

УДК 537.9

БАЛЛИСТИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК

© 2024 г. Е. Р. Созыкина^{а,*}, С. А. Созыкин^а, В. П. Бескачко^а

^аЮжно-Уральский государственный университет, Челябинск, 454080 Россия

*e-mail: sozykinaer@susu.ru

Поступила в редакцию 07.12.2023 г.

После доработки 08.02.2024 г.

Принята к публикации 08.02.2024 г.

В работе приведены результаты теоретического исследования электронной структуры и электрической проводимости одностенных золотых нанотрубок с индексами хиральности (4, 0), (5, 0), (6, 0), (7, 0), (4, 4) и (5, 5). Моделирование проводили по теории функционала плотности и методом неравновесных функций Грина. Были использованы обменно-корреляционный функционал Пердью–Бурке–Эрнцерхофа и двухэкспоненциальный базисный набор. Была продемонстрирована важность использования базисных наборов с поляризационными функциями при изучении электрических свойств золотых нанотрубок. Анализ результатов расчетов показал, что функции пропускания исследованных нанотрубок сложным образом зависят от их структуры, но в целом растут с увеличением диаметра. Зависимость функции пропускания от энергии электрона не позволяет априори говорить о линейности вольт-амперной характеристики золотых нанотрубок в пределах какого-либо конечного интервала напряжений. Кроме бездефектных одностенных золотых нанотрубок, были исследованы и золотые нанотрубки разного диаметра с дефектом типа вакансии. Это позволило оценить влияние такого дефекта на атомную структуру и электрическую проводимость одностенных золотых нанотрубок. Было продемонстрировано, что падение проводимости может варьироваться в широких пределах, коррелируя с изменением атомной структуры.

Ключевые слова: одностенная золотая нанотрубка, вольт-амперная характеристика, теория функционала электронной плотности, метод неравновесных функций Грина, вакансии.

DOI: 10.31857/S1028096024070074, **EDN:** EVGSYX

ВВЕДЕНИЕ

Баллистическим называется режим проводимости, при котором носитель заряда имеет длину свободного пробега, сопоставимую или больше размеров проводника. По мере миниатюризации электронных устройств часть их проводящих элементов может переходить в баллистический режим проводимости, что необходимо учитывать при оценке минимально достижимого сопротивления проводников [1]. Проводимость объектов размером менее 1 мкм может существенно отличаться от проводимости соответствующего объемного материала. Например, в работе [1] продемонстрирована анизотропия баллистической проводимости в тонких пленках. Измерение баллистической проводимости нанообъектов является мощным инструментом исследования их свойств. Так, в работе [2] этим методом изучены

особенности зонной структуры, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием в двуслойном графене. А в работе [3] установлена ступенчатая зависимость электрического сопротивления полоски графена от ее длины.

Золоту благодаря его пластичности и коррозионной стойкости находят широкое применение в электронике. В связи с этим активно исследуют экспериментально полученные нанопровода [4] и одностенные нанотрубки из атомов золота [5]. Для нанопроводов была продемонстрирована баллистическая проводимость, зависящая от количества атомных цепочек, формирующих проволоку [6].

Рассчитать проводимость объекта с баллистической проводимостью можно в модели Ландауэра [7]:

$$G = -G_0 \int_{-\infty}^{\infty} T(E) \frac{\partial f(E - \mu)}{\partial E} dE, \quad (1)$$

$$G = G_0 \bar{T}, \quad (2)$$

где $G_0 = 2e^2/h = 7.748 \times 10^{-5}$ См — квант проводимости; e — элементарный заряд; E — энергия электрона; $T(E)$ — функция пропускания или передаточная функция; f — распределение Ферми–Дирака; μ — равновесный потенциал; $\bar{T}$ — коэффициент проницаемости объекта. Функция пропускания выражается через количество поперечных проводящих мод, каналов проводимости и вероятности прохождения электрона по каждому из каналов. В настоящей работе не выделены эти вклады в функцию пропускания, поэтому не будем на них останавливаться. По определению, $\bar{T}$ может быть дробным числом и зависеть от приложенной разности потенциалов, поэтому проводимость одномерных объектов не всегда кратна кванту проводимости.

Электронные свойства золотых нанотрубок исследовали в основном в рамках теории функционала электронной плотности [8–13], но встречаются и альтернативные подходы [14, 15]. Во всех перечисленных работах сообщают об отсутствии запрещенной зоны в энергетическом спектре одностенных золотых нанотрубок (ОЗНТ). Электрическая проводимость изучена лишь фрагментарно: либо в рамках упрощенных моделей [8, 9], либо для ограниченного набора нанотрубок малого радиуса [11, 13]. Сведения о влиянии простейшего дефекта атомной структуры — вакансии — на проводимость имеются лишь для двух нанотрубок [11]. В настоящей работе мы решили устранить эти пробелы, исследовав вольт-амперные характеристики ряда золотых нанотрубок и установив влияние дефекта вакансии на данную характеристику.

МЕТОД И МОДЕЛЬ

В настоящей работе были построены модели шести различных ОЗНТ с индексами хиральности (4, 0), (5, 0), (6, 0), (7, 0), (4, 4) и (5, 5). Их атомная структура приведена на рис. 1а. Отметим, что из-за существования двух подходов к описанию структуры золотых нанотрубок, упоминаемые в работах [11, 13] золотые нанотрубки с индексами хиральности (4, 4) и (5, 5) соответствуют приведенным в нашей работе нанотрубкам с индексами хиральности (4, 0) и (5, 0).

Для расчета баллистической проводимости существует несколько программных продуктов, реализующих моделирование с использова-

нием метода неравновесных функций Грина. Большинство коммерчески доступных программных кодов частично основаны на коде, исторически связанном с проектом SIESTA [16]. Недавно появился альтернативный метод моделирования баллистической проводимости [17], результаты которого согласуются с реализованным в программе SIESTA. Учитывая вышесказанное, в качестве инструмента моделирования и электронных, и электрических свойств был выбран пакет SIESTA [18] версии 4.1.5. Использовался обменно-корреляционный функционал Пердью–Бурке–Эрнцерхофа (Perdew–Burke–Ernzerhof, PBE). Разбиение обратного пространства проводили по схеме Монхорста–Пака (Monkhorst–Pack) со 100 k -точками в направлении оси нанотрубки. Параметр, влияющий на детализированность сетки в координатном пространстве (MeshCutoff), задавали равным 5442 эВ. При моделировании использовали периодические граничные условия и тетрагональную расчетную ячейку. В перпендикулярных оси нанотрубки направлениях параметр трансляции составлял 5 нм. Параметр трансляции вдоль оси подбирали для каждой нанотрубки не-

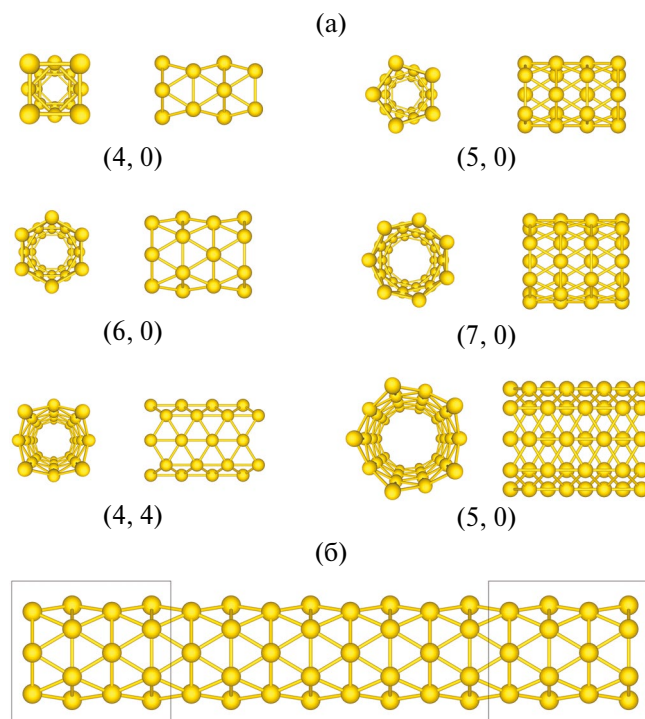


Рис. 1. Модели атомной структуры: а — ОЗНТ с указанными индексами хиральности (4, 0), (5, 0), (6, 0), (7, 0), (4, 4) и (5, 5) в двух проекциях; б — ОЗНТ с индексами хиральности (6, 0), области рассеяния соответствует центральная часть, электроды в виде ОЗНТ с индексами хиральности (6, 0) показаны слева и справа от области рассеяния, обведены прямоугольниками.

зависимо, из условия минимума полной энергии модели.

В настоящей работе исследуемая область, катод и анод образованы нанотрубками с одинаковой структурой. Такая модель позволяет минимизировать контактные явления [19] и выделить свойства ОЗНТ. Заметим, что подобный подход в разных вариациях применим и для углеродных нанотрубок [20]. На рис. 16 показана ОЗНТ с индексами хиральности (6, 0) с двумя электродами. Расстояние между электродами и исследуемой областью выбирали равным типичному межплоскостному расстоянию в соответствующей нанотрубке.

В работе [21] показано, что функции пропускания углеродных нанотрубок существенно зависят от выбора базисного набора: наборы с малым количеством базисных функций приводят к большим ошибкам. Было решено проверить наличие такой зависимости для золотых нанотрубок. Этот вопрос актуален потому, что расчеты функций пропускания и вольт-амперных характеристик (ВАХ) существенно более требовательны к вычислительным ресурсам, чем обычные расчеты в рамках теории функционала плотности (DFT) и может потребоваться сознательное ухудшение базиса, чтобы расчеты оказались осуществимы.

Функции пропускания, полученные для ОЗНТ (6, 0) при использовании четырех различных базисных наборов, одноэкспоненциального (single-zeta, SZ), одноэкспоненциального с добавлением поляризационных орбиталей (single-zeta polarized, SZP), двухэкспоненциального (double-zeta, DZ) и двухэкспоненциального с добавлением поляризационных орбиталей (double-zeta polarized, DZP), приведены на рис. 2. Символами *S* и *D* обозначены случаи представления орбитали валентного электрона с помощью одного и двух экспоненциальных слагаемых соответственно. Символ *P* означает наличие “поляризационной” компоненты в базисе. Из рис. 2 видно, что наличие дополнительной поляризационной компоненты важнее дополнительного экспоненциального слагаемого: результаты, полученные в приближении SZP, лучше всего согласуются с результатами наиболее точного из рассмотренных приближений (DZP). Выбор базисного набора DZ или SZ приводит к заметным ошибкам в функции пропускания, которые, согласно выражению (1), должны проявиться на вольт-амперных характеристиках. Для электронов с энергией менее 0.17 эВ функции пропускания, полученные с помощью всех рассмотренных базисов, одинаковы, что позволяет надеяться на совпадение значений проводимости, полученных с использованием разных базисов, только при близких к нулю раз-

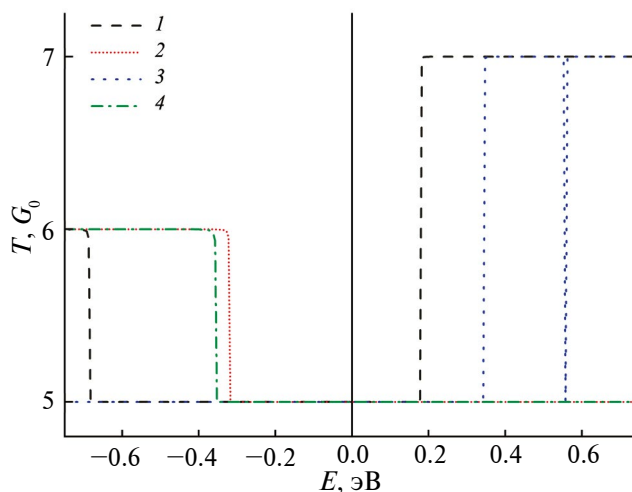


Рис. 2. Функции пропускания для ОЗНТ с индексами хиральности (6, 0), полученные при использовании базисных наборов: SZ (1), SZP (2), DZ (3) и DZP (4).

ностях потенциалов. Учитывая вышесказанное, для данного исследования был выбран базисный набор DZP.

После удаления одного атома из центральной области нанотрубки (создания вакансии) проводили оптимизацию атомной структуры с фиксированным параметром ячейки вдоль оси нанотрубки и координатами атомов электродов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Поскольку использовали тетрагональную расчетную ячейку, зонную структуру строили вдоль направления от точки гамма (Γ , центр зоны Бриллюэна) в центр грани границы зоны Бриллюэна, перпендикулярной оси нанотрубки (точка X). Зонная структура, полученная для элементарных ячеек нанотрубок с различными индексами хиральности, приведена на рис. 3. Пунктиром выделены некоторые из вырожденных дисперсионных кривых в диапазоне от -0.7 эВ до $+0.7$ эВ относительно уровня Ферми. Указанный диапазон был выбран из-за относительной простоты поведения дисперсионных кривых. Из рис. 3 видно, что количество дисперсионных кривых n вблизи уровня Ферми не постоянно. Для ОЗНТ с индексами хиральности (4, 0), (6, 0), (7, 0) и (5, 5) имеется диапазон энергий с уменьшенным n , а для нанотрубок с индексами хиральности (5, 0) и (4, 4) — с увеличенным. Для половины из рассмотренных нанотрубок обнаружены разрывы дисперсионных кривых, показанные на рис. 3.

Функции пропускания T , изображенные на рис. 4, согласуются с описанными выше особенностями зонной структуры и пропорциональны ко-

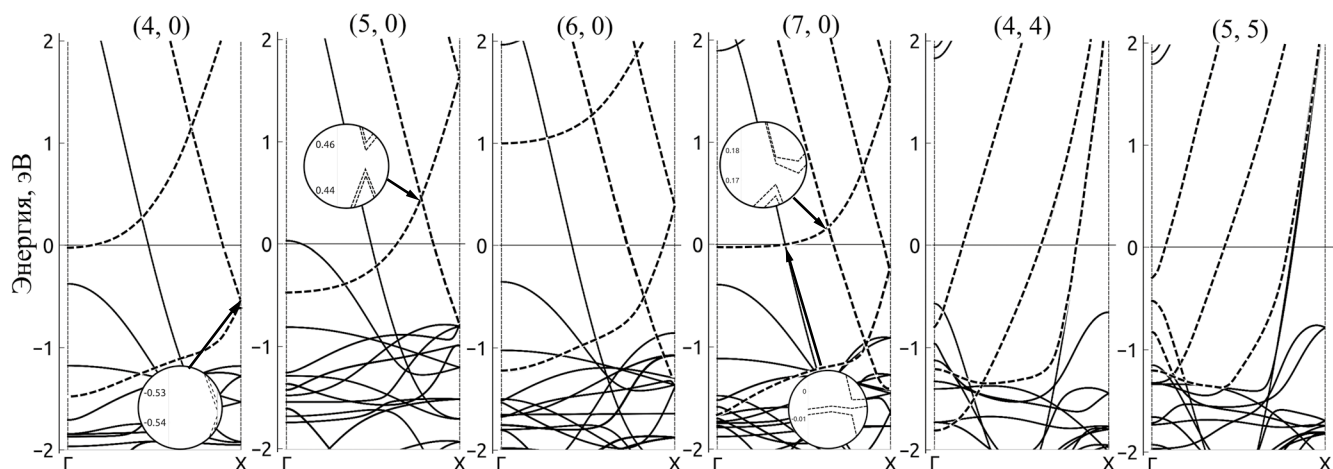


Рис. 3. Зонная структура золотых нанотрубок с указанными индексами хиральности.

личеству дисперсионных кривых (с учетом их вырожденности). Так, в области энергий 0.1–0.7 эВ наблюдали лишь отдельные узкие “провалы”, которые соответствуют разрывам вырожденных ветвей (именно поэтому падение составляет около $2G_0$). В области отрицательных энергий в интервале от –0.3 до –0.1 эВ функции пропускания всех рассматриваемых ОЗНТ постоянны, но часто (для трех из шести рассмотренных нанотрубок) не равны величине функции пропускания в области положительных энергий. Таким образом, согласно (1), нелинейность вольт-амперных характеристик ОЗНТ должна быть обусловлена в основном особенностями функций пропускания в окрестности нулевого значения энергии.

Сравним приведенные на рис. 4 функции пропускания золотых нанотрубок с имеющимися в литературе данными для нанообъектов. Для полосок

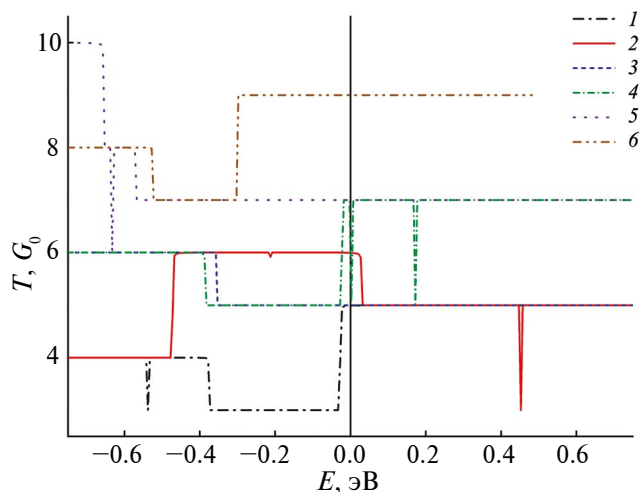


Рис. 4. Функции пропускания бездефектных ОЗНТ с индексами хиральности (4, 0) (1), (5, 0) (2), (6, 0) (3), (7, 0) (4), (4, 4) (5) и (5, 5) (6).

графена [22] и углеродных нанотрубок толщиной более 0.6 нм [21] функции пропускания практически симметричны (константа) относительно нуля в достаточно широком диапазоне значений энергии электрона. В молекулярных системах функция пропускания представляют собой комбинацию узких пиков [23]. Данные по золотым нанотрубкам приведены в работах [11, 13]. Для ОЗНТ с индексами хиральности (4, 0) было получено хорошее согласие результатов с результатами работы [13]. Для ОЗНТ с индексами хиральности (5, 0) согласие с работами [11, 13] хуже: по нашим результатам область $6G_0$ заметно шире и простирается до положительных энергий электрона. Сложно судить о причинах такого расхождения с [13], так как детали расчета в ней не приведены, а в работе [11] сообщают о существенно более грубой сетке в координатном пространстве, чем в настоящей работе (параметр MeshCutoff 2041 эВ). Можно предположить, что обнаруженные небольшие отличия — ошибки в литературных данных, связанные с более грубым подходом к моделированию. Согласие полученных нами результатов с литературными данными свидетельствует о корректности методики моделирования.

ВАХ бездефектных золотых нанотрубок в диапазоне от 0 до 0.5 В приведены на рис. 5а. Проводимость G вычисляли как коэффициент в уравнении прямой $I = GU$, аппроксимирующей полученные расчетные данные. С высокой точностью линейными оказались ВАХ ОЗНТ с индексами хиральности (6, 0) и (4, 4), для которых проводимость составила $5G_0$ и $7G_0$ соответственно. Для остальных нанотрубок было обнаружено уменьшение проводимости с увеличением разности потенциалов, но и для них погрешность определения углового коэффициента прямой не превышала 1.6%: проводимость (в единицах G_0)

составили 3.12 ± 0.03 , 4.94 ± 0.06 , 5.15 ± 0.03 и 8.37 ± 0.14 для ОЗНТ с индексами хиральности (4, 0), (5, 0), (7, 0) и (5, 5) соответственно.

Атомная структура дефектных нанотрубок с индексами хиральности (4, 0), (5, 0), (6, 0) и (7, 0) с электродами приведены на рис. 6. Из этого рисунка видно, что появление дефекта существенно изменяет структуру тонких нанотрубок с индексами хиральности (4, 0) и (5, 0), но лишь локально искажает структуру более толстых ОЗНТ с индексами хиральности (6, 0) и (7, 0). Отметим, что в данном случае для оценки степени дефектности не подходит доля удаляемых атомов: она максимальна для самой тонкой нанотрубки, но из-за малого радиуса ОЗНТ значительного искажения атомной структуры не происходит. Для более толстой нанотрубки с индексами хиральности (5, 0) оказывается возможным искажение атомной структуры, простирающееся на всю нанотрубку. В ОЗНТ с индексами хиральности (6, 0) искажения структуры практически не происходит.

Рассчитанные для дефектных ОЗНТ функции пропускания приведены на рис. 7. Можно от-

метить, что для ОЗНТ эта функция оказывается близкой к константе $5G_0$, то есть по сравнению со случаем бездефектной нанотрубки практически пропадает возвышающееся плато в области низких энергий электрона. Функции пропускания ОЗНТ с индексами хиральности (4, 0), (5, 0) и (7, 0) изменяются при появлении вакансии заметно сильнее: можно лишь констатировать уменьшение их значений. Это в целом соответствует результату работы [11] для ОЗНТ с индексами хиральности (5, 0).

ВАХ всех дефектных нанотрубок оказались линейными с высокой точностью (рис. 5б). Проводимости составили $2.63G_0$, $3.00G_0$, $4.93G_0$ и $4.56G_0$ для ОЗНТ с индексами хиральности (4, 0), (5, 0), (6, 0) и (7, 0) соответственно. То есть максимальное уменьшение проводимости ($1.94G_0$) по сравнению с бездефектной нанотрубкой наблюдается для ОЗНТ с индексами хиральности (5, 0), для которой было получено наибольшее искажение атомной структуры. Для ОЗНТ с индексами хиральности (6, 0) проводимость изменилась незначительно. Для ОЗНТ с индексами хираль-

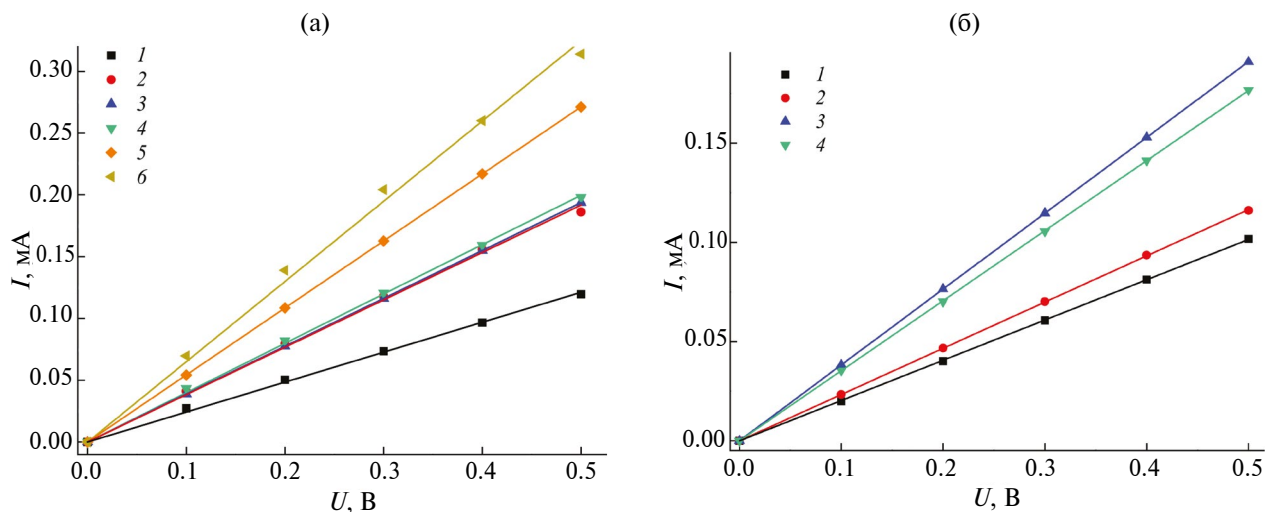


Рис. 5. ВАХ: а – бездефектных ОЗНТ с индексами хиральности (4, 0) (1), (5, 0) (2), (6, 0) (3), (7, 0) (4), (4, 4) (5) и (5, 5) (6); б – дефектных ОЗНТ с индексами хиральности (4, 0) (1), (5, 0) (2), (6, 0) (3) и (7, 0) (4).

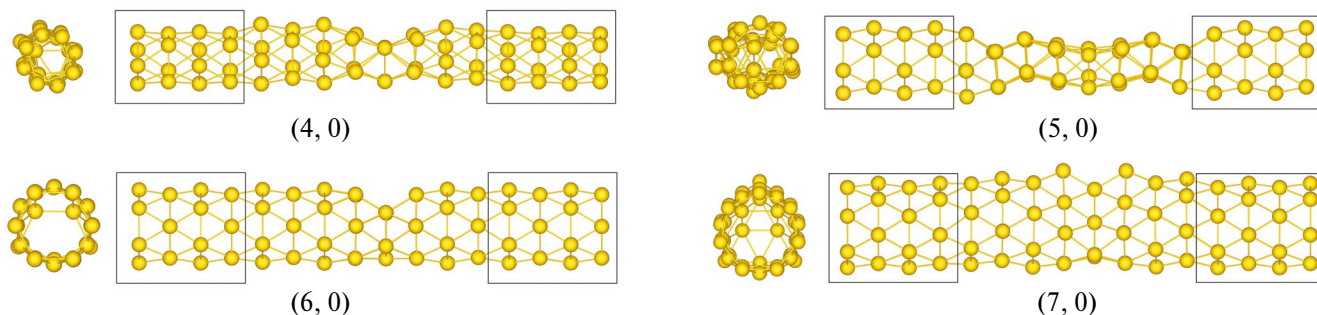


Рис. 6. Атомная структура дефектных нанотрубок с электродами.

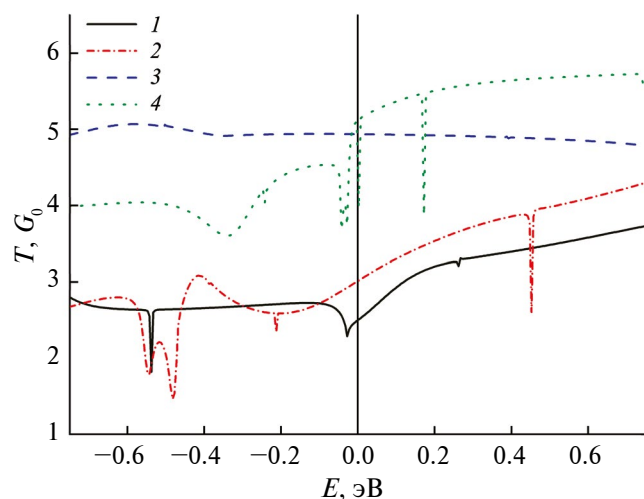


Рис. 7. Функции пропускания дефектных ОЗНТ с индексами хиральности (4, 0) (1), (5, 0) (2), (6, 0) (3) и (7, 0) (4).

ности (4, 0) и (7, 0) уменьшение проводимости составило $0.43G_0$ и $0.51G_0$ соответственно. Таким образом, очевидна корреляция описанного выше нарушения атомной структуры и уменьшения проводимости.

ВЫВОДЫ

Все рассмотренные в настоящей работе золотые нанотрубки, как и описанные в литературе, обладают металлическим типом проводимости. Функции пропускания исследованных бездефектных золотых нанотрубок кусочно-линейны и не симметричны относительно нуля энергии электронов. Вследствие более сложной, чем у проводящих углеродных нанотрубок, зонной структуры сформулировать простое утверждение относительно величины их проводимости не представляется возможным. В целом, проводимость растет с диаметром нанотрубки.

Из четырех исследованных нанотрубок с вакансией, только в случае ОЗНТ с индексами хиральности (5, 0) атомная структура оказалась неустойчива к появлению дефекта-вакансии: это привело к изменению структуры нанотрубки на всем протяжении модели.

Несмотря на сложный вид функций пропускания, вольт-амперные характеристики дефектных нанотрубок линейны. Падение проводимости при появлении дефекта может, как отсутствовать (случай ОЗНТ с индексами хиральности (6, 0)), так и превышать G_0 . Изменение проводимости зависит не от концентрации дефектов, а от того, останется ли искажение атомной структуры локальным.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bachmann M.D., Sharpe A.L., Baker G., Barnard A.W., Putzke C., Scaffidi T., Nandi N., McGuinness P., Zhakina E., Moravec M., Khim S., Köni M., Goldhaber-Gordon D., Bonn D.A., Mackenzie A.P., Moll P.J.W. // *Nat. Phys.* 2022. V. 18. № 7. P. 819. <https://www.doi.org/10.1038/s41567-022-01570-7>
2. Banszerus L., Frohn B., Fabian T., Somanchi S., Epping A., Müller M., Neumaier D., Watanabe K., Taniguchi T., Libisch F., Beschoten B., Hassler F., Stampfer C. // *Phys. Rev. Lett.* 2020. V. 124. № 17. P. 177701. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.177701>
3. De Cecco A., Prudkovskiy V.S., Wander D., Rini Ganguly R., Claire Berger C., de Heer W.A., Courtois H., Winkelmann C.B. // *Nano Lett.* 2020. V. 20. № 5. P. 3786. <https://www.doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c00838>
4. Kondo Y., Takayanagi K. // *Phys. Rev. Lett.* 1997. V. 79. P. 3455. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.3455>
5. Oshima Y., Onga K., Takayanagi A. // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. P. 205503. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.205503>
6. Takayanagi K., Kondo Y., Ohnishi H. // *JSAP Int.* 2001. V. 3. № 3. P. 3.
7. Landauer R. // *Phyl. Mag.* 1970. V. 21. № 172. P. 863. <https://www.doi.org/10.1080/14786437008238472>
8. Del Valle M., Tejedor C., Cuniberti G. // *Phys. Rev. B.* 2006. V. 74. P. 045408. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.74.045408>
9. Manrique D. Zs., Cserti J., Lambert C.J. // *Phys. Rev. B.* 2010. V. 81. № 7. P. 073103. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.073103>
10. Yang X., Dong J. // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 71. P. 233403. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.71.233403>
11. Cai Y., Zhou M., Zeng M., Zhang C., Feng Y.P. // *Nanotechnology.* 2011. V. 22. № 21. P. 215702. <https://www.doi.org/10.1088/0957-4484/22/21/215702>
12. Sozykin S.A., Beskachko V.P. // *Physica E.* 2020. V. 115. P. 113686. <https://www.doi.org/10.1016/j.physe.2019.113686>
13. Senger R., Dag, S. Ciraci S. // *Phys. Rev. Lett.* 2004. V. 93. P. 196807. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.196807>
14. Дьячков Е.П., Дьячков П.Н. // *Журнал неорганической химии.* 2021. Т. 66. № 11. С. 1568. <https://www.doi.org/10.31857/S0044457X21110040>
15. Краснов Д.О., Кольцова Э.М. // *Успехи в химии и химической технологии.* 2022. Т. 36. № 11. С. 60.

16. *García A., Papior N.R., Akhtar A., Artacho E., Blum V., Bosoni E., Brandimarte P., Brandbyge M., Cerdá J.I., Corsetti F., Cuadrado R., Dikan V., Ferrer J., Gale J., García-Fernández P., García-Suárez V.M., García S., Huhs G., Illera S., Korytár R., Koval P., Lebedeva I., Lin L., López-Tarifa P., Mayo S.G., Mohr S., Ordejón P., Postnikov A., Pouillon Y., Pruneda M., Robles R., Sánchez-Portal D., Soler J.M., Ullah R., Yu V. Wen-zhe, Junquera J.* // *J. Chem. Phys.* 2020. V. 152. № 20. P. 204108.
<https://www.doi.org/10.1063/5.0005077>
17. *Lee J., Kim H.S., Kim Y.H.* // *Adv. Sci.* 2020. V. 7. № 16. P. 2001038.
<https://www.doi.org/10.1002/advs.202001038>
18. *Soler J.M., Artacho E., Gale D.J., García A., Junquera J., Ordejón P., Sánchez-Portal D.* // *J. Phys. Condens. Matter.* 2002. V. 14. № 11. P. 2745.
<https://www.doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/302>
19. *Isshiki Y., Li D., Kiguchi M., Nishino T., Pauly F., Fujii S.* // *ACS Appl. Mater. Interfaces.* 2022. V. 14. № 9. P. 11919.
<https://www.doi.org/10.1021/acsami.1c24096>
20. *Zhu Y., Chen C., Wu S., Cheng R., Cheng L., Zhou W.-L.* // *J. Appl. Phys.* 2020. V. 128. № 6. P. 064302.
<https://www.doi.org/10.1063/5.0009406>
21. *Abadir G.B., Walus K., Pulfrey D.L.* // *J. Comput. Electron.* 2009. V. 8. № 1. P. 1.
<https://www.doi.org/10.1007/s10825-009-0263-5>
22. *Agrawal S., Srivastava A., Kaushal G.* // *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* 2022. V. 1221. № 1. P. 012053.
<https://www.doi.org/10.1088/1757-899X/1221/1/012053>
23. *Wang Y., Ma Y., Ni E., Jiang Y., Li H.* // *Chem. Phys. Chem.* 2022. V. 23. № 17. P. e202200177.
<https://www.doi.org/10.1002/cphc.202200177>

Ballistic Conductivity of Gold Nanotubes

E. R. Sozykina^{1,*}, S. A. Sozykin¹, V. P. Beskachko¹

¹South Ural State University, Chelyabinsk, 454080 Russia

*e-mail: sozykinaer@susu.ru

The paper presents the results of a theoretical study of the electronic structure and electrical conductivity with chirality indices (4, 0), (5, 0), (6, 0), (7, 0), (4, 4), and (5, 5). The simulations were performed using the density functional theory and the method of nonequilibrium Green's functions. The exchange-correlation functional Perdew-Burke-Ernzerhof and two-exponential basis set were used. We demonstrated the importance of polarized basis sets for the study of electrical properties. Analysis of the results showed that the transmission functions of the studied nanotubes depends on the structure of the SWGNTs in a complex way, but, in general, it increase with increasing diameter. The dependence of the transmission function on the electron energy does not allow us to speak a priori about the linearity of the current-voltage characteristic of gold nanotubes within a certain finite voltage range. In addition to defect-free single-walled gold nanotubes, gold nanotubes of different diameters with a vacancy were also studied. This allowed us to evaluate the effect of such a defect on the atomic structure and electrical conductivity of the single-walled gold nanotubes. It was demonstrated that the conductivity drop can vary within a wide range, correlating with changes in the atomic structure.

Keywords: single-walled gold nanotube, current-voltage characteristic, electron density functional theory, nonequilibrium Green's function method, vacancy.