

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРАФЕНОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК НА ЛЕНТАХ ГРАФАНА

Л. А. Чернозатонский, Д.Г. Квашнин

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН

В данной работе проведено моделирование структуры и электронных свойств графеновых нанобластей на листе графана различной формы: гексагон, треугольник, ромб, квадрат. Рассмотрены нанобласти, как отдельно стоящие, так и соединенные посредством графеновых дорожек. Оптимизация структур проводилась с помощью метода классической молекулярной динамики. Для описания электронных свойств был выбран метод сильной связи.

Для каждой формы нанобласти были рассчитаны электронные спектры. Показано, что разность HOMO-LUMO для каждой из областей существенно зависит от изменения их размеров.