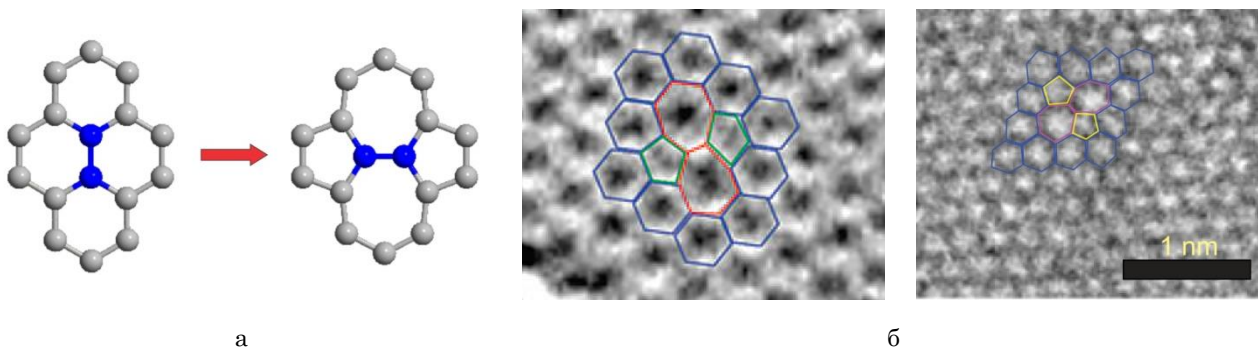


Рис. 1 – Трансформация Стоуна-Уэльса в графене: а) модельное представление (синим цветом выделена связь, поворачивающаяся на угол 90°); б) результаты экспериментальных работ [3, 4]

В работах [3, 4] экспериментально исследована динамика дефекта Стоуна-Уэльса в реальном времени (рис. 1б). Дефект SW является центром адсорбции различных атомов (или молекул) (см. например [5-7]) и существенно влияет на структурные свойства графена, приводя к образованию устойчивых «гребней» за счет создания сжимающих напряжений на его внутреннем участке (рис. 2) [8, 9]. Такие структу-

ры могут служить в качестве квантовых точек для наноэлектроники на основе графена. Кроме того, эти дефекты могут использоваться для «корректировки» энергетической зоны графена, чтобы сделать его более подходящим для использования в «графеновых» транзисторах [10, 11].

В данной работе предпринята попытка с помощью компьютерного моделирования с применением

* serdau@rambler.ru

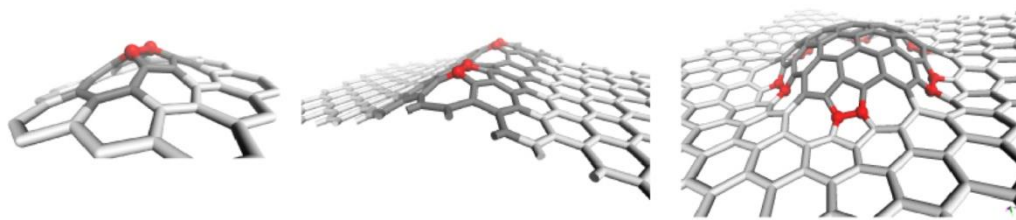


Рис. 2 – Изменение формы графена под влиянием дефектов Стоуна-Уэльса (взято из [8])

программы Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab определить электрические характеристики графеновой ленты с дефектом Стоуна-Уэльса.

2. ОПИСАНИЕ ОБЪЕКТА И МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ

В работе рассмотрен графеновый кластер, состоящий из 248 атомов углерода. Геометрия исследуемого графенового кластера с различными конфигурациями дефекта Стоуна-Уэльса приведена на рис. 3 а-е. (Для удобства описания каждой конфигурации условно присвоены буквы А-Е). Длина исследуемой графеновой ленты составляет $\sim 34,45 \text{ \AA}$, а длина электродов по оси $Z \sim 7,383 \text{ \AA}$. Размер области рассеяния квазичастиц (центральная область) составляет $\sim 19,7 \text{ \AA}$.

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

где e – заряд электрона, h – постоянная планка, ε – энергия, $T(\varepsilon)$ – функция (спектр) пропускания, $f(\varepsilon)$ – фермиевская функция распределения квазичастиц по энергиям, k_B – постоянная Больцмана, T_R , T_L – текущие температуры и μ_R , μ_L – электрохимические потенциалы правого и левого электрода.

Для описания межатомного взаимодействия и оптимизации дефектных графеновых структур использовался потенциал Brenner [19], который хорошо описывает углеродные наноструктуры. Структуры определялись путем минимизации энергии, при этом максимальный силовой компонент на каждом атоме для различной конфигурации (А-Е) варьировался от $0,023 \text{ эВ/\AA}$ до $0,049 \text{ эВ/\AA}$. При оптимизации наноструктур получены следующие данные:

- конфигурация А имеет простую структуру, состоящую из одного дефекта SW; ее длина коры $R = 1,338 \text{ \AA}$, протяженность дефекта по оси Z составляет $\sim 5,48 \text{ \AA}$, а по оси $Y - 6,7 \text{ \AA}$, максимальный силовой компонент на каждом атоме равен $\sim 0,046 \text{ эВ/\AA}$;

- конфигурация В состоит из двух дефектов SW, расположенных рядом друг с другом и на одной прямой по оси Z , длины коры дефектов $R_1 \approx R_2 \approx 1,355 \text{ \AA}$, расстояние между корами $\sim 1,56 \text{ \AA}$, протяженность взаимодействующих дефектов по оси Z составляет 8 \AA , а по оси $Y - 6,914 \text{ \AA}$, максимальный силовой компонент на каждом атоме равен $\sim 0,049 \text{ эВ/\AA}$;

Компьютерное моделирование электрических характеристик дефектной графеновой структуры проводилось в рамках теории функционала плотности (DFT – Density Functional Theory) с применением метода неравновесных гриновских функций (NEGF – Non-Equilibrium Green's Functions) в приближении локальной плотности (LDA – local-density approximation) [12, 13]. Моделирование квантово-транспортных характеристик графена реализовано в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab [14]. (Основные уравнения данного метода подробно описаны в работах [15-17]). ВАХ наноструктуры рассчитывается на основе известного уравнения Ландауэра, указывающего фундаментальную связь электрического тока со спектром пропускания [18]:

- конфигурация С состоит из двух дефектов SW, расположенных на одной прямой по оси Z и взаимодействующих через атом, длины кор дефектов $R_1 \approx 1,357 \text{ \AA}$ и $R_2 \approx 1,354 \text{ \AA}$, расстояние между корами $\sim 3,76 \text{ \AA}$, протяженность взаимодействующих дефектов по оси Z составляет $10,33 \text{ \AA}$, а по оси $Y - 6,89 \text{ \AA}$, максимальный силовой компонент на каждом атоме равен $\sim 0,023 \text{ эВ/\AA}$;

- конфигурация D состоит из двух дефектов SW, расположенных на одной прямой по оси Z и взаимодействующих через 2 атома, длины кор дефектов $R_1 \approx 1,35 \text{ \AA}$ и $R_2 \approx 1,355 \text{ \AA}$, расстояние между корами $\sim 6,12 \text{ \AA}$, протяженность взаимодействующих дефектов по оси Z составляет $12,73 \text{ \AA}$, а по оси $Y - 6,9 \text{ \AA}$, максимальный силовой компонент на каждом атоме равен $\sim 0,038 \text{ эВ/\AA}$;

- конфигурация E состоит из двух дефектов SW, расположенных на одной прямой по оси Y , длины кор дефектов $R_1 \approx R_2 \approx 1,352 \text{ \AA}$, расстояние между корами $\sim 3,93 \text{ \AA}$, протяженность взаимодействующих дефектов по оси Z составляет $5,5 \text{ \AA}$, а по оси $Y - 10,67 \text{ \AA}$, максимальный силовой компонент на каждом атоме равен $\sim 0,043 \text{ эВ/\AA}$;

- конфигурация F состоит из двух дефектов SW, расположенных на разных прямых по оси Y , длины кор дефектов $R_1 \approx R_2 \approx 1,33 \text{ \AA}$, расстояние между корами $\sim 5,56 \text{ \AA}$, область взаимодействующих дефектов составляет $11,71 \text{ \AA} \times 5,27 \text{ \AA}$, максимальный силовой компонент на каждом атоме равен $\sim 0,046 \text{ эВ/\AA}$.

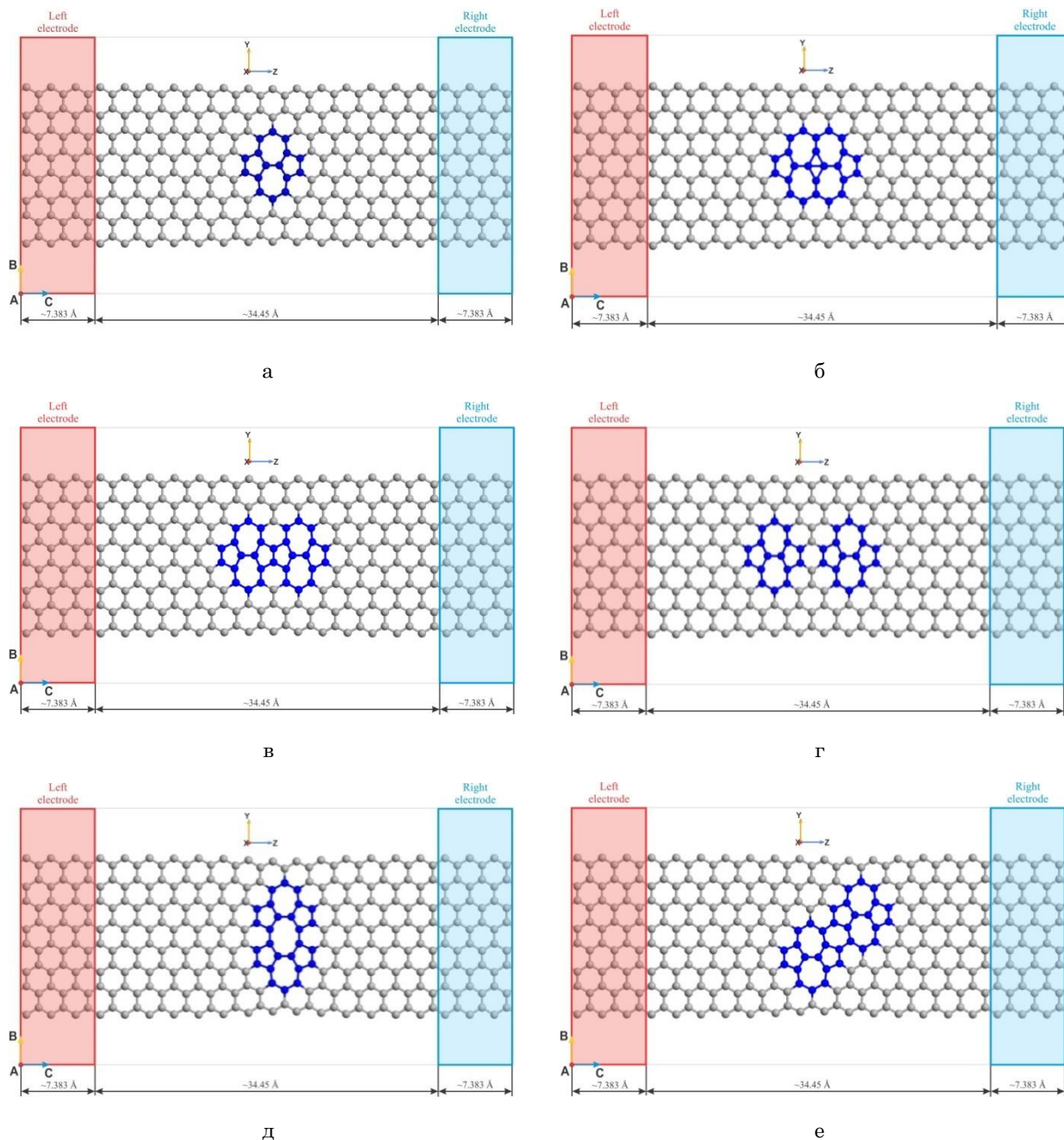


Рис. 3 – Геометрия графена с дефектами SW (ZY-plane): а) одиночный дефект SW (конфигурация А); б) два соседних дефекта SW на одной прямой (по оси Z) (конфигурация В); в) два дефекта SW, расположенные через 2 атома, на одной прямой (по оси Z) (конфигурация С); г) два дефекта SW, расположенные через 2 атома, на одной прямой (по оси Z) (конфигурация D); д) два дефекта SW на одной прямой (по оси Y) (конфигурация E); е) два дефекта SW на разных прямых (конфигурация F)

3. ОПИСАНИЕ И АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты вычисления плотности состояний (DDOS – Device Density of States) конфигураций дефектного графена, представлены на рис. 4. В работе [20] исследованы DOS графена с SW-дефектом, где показано, что SW-дефекты приводят к появлению дефектной полосы $\sim 0,5$ эВ выше уровня Ферми, когда в графене без дефекта данная полоса отсутствует. Пики DOS дефектной полосы возникают при энергии 0,45 эВ и 0,7 эВ. Происхождение дефектной полосы объясняется структурными неустойчивостями в дефектном графене. (Природа таких структур-

ных неустойчивостей описана в работе [21]). Следует отметить, что ширина и высота этой полосы зависят от концентрации дефектов в образце. pz-орбитали атомов углерода вращающейся связи C-C в центре SW-дефекта вносят вклад преимущественно в эту дефектную полосу. С увеличением концентрации дефектов увеличивается как ширина, так и плотность состояний дефектной зоны. Следовательно, эта дефектная зона оказывается полезной для идентификации SW-дефектов и определения их концентрации в графеновой пленке.

В нашем случае, пики дефектной полосы наблюдаются для одинарного SW-дефекта (А-

конфигурация) при энергии 0,36 эВ и 0,64 эВ с интенсивностями 14,2 усл. ед. и 12 усл. ед., соответственно. В тех же значениях энергии проявляется дефектная полоса и для В-конфигурации с интенсивностями 13,74 усл. ед.; 14,32 усл. ед., соответственно. Присутствие двух SW-дефектов, взаимодействующих через атом на одной линии (конфигурация С), в гексагональной решетке графена приводит к сдвигу по энергии. При энергии 0,56 эВ проявляется пиковое значение интенсивности 13,77 усл. ед., а второй пик интенсивностью 15,57 усл. ед. наблюдается при энергии 0,36 эВ. Два SW-дефекта, взаимодействующих через гексагональный элемент, по оси Z (D-конфигурация) дают вклад в DOS интенсивностью 12,7 усл. ед. и 17,6 усл. ед. при энергии 0,36 эВ и 0,48 эВ. Изменение положения взаимодействующих SW-дефектов по оси Y (E-конфигурация) тоже приводит к сдвигам по энергии: максимумы дефектной полосы появляются при энергии 0,4 эВ и 0,64 эВ с интенсивностями 11,14 усл. ед. и 14,27 усл. ед. При наличии в графене двух SW-дефектов на разных прямых (конфигурация F) наблюдается увеличение интенсивности при энергии 0,4 эВ на несколько порядков ~ 112,87 усл. ед., а значение интенсивности при 0,64 эВ остается неизменной 12,7 усл. ед.

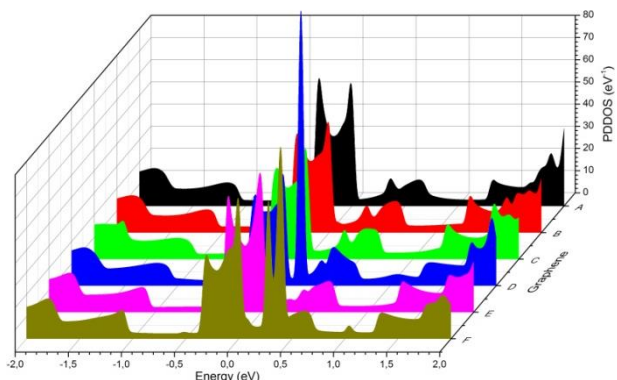


Рис. 4 – Плотность состояний A, B, C, D, E, F конфигурации

Эволюция функции (спектра) пропускания SW-дефектной графеновой пленки с увеличением напряжения смещения 0 В, 0,1 В, 0,2 В, 0,4 В ... 2 В представлена на рис. 5 а-е. Как видно, особенности DOS в виде появления дефектной полосы проявляются и в спектре пропускания рассматриваемой графеновой структуры при тех же значениях энергии, так как эти величины прямопропорциональны $T(\varepsilon) = D(\varepsilon - U)2\pi\gamma_1\gamma_2/\gamma$ (здесь U – самосогласованный потенциал, γ – параметр Латинжера) [22].

Для А-конфигурации дефектные особенности спектра пропускания наблюдается при энергии 0,36 эВ и 0,64 эВ с интенсивностями 1,7 усл. ед. и 1,14 усл. ед., соответственно. Наличие двух соседних SW-дефектов на одной прямой в В-конфигурации приводит к появлению дефектных особенностей спектра пропускания при энергии 0,32 эВ и 0,64 эВ с интенсивностями 1,95 усл. ед. и 2,23 усл. ед. Для С-конфигурации дефектные особенности спектра наблюдается при тех значениях энергии с интенсивностями 1,8 усл. ед. и 2,55 усл. ед. При двух взаимо-

действующих SW-дефектов в D-конфигурации графена дефектные особенности спектра пропускания возникают при энергии 0,32 эВ и 0,52 эВ с интенсивностями ~ 2 усл. ед.; 2,47 усл. ед. Дефектная полосы спектра пропускания E-конфигурации в отличие от предыдущих имеет сдвиг по энергии и наблюдается при энергии 0,4 эВ и 0,6 эВ с интенсивностями ~ 0,69 усл. ед.; 2,2 усл. ед. Дефектные особенности спектра пропускания F-конфигурации в виде двух SW-дефектов на разных прямых проявляются при энергии 0,4 эВ и 0,64 эВ с интенсивностями ~ 1,7 усл. ед.; ~ 1 усл. ед.

С увеличением напряжения смещения амплитуда спектра пропускания дефектного графена убывает, а в двух SW-дефектном графене в виде В-конфигурации $V_{bias} > 1,2$ В функция пропускания принимает нулевое значение (рис. 5 б).

Спектры пропускания графеновых наноструктур с отчетливыми максимумами и минимумами напоминают спектр резонансных туннельных структур [22]. Полагаем, что возможное возникновение резонансного туннелирования в таких структурах обусловлено низкой размерностью наноструктуры (рис. 3). Эффект резонансное туннелирование отражается в основных электрических характеристиках рассматриваемых структур.

Результаты моделирования вольтамперных характеристик (ВАХ) и дифференциальной проводимости приведены на рис. 6. Из приведенных зависимостей $I(V)$, dI/dV видно, что введение в гексагональную структуру графена дефектов Стоуна-Уэlsa приводит к изменению ВАХ и дифференциальной проводимости. Подобные изменения $I(V)$, dI/dV -характеристик следует учесть при расчетах графеновых электронных приборов, так как не всегда можем получить идеальные графеновые материалы.

Рассмотрим ВАХ А-конфигурации, имеющей один SW-дефект (рис. 6 а, кривая а). В интервале напряжений 0-0,8 В ток квазилинейно растет до 50 мкА. Далее зависимость $I(V)$ носит слабо осциллирующий характер. В интервалах напряжений 0,8-1 В, 1,2-1,43 В, 1,6-1,85 В наблюдается падение тока от 50 мкА до 46 мкА, от 50 мкА до 45 мкА, от 47 мкА до 41 мкА, соответственно, формируя участки отрицательного дифференциального напряжения.

Иное поведение ВАХ наблюдается в В-конфигурациях (рис. 6, кривая б). В интервале напряжении 0-0,85 В ток изменяется линейно от 0 до 48 мкА. Далее на участке напряжений 0,83-1,28 В ток падает от максимального значения 48 мкА до минимального – 4 мкА. Такое поведение зависимости $I(V)$ свойственно ВАХ полупроводниковой наноструктуры с отрицательным кулоновским потенциалом [23], и обычно проявляется в туннельных контактах малых размеров, где кулоновское взаимодействие может существенно менять DOS за счет появления неравновесного заряда в области наноконтакта. Появление пика на ВАХ при $V_{bias} \approx 0,8$ В возможно связано с кулоновскими корреляционными эффектами в В-структурах.

На ВАХ С-структуры (рис. 6, кривая с) также как и А-структуры в интервале напряжения смещения 0,8-1,15 В, 1,4-1,58 В уменьшается величина тока от

49 мкА до 29 мкА и от 46 мкА до 32 мкА, соответственно.

В интервале напряжений $\sim 0-0,6$ В ток D- и F-конфигурации переключается, а максимальное значение тока для этих конфигураций ~ 57 мкА и ~ 69 мкА, соответственно, возникает при $V_{bias} \approx 1,8$ В (рис. 6, кривые d, f). На ВАХ D-конфигурации прояв-

ляются следующие особенности: в интервале напряжений $0,73-0,95$ В и $1,18-1,375$ В уменьшение тока от 39 мкА до 35 мкА и от 44 мкА до 36 мкА. А на ВАХ F-конфигурации наблюдается уменьшение тока от 37 мкА до 33 мкА при $V_{bias} = 0,6-0,8$ В и $V_{bias} = 1,1-1,4$ В, соответственно.

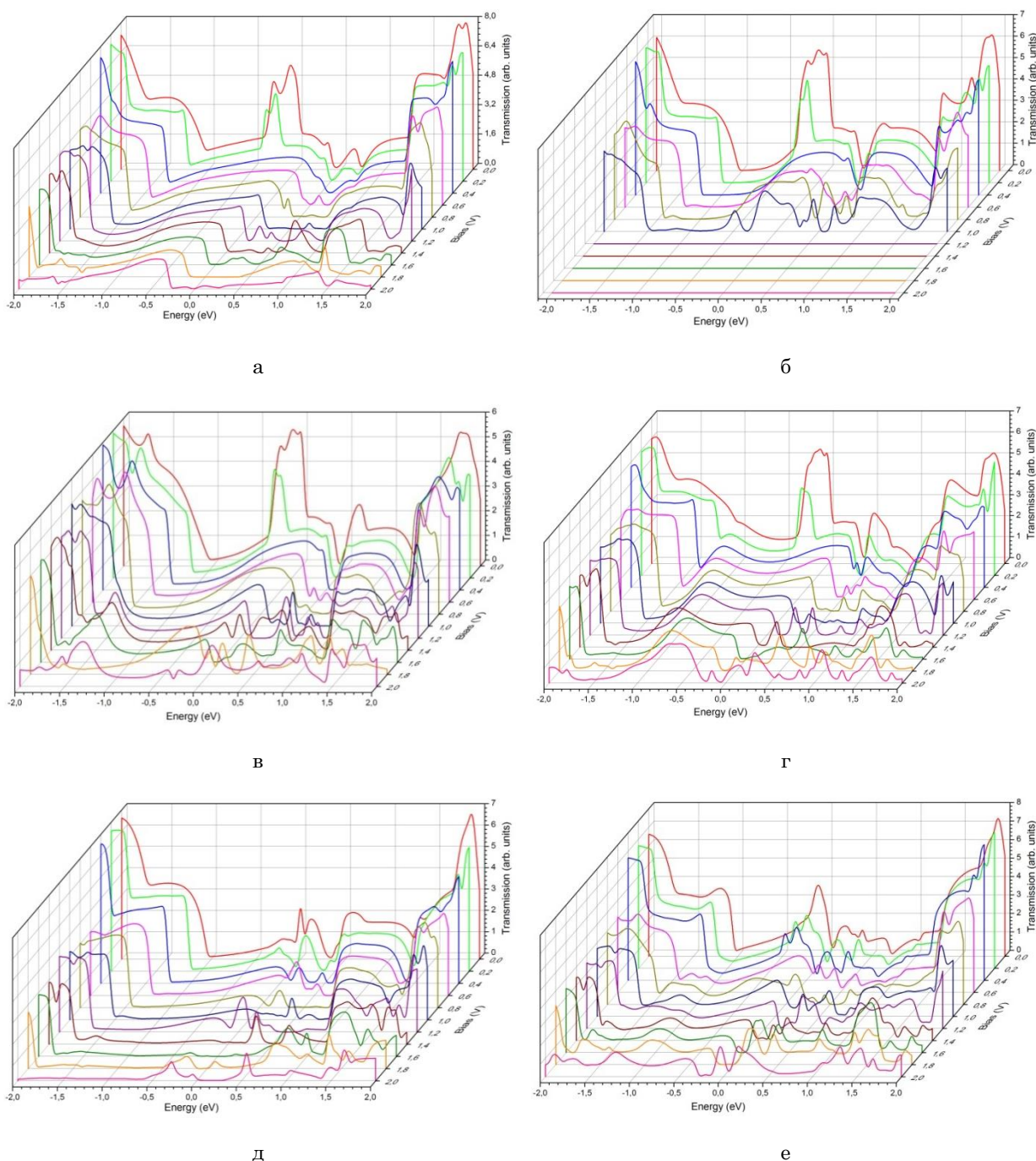


Рис. 5 – Эволюция спектра пропускания SW-дефектной графеновой структуры с увеличением напряжения смещения V_{bias} (0-2 В) (спектры соответствуют структурам, представленным на рис. 3)

При наличии двух SW-дефектов в графене на одной прямой по оси Y (конфигурация E) наблюдается совсем другое поведение ВАХ. Если во всех рассмотренных наноструктурах при $V_{bias} \sim 0-0,7$ В зависимость тока от напряжения носила квазилинейный

характер и значение тока варьировалось $\sim 36-50$ мкА, то для E-конфигурации в этом интервале напряжений ток принимает значение 20 мкА, что существенно меньше относительно от других структур. Уменьшение тока наблюдается на двух участках ВАХ: от

20 мкА до 11 мкА при $V_{bias} = 0,6-0,9$ В и от 24 мкА до 10 мкА при $V_{bias} = 1,18-1,5$ В, соответственно.

Особенности ВАХ рассмотренных графеновых наноструктур отчетливо проявляются и в их дифференциальной проводимости (рис. 6 б). Для удобства сравнения спектры дифференциальной проводимости сдвинуты по оси dI/dV на 50 мкСм (кривая b), 130 мкСм (кривая c), 200 мкСм (кривая d), 300 мкСм (кривая e), 350 мкСм (кривая f). Из-за симметричности dI/dV -спектров рассмотрим дифференциальную проводимость наноструктур только при положительных значениях напряжения смещения. Она имеет три локальных максимумов и минимумов в интервале 0-2 В.

При околонулевом значении напряжения смещения дифференциальная проводимость А-, В-, С-, D-, Е-, F-структур принимает следующие значения 99,7 мкСм, 102,77 мкСм, 98,89 мкСм, 101,2 мкСм, 30,3 мкСм, 79,16 мкСм, соответственно. Первая особенность dI/dV -спектра наблюдается в интервале напряжения 0,25-0,44 В в виде минимумов от 11,6 мкСм (Е-

конфигурация) до ~ 53 мкА (А-конфигурация), а вторая особенность в виде максимума проявляется в полосе 0,46-0,67 В, при этом ее значения варьируется от ~ 56 мкСм (D-конфигурация) до 78,4 мкСм (F-конфигурация). Далее особенности dI/dV -спектра наноструктур переключаются. Все особенности спектра дифференциальной проводимости А- и D-структур проявляются при одинаковых значениях напряжения смещения, но разными амплитудами: в виде максимумов 68,44 мкСм и 56 мкСм при $V_{bias} \approx 0,51$ В; 33,82 мкСм и 57,45 мкСм при $V_{bias} \approx 1,1$ В и 13,8 мкСм и 12,8 мкСм при $V_{bias} \approx 1,52$ В, а в виде минимумов 52,94 мкСм и 35,5 мкСм при $V_{bias} = 0,33$ В; - 34,7 мкСм и - 28,8 мкСм при $V_{bias} \approx 0,9$ В; - 33,3 мкСм и - 58,5 мкСм при $V_{bias} \approx 1,3$ В, соответственно.

На наш взгляд, такое проявление пиков и провалов dI/dV -спектра А- и D-структур можно объяснить схожестью SW-дефектов в их гексагональной решетке. В этих структурах дефект Стоуна-Уэльса существует в одиночном виде и в комбинированном, взаимодействующий через один гексагональный элемент решетки.

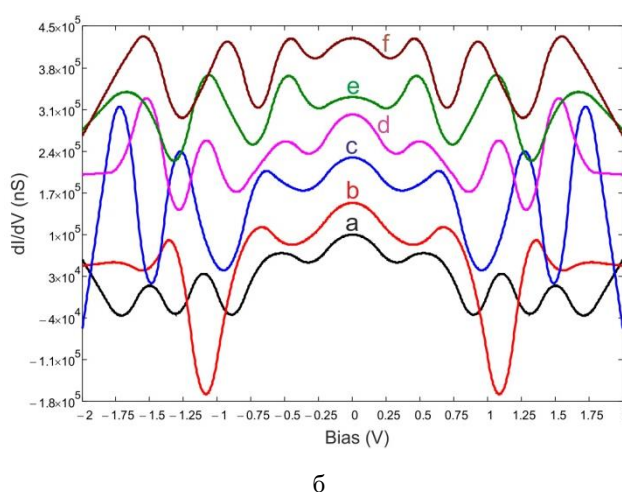
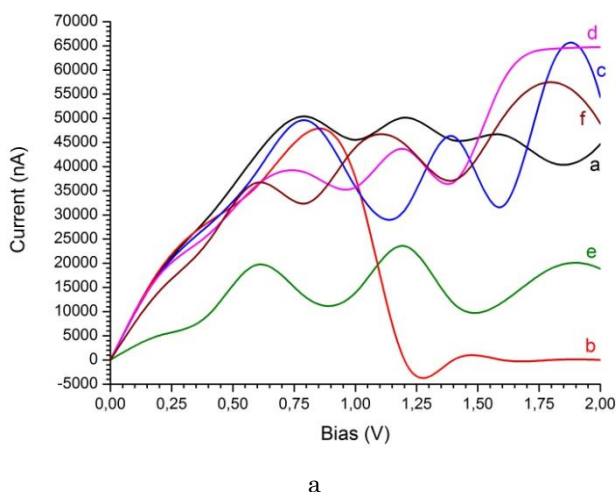


Рис. 6 – Вольтамперные (а) и dI/dV -характеристики (б) SW-дефектных графеновых структур (буквенные обозначения соответствует структуре, показанной на рис. 3). Для удобства сравнения кривые дифференциальной проводимости смещены по оси dI/dV

4. ВЫВОДЫ

Таким образом, в данной работе в рамках теории функционала плотности модельно исследованы основные электрические характеристики (плотность состояний, спектры пропускания при различных значениях напряжения смещения, ВАХ, дифференциальная проводимость) SW-дефектных графеновых структур. Обнаружены особенности плотности состояний графеновых наноструктур в виде появления дефектной полосы ~ 0,5 эВ выше уровня Ферми, идентифицирующие присутствие дефектов Стоуна-Уэльса и характеризующие их концентрации в подобных структурах. Показано, что ВАХ SW-дефектных графеновых структур имеет особенность резкого возрастания туннельного тока при определенных значениях напряжения, возможно обусловленную резонансным туннелированием квазичастиц. Выявлено, что ВАХ дефектного графена в виде В-конфигурации с наличием двух непосредственно взаимодействующих SW-дефектов по оси Z, демон-

стрирует зависимость туннельного тока от напряжения полупроводниковой наноструктуры с отрицательным кулоновским потенциалом. Установлено, что туннельный ток графеновой структуры в виде Е-конфигурации с двумя SW-дефектами по оси Y в два раза меньше ~ 24 мкА относительно остальных структур. Приведена эволюция спектра пропускания наноструктуры с увеличением напряжения смещения (от 0 до 2 В), при этом поведение спектра пропускания с острыми резонансными пиками является доказательством эффекта резонансного туннелирования в рассматриваемых структурах. Полученные результаты могут быть полезными для расчетов новых перспективных электронных приборов нанoeлектроники на основе графена.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при частичной поддержке гранта Министерства образования и науки Республики Казахстан (проект №4903/ГФ4).

Computer Simulation of Electrical Characteristics of a Graphene Cluster with Stone-Wales Defects

D.M. Sergeyev^{1,2}

¹ *Zhubanov Aktobe Regional University, 34, Moldagulova Ave., 030000 Aktobe, Kazakhstan*

² *Begeldinov Military Institute of Air Defence Forces, 39, Moldagulova Ave., 030012 Aktobe, Kazakhstan*

In the framework of the density functional theory, using the method of nonequilibrium Green's functions and in the local density approximation, the electrical characteristics of various configurations of graphene with a Stone-Wales defect are investigated. The calculation is implemented in the Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab program. The current-voltage, dI/dV -characteristics, the transmission spectrum and the density of states of the nanostructures under consideration are calculated. At an energy of ~ 0.5 eV, a band consisting of two peaks, characteristic for Stone-Wales defects, appears on the density of states. This "defect band" can be useful for recognizing such defects, as well as for determining their concentration in a graphene film. It is shown that on the current-voltage characteristics of defective graphene structures, a region with a negative differential resistance appears, possibly due to resonant tunneling of quasiparticles. The same changes are also observed on the dI/dV -characteristic. The obtained results can be useful for calculations of new promising electronic devices of nanoelectronics based on graphene.

Keywords: Graphene, Stone-Wales defect, Density of states, Current-voltage characteristic, Differential conductivity, Transmission spectra.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A.J. Stone, D.J. Wales, *Chem. Phys. Lett.* **128**, 501 (1986).
2. A.I. Podlivaev, L.A. Openov, *Phys. Solid State* **57**, 820 (2015).
3. J. Kotakoski, J.C. Meyer, S. Kurasch, D. Santos-Cottin, U. Kaiser, A.V. Krashenninnikov, *Phys. Rev. B* **83**, 245420 (2011).
4. J.C. Meyer, C. Kisielowski, R. Erni, M.D. Rossell, M.F. Crommie, A. Zettl, *Nano Lett.* **8**, 3582 (2008).
5. S. Letardi, M. Celino, F. Cleri, V. Rosato, *Surf. Sci.* **496**, 33 (2002).
6. L. Chen, H. Hu, Yu. Ouyang, H.Z. Pan, Y.Y. Sun, F. Liu, *Carbon* **49**, 3356 (2011).
7. L. Chen, J. Li, D. Li, M. Wei, X. Wang, *Solid State Commun.* **152**, 1985 (2012).
8. M.T. Lusk, L.D. Carr, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 175503 (2008).
9. L.A. Openov, A.I. Podlivaev, *Phys. Solid State* **57**, 1477 (2015).
10. X. Peng, R. Ahuja, *Nano Lett.* **8**, 4464 (2008).
11. H. Zeng, J. Zhao, J.W. Wei, H.F. Hu, *Eur. Phys. J. B* **79**, 335 (2011).
12. M. Brandbyge, J.-L. Mozos, P. Ordejon, J. Taylor, K. Stokbro, *Phys. Rev. B* **65**, 165401 (2002).
13. E.S. Kryachko, E.V. Ludena, *Phys. Rep.* **544**, 123 (2014).
14. *Atomistix ToolKit. Manual Version 2015.1.*, 840 (QuantumWise A/S: 2015).
15. D. Sergeyev, K. Shunkeyev, *Russ. Phys. J.* **60**, 1938 (2018).
16. D. Sergeyev, K. Shunkeyev, *J. Nano- Electron. Phys.* **9**, 06019 (2017).
17. D. Sergeyev, N. Zhanturina, K. Shunkeyev, *2017 International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON)* (IEEE Catalog Number: CFP17794-CDR: Astana: 2017).
18. R. Landauer, *Philos. Mag.* **21**, 863 (1970).
19. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 783 (2002).
20. Sh.N. Shirodkar, U.V. Waghmare, *Phys. Rev. B* **86**, 165401 (2012).
21. A. Carpio, L.L. Bonilla, F. de Juan, M.A.H. Vozmediano, *New J. Phys.* **10**, 053021 (2008).
22. Datta S. *Quantum Transport: Atom to Transistor*, 404 (Cambridge: Univ. Press: 2005).
23. P.I. Arseev, V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, V.I. Panov, *Phys.-Usp.* **60**, 1067 (2017).