

УДК 538.22

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Ванчугов А.А.

*Марийский государственный университет
424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 1
e-mail: alvanch@mail.ru*

В работе изучается один из самых перспективных в мире материалов – графен. Исследование необходимо было начать с представления гамильтониана в рамках классической модели Хаббарда:

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{f,\sigma} a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma} + \sum_{f \neq f'} V_{f,f'} (a_{f\sigma}^+ a_{f'\sigma} + a_{f'\sigma}^+ a_{f\sigma}) + U \sum_{f,\sigma} \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow}, \quad (1)$$

где ε – собственная энергия электронов, $V_{f,f'}$ – интеграл перескока электрона с узла f на соседний узел f' нанокластера графена, U – кулоновский потенциал, $a_{f\sigma}^+$, $a_{f\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона на узле f с проекцией спина σ .

В данной работе были рассмотрены различные по размеру нанокластеры графена. Начиная от первой системы – простого гексагона, путем увеличения размера количество атомов увеличилось с 6 до 384.

Так же в работе представлены энергетические спектры нанокластеров в приближении статических флуктуаций в рамках модели Хаббарда. Рассчитаны и представлены уравнения на химический потенциал, который показывает зависимость количества электронов от количества атомов углерода в системе.

Для рассмотренных нанокластеров графена была рассчитана энергия основного состояния. Было проанализировано изменение вида энергии основного состояния при увеличении количества атомов в структуре.

Рассчитаны и представлены графики плотностей электронных состояний для различных по размеру нанокластеров графена, включая бесконечную по размеру структуру.