**Рожков, Михаил Александрович.  
Механические и электронные свойства графеновых кристаллов с дисклинациями : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07 / Рожков Михаил Александрович; [Место защиты: Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена]. - Санкт-Петербург, 2019. - 124 с. : ил.**

**Оглавление диссертациикандидат наук Рожков Михаил Александрович**

**Введение**

**1 СОВРЕМЕННЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В ГРАФЕНЕ**

**1.1 Дефекты в графене**

**1.1.1 Точечные дефекты**

**1.1.2 Одномерные дефекты**

**1.1.3 Двумерные дефекты**

**1.1.4 Графеновые кристаллы с двумерным распределением дефектных углеродных колец**

**1.1.5 Зарождение дефектов в графене**

**1.2 Физико-механические свойства графена с дефектами и графена под внешним воздействием**

**2 ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ИССЛЕДОВАНИЮ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ГРАФЕНА**

**2.1 Дисклинационная теория для двумерных кристаллов**

**2.2 Метод молекулярной динамики**

**2.3 Теория функционала плотности**

**3 СТРУКТУРА И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛОСКИХ ГРАФЕНОВЫХ КРИСТАЛЛОВ С ДИСКЛИНАЦИЯМИ**

**3.1 Дисклинационные структурные элементы в конфигурациях углеродных атомов**

**3.2 Моделирование линейных дефектов в графене: интерфейсов и границ зерен, с помощью дисклинационных структурных элементов**

**3.3 Моделирование графена с дисклинационными сетками. Пседографены**

**4 ВЛИЯНИЕ ДИСКЛИНАЦИЙ И ИХ АНСАМБЛЕЙ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА**

**4.1 Об определении упругих характеристик графена и псевдографенов**

**4.2 Моделирование разрушения псевдографенов**

**5 ЭВОЛЮЦИЯ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ГРАФЕНА С ДИСКЛИНАЦИЯМИ**

**5.1 Зонные структуры псевдографеновых кристаллов**

**5.2 Зонная структура графеновых кристаллов с дисклинационными сетками**

**Заключение и выводы**

**Список сокращений и условных обозначений**

**Список использованных источников**

**Приложение А. Листинг программного кода для вычисления потенциальной энергии кристалла графена с дислинациями методом молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS**

**Приложение Б. Листинг программного кода для контроля выполнения периодических условий моделируемых кристаллов в программном пакете MATLAB**

**Введение**