

УДК 581+620.3

## ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Е.Р. Иванов

Саратовский национальный исследовательский государственный  
университет имени Н.Г. Чернышевского, г. Саратов

\*E-mail: [starlord1303@mail.ru](mailto:starlord1303@mail.ru)

Принята к публикации: 17 ноября 2020.

Опубликована: 28 декабря 2020.

Исследованиям по выявлению закономерностей воздействия техногенных наноматериалов на растения наряду с установлением их влиянием на животных и человека необходимо в настоящее время придать первоочередной статус.

Ключевые слова: плотность, функция, состояние, потенциал, частицы, потенциал.

### Введение.

Согласно теории функционала электронной плотности (ФЭП), существует однозначное соответствие между электронной плотностью и многоэлектронной волновой функцией основного состояния [1]. Данный подход затрачивает меньше ресурсов, поскольку многоэлектронная волновая функция зависит от  $3n$  переменных ( $n$  – число электронов), а ФЭП от 3 пространственных координат. Способ построения ФЭП системы частиц был предложен Уолтером Коном и Лю Шэмом и заключается в представлении ФЭП в виде двух компонент – функционала электронной плотности системы свободных частиц и действующего на эту систему некоторого внешнего потенциала [2]. Выбор внешнего потенциала, отвечающего за кулоновское и обменно-корреляционное взаимодействие, должен быть сделан таким образом,

чтобы ФЭП системы связанных частиц совпадал с новым двухкомпонентным представлением.

### Методика исследований.

В рамках проведённых исследований была рассчитана плотность электронных состояний на основе метода функционала электронной плотности в приближении сильной связи и построены графики DOS для трех конфигураций (рис. 1–4).

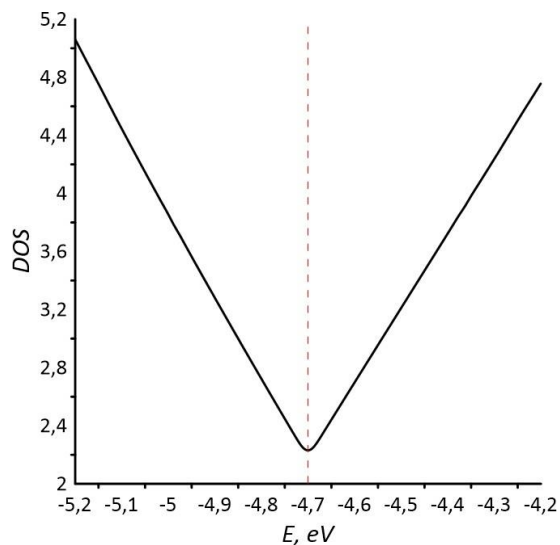


Рисунок 1 - График плотности электронных состояний для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 7 гексагон и УНТ типа «кресло» (5,5)

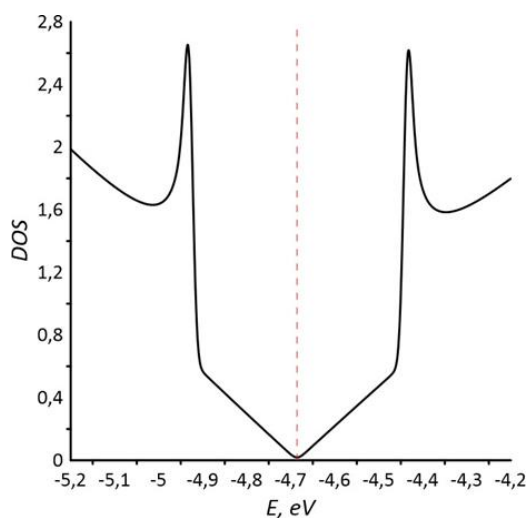


Рисунок 2 - График плотности электронных состояний для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 1 гексагон и УНТ типа «зигзаг» (16,0)

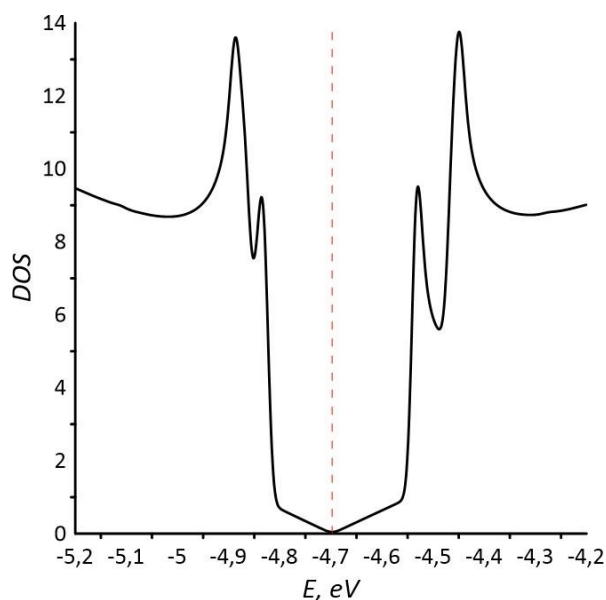
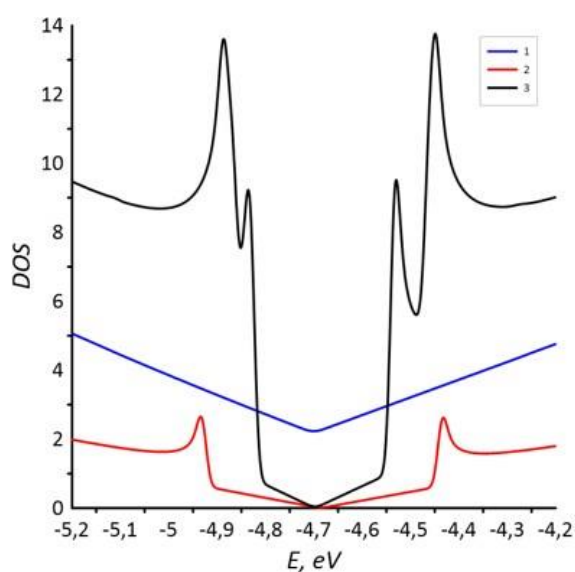


Рисунок 3 - График плотности электронных состояний для модели слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 9 гексагон и 2 УНТ типа «зигзаг» (6,0)



№	$E_F$ , eV
1	-4.679
2	-4.685
3	-4.697

Рисунок 4 - Плотность электронных состояний для трех исследуемых моделей

### Результаты исследований.

График 1 – соответствует конфигурации слоистой пленки с островковой структурой, содержащая 2 листа графена шириной в 9 гексагон и 2 УНТ типа «зигзаг» (6,0), 2 - соответствует конфигурации слоистой пленки с островковой структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 7 гексагон и УНТ типа «кресло» (5,5), 3 – соответствует конфигурации слоистой пленки с островковой

структурой, содержащей 2 листа графена шириной в 1 гексагон и УНТ типа «зигзаг» (16,0).

### **Заключение.**

Исходя из результатов расчета зонных диаграмм и плотности электронных состояний видно, что для первого материала характерен металлический тип проводимости, запрещенная зона полностью отсутствует, для второго материала также характерен металлический тип проводимости, однако возникает тенденция появления запрещенной зоны порядка 0,5 эВ, для третьего характерен полупроводниковый тип проводимости с запрещенной зоной порядка 0,2 эВ.

### **Список литературы**

1. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Physical Review. – 1964. – Vol. 136, 3B. – B864–B871. – DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>.

2. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Physical Review. – 1965. – Nov. – Vol. 140, 4A. – A1133–A1138.

### **Сведения об авторах**

Иванов Евгений Романович, магистрант кафедры «Радиотехника и электродинамика», ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Россия.

410012, г. Саратов ул. Астраханская, д. 83.

## **DENSITY OF ELECTRONIC STATES**

E.R. Ivanov

Saratov National Research State University named after N.G. Chernyshevsky

Research to identify the patterns of the impact of technogenic nanomaterials on plants, along with the establishment of their impact on animals and humans, should now be given a priority status.

Keywords: density, function, state, potential, particles, potential.