

## ФИЗИКА. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ PHYSICS. MATHEMATICAL MODELING

УДК 538.95  
MSC 82D80

DOI 10.52575/2687-0959-2026-58-1-65-71  
EDN MAONCN

Оригинальное исследование

### Электронные и оптические свойства углеродных нанолент

Шарин Е. П. 

(Статья представлена членом редакционной коллегии Носковым А. В.)

Северо-Восточный федеральный университет,  
Россия, 677000, г. Якутск, ул. Белинского, 58

[esharin@yandex.ru](mailto:esharin@yandex.ru)

**Аннотация.** С помощью теории функционала плотности в приближении обобщенных градиентов исследованы электронные зонные структуры и оптические свойства графеновых нанолент, пассивированных атомами водорода. Расчеты показали, что с увеличением ширины нанолент ширина запрещенной зоны уменьшается. Ширина запрещенной зоны обусловлена как квантовым ограничением, так и эффектом краев. Вычислены комплексная диэлектрическая проницаемость, комплексный показатель преломления, коэффициент поглощения и коэффициент отражения графеновой наноленты 9-AGNR. Максимальные пиковые значения реальной и мнимой частей диэлектрической функции смещены в область низких частот. Максимальный пик коэффициента поглощения тоже смещен в синюю область спектра. Оптическое поглощение обусловлено межзонными переходами, расположенными вблизи точки Г. Коэффициент отражения имеет три близких по значению пика, расположенных, соответственно, в красной, видимой и синей областях спектра.

**Ключевые слова:** теория функционала плотности, графеновая нанолента, нанолента типа «кресло», комплексная диэлектрическая проницаемость

**Для цитирования:** Шарин Е.П. Электронные и оптические свойства углеродных нанолент. *Прикладная математика & Физика*. 2026;58(1):65–71. DOI 10.52575/2687-0959-2026-58-1-65-71 EDN MAONCN

Original Research

### Electronic and Optical Properties of Carbon Nanoribbons

Egor P. Sharin 

(Article submitted by a member of the editorial board Noskov A. V.)

North-Eastern Federal University,  
58 Belinsky St., Yakutsk 677000, Russia

[esharin@yandex.ru](mailto:esharin@yandex.ru)

**Abstract.** Low-dimensional materials have attracted considerable research interest from both theoretical and experimental perspectives. These materials exhibit novel physical and chemical properties due to confinement in low dimensions. Narrow graphene nanoribbons (GNRs) exhibit a significant band gap, and their optical properties are expected to be fundamentally different from those of the parent material, graphene. Unlike graphene, the optical response of GNRs can be tuned by the ribbon width and the directly related band gap. Using density functional theory in the generalized gradient approximation, we studied the electronic band structures and optical properties of graphene nanoribbons passivated with hydrogen atoms. Calculations showed that the band gap decreases with increasing nanoribbon width. This band gap is determined by both quantum confinement and the edge effect. The complex permittivity, complex refractive index, absorption coefficient, and reflectance of 9-AGNR graphene nanoribbon were calculated. The maximum peak values of the real and imaginary parts of the permittivity function are shifted toward lower frequencies. The maximum peak of the absorption coefficient is also shifted toward the blue region of the spectrum. Optical absorption is caused by interband transitions located near the point. The reflectance has three closely spaced peaks located in the red, visible, and blue regions of the spectrum, respectively.

**Keywords:** Density Functional Theory, Graphene Nanoribbon, Armchair Nanoribbon, Complex Permittivity

**For citation:** Sharin EP. Electronic and Optical Properties of Carbon Nanoribbons. *Applied Mathematics & Physics*. 2026;58(1):65–71. (In Russ.). DOI 10.52575/2687-0959-2026-58-1-65-71 EDN MAONCN

**1. Введение.** Благодаря превосходным электронным, термическим, механическим и оптическим свойствам графен считается материалом, обладающим высоким потенциалом в будущих электронных и оптических устройствах. Однако бесщелевая структура приводит к низкому отношению токов открытого и закрытого состояний в графеновых полевых транзисторах и препятствует развитию графеновой наноэлектроники. Один из наиболее перспективных подходов к управлению электронными и оптическими

свойствами – создание одномерных полосок графена, обычно называемых графеновыми нанолентами (GNR). Наноленты – это квазиодномерные материалы, обладающие иными электронными свойствами по сравнению с исходными двумерными материалами. Низкая размерность приводит к интересным электронным и магнитным свойствам, которые обусловлены размером и геометрией материала, а также составляющими его атомами. Интересные свойства нанолент помогают подогнать ширину запрещенной зоны в зависимости от их ширины и пассивирующих атомов на краях. Электронные и оптические свойства графеновых нанолент определяются шириной ленты и структурой края. Графеновые наноленты с кресельной и зигзагообразной структурой (AGNR и ZGNR) являются двумя типичными системами, выбранными для модельных исследований. В частности, энергетические щели, индуцированные в AGNR, обратно пропорциональны ширине ленты [1, 2]. Такие наноленты представляют интерес для применения в цифровых и оптоэлектронных устройствах, например, в полевых транзисторах [3, 4] или в устройствах с квантовыми точками [5, 6]. Такие свойства, как химическая реактивность [7], электронная структура [8], колебательные и транспортные свойства [9, 10], зависят от способа изготовления нанолент. Отличительные оптические свойства GNR открывают огромные перспективы для различных оптоэлектронных приложений, подкрепленные их регулируемой шириной запрещенной зоны, надежным взаимодействием света с веществом нелинейными оптическими свойствами. Эти особенности открывают новые горизонты в проектировании и разработке современных фотонных и оптоэлектронных устройств. Недавние достижения в синтезе графеновых нанолент «снизу вверх» позволили контролировать практически все структурные параметры с атомарной точностью [11, 12], что достигается благодаря целенаправленному проектированию и самосборке малых молекул-предшественников. В данной работе мы исследуем структуры энергетических зон и оптические свойства графеновых нанолент, пассивированных атомами водорода, используя *ab initio* методы.

**2. Методика расчета.** Расчеты выполнены с использованием пакета Quantum Espresso на основе теории функционала плотности (DFT). Взаимодействие электронов с ионным остовом представлено потенциалами проекционных присоединенных волн (PAW), которые точнее, чем ультрамягкие псевдопотенциалы. При проведении расчетов по структурной оптимизации и вычисления зонной структуры графеновой наноленты обменные и корреляционные эффекты учитывались с помощью обобщенного градиентного приближения (GGA) [13]. Для учета взаимодействия между ионными ядрами и валентными электронами используется модель псевдопотенциалов Маритнса – Троллера (Martins – Troullier) [14, 15]. Алгоритм сопряженных градиентов используется для релаксации ионов в их основные состояния, а энергии и силы, действующие на каждый ион, сходятся в пределах  $1.0 \times 10^{-4}$  eV/atom и  $0.003$  eV/Å, соответственно. В разложении волновой функции были учтены плоские волны с энергией до 612 eV, которые обеспечивают хорошую сходимость полной энергии. Электроны атома углерода  $2s^2 2p^2$  и атома водорода  $1s^1$  рассматриваются как валентные электроны. Для моделирования бесконечно длинной изолированной наноленты мы используем геометрию суперъчейки, где каждая плоскость отделена от своей реплики на  $15$  Å как в направлении от края к краю, так и между слоями. Этого интервала достаточно, чтобы обеспечить пренебрежимо малое взаимодействие между лентой и ее периодическими изображениями, поскольку идентичные результаты получаются при больших расстояниях разделения. Точка *k* выбирается согласно схеме автоматической генерации Монкхорста – Пака с началом в точке  $\Gamma$ , вместе с гауссовым размытием  $0.2$  eV.

**3. Результаты и обсуждение.** При нарезании бесконечного листа графена можно получить различные наноленты, в зависимости от ориентации обладающие разным расположением атомов на границах. При этом если атомы расположены в виде кресла, то такая графеновая лента называется нанолентой типа «кресло» (AGNR – armchair graphene nanoribbon). Такие ленты обозначаются как N-AGNR, где N – число димеров, которое характеризует ширину наноленты. В этом разделе мы исследуем электронные и оптические свойства графеновых нанолент типа «кресло», пассивированных атомами водорода. На рисунке 1 показаны типичные кристаллические структуры нанолент типа «кресло», пассивированные атомами водорода с шириной  $N = 3, 5, 9$ , соответственно.

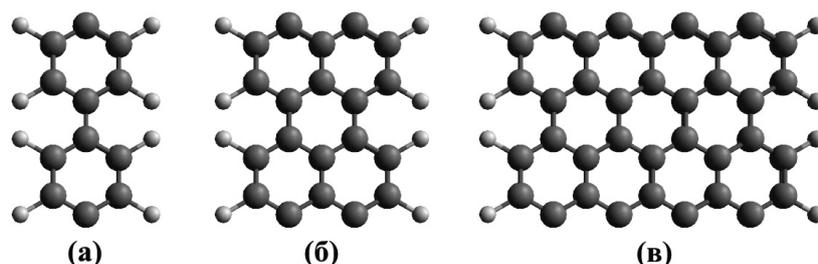


Рис. 1. Кристаллические структуры нанолент 3-AGNR (а), 5-AGNR (б) и 9-AGNR (в)  
Fig. 1. Crystal structures of 3-AGNR(a), 5-AGNR(b), and 9-AGNR (c) graphene nanoribbons

На рисунке 2 представлены электронные зонные структуры 3-AGNR, 5-AGNR и 9-AGNR нанолент, соответственно.

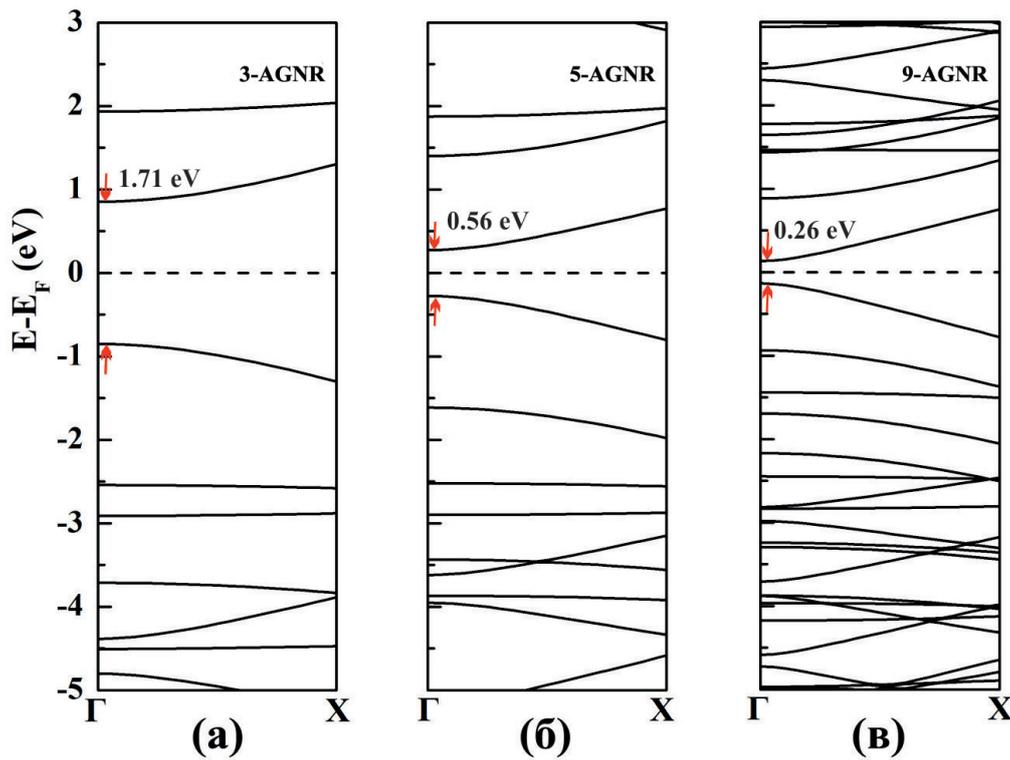


Рис. 2. Электронные зонные структуры графеновых нанолент  
Fig. 2. Electronic band structures of graphene nanoribbons

Расчеты показали, что все графеновые наноленты проявляют полупроводниковое поведение, а ширина запрещенной зоны уменьшается с увеличением ширины ленты. Ширина запрещенной зоны обусловлена как квантовым ограничением, так и эффектом краев [2]. Такая зависимость ширины запрещенной зоны от геометрической структуры графеновых нанолент дает уникальную возможность управлять электронными свойствами графеновых нанолент, просто контролируя их ширину и ориентацию краев, для реализации функциональных устройств на основе графена.

Далее мы исследуем оптические свойства графеновой наноленты на примере 9-AGNR. На рисунке 3 показаны зависимости реальной и мнимой частей диэлектрической проницаемости от энергии фотона для наноленты 9-AGNR. Пунктирными линиями отмечен участок, принадлежащий видимой части спектра. В длинах волн эта область занимает примерно от 380 до 780 нм, если перевести эти величины в энергетические единицы, то этот интервал будет от 1,6 до 3,2 эВ (780 нм – 1,6 эВ; 380 нм – 3,2 эВ). Диэлектрическая функция имеет большее преимущество перед некоторыми макрооптическими константами, которые могут отражать информацию между зонной структурой и оптическими спектрами твёрдых материалов, а также позволяют лучше характеризовать физические свойства. Комплексная диэлектрическая проницаемость определяется как

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2,$$

где  $\varepsilon_1$  – реальная часть и  $\varepsilon_2$  – мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости. Как известно, реальная часть диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_1(\omega)$  входит в выражение для электрической индукции и определяет поляризацию среды. Она ответственна за накопление энергии в среде. Пиковое значение реальной части диэлектрической функции  $\varepsilon_1(\omega)$  имеет энергию 1.03 эВ (см. рис. 3). Мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_2(\omega)$  связана с плотностью тока проводимости и характеризует потери энергии электромагнитного поля в среде. Это означает, что мнимая часть диэлектрической функции  $\varepsilon_2(\omega)$  соответствует энергии, необходимой для фотовозбуждения электронов в зону проводимости, энергетические переходы которой обозначены острыми пиками. Пиковое значение мнимой части диэлектрической функции  $\varepsilon_2(\omega)$  имеет энергию 1.26 эВ. Из рисунка 3 видно, максимальные пиковые значения реальной и мнимой частей диэлектрической функции наноленты 9-AGNR, пассивированной атомами водорода, имеют заметный сдвиг в область низких частот, что в основном объясняется изменением структуры энергетической зоны на уровне Ферми.

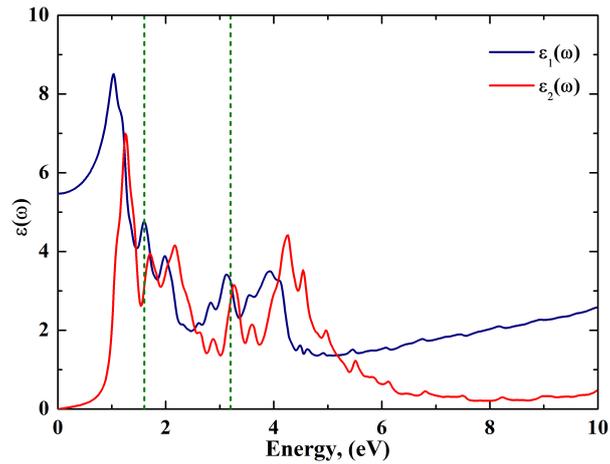


Рис. 3. Реальная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости  
Fig. 3. The real and imaginary parts of the complex dielectric constant

Другие оптические характеристики могут быть получены из комплексной диэлектрической проницаемости. Например комплексный показатель преломления, коэффициент поглощения и коэффициент отражения определяются величинами  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ . В частности, комплексный показатель преломления определяется как

$$n^* = n + ik,$$

где  $n^*$  – комплексный показатель преломления,  $n$  – реальная часть показателя преломления,  $k$  – коэффициент затухания (коэффициент экстинкции). Показатель преломления и коэффициент затухания связаны с  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  следующими соотношениями:

$$n = \frac{1}{2} \sqrt{\varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2}}, \quad k = \frac{2n}{\varepsilon_2}.$$

Используя эти формулы, мы определили коэффициенты преломления и экстинкции падающей электромагнитной волны в зависимости от энергии фотона. На рисунке 4 показаны рассчитанные зависимости коэффициентов преломления и затухания для графеновой наноленты 9-AGNR от энергии фотона.

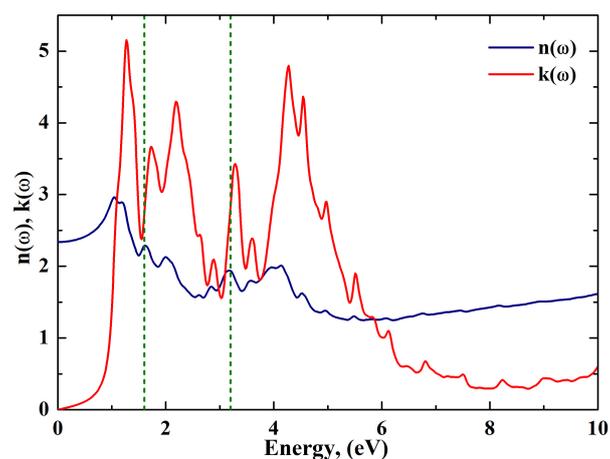


Рис. 4. Показатель преломления и коэффициент экстинкции в зависимости от частоты фотона  
Fig. 4. The refractive index and extinction coefficient depend on the frequency of the photon

Коэффициент оптического поглощения связан с коэффициентом экстинкции следующим соотношением

$$\alpha(\omega) = \frac{2k\omega}{\hbar c},$$

где  $c$  – скорость света;  $\hbar$  – постоянная Планка. На рисунке 5 представлена зависимость коэффициента поглощения от частоты фотона. Спектр  $\alpha(\omega)$  показывает два интенсивных пика на частотах 4.27 и 4.56 эВ. При этом максимальный пик  $\alpha(\omega)$  наноленты всегда смещен в синюю область спектра. В видимой области спектра имеется пик на частоте 2.22 эВ. Здесь мы показываем только оптическое поглощение для случая, когда вектор поляризации света перпендикулярен плоскости наноленты. Пики поглощения возникают, когда энергия превышает ширину щели между валентной зоной и зоной проводимости. Из этого следует, что оптическое поглощение обусловлено электронными межзонными переходами, расположенными в  $k$ -пространстве вблизи точки  $\Gamma$ .

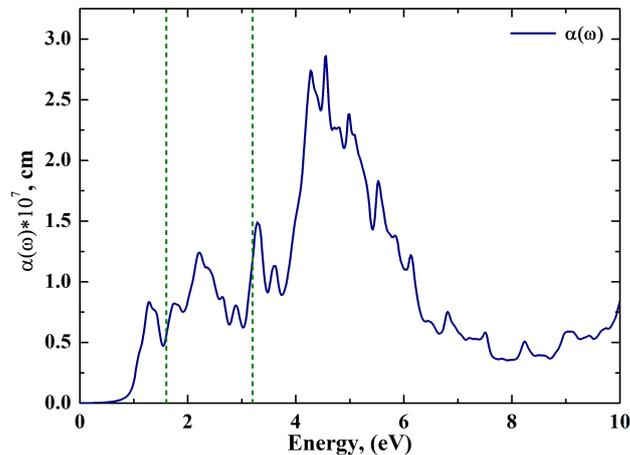


Рис. 5. Коэффициент поглощения в зависимости от частоты фотона  
Fig. 5. Absorption coefficient depending on the photon frequency

Другой важной характеристикой является коэффициент отражения, который определяется как

$$R = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2},$$

где  $n$  – показатель преломления среды;  $k$  – коэффициент экстинкции. На рисунке 6 представлен график зависимости коэффициента отражения от энергии фотона для наноленты 9-AGNR.

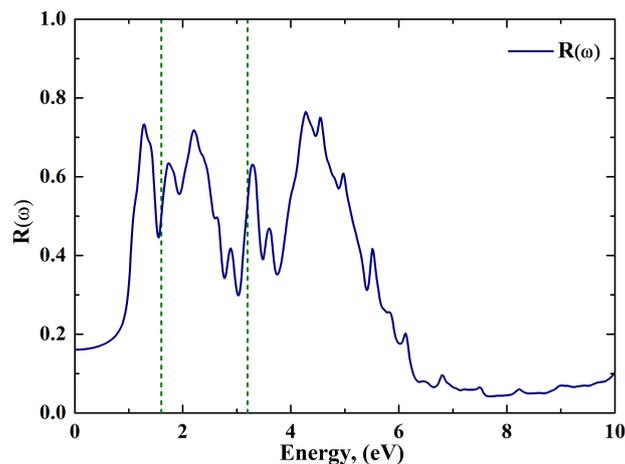


Рис. 6. Коэффициент отражения в зависимости от частоты фотона  
Fig. 6. Reflection coefficient depending on the photon frequency

Максимальный пик находится в ультрафиолетовой области и его энергия равна 4.27 эВ. В видимой области имеется один пик на частоте 2.2 эВ и в инфракрасной области тоже имеется один пик с энергией 1.28 эВ.

**4. Заключение.** В настоящей работе мы исследовали электронные и оптические свойства графеновых нанолент типа «кресло». Методом теории функционала плотности рассчитаны электронная зонная

структура графеновых нанолент 3-AGNR, 5-AGNR, 9-AGNR, пассивированных атомами водорода. Ширина запрещенной зоны обусловлена как квантовым ограничением, так и эффектом краев. Такая зависимость ширины запрещенной зоны от геометрической структуры графеновых нанолент дает уникальную возможность управлять электронными свойствами графеновых нанолент, просто контролируя их ширину и ориентацию краев, для реализации функциональных устройств на основе графена. Исследованы комплексная диэлектрическая проницаемость, комплексный показатель преломления, коэффициент поглощения и коэффициент отражения графеновой наноленты 9-AGNR в зависимости от энергии фотона. Максимальные пиковые значения реальной и мнимой частей диэлектрической функции смещены в область низких частот. Максимальный пик коэффициента поглощения тоже смещен в синюю область спектра. Оптическое поглощение обусловлено межзонными переходами, расположенными вблизи точки Г. Коэффициент отражения имеет три близких по значению пика, расположенных, соответственно, в красной, видимой и синей областях спектра.

#### Список литературы

1. Barone V., Hod O., Scuseria G.E. Electronic structure and stability of semiconducting graphene nanoribbons. *Nano Letters*. 2006; 6(12): 2748–2754.
2. Son Y.W., Cohen M.L., Louie S.G. Energy gaps in graphene nanoribbons. *Physical Review Letters*. 2006; 97(21): 216803–4.
3. Wang X., Ouyang Y., Li X., Wang H., Guo J., Dai H. Room-Temperature All-Semiconducting Sub-10-nm Graphene Nanoribbon Field-Effect Transistors. *Physical Review Letters*. 2008; 100: 206803.
4. Zhang Q., Fang T., Xing H., Seabaugh A., Jena D. Graphene nanoribbon tunnel transistors. *IEEE Electron Device Letters*. 2008 29(12):1344–1346.
5. Stampfer C., Schurtenberger E., Molitor F., Gottinger J., Ihn T., Ensslin T. Tunable graphene single electron transistor. *Nano Letters*. 2008 8:2378–2383.
6. Ponomarenko L.A., Schedin F., Katsnelson M.I., Yang R., Hill E.H., Novoselov K.S., Geim A.K. Chaotic Dirac billiard in graphene quantum dots. *Science*. 2008 320: 356–358.
7. Castro A.H., Guinea F., Peres N.M., Novoselov K.S., Geim A.K. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics* 2009 81(1): 109–162.
8. Abergel DSL., Apalkov V., Berashevich J., Ziegler K., Chakraborty T. Properties of graphene: a theoretical perspective. *Advances in Physics* 2010 59: 261–482.
9. Fujita M., Wakabayashi K., Nakada K., Kusakabe K. Peculiar localized state at zigzag graphite edge. *Journal of the Physical Society of Japan*. 1996 65: 1920–1923.
10. Rizzo D.J., Veber D., Cao T., Bronner C., Chen T., Zhao F., Rodriguez H., Louie S.G., Crommie M.F., Fischer F.R. Topological band engineering of graphene nanoribbons. *Nature*. 2018 560(7717): 204–208.
11. Groning O., Wang S., Yao X., Pignedoli C.A., Barin G.B., Daniels C., Cupo A., Meunier V., Feng X., Narita A., Mullen K., Ruffieux P., Fasel R. Engineering of robust topological quantum phases in graphene nanoribbons. *Nature*. 2018 560(7717): 209–213.
12. Sun Q., Yan Y., Yao X., Mullen K., Narita A., Fasel R., Ruffieux P. Evolution of the topological energy band in graphene nanoribbons. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2021 12(35): 8679–8684.
13. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple *Physical Review Letters*. 1996 77(18): 3865–3868.
14. Григорьев Ю.М., Шарин Е.П., Муксунов Н.Я. Электронные свойства вертикально уложенной гетероструктуры MoS<sub>2</sub>/WS<sub>2</sub>. *Природные ресурсы Арктики и Субарктики*. 2022; 27(3):459–465. <https://doi.org/10.31242/2618-9712-2022-27-3-459-465>
15. Шарин Е.П., Новгородов А.А. Электронные и оптические свойства планарной гетероструктуры MoS<sub>2</sub>/WS<sub>2</sub>. *Вестник Северо-восточного федерального университета имени М. К. Аммосова*. 2023 20(3):42–49. <https://doi.org/10.25587/2222-5404-2023-20-3-42-49>.

#### References

1. Barone V., Hod O., Scuseria G.E. Electronic structure and stability of semiconducting graphene nanoribbons. *Nano Letters*. 2006; 6(12): 2748–2754.
2. Son Y.W., Cohen M.L., Louie S.G. Energy gaps in graphene nanoribbons. *Physical Review Letters*. 2006; 97(21): 216803–4.
3. Wang X., Ouyang Y., Li X., Wang H., Guo J., Dai H. Room-Temperature All-Semiconducting Sub-10-nm Graphene Nanoribbon Field-Effect Transistors. *Physical Review Letters*. 2008; 100: 206803.
4. Zhang Q., Fang T., Xing H., Seabaugh A., Jena D. Graphene nanoribbon tunnel transistors *IEEE Electron Device Letters*. 2008 29(12):1344–1346.
5. Stampfer C., Schurtenberger E., Molitor F., Gottinger J., Ihn T., Ensslin T. Tunable graphene single electron transistor. *Nano Letters*. 2008 8:2378–2383.

6. Ponomarenko LA., Schedin F., Katsnelson MI., Yang R., Hill EH., Novoselov KS., Geim AK. Chaotic Dirac billiard in graphene quantum dots. *Science*. 2008 320: 356–358.
7. Castro AH., Guinea F., Peres NM., Novoselov KS., Geim AK. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*. 2009 81(1): 109–162.
8. Abergel DSL., Apalkov V., Berashevich J., Ziegler K., Chakraborty T. Properties of graphene: a theoretical perspective. *Advances in Physics*. 2010 59: 261–482.
9. Fujita M., Wakabayashi K., Nakada K., Kusakabe K. Peculiar localized state at zigzag graphite edge. *Journal of the Physical Society of Japan*. 1996 65: 1920–1923.
10. Rizzo DJ., Veber D., Cao T., Bronner C., Chen T., Zhao F., Rodriguez H., Louie SG., Crommie MF., Fischer FR. Topological band engineering of graphene nanoribbons *Nature* 2018 560(7717): 204–208.
11. Groning O., Wang S., Yao X., Pignedoli CA., Barin GB., Daniels C., Cupo A., Meunier V., Feng X., Narita A., Mullen K., Ruffieux P., Fasel R. Engineering of robust topological quantum phases in graphene nanoribbons. *Nature* 2018 560(7717): 209–213.
12. Sun Q., Yan Y., Yao X., Mullen K., Narita A., Fasel R., Ruffieux P. Evolution of the topological energy band in graphene nanoribbons. *The journal of physical chemistry letters* 2021 12(35): 8679–8684.
13. Perdew JP., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple *Phys. Rev. Lett.* 1996 77(18): 3865–3868.
14. Grigoriev YuM., Sharin EP., Muksunov NYa. Electronic properties of vertically stacked MoS<sub>2</sub>/WS<sub>2</sub> heterostructure. *Prirodnye resursy Arctiki i Subarctiki*. 2022; 27(3):459–465. <https://doi.org/10.31242/2618-9712-2022-27-3-459-465>. (In Russ.)
15. Sharin EP., Novgorodov AA. Electronic and Optical Properties of MoS<sub>2</sub>/WS<sub>2</sub> Planar Heterostructure. *Vestnik SVFU*. 2023 20(3):42–49. <https://doi.org/10.25587/2222-5404-2023-20-3-42-49>. (In Russ.)

**Конфликт интересов:** о потенциальном конфликте интересов не сообщалось.

**Conflict of interest:** no potential conflict of interest related to this article was reported.

Поступила в редакцию 08.12.2025

Received December 8, 2025

Поступила после рецензирования 22.01.2026

Revised January 22, 2026

Принята к публикации 26.01.2026

Accepted January 26, 2026

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

**Шарин Егор Петрович** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики, Северо-Восточный федеральный университет, г. Якутск, Россия

#### INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

**Egor P. Sharin** – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Theoretical Physics Department, North-Eastern Federal University, Yakutsk, Russia

[К содержанию](#)