

ЛОКАЛІЗОВАНІ ТА КВАЗІЛОКАЛІЗОВАНІ РІВНІ ЕНЕРГІЇ В ЕЛЕКТРОННОМУ СПЕКТРІ ГРАФЕНУ, ЩО МІСТИТЬ ІЗОЛЮВАНІ ДОМІШКИ ЗАМІЩЕННЯ Мінакова К.О.

*Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут», м. Харків*

Графенові моношари не можуть існувати як плоскі утворення у вільному стані, оскільки в плоских 2D кристалах середньоквадратичні амплітуди атомів у напрямку, нормальному до площини шару розходяться навіть при $T = 0$ (див., наприклад, [1]). Вивчати і практично використовувати можна графен, що знаходиться на деякій підкладці, яка обумовлює стійкість його плоскої форми (див., наприклад, [2-4]).

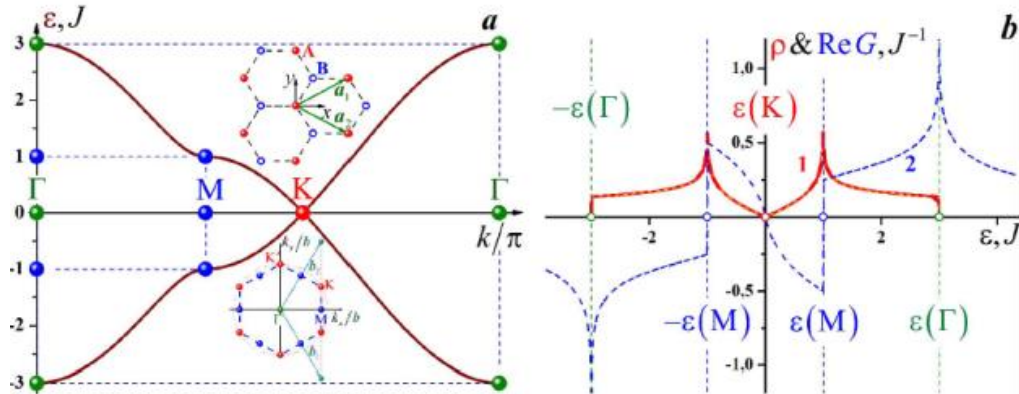


Рисунок 1 – Дисперсійні криві графена вздовж високосиметричних напрямків (фрагмент **a**), а також DOS графена та речова частина його функції Гріна (фрагмент **b** – криві 1 та 2, відповідно). Енергія відраховується від рівня Фермі ($\epsilon(K)$). На фрагменті **a** наведено елементарна комірка графена та його перша зона Бріллюєна з положеннями її високосиметричних точок

Впроваджені в графен домішкові атоми, при певному співвідношенні між енергіями частинок у вузлах та взаємодією між атомами, можуть зумовлювати виникнення домішкових станів за межами смуги квазінеперервного спектра ідеальної структури. Крім того, слід зазначити, що дираківська V – образна сингулярність на щільності станів графена визначає поведінку поблизу ферміївського рівня речової частини функції Гріна, яка пов'язана із щільністю станів співвідношенням Крамерса-Кроніга (крива 2 на Рис. 1b). У роботі розглянуто формування у графені поблизу ферміївського рівня квазілокалізованих станів (QLS), зумовлених заміщенням вуглецю азотом.

Література:

- [1] A.M. Kosevich, The Crystal Lattice (Phonons, Solitons, Dislocations), Berlin: WILEY-VCH Verlag Berlin GmbH, 1999.
- [2] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang1, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov, Nature 438, 197 (2005).
- [3] The etporonic properties of graphene, A.H. Castro-Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim, arXiv 0709.1163v2 [cound-mat. Othe] 29 Feb 2008.
- [4] N.M.R. Peres, F.D. Klironomos, S.W. Tsai, J.M.D. Lopes dos Santos, A.H. Castro-Nero, Electrom Waves in chemistry substituted graphene, arXiv 0705304v1 [cound. Mat. Mtrl-sci] 21 May, 2007