

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

З.З. АЛИСУЛТАНОВ¹⁾, канд. физ.-мат. наук,
Н.А. МИРЗЕГАСАНОВА²⁾, аспирант

Г.М. МУСАЕВ²⁾,
Х.К. ФАДЕЛЬ²⁾,

¹⁾ Институт физики им. А.М. Амирханова
ДагНЦ РАН

²⁾ Дагестанский государственный университет
Махачкала, Российская Федерация
E-mail: zaur0102@gmail.com

АДСОРБЦИЯ АТОМОВ НА ГРАФЕНЕ ВО ВНЕШНЕМ КВАНТУЮЩЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В работе модель Андерсона–Ньюнса для адсорбции атомов на графене обобщается на случай наличия внешнего поперечного квантующего магнитного поля. Получены аналитические выражения для плотности состояний двумерной системы с дираковским спектром во внешнем магнитном поле. В приближении, в котором учитывается только изменение плотности состояний подложки, получены аналитические выражения плотности состояний адатома. Исследован зарядовый обмен между адатомом и подложкой. Изучены зависимости плотности состояний адатома и переходящего заряда от величины магнитного поля при различных значениях константы взаимодействия. Получено аналитическое выражение для возмущенной адсорбцией плотности состояний подложки и исследована зависимость последней от параметров задачи.

Ключевые слова: адсорбция, графен, модель Андерсона–Ньюнса, дираковские фермионы, плотность состояний, переходящий заряд.

Z.Z. ALISULTANOV, Cand. of Phys.-Math. Science,
N.A. MIRZEGASANOVA²⁾, Postgraduate Student
G.M. MUSAEV²⁾, Doctor of Phys.-Math. Science
H.K. FADEL²⁾, Postgraduate Student

¹⁾ Amirkhanov Institute of Physics of Daghestan Scientific Center of RAS

²⁾ Dagestan State University
Dagestan, Russian Federation
E-mail: zaur0102@gmail.com

THE ADSORPTION OF ATOMS ON GRAPHENE IN AN EXTERNAL MAGNETIC FIELD

In this paper the Anderson–Newns model for atomic adsorption on graphene is generalized to the case of presence an external transverse magnetic field. We obtain analytical expressions for the density of states of the two-dimensional Dirac system with a spectrum in external magnetic field. In the approximation that takes into account only change of the density of states of the substrate, the analytical expressions of the density of states of the adatoms was obtained. We investigated the charge transfer between the adatom and the substrate. The dependence of the density of states of the adatom and the charge transfer on the value of the magnetic field at different values of the coupling constant also was studied. We obtain the analytical expression for the perturbed by adsorption density of states and the substrate, the dependence of the latter on the problem parameters.

Key words: adsorption, graphene, the Anderson-Newns model, the Dirac fermions, density of states, charge transfer.

1. Введение

В современной физике важное место занимают системы с дираковским (линейным) энергетическим спектром квазичастиц. К таким системам относится графен – двумерный аллотроп углерода, экспериментально изученный в 2005 г. К.С. Новоселовым, А.К. Геймом и С.В. Морозовым [1, 2]. Другой системой с дираковским спектром является топологический изолятор – материал, являющийся проводником на поверхности и диэлектриком в объеме [3...6]. Необычный спектр и соображения симметрии приводят к уникальным свойствам графена и топологических изоляторов (ТИ) [1...7]. У этих двух материалов имеется много общего, а есть и принципиальные различия. И графен, и топологический изолятор обладают линейным бесщелевым спектром квазичастиц. Спин-орбитальное взаимодействие в графене очень слабое. В топологическом изоляторе же спин-орбитальное взаимодействие сильное и играет определяющую роль при формировании его уникальных свойств [8, 9] (например, закон сохранения проекции спина приводит к тому, что поверхностный ток в ТИ оказывается очень устойчивым к различного рода дефектам). Кроме того, ТИ являются перспективным материалом в спинтронике [8, 9]. Необычные свойства этих материалов привлекают внимание исследователей из самых различных областей физики и химии. Последнее обстоятельство привело к тому, что исследование этих материалов сегодня является одним из самых актуальных вопросов современной физики конденсированного состояния.

Другой важной задачей физики конденсированного состояния является исследование адсорбции атомов и молекул на поверхности различных металлических и полупроводниковых структур [10]. Такой интерес обусловлен несколькими причинами. Одним из существенных обстоятельств является то, что адсорбция может кардинально изменить энергетический спектр адсорбента (открыть энергетическую щель, изменить работу выхода, изменить поверхностную проводимость, магнитные свойства, воздействовать на спектр поверхностных плазмонов и т.д.) [11...13]. Таким образом, появляется возможность получать желаемые характеристики тех или иных структур с помощью адсорбированных атомов и молекул. Все указанные возможности в полной мере относятся к графену и ТИ. С теоретической зрения эти вопросы особенно интересны, т.к. графен и ТИ являются очень необычными адсорбентами. Адсорбция на монослой и бислой графена в модели Андерсона–Ньюнса изучалась в недавних работах

[13...17]. В настоящей работе модель Андерсона–Ньюнса для адсорбции атомов на графене обобщается на случай наличия внешнего поперечного квантующего магнитного поля. Такое обобщение интересно еще и по другой причине. Одним из основных направлений физики графена является изучение эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металлов или полупроводников [18]. В работах [19...25] была предложена и развита аналитическая модель эпитаксиального графена. В этой модели, лист графена, находящегося на поверхности подложки, представляется в виде атомов углерода, адсорбированных на этой поверхности и выстроенных в структуре графена. Следовательно, развиваемая в этой работе общая теория может быть применена для исследования эпитаксиального графена во внешнем магнитном поле.

2. Модель Андерсона–Ньюнса для адсорбции на графене

Гамильтониан модели Андерсона имеет следующий вид

$$H = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{p}) c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} + E_a \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + \mathfrak{A} a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow} + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p}, \sigma} (c_{\mathbf{p}\sigma}^+ a_{i\sigma} + \text{h.c.}), \quad (1)$$

где E_a – энергия атомного электрона в состоянии $|a\sigma\rangle$; $\mathfrak{A}$ – внутриатомное кулоновское отталкивание электронов с противоположными спинами; $c_{\mathbf{k}\sigma}^+$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}$) – оператор рождения (уничтожения) электронов подложки, находящихся в состоянии $|\mathbf{p}\sigma\rangle$; $\mathbf{p}$ – квазиимпульс электрона подложки; $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$) – оператор рождения (уничтожения) электрона адатома; V – потенциал гибридизации (в данной работе мы следуем приближению, в котором эта величина не зависит от $|\mathbf{p}\sigma\rangle$); N – число атомов подложки; σ – спиновое число. Далее, мы ограничимся одним спиновым состоянием. С помощью гамильтониана (1) получаем выражение для функции Грина (ФГ) адатома

$$G_i^0 = (\omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega) - i\Gamma_c(\omega))^{-1}, \quad (2)$$

где $\varepsilon_a = E_a + \mathfrak{A} \langle a_{\sigma}^+ a_{\sigma} \rangle$, а

$$\Gamma_c(\omega) = \pi |V|^2 \rho(\omega), \quad (3)$$

$$\Lambda(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_c(\omega') d\omega' / (\omega - \omega'), \quad (4)$$

есть полуширина и функция сдвига квазиуровня, соответственно, $\rho(\omega)$ – плотность состояний (ПС) подложки, знак « P » означает интегрирование в смысле главного значения. В модели Андерсона–

Ньюнса для адсорбции атомов на металле плотность состояний металла аппроксимируется следующим образом

$$\rho(\omega) = \rho_0 = \text{const}. \quad (5)$$

Вообще говоря, плотность состояний, не зависящая от энергии, соответствует двумерному электронному газу с квадратичным спектром. Действительно, для элемента фазового объема такого газа имеем

$$dV = \frac{4\pi S p dp}{(2\pi\hbar)^2} = \frac{4\pi m S \sqrt{E} \frac{dE}{\sqrt{E}}}{(2\pi\hbar)^2} = \frac{4\pi m S dE}{(2\pi\hbar)^2}, \quad (6)$$

откуда для плотности состояний получаем

$$\rho_0 = \frac{mS}{\pi\hbar^2}, \quad (7)$$

где S – площадь рассматриваемого участка двумерного газа; m – эффективная масса электрона.

Графен есть двумерная структура со следующим спектром квазичастиц

$$E(\mathbf{q}) = v_b t \times \sqrt{3 + 2\cos(\sqrt{3}q_x a) + 4\cos(\sqrt{3}q_x a/2)\cos(3q_y a/2)},$$

где t – матричный элемент перехода электрона на ближайшие соседние атомы (для изолированного графена $t \approx 2,8$ эВ); a – расстояние между ближайшими атомами в графене; $\mathbf{q}$ – двумерный волновой вектор электронов графена; v_b – зонный индекс: $v_b = +1$ соответствует зоне проводимости, а $v_b = -1$ – валентной зоне. Вблизи точки Дирака с координатами $\mathbf{Q} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$ для энергетического спектра получаем: $t f(\mathbf{k}) = v_b 3ta|\mathbf{k}|/2 = v_b v_F \hbar |\mathbf{k}|$, где $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}$, $v_F = 3ta/2\hbar$ – скорость Ферми для электронов графена (для изолированного графена $v_F \approx 1 \cdot 10^8$ см/с). Тогда имеем

$$\rho_0(\omega) = \frac{S|\omega|}{\pi v_F^2 \hbar^2}, \quad (8)$$

$$\Lambda_0(\omega) = -\frac{S\omega}{2\pi v_F^2 \hbar^2} \ln \left| \frac{\omega^2 - \xi^2}{\omega^2} \right|,$$

где ξ – энергетический параметр порядка ширины зоны. Отметим, что здесь и дальше под ПС подразумевается ПС, приходящаяся на один атом графена. В связи с этим, $S = S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$. Величину ξ определим из естественного условия, что один атом недопированного графена содержит один

электрон в $2p_z$ -состоянии, т.е. $\int_{-\xi}^{\varepsilon_F} \rho(\omega) d\omega = 1$, где ε_F

– энергия Ферми, равная нулю для недопированного графена. Из этого условия получаем:

$\xi = \sqrt{\pi\sqrt{3}t}$. С учетом явных выражений для ξ и S , (8) могут быть переписаны в следующем виде

$$\rho_0(\omega) = \frac{|\alpha|}{\xi}, \quad (9)$$

$$\Lambda_0(\omega) = -\frac{\alpha|V|^2}{2\xi} \ln \left| \frac{\alpha^2 - 1}{\alpha^2} \right|,$$

где введена безразмерная переменная $\alpha = \omega/\xi$. На рисунке 1 показана плотность состояний и функция сдвига изолированного графена.

3. Обобщение модели Андерсона-Ньюнса на случай наличия внешнего магнитного поля

При наложении внешнего, перпендикулярного поверхности подложки, магнитного поля происходит изменение характеристик подложки, адатома, а также процессов обмена между подложкой и адатомом. Основные изменения, происходящие в системе адатом–подложка можно сформулировать следующим образом:

- 1) под воздействием поля изменяется плотность состояний подложки;
- 2) квазиуровень энергии парамагнитных адатомов (щелочные, переходные, редкоземельные металлы и т.д.) расщепляется (эффект Зеемана);
- 3) снятие вырождения по спину приводит к изменению кулоновского отталкивания между электронами с противоположными спинами (третий член в гамильтониане (1)).

Проблема, обозначенная во втором пункте, может быть опущена с известными оговорками. Т.е. можно считать, что зеемановское расщепление мало в рассматриваемом случае. Третий пункт содержит очень важный эффект, который требует

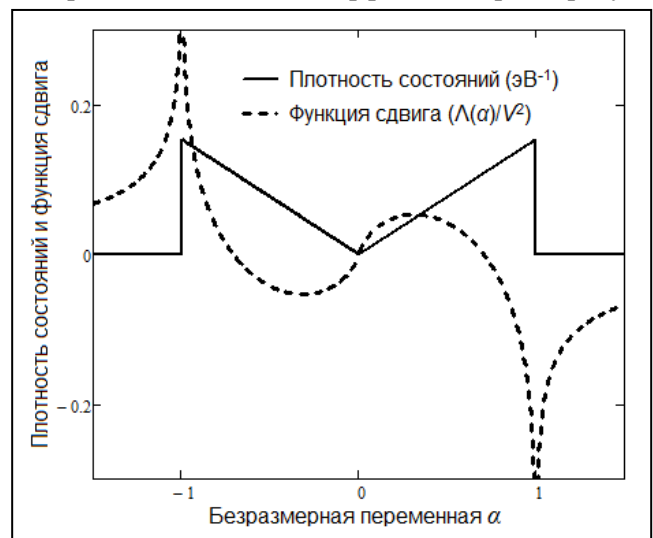


Рис. 1. Плотность состояний изолированного графена и функция сдвига энергии квазиуровня адатома на нем

отдельного рассмотрения в рамках микроскопической теории. Наличие магнитного поля приведет к тому, что в выражение для квазиуровня войдет обменное взаимодействие. Последнее связано с тем, что между электронами возникает дополнительное отталкивание вследствие того, что их спины из-за магнитного поля оказываются сонаправленными. В настоящей работе мы учтем только первый пункт.

При наличии внешнего квантующего магнитного поля, энергетический спектр электронов графена квантуется и имеет вид

$$E_{n,v} = \hbar\omega_c \sqrt{n}, \quad (10)$$

где $\omega_c = \sqrt{2}v_F/l_H$ – циклотронная частота; $l_H = (\hbar c/eH)^{1/2}$ – магнитная длина; H – напряженность магнитного поля; c – скорость света в вакууме; v – зонный индекс. Чтобы определить плотность состояний, необходимо знать спектральную функцию, которая в данном случае определяется следующим образом

$$A_n(\omega) = \frac{s}{(\omega - E_{n,v})^2 + s^2} = \pi\delta(\omega - E_{n,v}), \quad (11)$$

где $s = 0^+$. Плотность состояний есть величина, равная

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \sum_{n=0, v=\pm 1}^{n_0} \frac{s}{(\omega - E_{n,v})^2 + s^2}. \quad (12)$$

В (12) суммирование проводится до некоторого уровня n_0 , соответствующего краю зоны разрешенных энергий. Очевидно, величина n_0 определяется из условия $\xi = \hbar\omega_c \sqrt{n_0}$, т.е. равна $n_0 = (\xi/\hbar\omega_c)^2$. Дельтаобразная спектральная функция соответствует отсутствию в системе затухания ($s = 0^+$), т.е. случаю свободных частиц.

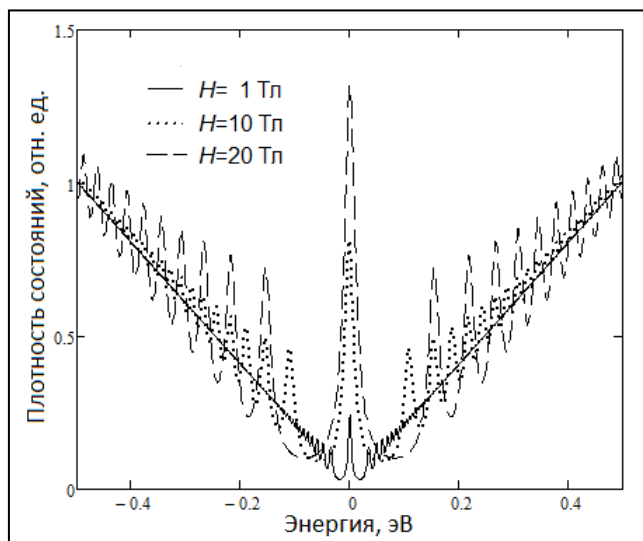


Рис. 2. Плотность состояний графена в поперечном магнитном поле при различных значениях напряженности последнего

Однако, в реальной системе всегда имеется затухание квазичастиц. Более того, адсорбированный слой атомов представляет собой дополнительный источник рассеяния квазичастиц, что также приводит к их затуханию. Поэтому мы положим $s = \Gamma \neq 0$. Кроме этого, каждый уровень Ландау характеризуется фактором вырождения, определяемым как отношение площади рассматриваемого образца (S), перпендикулярного магнитному полю к площади области, в котором имеется квантование (πl_H^2). Таким образом, фактор вырождения каждого уровня Ландау равен $\mu = S\omega_c^2/2\pi v_F^2 = a\hbar^2\omega_c^2$.

Тогда, окончательно для плотности состояний имеем

$$\rho(\omega) = \frac{a\hbar^2\omega_c^2}{\pi} \sum_{n=0, v=\pm 1}^{n_0} \frac{\Gamma}{(\omega - E_{n,v})^2 + \Gamma^2}. \quad (13)$$

Здесь и далее положим $\Gamma = 0,1\hbar\omega_c$ эВ. Для таких параметров имеем: $\hbar\omega_c \approx 3,45 \cdot 10^{-2} \sqrt{H}$ эВ, причем магнитное поле дается в этом выражении в теслах. На рисунке 2 показана приведенная плотность состояний (13) ρ/a при различных значениях напряженности магнитного поля.

Из рисунка 2 видно, что плотность состояний представляет собой контуры Лоренца, ширина которых определяется, очевидно, величиной Γ . Легко сообразить, что в пределе $H \rightarrow 0$, $\Gamma \rightarrow 0$ получаем плотность состояний изолированного графена $\rho_0 \propto |\omega|$. Для функции сдвига имеем

$$\Lambda(\omega) = \frac{a\hbar^2\omega_c^2|V|^2}{\pi} \sum_{n=0, v=\pm 1}^{n_0} \frac{(\omega - E_{n,v})}{(\omega - E_{n,v})^2 + \Gamma^2}. \quad (14)$$

На рисунке 3 представлена зависимость приведенной функции сдвига $\Lambda(\omega)/a|V|^2$ от

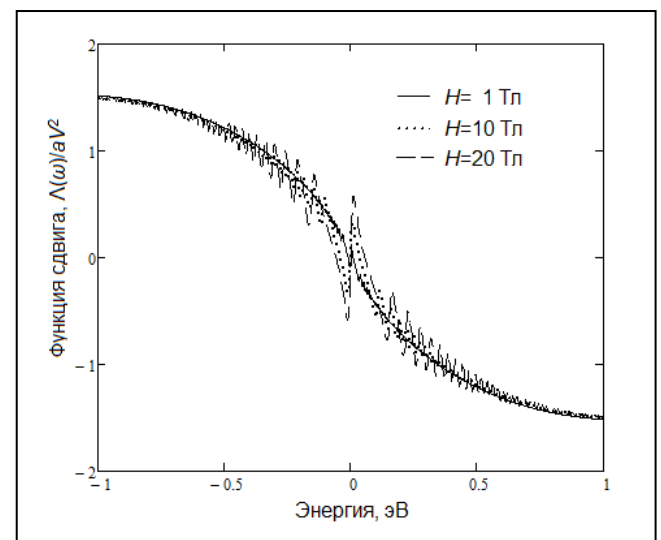


Рис. 3. Функция сдвига квазиуровня атома на графене во внешнем магнитном поле

энергетической переменной. Из рисунка 3 видно, что функция сдвига, как и плотность состояний носит осциллирующий характер. При $H \rightarrow 0$ получаем $\Lambda(\omega) \rightarrow \Lambda_0(\omega)$.

Можно также учесть наличие спина у электронов подложки. В этом случае энергетический спектр подложки необходимо записать в виде

$$E_{n,v} = \hbar\omega_c v \sqrt{|n|} \pm \frac{\hbar\omega_c}{2}.$$

Используемая здесь модель, вообще говоря, может быть обобщена и на случай адсорбции на бислой графена [17].

4. Плотность состояний адатома и переходящий заряд

Плотность состояний адатома определяется мнимой частью функции Грина (2)

$$\rho_a(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G_a(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_c}{(\omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega))^2 + \Gamma_c^2}. \quad (15)$$

Используя (13), (14) и (15) на рисунке 4 приведена плотность состояний адатома с положительной энергией квазиуровня при различных значениях напряженности магнитного поля и различных значениях потенциала гибридизации. Плотность состояний адатома наиболее существенно отлична от нуля при энергиях близких к ε_a . Последнее очевидно, т.к. рассматриваемый атом содержит один электрон с энергией ε_a . При отсутствии взаимодействия с подложкой, плотность состояний представляется собой, естественно, дельта функцию с аргументом $\omega - \varepsilon_a$. Наиболее интересный вывод, который можно сделать из рисунка 4 состоит в следующем. При увеличении магнитного поля, уширение квазиуровня уменьшается, а высота пика при ε_a возрастает. Это свидетельствует о том, что увеличение магнитного поля приводит к уменьшению взаимодействия между адатомом и подложкой. Последнее легко понять из следующих соображений. При увеличении магнитного поля происходит

увеличение расстояния между соседними уровнями Ландау. Это, естественным образом, приводит к уменьшению числа уровней Ландау под уровнем Ферми. Уменьшение уровней означает уменьшение числа электронов, за счет которых и осуществляется связь между адатомом и подложкой.

Число заполнения адатома определим стандартным образом [11]

$$n_a = \int_{-\xi}^{E_F} \rho_a(\omega) d\omega, \quad (16)$$

где E_F – энергия Ферми, равная нулю для изолированного графена; ξ – ширина разрешенных энергий валентной зоны. Здесь мы рассмотрим общие законы изменения заряда адатома при варьировании таких величин как потенциал гибридизации, энергия квазиуровня адатома. Наиболее важной величиной, определяющей природу адсорбции, является переходящий заряд, равный индуцированному заряду адатома и определенному, очевидно, как $\Delta q = (1 - n_a)e$, где e – заряд электрона. На рисунке 5 показана зависимость величины переходящего заряда от энергии квазиуровня адатома. Из рисунка 5 можно сделать вывод о том, что при $\varepsilon_a < E_F$ переходящий заряд мал по сравнению со случаем, когда $\varepsilon_a \geq E_F$. Это можно объяснить тем, что все уровни, лежащие ниже уровня Ферми, заняты электронами. Это приводит к тому, что электрон с адатома не может перейти на эти уровни. Для энергий $\varepsilon_a \geq E_F$ наблюдается обратная ситуация.

5. Изменение плотности состояний графена, индуцированное адсорбцией

При адсорбции атомов на графене, очевидно, изменяется электронная структура самого графена. Здесь мы рассмотрим задачу об изменении плотности состояний графена, вызванном адсорбцией атомов. Для функции Грина возмущенного графена, на котором адсорбирован

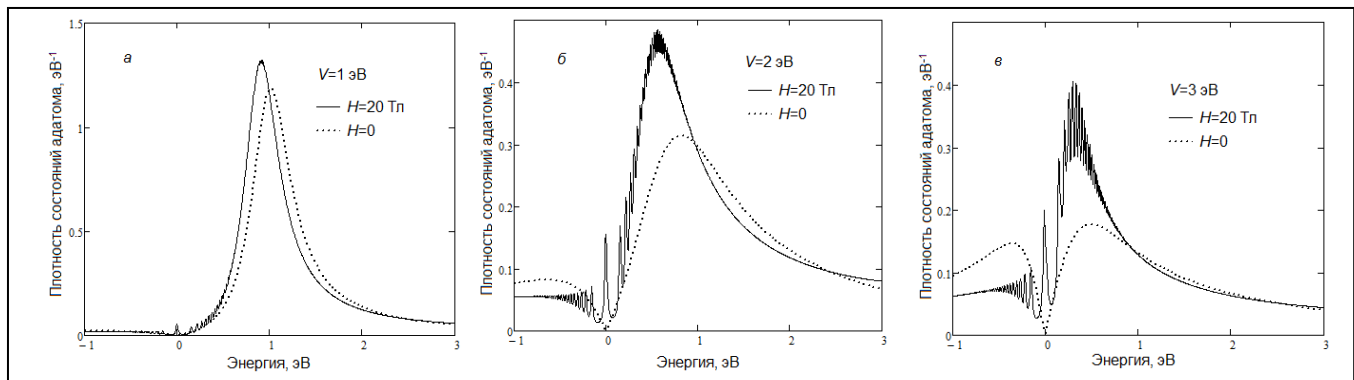


Рис. 4. Плотность состояний адатома с энергией квазиуровня $\varepsilon_a = 1$ эВ при различных значениях потенциала гибридизации и напряженности магнитного поля

атомный слой с концентрацией η , воспользовавшись уравнением Дайсона, в первом приближении получим

$$G_{kk'} = G_{kk}^0 \delta_{kk'} + \frac{1}{N_a} G_k^0 \sum_{i,j} V_{ki} G_{ij} V_{jk'} G_{kk'}^0, \quad (17)$$

где суммирование производится по всем узлам адрешетки, а N_a – общее число узлов в адрешетке (при Т-типе адсорбции, когда адатом расположен непосредственно над атомом подложки, в режиме монослоя $N_a = N$), G_{ij} – функция Грина одиночного адатома. Заметим, что мы пренебрегаем возможными взаимодействиями между адатомами (прямой и косвенный обмен электронами, дипольное взаимодействие и т.д.). Далее считается, что на один адатом приходится один атом графена. Учитывая, что функция $G_{ij} = G_a$ не зависит от расположения адатома в адрешетке, а также $V_{ki} = V$, получим

$$G_k = G_k^0 + nV^2 G_k^0 G_a G_k^0. \quad (18)$$

Прежде чем проводить суммирование по зонам и подзонам, заметим, что

$$\begin{aligned} (G_k^0)^2 &= \frac{1}{(\omega - E(k) - is)^2} = \\ &= -\frac{\partial}{\partial \omega} \left(\frac{1}{\omega - E(k) - is} \right) = -\frac{\partial G_k^0}{\partial \omega}. \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} G(\omega) &= \frac{1}{2N} \sum_{k,v=\pm 1} G_k(\omega) = \\ &= G^0(\omega) - nV^2 \frac{\partial G^0(\omega)}{\partial \omega} G_a(\omega). \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\omega) &= \pi^{-1} \text{Im} G(\omega) = \rho(\omega) - \\ &- nV^2 \text{Im} \left(\frac{\partial}{\partial \omega} (\pi^{-1} \text{Re} G^0(\omega) + i\rho(\omega)) \right) \times \\ &\times (\text{Re} G_a(\omega) + i\pi\rho_a(\omega)), \end{aligned} \quad (20)$$

где

$$\text{Re} G_a(\omega) = \frac{\pi(\omega - \tilde{\epsilon}_a - \Lambda(\omega))\rho_a(\omega)}{\Gamma(\omega)},$$

$$\text{Re} G^0(\omega) = \Lambda(\omega)/V^2.$$

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\omega) &= \rho(\omega) - nV^2 \rho_a(\omega) \times \\ &\times \left(\frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re} G^0(\omega) + \frac{\pi(\omega - \tilde{\epsilon}_a - \Lambda(\omega))}{\Gamma(\omega)} \frac{\partial}{\partial \omega} \rho(\omega) \right). \end{aligned} \quad (21)$$

Написанные выражения аналогичны тем, что приводятся в работе [26], за тем исключением, что здесь рассматривается случай адсорбированного слоя, а в [26] рассматривался случай адсорбции одиночного атома. Разница заключается в том, что в данном случае выражение для плотности состояний возмущенного адсорбцией графена содержит концентрацию адатомов. В случае адсорбции

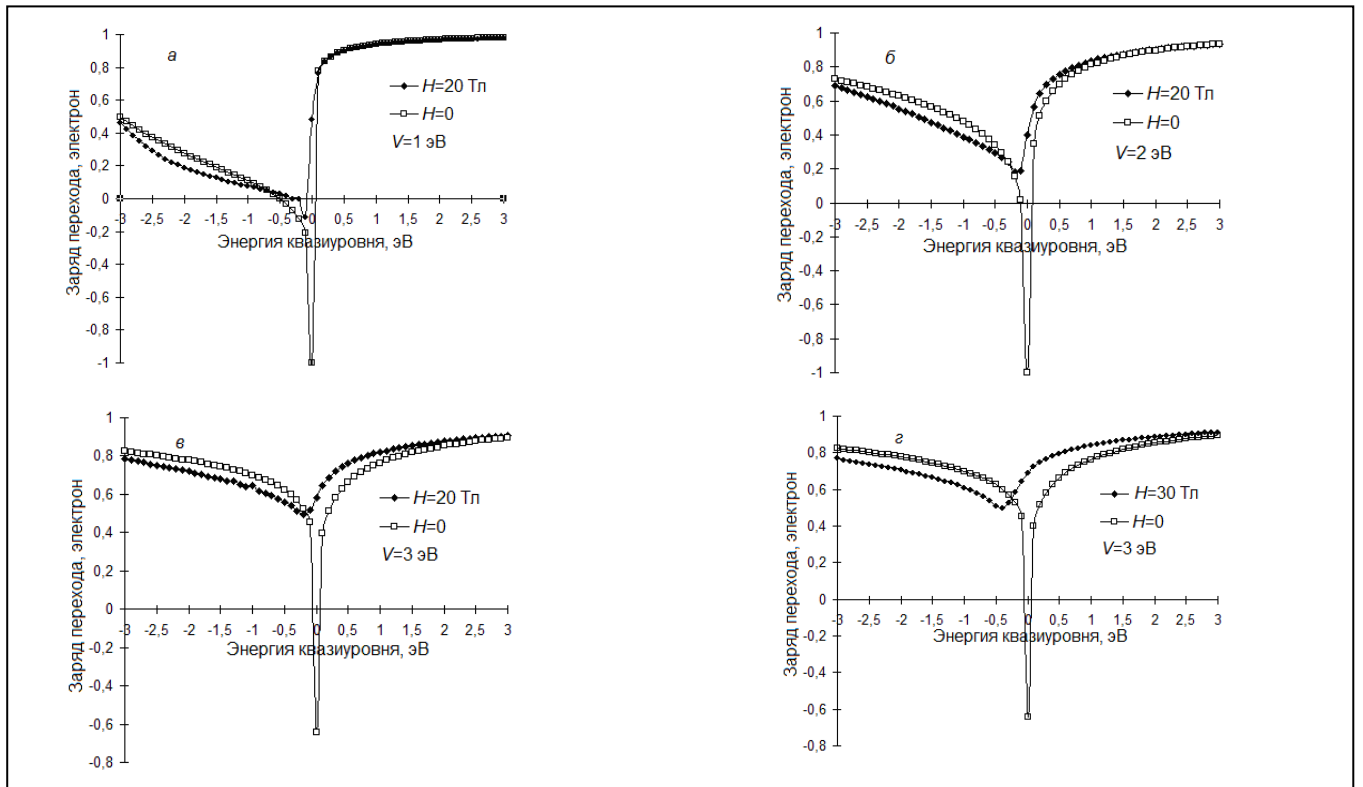


Рис. 5. Величина переходящего заряда при различных значениях потенциала гибридизации и напряженности магнитного поля

одиноким адатомом, необходимо положить $n \rightarrow 0$, что дает $\tilde{\rho}(\omega) \rightarrow \rho(\omega)$. Последнее является вполне разумным, т.к. изменение, вносимое одним атомом ничтожно мало. Совершенно другой результат мы будем иметь, если рассматривается не полная плотность состояний, а локальная, т.е. плотность состояний непосредственно под адатомом. В этом случае необходимо положить $n = 1$, что и было сделано в [26] при исследовании энергии связи атома с графеном. Здесь же мы рассматриваем изменение полной плотности состояний графена, а не локальной. Случай $n = 1$ здесь соответствует режиму монослоя. Легко сообразить, что для больших концентраций адатомов искажение плотности состояний существенно, что вполне логично, т.к. адсорбция деформирует $2p_z$ -орбитали атомов углерода, за счет которой и формируется зона Бриллюэна графена.

Помимо искажения кривой плотности состояний, очевидно, имеет место смещение точки Дирака, т.е. изменение энергии уровня Ферми. Действительно, зарядовый обмен между графеном и адсорбатом, вообще говоря, изменяет концентрацию носителей в графене, что и приводит к смещению уровня Ферми. Для определения связи между изменением энергии Ферми и концентрацией адатомов, мы воспользуемся приближением, в котором вычислим изменение энергии Ферми монослоя. С учетом сказанного, имеем

$$\int_0^{\Delta E_F} \rho_0(\omega) d\omega = n \Delta q.$$

Из последнего выражения сразу же получаем

$$\Delta E_F = \pm \xi \sqrt{n \Delta q}, \quad (22)$$

где знак «плюс» соответствует переходу заряда с адсорбата на графен, знак «минус» – переходу заряда из графена в адсорбат.

6. Заключение и обсуждение

Для расчета заряда атомов необходимо знать две характеристики адатома: энергия квазиуровня и потенциал гибридизации, который зависит от типа адатома, а также от типа адсорбции. Многочисленные расчеты и экспериментальные измерения (см., например, [27...29]) показывают, что при адсорбции металлических атомов, как правило, наблюдаются три адсорбционных центра (рис. 6). Эти позиции отличаются наиболее высокими значениями энергии адсорбции. Наиболее вероятным из трех позиций является Н (hollow) – центр, а самым маловероятным – Т (top) – позиция. Мы в данной работе рассматриваемый наиболее вероятный случай, т.е. предполагаем, что атом адсорбируется в центре гексагона. Энергию квазиуровня определим с помощью соотношения [12]

$$\varepsilon_a = \Phi - I + e^2/4\lambda, \quad (23)$$

где Φ – работа выхода графена; I – потенциал ионизации адатома; λ – среднее расстояние между адатомом и поверхностью графена; $e^2/4\lambda$ – внутриатомное кулоновское отталкивание. Работа выхода графена согласно [30] составляет 4,6 эВ, а согласно [31] – 5,11 эВ. Мы положим $\Phi = 5,11$ эВ. Потенциалы ионизации различных атомов найдем из [32]. Величину λ определим из выражения: $\lambda = \sqrt{(r_a + r_c)^2 - a^2} - r_c$, где r_a – радиус адатома, $r_c = 0,77$ Å – радиус атома углерода; $a = 1,42$ Å – расстояние между ближайшими соседними атомами в графене. Потенциал гибридизации можно определить с помощью метода связывающих орбиталей Харрисона [33, 34]. Например, при адсорбции атомов щелочных металлов на s - и p - подложках основную роль играют s - и p -орбитали, а следовательно, можно воспользоваться формулой

$$V = V_{ij\alpha} = \eta_{ij\alpha} \frac{\hbar^2}{m_0 (r_a + r_c)^2}, \quad (24)$$

где индексы i, j означают состояния адатома и графена, соответственно, которые участвуют в гибридизации ($i, j = s, p$); $\alpha = \pi, \pi$ – тип связи (сигма- или пи-связь) между адатомом и графеном; $\eta_{ij\alpha}$ – характерная константа взаимодействия; m_0 – масса свободного электрона. Понятно, что в данном случае $j = p$. Используя эти параметры, можно провести количественные расчеты адсорбционных характеристик конкретных атомов. Однако в настоящей работе нас интересовали качественные эффекты, которые достаточно подробно изучены выше. А расчеты для конкретных атомов представляют интерес при наличии экспериментальных данных по исследуемой проблеме. Последние, к сожалению, авторам неизвестны, а, следовательно, количественные

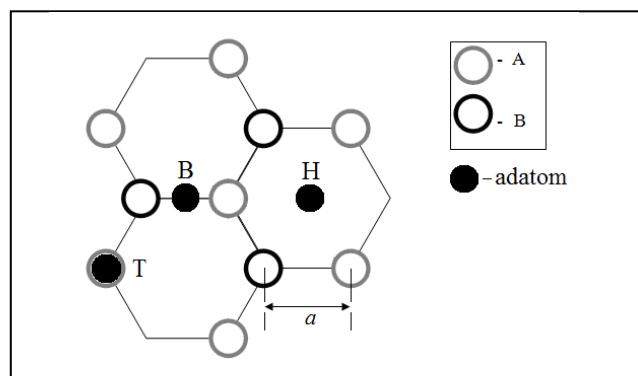


Рис. 6. Три наиболее вероятных расположения адатома на графене: Н (hollow) – позиция в центре гексагона, В (bridge) – позиция в центре прямой, соединяющей ближайшие атомы углерода в графене, Т (top) – позиция непосредственно над атомом углерода. А и В обозначают различные подрешетки графена

расчеты на данном этапе будут в некотором смысле бесполезными.

В конце следует подчеркнуть, что в настоящей работе мы пренебрегали прямым и косвенным обменами электронами между адатомами. В то же время известно, что учет таких взаимодействий приводит в некоторых случаях к принципиально новым эффектам (см. например [12, 35...37]). Проблема, поставленная в настоящей работе, может быть обобщена на случай, когда в системе учитываются указанные взаимодействия. Теоретические основы для такого исследования были заложены в работах [36, 37]. Такое исследование представляет большой интерес и является темой отдельной статьи.

Одним из соавторов (А.З.З.) работа частично выполнялась в СПбГЭТУ (НОЦ «Материалы нанoeлектроники и фотоники») по гранту ФЦП «Развитие внутрироссийской мобильности научных и научно-педагогических кадров путем выполнения научных исследований молодыми учеными и преподавателями в научно-образовательных центрах» ГК № 14. В37. 21.0238 от 23.07.2012.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V. et al. Science 2004. Vol. 306. P. 666.
2. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V. et al. Nature. 2005. Vol. 438. P. 197.
3. Moore J.E. Nature. 2010. Vol. 464. P. 194.
4. Hasan M.Z., Kane C.L. Rev. Mod. Phys. 2010. Vol. 82. P. 3045.
5. Manoharan H.C. Nature Nanotechnology. 2010. Vol. 5. P. 477.
6. Rotenberg E. Nature Physics. 2011. Vol. 7. P. 8.
7. Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R. et al. Rev. Mod. Phys. 2008. Vol. 81. P. 109.
8. Murakami S., Nagaosa N., Zhang S.-C, Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93. P. 156804.
9. Bernevig B.A., Hughes T.L., Zhang S.-C, Science. 2006. Vol. 314. P. 1757...1761.
10. Эйнштейн Т., Герц Дж., Шриффер Дж. *Проблемы теории хемосорбции. В сб.: Теория хемосорбции* / Под редакцией А.М. Бродского. М.: Мир, 1983.
11. Brodskiy A.M., Urbakh M.I. Prog. in Surf. Sci. 1977. Vol. 8. P. 103.
12. Большов Л.А., Напартович А.П., Наумовец А.Г. и др. // *УФН*. 1977. Т. 122. С. 125.
13. Давыдов С.Ю. // *ФТП*. 2012. Т. 46. № 2. С. 204.
14. Давыдов С.Ю., Сабирова Г.И. // *Письма в ЖТФ*. 2010. Т. 36. №. 24. С. 77; *ФТТ*. 2011. Т. 53. №. 3. С. 608.
15. Алисултанов З.З., Мейланов Р.П., Нухов А.К. // *Письма в ЖТФ*. 2013. Т. 39. № 3. С. 63.
16. Алисултанов З.З. // *ФНТ*. 2013. Т. 39. № 2. С. 225; *ФТТ*. 2013. Т. 55. №. 6. С. 1211.
17. Алисултанов З.З. // *ФТП*. 2013. Т. 47. № 7. С. 954.

18. Berger C., Song Z., Li T. et al. J. Phys. Chem. B. 2004. Vol. 108. P. 19912.
19. Давыдов С.Ю. *Письма в ЖТФ*. 2011. Vol. 37. P. 64. *ФТП*. 2011. Vol. 45. P. 629. *ФТТ*. 2011. Vol. 45. P. 1102.
20. Давыдов С.Ю. *ФТП*. 2013. Vol. 47 (1). P. 97...106.
21. Алисултанов З.З., Мейланов Р.П. *ФТТ*. 2012. Vol. 54. P. 1398, *ТМФ*. 2012. Vol. 172. P. 455.
22. Алисултанов З.З., Мейланов Р.П. *ФММ*. 2012. Vol. 113. P. 1504.
23. Алисултанов З.З., Гарнов С.В., Мейланов Р.П. *ФТТ*. 2012. Vol. 54. P. 2237.
24. Алисултанов З.З. *ФММ*. 2013. Vol. 114 (6) (в печати).
25. Давыдов С.Ю. *ФТТ*. 2011. Vol. 53. № 12. P. 2414.
26. Chan K.T., Neaton J.B., Cohen M.L. Phys. Rev. B 2008. Vol. 77. P. 235430.
27. Liu X., Wang C.Z., Hupalo M. et. al. Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82. P. 245408.
28. Liu X., Wang C.Z., Yao Y.X. et. al. Phys. Rev. B. 2011. Vol. 83. P. 235411.
29. Sque S.J., Jones R., Briddon P.R. Phys. Status Solidi A. 2007. Vol. 204. P. 3078.
30. Mattausch A., Pankratov O. Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99. P. 076 802.
31. *Физические величины. Справочник* / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991, 1232 с.
32. Harrison W.A. Phys. Rev. B. 1983. Vol. 27. № 6. P. 3592.
33. Harrison W.A. Phys. Rev. B. 1985. Vol. 31. № 4. P. 2121.
34. Браун О.М., Медведев В.К. *УФН*. 1989. Vol. 157. P. 631...666.
35. Давыдов С.Ю. *ФММ*. 1979. Vol. 47. P. 481.
36. Волокитин А.И. *ФММ*. 1980. Vol. 50. P. 629.

REFERENCES

1. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V. et al. Science 2004. Vol. 306. P. 666.
2. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V. et al. Nature. 2005. Vol. 438. P. 197.
3. Moore J.E. Nature. 2010. Vol. 464. P. 194.
4. Hasan M.Z., Kane C.L. Rev. Mod. Phys. 2010. Vol. 82. P. 3045.
5. Manoharan H.C. Nature Nanotechnology. 2010. Vol. 5. P. 477.
6. Rotenberg E. Nature Physics. 2011. Vol. 7. P. 8.
7. Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R. et al. Rev. Mod. Phys. 2008. Vol. 81. P. 109.
8. Murakami S., Nagaosa N., Zhang S.-C, Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93. P. 156804.
9. Bernevig B.A., Hughes T.L., Zhang S.-C, Science. 2006. Vol. 314. P. 1757...1761.
10. Eynshteyn T., Gerts Dzh., Shriffer Dzh. *Problemy teorii khemosorbtsii. V sb.: Teoriya khemosorbtsii* [Problems of the theory of chemisorption. In: The theory of chemisorption]. Ed. by A.M. Brodskogo. M.: Mir [Moscow: Publishing House «Peace»], 1983.
11. Brodskiy A.M., Urbakh M.I. Prog. in Surf. Sci. 1977. Vol. 8. P. 103.

12. Bol'shov L.A., Napartovich A.P., Naumovets A.G. et. al. *UFN* [Physics-Uspekhi]. 1977. Vol. 122. P. 125. (in Russian).
13. Davydov S.Yu. *FTP*. 2012. Vol. 46. № 2. P. 204. (in Russian).
14. Davydov S.Yu., Sabirova G.I. *Pis'ma v ZHTF* [Tech. Phys. Lett.]. 2010. Vol. 36. № 24. P. 77; *FTT*. 2011. Vol. 53. № 3. P. 608. (in Russian).
15. Alisultanov Z.Z., Meylanov R.P., Nukhov A.K. *Pis'ma v ZHTF* [Tech. Phys. Lett.]. 2013. Vol. 39. № 3. P. 63. (in Russian).
16. Alisultanov Z.Z. *FNT*. 2013. Vol. 39. № 2. P. 225; *FTT*. 2013. Vol. 55. № 6. P. 1211. (in Russian).
17. Alisultanov Z.Z. *FTP*. 2013. Vol. 47. № 7. P. 954. (in Russian).
18. Berger C., Song Z., Li T. et al. *J. Phys. Chem. B*. 2004. Vol. 108. P. 19912.
19. Davydov S.Yu. *Pis'ma v ZHTF* [Tech. Phys. Lett.]. 2011. Vol. 37. P. 64. *FTP*. 2011. Vol. 45. P. 629. *FTP*. 2011. Vol. 45. P. 1102. (in Russian).
20. Davydov S.Yu. *FTP*. 2013. Vol. 47 (1). P. 97...106. (in Russian).
21. Alisultanov Z.Z., Meylanov R.P. *FTT*. 2012. Vol. 54. P. 1398, *TMF*. 2012. Vol. 172. P. 455. (in Russian).
22. Alisultanov Z.Z., Meylanov R.P. *FMM*. 2012. Vol. 113. P. 1504. (in Russian).
23. Alisultanov Z.Z., Garnov S.V., Meylanov R.P. *FTT*. 2012. Vol. 54. P. 2237. (in Russian).
24. Alisultanov Z.Z. *FMM*. 2013. Vol. 114 (6) (in print). (in Russian).
25. Davydov S.Yu. *FTT*. 2011. Vol. 53. № 12. P. 2414. (in Russian).
26. Chan K.T., Neaton J.B., Cohen M.L. *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 235430.
27. Liu X., Wang C.Z., Hupalo M. et. al. *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 82. P. 245408.
28. Liu X., Wang C.Z., Yao Y.X. et. al. *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 83. P. 235411.
29. Sque S.J., Jones R., Briddon P.R. *Phys. Status Solidi A*. 2007. Vol. 204. P. 3078.
30. Mattausch A., Pankratov O. *Phys. Rev. Lett.* 2007. Vol. 99. P. 076 802.
31. *Fizicheskie velichiny. Spravochnik* [Physical quantities. Directory]. Ed. by Grigor'ev, Meylikhov. M.: Energoatomizdat [Moscow: Publishing House «Energoatomizdat»], 1991, 1232 p.
32. Harrison W.A. *Phys. Rev. B*. 1983. Vol. 27. № 6. P. 3592.
33. Harrison W.A. *Phys. Rev. B*. 1985. Vol. 31. № 4. P. 2121.
34. Brown O.M., Medvedev V.K. *UFN* [Physics-Uspekhi]. 1989. Vol. 157. P. 631...666. (in Russian).
35. Davydov S.Yu. *FMM*. 1979. Vol. 47. P. 481. (in Russian).
36. Volokitin A.I. *FMM*. 1980. Vol. 50. P. 629. (in Russian).

Сведения об авторах

Алисултанов Заур Замирович, канд. физ.-мат. наук
E-mail: zaur0102@gmail.com
 Институт физики им. А.М. Амирханова ДагНЦ РАН
 367003, Махачкала, Российская Федерация, ул. Ярагского, 94
Мирзегасанова Набат Альбертовна, аспирант
Мусаев Гапиз Мусаевич, доктор физ.-мат. наук
Фадель Хайдер, аспирант
 Дагестанский государственный университет
 367000, Махачкала, Российская Федерация, ул. М. Гаджиева 43-а

Information about authors

Alisultanov Zaur Z., Cand. of Phys.-Math. Science
E-mail: zaur0102@gmail.com
 Amirkhanov Institute of Physics of Daghestan Scientific Center of RAS
 367003, Makhachkala, Russian Federation, Yaragskovo str., 94
Mirzegasanova Nabat A., Postgraduate Student
Musaev Gapiz M., Doctor of Phys.-Math. Science
 Dagestan State University
 367000, Makhachkala, Russian Federation, st. M. Gadzhiev, 43-a