



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 69 за 2020 г.](#)



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Толстов И.О.

Расчет электронной
проводимости плоской
углеродной наноструктуры
на основе модели
водородоподобного атома

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Толстов И.О. Расчет электронной проводимости плоской углеродной наноструктуры на основе модели водородоподобного атома // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 69. 20 с. <http://doi.org/10.20948/prepr-2020-69>
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-69>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

И.О. Толстов

**Расчет электронной проводимости
плоской углеродной наноструктуры
на основе модели
водородоподобного атома**

Москва — 2020

Толстов И.О.

Расчет электронной проводимости плоской углеродной наноструктуры на основе модели водородоподобного атома

В статье приводится расчёт электронной проводимости образца графена по формуле Кубо-Гринвуда. Для этого вначале находятся волновые функции системы методом теории функционала плотности с использованием модели водородоподобного атома, затем найденные волновые функции используются при расчёте электронной проводимости в формализме Кубо-Гринвуда. Целью работы является проверка качественного соответствия результатов, получаемых с помощью модели водородоподобного атома, и результатов в работах других авторов.

Ключевые слова: модель водородоподобного атома, графен, проводимость, формула Кубо-Гринвуда.

Tolstov I.O.

Calculation of the electronic conductivity of a flat carbon nanostructure based on the model of a hydrogen-like atom

The paper presents the calculation of the electronic conductivity of a graphene sample using the Kubo-Greenwood formula. The ground state of the system is determined by the density functional theory method using the hydrogen-like atomic model. The found wave functions are used for calculating the electronic conductivity in the Kubo-Greenwood formalism. The aim of this work is to check the qualitative correspondence of the results obtained using the model of a hydrogen-like atom with the results in the works of other authors.

Key words: hydrogen-like atomic model, graphene, conductivity, Kubo-Greenwood formula.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 20-07-00790-а.

Введение

Двумерные углеродные наноструктуры представляют большой интерес для науки [1], [2] и промышленности в силу своих физических свойств: нулевая запрещенная зона, высокий коэффициент проводимости [3] и эмиссии [4] и так далее. Общепринятые методы моделирования твёрдых тел оказываются малоприменимы для расчёта электронных свойств подобных структур [5]. В данной работе для моделирования свойств углеродных структур используется предложенная ранее модель водородоподобного атома, позволяющая учесть особенности электронной структуры углерода. Расчёт электронной проводимости проводится в формализме Кубо-Гринвуда.

Модель водородоподобного атома

В разработанной ранее [5] полуэмпирической модели водородоподобного атома для расчёта полной энергии системы атомов центральным местом является особенность геометрии шестиугольной углеродной решетки. Эта особенность влияет на распределение валентных электронов атома углерода: из четырёх валентных электронов три находятся на связях (расстояние связи 0,142 [6] – примерно среднее между двойной связью (длина C=C 0.135 нм) и одинарной (длина C-C 0.147 нм)). Четвёртый электрон находится в $2p_z$ состоянии, направленном по нормали к поверхности графена, притом у соседних атомов такие электроны разнонаправлены – находятся по разные стороны от плоскости графена.

Модель экранированного иона была предложена в работе [7] для решения задачи торможения при движении атомов ионов в электронном газе. В этой модели распределение N электронов экранирующей оболочки иона с зарядом Z определяется соотношением:

$$\rho_{ei} = \frac{N}{4\pi\lambda_N^3} \frac{\lambda_N}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_N}\right), \quad \lambda_N = 0.48 \frac{(N/Z)^{2/3}}{1 - N/7Z} \cdot \frac{a_0}{(Z)^{1/3}}. \quad (1)$$

Интегрируя по r от нуля до бесконечности, получим потенциал экранированного иона:

$$\begin{aligned}
 U(r) &= \frac{Z}{r} - (Z-1) \left[\frac{1}{r} \int_0^r \rho(r) r^2 dr + \int_r^\infty \rho(r) r dr \right] = \\
 &= \frac{Z}{r} - \frac{Z-1}{r} \left[1 - \left(1 + \frac{r}{\lambda} \right) \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right) + \frac{r}{\lambda} \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right) \right]; \\
 U(r) &= \frac{1}{r} + \frac{Z-1}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right).
 \end{aligned} \tag{2}$$

Для однозарядного иона углерода $Z=6$, $N=1$, $\lambda \approx 0.2655 a_0$, где a_0 – радиус Бора.

Первоначально в работе [5] решалась вариационная задача нахождения эффективного заряда иона в однородном поле. Для этого минимизировалась невязка между полями, создаваемыми потенциалами Брандта-Китагавы и потенциалом водородоподобного атома:

$$\begin{aligned}
 J(q) &= \left\langle \psi(x) \left[\frac{x}{2} \frac{\partial}{\partial x} U_i(x, q, \lambda_0) + U_i(x, q, \lambda_0) - 2 \frac{q^2}{nx} \right]^2 \psi^*(x) \right\rangle, \\
 \frac{\partial}{\partial q} J(q) &= 0,
 \end{aligned} \tag{3}$$

где $q = q_{eff}$ – эффективный заряд экранированного иона.

Однако полная энергия такой системы получалась слишком большой, к тому же данная схема не учитывала неоднородность полученного нами потенциала:

$$\frac{\partial}{\partial r} U_i(r) \neq -\frac{U_i(r)}{r}. \tag{4}$$

Согласно теореме вириала [8], полная энергия финитного движения в неоднородном центральном поле будет равна

$$\hat{E}(r) = \frac{r}{2} \frac{\partial}{\partial r} U_i(r) + U_i(r). \tag{5}$$

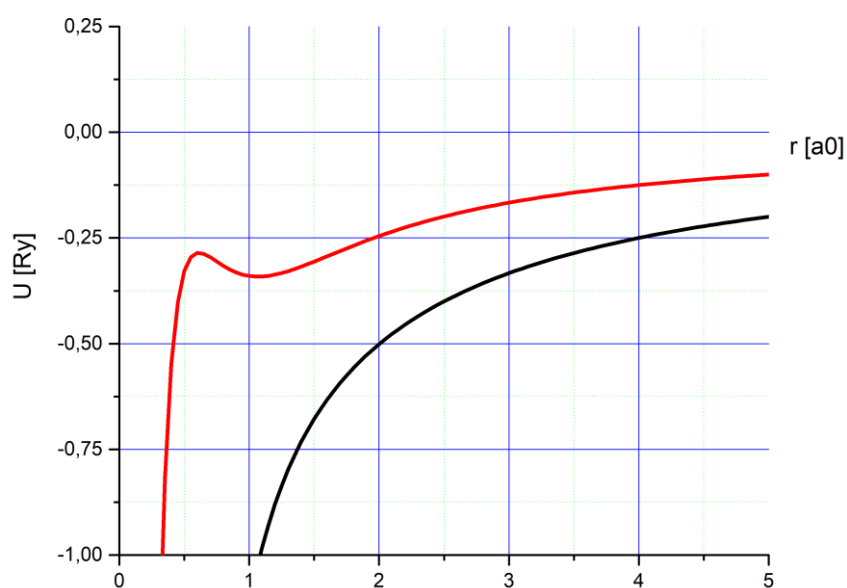


Рис. 1 – Сравнение распределения полной и потенциальной энергии электрона в модели водородоподобного атома

Рис. 1 показывает, что учёт неоднородности формирует локальный минимум энергии, который, по нашему предположению, отвечает за локализованное состояние валентного электрона.

Модель водородоподобного атома исходит из предположения о плотности распределения электронов экранирующей оболочки, что позволяет её использовать вкуче с методами теории функционала плотности – добавив в рассмотрение обменно-корреляционный функционал для энергии взаимодействия локализованного электрона, а также перейдя к рассмотрению энергии взаимодействия однократно заряженных экранированных ионов вместо взаимодействия отдельных ядер и электронов оболочки, решим самосогласованную задачу на нахождение минимума полной энергии системы.

Использование модели водородоподобного атома в методе теории функционала плотности

Согласно методам теории функционала плотности, полная энергия системы запишется в виде:

$$E[\rho] = T[\rho] + E_n[\rho] + E_{ee}[\rho], \quad (6)$$

где $T[\rho]$ – кинетическая энергия движения электронов во всём объёме системы, $E_n[\rho]$ – потенциальная энергия электронно-ядерных взаимодействий, $E_{ee}[\rho]$ – энергия межэлектронных взаимодействий. Последний член d (6) представим в виде:

$$E_{ee}[\rho] = E_{Coul}[\rho] + E_{xc}[\rho]. \quad (7)$$

Здесь $E_{Coul}[\rho]$ – энергия кулоновского взаимодействия электронов, а $E_{xc}[\rho]$ – т.н. обменно-корреляционная энергия. Обменно-корреляционная энергия отвечает за взаимодействие электронов между собой и учитывает обменный член в методе Хартри-Фока и корреляционную энергию. Функционалы $T[\rho]$, $E_n[\rho]$ и $E_{Coul}[\rho]$ могут быть найдены точно.

Для обменно-корреляционного потенциала $E_{xc}[\rho]$, однако, точное представление неизвестно и требуется введение дополнительных приближений. Наиболее простое из них – т.н. приближение локальной плотности (local density approximation, LDA) [9]. Его основная идея состоит в том, что $E_{xc}[\rho]$ есть энергия, зависящая от локальных свойств однородного электронного газа. Под локальностью какого-то свойства в данной точке понимается его зависимость от ρ только в данной точке. Например, кулоновская энергия локальна, т.к. ее величина зависит только от координат электронов в данной точке, а обменная энергия в методе Хартри-Фока – нелокальна, т.к. зависит от плотности электронов на во всем пространстве.

До сих пор общепринятой практикой является разделение обменно-корреляционного взаимодействия на сумму «обменной» и «корреляционной» частей:

$$E_{xc}[\rho] = E_x[\rho] + E_c[\rho]. \quad (8)$$

Подобное разложение продиктовано в первую очередь соображениями удобства. Обменную часть удобно представлять в виде, называемом «слейтеровским обменным членом» [10]:

$$E_x[\rho] = -C_x \int \rho^{4/3}(r) dr, \quad C_x = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/3}. \quad (9)$$

Корреляционный функционал VWN3, используемый нами в расчётах, имеет вид:

$$E_c^{LDA} = A \int \rho(1 + \alpha_1 r_s) \ln B dr, \quad (10)$$

$$B = 1 + \frac{1}{A(\beta_1 r_s^{1/2} + \beta_2 r_s + \beta_3 r_s^{3/2} + \beta_4 r_s^2)},$$

где r_s – радиус Зейца, A , α_1 , β_1 , β_2 , β_3 , β_4 – экспериментально подобранные параметры.

Электрон-ядерное взаимодействие будет учитываться в рамках модели водородоподобного атома:

$$E_{en}[\rho] = \frac{r}{2} \frac{\partial U}{\partial r} + U = \frac{1}{2r} - \frac{Z-1}{2r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right) + \frac{Z-1}{2\lambda} \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right). \quad (11)$$

В соответствии с выбранной нами моделью водородоподобного атома расчёт ведётся для одного электрона на атом в случае, если все остальные электроны составляют оболочку иона или находятся на связях, или для двух, в случае если атом находится на краю поверхности и имеет два локализованных электрона. Вообще говоря, данный случай необходимо рассматривать отдельно, что составит предмет наших дальнейших изысканий.

Расчёт ведётся по самосогласованной схеме, аналогично тому, как это делается в расчётах методом ТФП: находим изначальную матрицу плотности, решая одночастичный гамильтониан системы, рассчитываем матрицы обменно-корреляционного взаимодействия и электрон-

электронного отталкивания и из них строим фокиан системы. Находим собственные энергии и вектора такой системы, считаем полную энергию. Если отличие найденной полной энергии от предыдущего её значения (или значения полной энергии одночастичного гамильтониана для первого шага) больше наперёд заданного порога (10^{-4} в данной работе), считаем уточнённую матрицу плотности, пользуясь найденными собственными векторами.

Когда изменения полной энергии гамильтониана станут несущественны, строим волновые функции локализованных состояний, раскладывая их по набору базисных функций. Полученные волновые функции, значения электронной плотности и собственные энергии будут использоваться для расчётов электронной проводимости.

Расчёт проводимости образца графена

Существует два распространённых описания проводимости: Ландауэра-Буттикера [3] и Кубо-Гринвуда [11], [12]. В первом случае в модель включаются контакты, к которым присоединён рассматриваемый материал. Контакты считаются массивными по сравнению с проводящим каналом между ними и находятся в состоянии равновесия (энергии Ферми обоих контактов одинаковы) в отсутствие приложенного напряжения. Если прикладывается напряжение, то происходит сдвиг энергии Ферми, электроны перемещаются с одного контакта на другой через собственные состояния проводящего канала, притом в электронном транспорте участвуют только те состояния, энергия которых находится в интервале между энергиями Ферми контактов. Такой подход требует расчёта локализованных состояний для каждого атома проводящего канала, а следовательно, и довольно громоздких вычислений.

Второй подход (формализм Кубо-Гринвуда), в общем случае, используется для расчёта динамической проводимости. Формула Кубо-

Гринвуда основана на определении и минимизации полной энергии, поглощенной электронами, из микроскопического рассмотрения.

Пусть на электронную подсистему действует ограниченный во времени импульс электрического поля $E(t)$. Под его действием возникает ограниченный во времени импульс плотности электрического тока $j(t)$. Полная энергия, поглощенная электронами за все время, может быть записана в виде:

$$E^{abs} = \Omega \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(\omega) |E_\omega|^2 \frac{d\omega}{2\pi}, \quad (12)$$

Ω здесь обозначает объем рассматриваемой системы, в нашем случае – элемент нанотрубки или лист графена. Рассматривается система дискретных стационарных уровней с энергиями и соответствующими им волновыми функциями Ψ_i . На систему действует возмущающий оператор:

$$\hat{V}_{pert} = eE(t) \hat{x}. \quad (13)$$

Можно показать [13], что полная вероятность перехода с уровня i на уровень j под действием возмущения:

$$\omega_{i \rightarrow j} = \frac{e^2}{\hbar^2} \left| \langle \Psi_j | \hat{x} | \Psi_i \rangle \right|^2 \left| E_{\frac{\varepsilon_j - \varepsilon_i}{\hbar}} \right|^2. \quad (14)$$

Переход приводит к увеличению полной энергии системы на величину:

$$E_{i \rightarrow j}^{abs} = \frac{e^2}{\hbar^2} (\varepsilon_j - \varepsilon_i) \left| \langle \Psi_j | \hat{x} | \Psi_i \rangle \right|^2 \left| E_{\frac{\varepsilon_j - \varepsilon_i}{\hbar}} \right|^2. \quad (15)$$

Полная энергия, поглощенная системой, получается суммированием по всевозможным начальным и конечным уровням:

$$E^{abs} = \sum_{i,j} \frac{e^2}{\hbar^2} (\varepsilon_j - \varepsilon_i) \left| \langle \Psi_j | \hat{x} | \Psi_i \rangle \right|^2 \left| E_{\frac{\varepsilon_j - \varepsilon_i}{\hbar}} \right|^2 f(\varepsilon_i) (1 - f(\varepsilon_j)). \quad (16)$$

Подставляя в формулу (12), получим:

$$\sigma(\omega) = \frac{\pi e^2}{\Omega \hbar^2} \sum_{i,j} (\varepsilon_j - \varepsilon_i) \left| \langle \Psi_j | \hat{x} | \Psi_i \rangle \right|^2 \left| E_{\frac{\varepsilon_j - \varepsilon_i}{\hbar}} \right|^2 \times$$

$$\times f(\varepsilon_i) (1 - f(\varepsilon_j)) \delta\left(\omega - \frac{\varepsilon_j - \varepsilon_i}{\hbar}\right). \quad (17)$$

Здесь $f(\varepsilon)$ — числа заполнения, определяемые распределением Ферми.

При практических расчетах зоны лежат на некотором расстоянии друг от друга, и формула Кубо-Гринвуда непосредственно дала бы лишь набор дискретных пиков. Поэтому в этой работе при практических расчетах функция уширяется с помощью гауссовой функции:

$$\delta(\varepsilon_j - \varepsilon_i - \hbar\omega) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta E} \exp\left(-\frac{(\varepsilon_j - \varepsilon_i - \hbar\omega)^2}{2(\Delta E)^2}\right), \quad (18)$$

где ΔE — уширение гауссовой функции.

Численный эксперимент

Расчёты полной волновой функции для графена проводились в базисе 6-31G. Выбор его обусловлен тем, что 2sp состояния в нём описываются двумя орбитальными функциями (по две на s и p состояния соответственно). Как известно [14], увеличение количества функций, описывающих орбиталь, положительно сказывается на точности расчётов.

Программа требует расчётов довольно большого количества интегралов — кинетической энергии, орбитального перекрытия, двухэлектронных интегралов отталкивания. Благодаря выбору базисных функций в виде суммы гауссовых функций, почти все они, кроме обменно-корреляционного члена, рассчитываются аналитически.

Для расчёта полной энергии нам необходимы: расчёт кинетической энергии, притяжения к ядрам, кулоновского отталкивания электронов и

обменно-корреляционного члена. Аналитический расчёт первых трёх членов проводится по схеме, описанной Гиллом [15].

Притяжение электронов к ядрам с учётом приближения водородоподобного атома представим в виде:

$$I = \int e^{-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{A}|^2} e^{-\beta|\mathbf{r}-\mathbf{B}|^2} U(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

$$U(r) = \frac{1}{2r} - \frac{Z-1}{2r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right) + \frac{Z-1}{2\lambda} \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right). \quad (19)$$

Расчёт двухэлектронных интегралов отталкивания проводился по схеме PRISM, разработанной Поуплом и Гиллом [16] [17].

Расчёт интегралов обменно-корреляционного взаимодействия проводился через интегрирование в сферической системе координат. Интегрирование по радиусу производилось с помощью чебышевских квадратур, интегрирование по угловым координатам – в лебедевских квадратурах [18]. Такой способ позволяет значительно ускорить расчёты.

Параллелизация расчётов выполнена при помощи библиотеки Intel TBB. Библиотека имеет собственный планировщик задач, позволяет задавать количество используемых потоков для расчёта, написана на C++ [19]. На вход принимает функции и лямбда-выражения, что позволяет быстро интегрировать её в существующие проекты, а также эффективно управлять параллельностью. Главное преимущество подобного подхода в том, что в TBB допускается параллельное исполнение разных блоков кода, что позволяет параллельно выполнять различные функции одновременно (например, расчёт матриц кинетической энергии и орбитального перекрытия) минимизируя время простоя ядер процессора [20]. Также работа с функциями вместо макросов позволяет проще задавать размер блоков кода для исполнения в однопоточном режиме, минимизируя количество операций по обмену данными между потоками, что также положительно сказывается на времени исполнения кода.

Результаты и обсуждение

В качестве данных для сравнения возьмём графики, полученные в работах [21] [22] [23] [24]. В указанных работах для расчёта проводимости использовался формализм Кубо-Гринвуда, а для нахождения плотности состояний использовались различные приближения – в работе [21] рассматривается графен, нанесенный на металлическую подложку, соответственно, плотность состояний берётся как плотность состояний подложки плюс электронный обмен с эпитаксиальным (выращенным на подложке) графеном, однако используемое описание позволяет также рассматривать и изолированный графен – достаточно положить энергию Ферми равной нулю. В работе [22] автор перешёл от формулы Кубо-Гринвуда к формуле Эйнштейна, где рассматривается зависимость проводимости от среднеквадратичных отклонений электронов от своих локализованных состояний.

Подобный подход позволяет перейти к исследованию баллистической проводимости. График такой проводимости приведён в работе [23] (рис. 2).

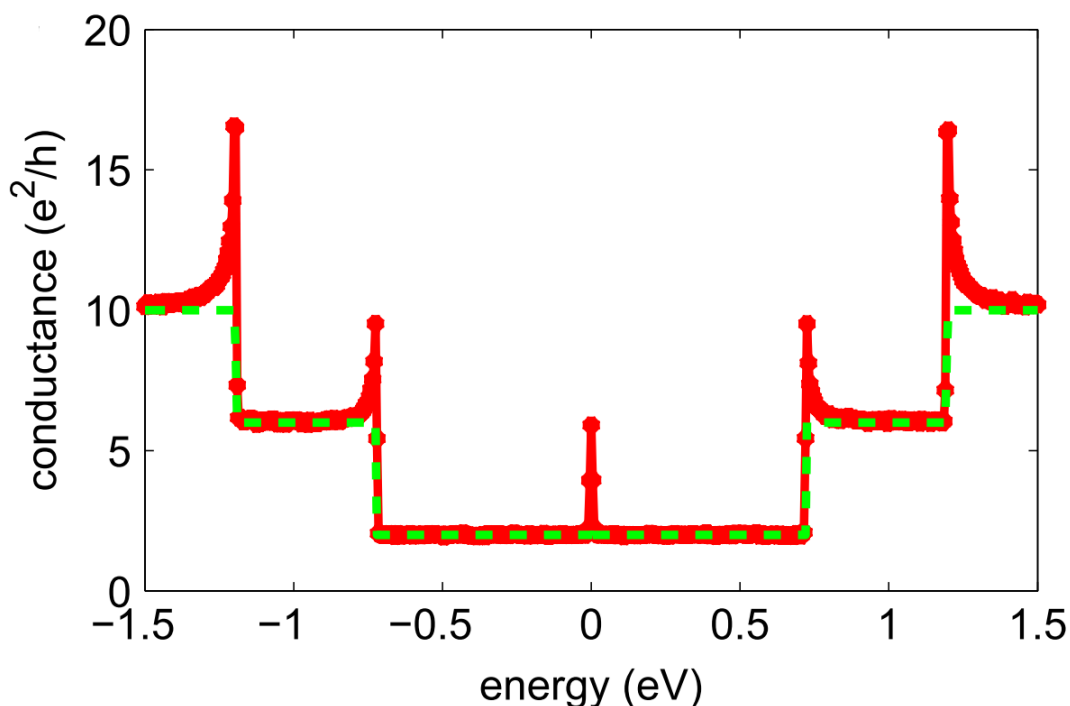


Рис. 2 – Зависимость баллистической проводимости графена от энергии, рассчитанная по формуле Эйнштейна

В работе [24] рассматривается допированный другими веществами графен при разных концентрациях допирующих веществ (таллия). Данный график возьмём в качестве основного для сравнения, а увеличение концентрации таллия будем рассматривать как увеличение энергии Ферми для электронов образца (см. рис. 3).

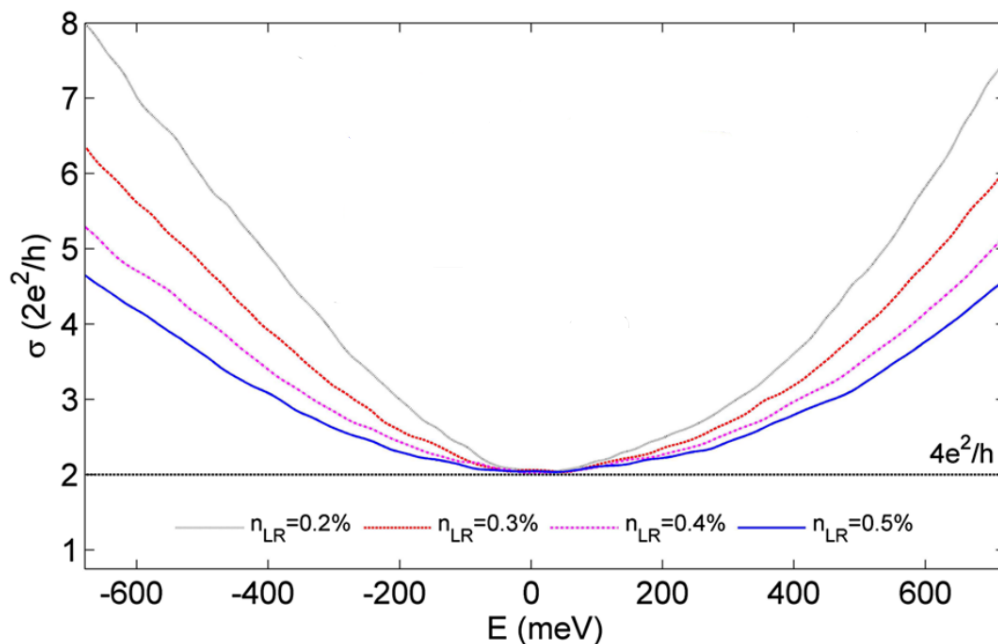


Рис. 3 – Зависимость проводимости образца графена от приложенного поля. Разными цветами обозначены образцы с различными концентрациями таллия (данные о концентрациях отображены на графике)

Как видим из рис. 3, при переходе от баллистической проводимости к нормальной график превращается из ступеньки в пологую кривую с минимумом в нуле.

Критерием проверки гипотезы о применимости модели водородоподобного атома к вычислениям свойств углеродных наноструктур будем считать качественное повторение результатов указанных работ – зависимости динамической и статической проводимости в образце графена от приложенного поля (см. рис. 4).

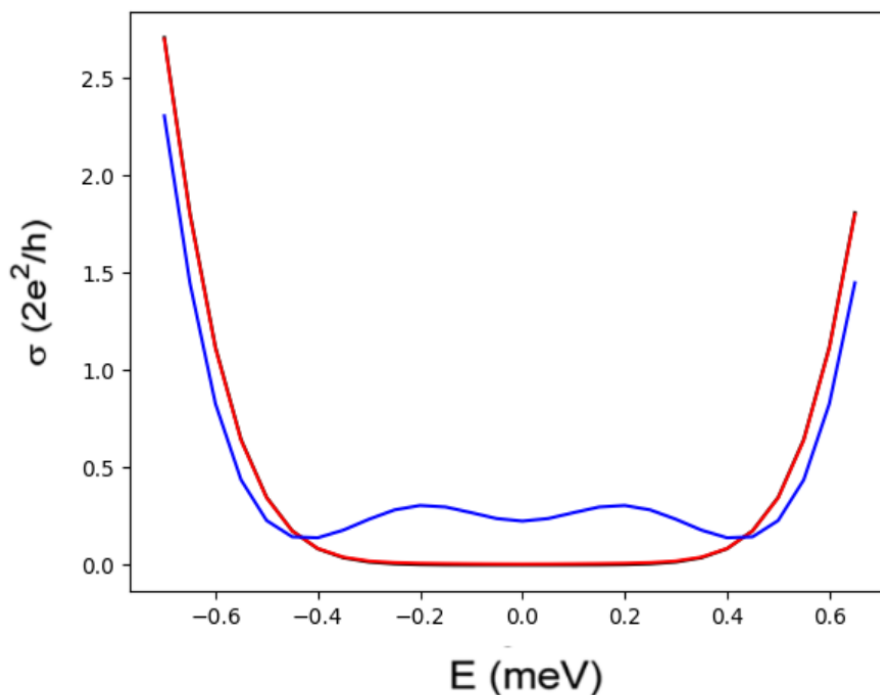


Рис. 4 – Зависимость проводимости от величины приложенного поля. Чёрным обозначена зависимость при $\epsilon F = 0$ eV, красным при $\epsilon F = 0.2$ eV, синим при $\epsilon F = 0.4$ eV

Как видим из рис. 4, зависимость динамической проводимости качественно повторяет результаты работы [24] – с увеличением энергии Ферми график становится более пологим, имеется минимум в нуле. Основных отличий два – минимум оказывается существенно ниже минимального значения проводимости, что, на наш взгляд, обусловлено выбором слишком малой константы экранирования в модели водородоподобного атома – электрон испытывает «недостаточное» влияние полей от соседних экранированных ионов. Рост проводимости в нуле, с одной стороны, согласуется с ожидаемым поведением – при расчёте проводимости в рамках уравнения Дирака проводимость должна расти линейно с ростом энергии Ферми, с другой стороны, резкий скачок обусловлен слишком малым размером образца – в нём не достигается необходимая плотность состояний электронов с отличной от нуля энергией для того, чтобы статическая проводимость росла линейно.

Рассмотрим далее зависимость статической проводимости от величины энергии Ферми. Для чистого графена ожидается линейная зависимость [21] (рис. 5).

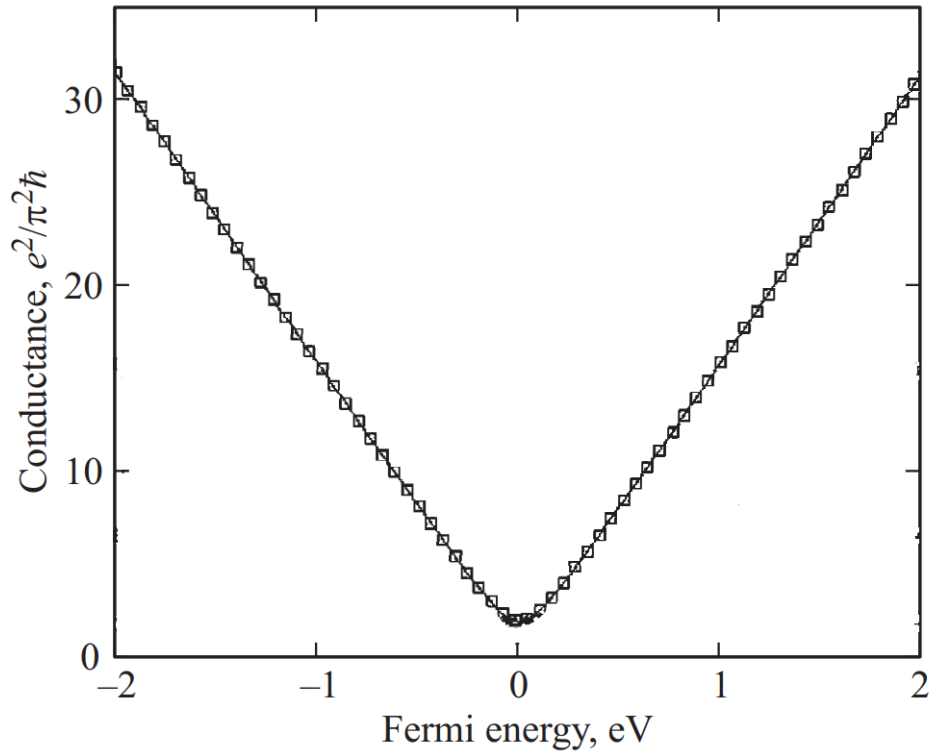


Рис. 5 – Зависимость статической проводимости графена от энергии Ферми, полученная в работе [21]

В то же время в исследовании проводимости нанотрубок в формализме Кубо-Гринвуда получены немного отличающиеся результаты для статической проводимости допированных нанотрубок [25] (см. рис. 6).

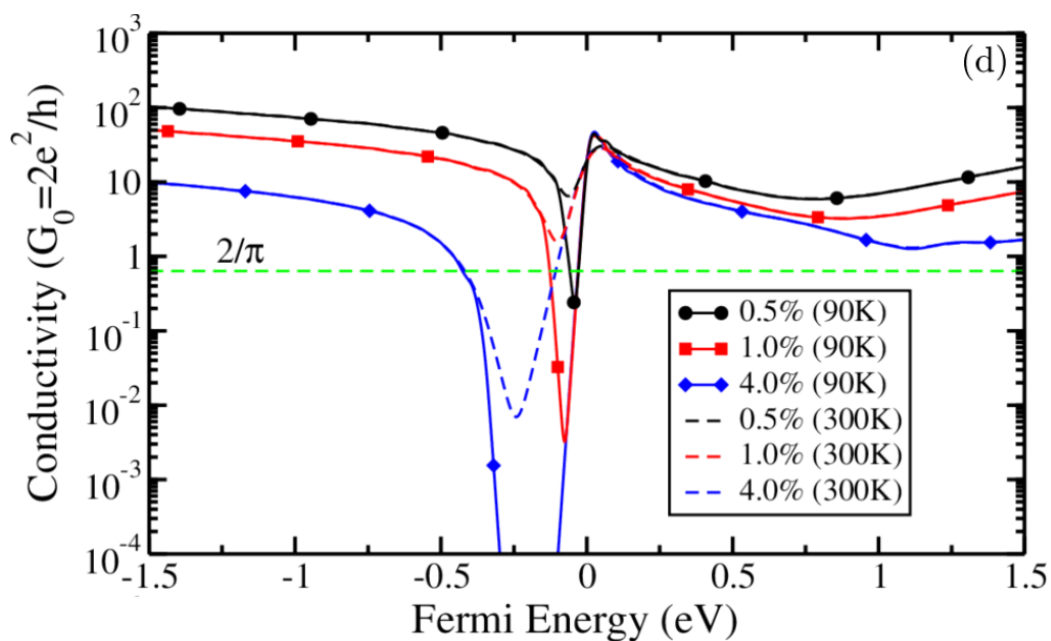


Рис. 6 – Зависимость статической проводимости углеродной нанотрубки с примесями от энергии Ферми, полученная в работе [25]

Таким образом, в ситуации малой плотности состояний при изменении энергии Ферми стоит ожидать минимума проводимости в нуле с последующим выходом на плато. Похожие данные получены нами (рис. 7).

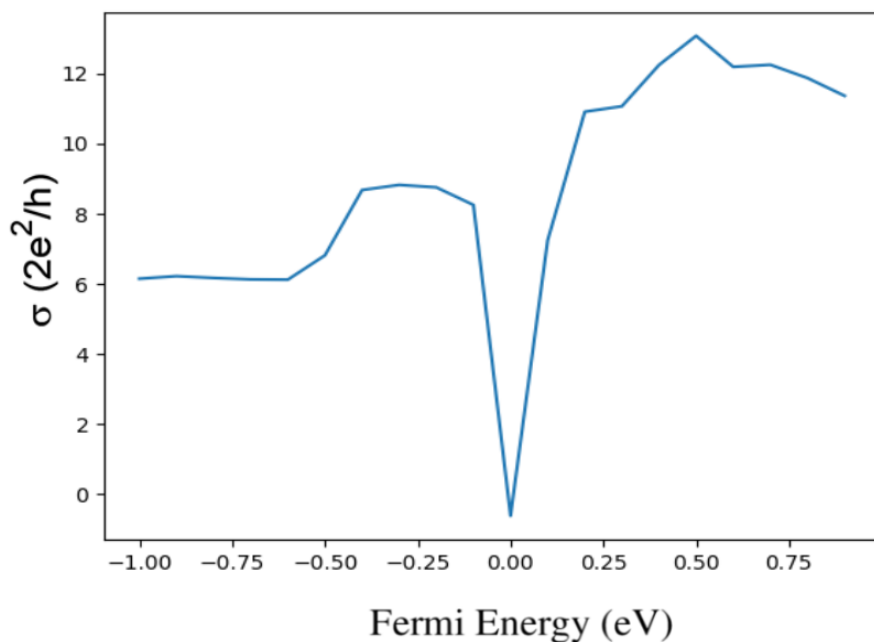


Рис. 7 – Зависимость статической проводимости от энергии Ферми для образца графена, рассчитанная по формуле Кубо-Гринвуда

Проведенный численный эксперимент показал качественное совпадение полученных нами зависимостей проводимости графена от энергии приложенного поля и зависимости статической проводимости графена от энергии Ферми с наблюдаемыми у других авторов. Так, зависимость проводимости графена от энергии приложенного поля лежит между таковой для баллистической проводимости (рис. 2) и проводимости нанотрубки с примесями (рис. 3). Зависимость статической проводимости от энергии Ферми качественно повторяет результаты для допированных нанотрубок (рис. 6), имея выраженный пик в нуле. Результаты сторонних авторов получены с помощью отличных от нашего приближений и зависят от дополнительных условий – так, например, в работе [22] получена также зависимость проводимости от длины образца.

Заключение

Проведенный численный эксперимент показал качественное совпадение полученных нами зависимостей проводимости графена с результатами, полученными другими авторами с использованием других приближений. В целом можно считать, что модель водородоподобного атома применима к расчётам характеристик углеродных наноструктур как приближение для метода теории функционала плотности, однако требует ряда уточнений – как минимум, стоит провести исследование зависимости полной энергии образца от значения постоянной экранирования иона для уточнения зависимости статической проводимости от значения энергии Ферми.

Данная работа не претендует на законченное исследование, однако ставит большое количество вопросов, рассмотрение которых должно лечь в основу более глубокого исследования применимости модели водородоподобного атома к углеродным наноструктурам различной геометрии. Так, открытыми остаются проблемы учёта влияния поля окружения на электроны, составляющие экранированную оболочку.

Подобное влияние (если оно существенно) должно приводить к поправкам к константе экранирования. В качестве дальнейшего исследования применимости модели водородоподобного атома перспективной задачей представляется расчет эмиссионных характеристик углеродных нанотрубок под действием внешнего поля

Список литературы

- [1] Д. Шмыгин, Колонный графен: особенности электронного транспорта, закономерности перетекания заряда и электронно-энергетические характеристики, Саратов: Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, 2019.
- [2] Olga E. Glukhova, Dmitriy S. Shmygin, The electrical conductivity of CNT/graphene composites: a new method for accelerating transmission function calculations, // Beilstein J. Nanotechnol, Vol. 9, p. 1254–1262, 2018.
- [3] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [4] L. A. Chernozatonskii, Y. V. Gulyaev, Z. Y. Kosakovskaya, N. I. Sinitsyn и G. V. Torgashov, Electron field emission from nanofilament carbon films // Chem. Phys. Lett. 233,, p. 63–68, 1995.
- [5] Б. Фрейнкман, Модель псевдопотенциала атома углерода в решетке графена // Математическое моделирование, т. 27, № 7, 2015.
- [6] А. Елецкий, Холодные полевые эмиттеры на основе углеродных нанотрубок // Успехи физических наук, т. 180, № 9, 2010.
- [7] W. Brandt и M. Kitagawa, Effective stopping-power charges of swift ions in condensed matter // Physical review B, т. 25, № 9, 1982.
- [8] В. Фок, Начала квантовой механики, Москва - Ижевск, 2003.
- [9] R. G. Parr и W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford: Oxford University Press, 1994.
- [10] А. Арбузников, Гибридные обменно-корреляционные функционалы и потенциалы: развитие концепции // Журнал структурной химии, т. 48, 2007.

- [11] D. Greenwood, The Boltzmann Equation in the Theory of Electrical Conduction in Metals // Proceedings of the Physical Society (1958-1967), т. 71, № 4.
- [12] R. Kubo, Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems // Journal of the Physical Society of Japan, т. 12, № 6, 1957.
- [13] Д. Князев, Расчет электропроводности, теплопроводности и оптических свойств плотной плазмы на основе метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо-Гринвуда, Москва, 2015.
- [14] W. J. Hehre, R. F. Stewart и J. A. Pople, Self-Consistent Molecular-Orbital Methods. I. Use of Gaussian Expansions of Slater-Type Atomic Orbitals // Journal of Chemical Physics, т. 51, № 6, 1969.
- [15] P. Gill, Molecular integrals Over Gaussian Basis Functions // Advances in Quantum Chemistry, т. 25, 1994.
- [16] P. Gill, G. People, The prism algorithm for two-electron integrals // International Journal of Quantum Chemistry, т. 40, № 6, 1991.
- [17] B. G. Johnson, P. M. W. Gill, J. A. Pople и D. J. Fox, Computing molecular electrostatic potentials with the PRISM algorithm // Chemical Physics Letters, т. 206, № 1-4, 1993.
- [18] В. И. Лебедев, О квадратурах на сфере // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., т. 16, № 2, p. 293–306, 1976.
- [19] A. Tousimojarad и W. Vanderbauwhede, Comparison of Three Popular Parallel Programming Models on the Intel Xeon Phi // Parallel Processing Workshops, 2014.
- [20] M. Voss, R. Asenjo и J. Reinders, Pro TBB: C++ parallel programming with threading building blocks, Berkeley: Apress, CA, 2019.
- [21] З. Алисултанов и И. Камилов, Транспортные свойства эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металла // Физика твердого тела, т. 56, № 4, 2014.
- [22] A. Uppstu, Z. Fan и A. Harju, Obtaining localization properties efficiently using the Kubo-Greenwood formalism // Physical Review B, 69, p. 075420, 2014.

- [23] Z. Fan, A. Uppstu, T. Siro и A. Harju, Efficient linear-scaling quantum transport calculations on graphics processing units and applications on electron transport in graphene // *Computer Physics Communications*, т. 185, № 1, 2014.
- [24] A. Cresti, D. V. Tuan, D. Soriano, A. W. Cummings и S. Roche, Multiple Quantum Phases in Graphene with Enhanced Spin-Orbit Coupling: From the Quantum Spin Hall Regime to the Spin Hall Effect and a Robust Metallic State // *Physical Review Letters*, т. 113, № 246603, 2014.
- [25] A. Lherbier, A. R. Botello-Méndez и J.-C. Charlier, Electronic and Transport Properties of Unbalanced Sublattice N-Doping in Graphene // *Nano Letters*, т. 13, № 4, 2013.

Оглавление

Введение	3
Модель водородоподобного атома	3
Использование модели водородоподобного атома в методе теории функционала плотности	6
Расчёт проводимости образца графена	8
Численный эксперимент	10
Результаты и обсуждение	12
Список литературы	18