

# Энергетические щели в плотности состояний буферного слоя графена на карбиде кремния: учет неоднородности связей слой—подложка

© С.Ю. Давыдов<sup>†</sup>

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“ им. В.И. Ульянова (Ленина) (СПбГЭТУ),  
197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 15 апреля 2013 г. Принята к печати 15 мая 2013 г.)

В диагональном приближении получены функция Грина и плотность состояний эпитаксиального графена, образованного на поверхности полупроводника. Подробно рассматривается буферный слой графена на карбиде кремния. Предполагается, что в буферном слое имеются два вида состояний, слабо и сильно связанные с субстратом. Показано, что если в плотности состояний буферного слоя имеет место энергетическая щель, то ее существование и ширина определяются состояниями слабой связи графен—подложка.

## 1. Введение

Вопросы взаимодействия эпитаксиального графена с подложкой крайне важны, так как определяют характеристики графенового листа [1–5]. В качестве подложек чаще всего выступают кристаллы  $6H\text{-SiC}\{0001\}$  и  $4H\text{-SiC}\{0001\}$ . Такая популярность карбида кремния объясняется тем обстоятельством, что путем термодесорбции атомов кремния на его поверхности можно создать пленку графена [4–10].

Модельный подход к задаче об эпитаксиальном графене был сформулирован нами в работах [11,12]. При этом сначала рассматривался набор изолированных атомов углерода, а затем из этих атомов путем прямого (кинетического) обмена выстраивалась решетка графена. В работе [13] было показано, что для адсорбированного димера такой подход дает те же результаты, что и строгое рассмотрение задачи. Здесь мы уточним рамки применимости такого подхода.

Самое радикальное из того, что полупроводниковая подложка может сделать с однослойным графеном, это навести энергетическую щель в его электронном спектре. Такая задача исследовалась нами в работах [13,14]. При этом для описания плотности состояний подложки использовалась модель Халдейна—Андерсона [15], приводящая к логарифмическим расходимостям. Наличие этих расходимостей проявлялось в том, что уже отличное от нуля взаимодействие углеродных атомов создает щели, примыкающие к краям зон разрешенных состояний. В работе [16] с помощью плотности состояний, отвечающей параболическому закону дисперсии электронов субстрата, удалось избежать появления таких щелей-артефактов и получить критерий возникновения реальной щели. В данной работе используется именно эта модель.

До сих пор во всех работах мы молчаливо полагали для простоты, что все атомы эпитаксиального графена находятся в физически одинаковых состояниях, что, однако, не соответствует действительности (см., например,

структурные модели [17–27]). Достаточно сказать, что в буферном углеродном слое, образованном на поверхности Si(0001), т.е. на Si-границе карбида кремния, только 30% атомов углерода сильно (ковалентным образом) связаны с подложкой. Здесь мы учтем это обстоятельство в рамках простой модели двух состояний.

## 2. Функция Грина и плотность состояний эпитаксиального графена

Начнем с вывода функции Грина эпитаксиального графена. Пойдем, однако, не по схеме работ [13,14], а иным путем. Пусть  $\varepsilon_{gk}$  — закон дисперсии электронов в графене,  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  — двумерный волновой вектор для электронов графена, расположенного в плоскости  $(x, y, 0)$ ;  $\varepsilon_{sk}$  — закон дисперсии электронов в подложке,  $\mathbf{\kappa}$  — трехмерный волновой вектор для электронов субстрата. Введем теперь матричный элемент взаимодействия между графеном и субстратом  $V_{k\kappa}$ . Тогда гамильтониан задачи  $H$  имеет вид

$$H = H_G + H_S + \sum_{k\kappa} (V_{k\kappa} c_k^+ c_\kappa + h.c.),$$

$$H_G = \sum_k \varepsilon_{gk} c_k^+ c_k, \quad H_S = \sum_\kappa \varepsilon_{s\kappa} c_\kappa^+ c_\kappa. \quad (1)$$

Здесь  $H_{G(S)}$  — гамильтониан свободного графена (субстрата),  $c_k^+(c_k)$  — оператор рождения (уничтожения) электрона графена в состоянии  $|k\rangle$ ,  $c_\kappa^+(c_\kappa)$  — аналогичные операторы для электрона субстрата,  $h.c.$  — эрмитово-сопряженное слагаемое. Функция Грина  $\langle\langle A|B \rangle\rangle_\omega$  для операторов  $A$  и  $B$  находится из уравнения

$$\omega \langle\langle A|B \rangle\rangle_\omega = \langle\{A, B\}\rangle + \langle\langle [A, H]|B \rangle\rangle_\omega, \quad (2)$$

где  $\omega$  — энергия,  $[A, B] = AB - BA$ ,  $\{A, B\} = AB + BA$ ,  $\langle \dots \rangle$  — усреднение по основному состоянию. Для функции Грина атома углерода эпитаксиального графена

<sup>†</sup> E-mail: Sergei\_Davydov@mail.ru

получим

$$\begin{aligned} (\omega - \varepsilon_{gk}) \langle\langle c_k | c_{k'}^+ \rangle\rangle_\omega &= \delta_{kk'} + \sum_{\kappa} V_{k\kappa} \langle\langle c_\kappa | c_{k'}^+ \rangle\rangle_\omega, \\ (\omega - \varepsilon_{s\kappa}) \langle\langle c_\kappa | c_{k'}^+ \rangle\rangle_\omega &= \sum_k V_{k\kappa} \langle\langle c_k | c_{k'}^+ \rangle\rangle_\omega, \end{aligned} \quad (3)$$

откуда

$$(\omega - \varepsilon_{gk}) \langle\langle c_k | c_{k'}^+ \rangle\rangle_\omega = \delta_{kk'} + \sum_{k'', \kappa} \frac{V_{k\kappa} V_{\kappa k''}}{\omega - \varepsilon_{s\kappa} + i s} \langle\langle c_{k''} | c_{k'}^+ \rangle\rangle_\omega, \quad (4)$$

где  $s = 0^+$ . В первом приближении, когда в последнем члене в правой части (4) учитывается только член с  $k'' = k$ , получим

$$(\omega - \varepsilon_{gk}) \langle\langle c_k | c_{k'}^+ \rangle\rangle_\omega^{(1)} = \delta_{kk'} + \sum_{\kappa} \frac{V_{k\kappa} V_{\kappa k}}{\omega - \varepsilon_{s\kappa} + i s} \langle\langle c_k | c_{k'}^+ \rangle\rangle_\omega^{(1)} \quad (5)$$

или, используя обозначение  $G_{kk'}^g \equiv \langle\langle c_k | c_{k'}^+ \rangle\rangle_\omega$ , найдем

$$G_{kk'}^{g(1)} = \left( \omega - \varepsilon_{gk} - V^2 \sum_{\kappa} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{s\kappa} + i s} \right)^{-1} \delta_{kk'}, \quad (6)$$

где мы, как обычно [28,29], положили  $V_{k\kappa} V_{\kappa k} = V^2$ . Если теперь представить последний член в круглых скобках в (6) в виде  $\Lambda(\omega) - i\Gamma(\omega)$ , где  $\Lambda(\omega) = V^2 P \sum_{\kappa} (\omega - \varepsilon_{s\kappa})^{-1}$  и  $\Gamma(\omega) = \pi V^2 \sum_{\kappa} \delta(\omega - \varepsilon_{s\kappa})$ ,  $P$  — символ главного значения,  $\delta(\dots)$  — дельта-функция Дирака, то

$$\begin{aligned} G_{kk}^{g(1)} &= (\omega - \varepsilon_a \mp t f(\mathbf{k}) - \Lambda(\omega) + i\Gamma(\omega))^{-1}, \\ f^2(\mathbf{k}) &= 3 + 2 \cos(k_x a \sqrt{3}) + 4 \cos(k_x a \sqrt{3}/2) \cos(3k_y a/2), \end{aligned} \quad (7)$$

где мы учли явный вид закона дисперсии электронов в свободном графене:  $\varepsilon_{gk} = \varepsilon_a \pm t f(\mathbf{k})$ ,  $\varepsilon_a$  — энергия точки Дирака свободного графена,  $t$  — энергия перехода между соседними атомами углерода в свободном графене,  $a$  — расстояние между ближайшими соседями в графене, верхний знак относится к  $\pi^*$ -зоне графена, нижний — к  $\pi$ -зоне. Выражение (7) совпадает с полученными ранее результатами [13,14]. Альтернативный вывод функций Грина (6) приведен в *Приложении*. Там же, в частности, показано, что выражение (6) справедливо с точностью до  $V^2$ .

Необходимая для нахождения энергетической плотности состояний эпитаксиального графена  $\rho_g(\omega) = \pi^{-1} \text{Im} G^g(\omega)$  функция Грина первого (диагонального) приближения есть

$$G^g(\omega) = \sum_k G_{kk}^{g(1)}. \quad (8)$$

В работах [13,14] для получения аналитического выражения для функции Грина (8) мы прибегали к низкоэнергетической аппроксимации закона дисперсии в графене, полагая функцию  $f(\mathbf{q}) = 3ta|\mathbf{q}|/2$ , где  $\mathbf{q} = \mathbf{K} - \mathbf{k}$ , где  $\mathbf{K} = a^{-1}(2\pi/3\sqrt{3}, 2\pi/3)$  — волновой вектор точки Дирака, что справедливо для малых значений  $|\mathbf{q}|$ . Тогда

плотность состояний однородного эпитаксиального слоя графафена (в расчете на атом) принимает вид

$$\begin{aligned} \rho_g(\omega) &= \frac{1}{\pi \xi^2} \left[ \Gamma(\omega) \ln \frac{(\bar{\Omega} \mp \xi)^2 + \Gamma^2(\omega)}{\bar{\Omega}^2 + \Gamma^2(\omega)} \right. \\ &\quad \left. + 2\bar{\Omega} \left( \arctan \frac{\bar{\Omega}}{\Gamma(\omega)} - \arctan \frac{\bar{\Omega} \mp \xi}{\Gamma(\omega)} \right) \right], \end{aligned} \quad (9)$$

где  $\bar{\Omega} = \omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega)$ ,  $\xi \equiv 3taq_B/2$ ,  $q_B$  — вектор обреза, верхний знак в (9) относится к  $\pi^*$ -зоне графена, т.е. к области энергий  $\bar{\Omega} > 0$ , нижний — к  $\pi$ -зоне, где  $\bar{\Omega} < 0$  [13,14].

Для того чтобы найти явные выражения для функций сдвига  $\Lambda(\omega)$  и уширения  $\Gamma(\omega)$ , необходимо задать плотность состояний субстрата  $\rho_s(\omega)$  [11–15], так как

$$\Gamma(\omega) = \pi V^2 \rho_s(\omega),$$

$$\Lambda(\omega) = P \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(\omega') d\omega'}{\omega - \omega'}. \quad (10)$$

В качестве  $\rho_s(\omega)$  для полупроводниковой подложки выберем модель, использованную в работе [16] и отвечающую параболическому спектру электронов. Так как нас в дальнейшем будет интересовать только область энергий, включающая запрещенную зону субстрата, мы будем рассматривать приближение бесконечно широких зон разрешенных состояний аналогично [15,17], считая  $W_{C(V)}/E_g \rightarrow \infty$ , где  $W_{C(V)}$  — ширина зоны проводимости (валентной зоны),  $E_g$  — ширина запрещенной зоны. Таким образом, запишем:

$$\rho_s(\omega) = \begin{cases} A \sqrt{-\omega - E_g/2}, & \omega < -E_g/2, \\ A \sqrt{\omega - E_g/2}, & \omega > E_g/2, \\ 0, & |\omega| \leq E_g/2, \end{cases} \quad (11)$$

где  $A$  — коэффициент с размерностью  $\text{eV}^{-3/2}$ , нуль энергии помещен в центр запрещенной зоны подложки. Тогда из (10) получим приведенную функцию сдвига  $\bar{\Lambda}(\omega) = \Lambda(\omega)/AV^2$  в виде

$$\bar{\Lambda}(\omega) = \begin{cases} F_-(\omega), & \omega < -E_g/2, \\ F_-(\omega) - F_+(\omega), & -E_g/2 \leq \omega \leq E_g/2, \\ -F_+(\omega), & \omega > E_g/2, \end{cases} \quad (12)$$

где  $F_{\pm}(\omega) = \pi \sqrt{\pm\omega + E_g/2}$ .

Для того чтобы простейшим образом учесть неоднородность буферного слоя графена, будем считать, что в слое имеются состояния 1 и 2, которым отвечают матричные элементы взаимодействия с подложкой  $V_1$  и  $V_2$ . Тогда будем иметь две плотности состояний  $\rho_{g1}$  и  $\rho_{g2}$ , определяемые формулой (9) с  $\Lambda_1, \bar{\Omega}_1, \Gamma_1$  и  $\Lambda_2, \bar{\Omega}_2, \Gamma_2$  соответственно. Далее, определим плотность состояний буферного слоя  $\rho_g$  как

$$\rho_g(\omega, \vartheta) = \vartheta \rho_{g1}(\omega) + (1 - \vartheta) \rho_{g2}(\omega), \quad (13)$$

где  $\vartheta$  — относительная концентрация состояний 1 в буферном слое.

### 3. Щели в плотности состояний буферного слоя

Проанализируем полученные выражения в области энергий, отвечающих запрещенной зоне подложки, в которой функция  $\Gamma_{1,2}(\omega)$  тождественно равна нулю, а

$$\Lambda_{1,2}(\omega) = \pi AV_{1,2}^2 \left( \sqrt{-\omega + E_g/2} - \sqrt{\omega + E_g/2} \right).$$

Как следует из выражения (9), первый член в квадратных скобках обращается в нуль, а второй обращается в нуль только в том случае, когда совпадают знаки аргументов арктангенсов. В противном случае второй член в квадратных скобках принимает значение  $2\pi|\bar{\Omega}|$ , так что плотность состояний в интервале энергий  $-E_g/2 \leq \omega \leq E_g/2$  становится равной

$$\rho_{g1,2}(\omega) = \frac{2|\bar{\Omega}_{1,2}^<|}{\xi^2}, \quad (14)$$

где под  $|\bar{\Omega}_{1,2}^<|$  понимаются энергетические области, где щели в плотности состояний графена отсутствуют.

Рассмотрим случай обращения в нуль второго слагаемого в квадратных скобках выражения (9) подробнее. Для обращения в нуль  $\rho_{g1,2}(\omega)$  необходимо и достаточно выполнение неравенства

$$\bar{\Omega}_{1,2}(\bar{\Omega}_{1,2} \mp \xi) > 0, \quad (15)$$

где по-прежнему знак минус относится к случаю  $\bar{\Omega} > 0$ , знак плюс — к  $\bar{\Omega} < 0$ . Таким образом, при  $\bar{\Omega} > 0$  условием выполнения неравенства (15) является  $\bar{\Omega} > \xi$ , при  $\bar{\Omega} < 0$  условие (15) выполняется при  $\bar{\Omega} < -\xi$  [13,14,16]. Объединяя два этих случая, получим вместо (15) неравенство  $|\bar{\Omega}| > \xi$  (такие  $|\bar{\Omega}|$  будем обозначать  $|\bar{\Omega}^>|$  в отличие от  $|\bar{\Omega}^<|$ , удовлетворяющих условию  $|\bar{\Omega}| < \xi$ ) следующее выражение:

$$|\omega - \varepsilon_a - \Lambda_{1,2}(\omega)| > \xi. \quad (16)$$

Перед тем как перейти к численным оценкам, введем безразмерные величины, приняв за единицу энергии  $E_g/2$ :  $x = 2\omega/E_g$ ,  $\eta = 2\varepsilon_a/E_g$ ,  $c_{1,2} = \pi AV_{1,2}^2 \sqrt{2/E_g}$ ,  $\bar{\omega} = 2\bar{\Omega}/E_g$ ,  $\xi = 2\xi/E_g$ ,  $g_{1,2}^* = \rho_{g1,2} E_g/2$ ,  $\gamma_{1,2}(x) = 2\Gamma_{1,2}(x)/E_g$ ,  $\lambda_{1,2}(x) = 2\Lambda_{1,2}(x)/E_g$  (явный вид функций  $\gamma_{1,2}(x)$  и  $\lambda_{1,2}(x)$  приведен в *Приложении*). Тогда вместо (9) получим

$$g_i^*(x) = \frac{1}{\pi\xi^2} \left[ \gamma_i(x) \ln \frac{(\bar{\omega}_i \mp \xi)^2 + \gamma_i^2(x)}{\bar{\omega}_i^2 + \gamma_i^2(x)} + 2\bar{\omega}_i \left( \arctan \frac{\bar{\omega}_i}{\gamma_i(x)} - \arctan \frac{\bar{\omega}_i \mp \xi}{\gamma_i(x)} \right) \right], \quad (17)$$

где  $i = 1$  и  $2$ . Вместо (13) имеем

$$g^*(x, \vartheta) = \vartheta g_1^*(x) + (1 - \vartheta) g_2^*(x). \quad (18)$$

Неравенство (15) переходит в

$$|x - \eta - \lambda_{1,2}(x)| > \xi. \quad (19)$$

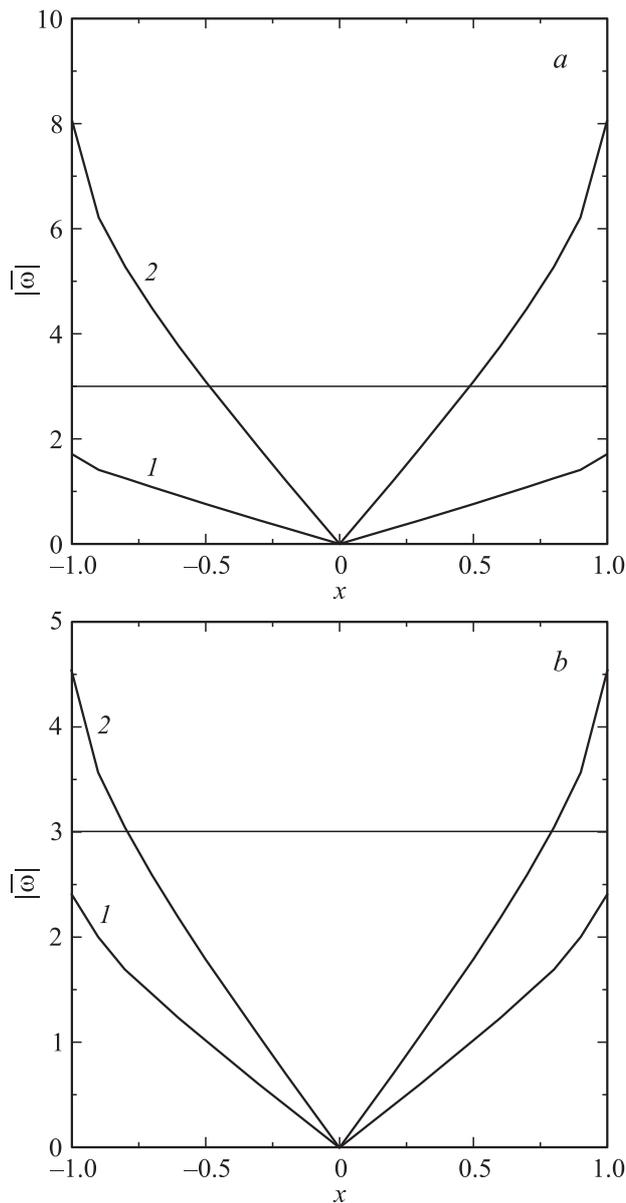
Положим  $A = A'V_0$  [16], где  $V_0$  — характерный объем (порядка атомного) для субстрата, введенный для того, чтобы размерность плотности состояний была  $\text{эВ}^{-1}$ ,  $A' = \sqrt{2}m_d^{3/2}/\pi^2\hbar^3$  [30,31], где  $m_d$  — эффективная масса для плотности состояний, средняя для валентной зоны и зоны проводимости, так как мы приняли плотности состояний разрешенных зон одинаковыми. Для наших достаточно грубых оценок положим  $V_0 = (4\pi/3)r_0^3$ , где расстояние между ближайшими соседями  $r_0 = 1.88 \text{ \AA}$ . Величину  $m_d$  оцениваем по данным [32], что дает  $m_d/m_0 \approx 1$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона (оценки делались для политипа 6H,  $E_g = 3 \text{ эВ}$ ). В результате получаем  $A \propto 0.2 \text{ эВ}^{-3/2}$  и  $c_{1,2} \propto 0.5V_{1,2}^2$ , где  $V_{1,2}$  нужно брать в эВ. Величину  $V^2$  будем рассматривать как параметр задачи, меняющийся от 1 до  $10 \text{ эВ}^2$ . Будем также полагать, что матричный элемент  $V_1$  характеризует слабо связанное с подложкой состояние атома углерода графена, а  $V_2$  — сильно связанное состояние, так что  $V_1 < V_2$ . Далее будем рассматривать два варианта: вариант I —  $V_1 = 1$  ( $c_1 = 0.5$ ),  $V_2 = \sqrt{10}$  ( $c_2 = 5$ ) и вариант II —  $V_1 = \sqrt{2}$  ( $c_1 = 1$ ),  $V_2 = \sqrt{5}$  ( $c_2 = 2.5$ ). Полагая  $t \approx 3 \text{ эВ}$  и  $aq_B \approx 1$ , получим  $\xi \approx 3$ .

На рис. 1 представлено графическое решение неравенства (19) для симметричного случая  $\eta = 0$  ( $\varepsilon_a = 0$ ). Видно, что в обоих вариантах щели в спектре графенового слоя возникают только для случая сильной связи слой–подложка, т.е. для  $V_2$  (кривая 2), а для  $V_1$  (кривая 1) щель отсутствует. Симметричность ветвей  $\bar{\omega}(x)$  объясняется тем, что функция  $\lambda(x)$  является антисимметричной:  $\lambda(x) = -\lambda(-x)$ .

Из сравнения рис. 1, *a* и *b* следует, что с уменьшением величины  $V_2$  ширина щелей  $\Delta_- = \Delta_+$  убывает. В варианте I (рис. 1, *a*) щели  $\Delta_{-2}$  и  $\Delta_{+2}$  расположены соответственно в интервалах  $(-1, -0.46)$  и  $(0.46, 1)$ , в варианте II (рис. 1, *b*) — в интервалах  $(-1, -0.79)$  и  $(0.79, 1)$ .<sup>1</sup> Таким образом, при изменении матричного элемента взаимодействия слой–подложка от  $V_2 = \sqrt{10}$  до  $V_2 = \sqrt{5}$  ширина щелей убывает от  $\Delta_{-2} = \Delta_{+2} = 0.54$  до  $\Delta_{-2} = \Delta_{+2} = 0.21$ .

Рис. 2 демонстрирует графическое решение неравенства (19) в асимметричном случае  $\eta \neq 0$  ( $\varepsilon_a \neq 0$ ). Если  $\eta > 0$ , то точка Дирака  $\bar{\omega} = 0$  сдвигается вправо относительно центра запрещенной зоны, если  $\eta < 0$ , то реализуется обратная картина. При  $\eta = 1$  в варианте I (рис. 2, *a*) щели  $\Delta_{-2}$  и  $\Delta_{+2}$  возникают только для случая сильной связи (кривая 2), причем  $\Delta_{-2} > \Delta_{+2}$ . В варианте II (рис. 2, *b*) щель  $\Delta_{-1}$  появляется и в случае слабой связи слой–подложка (кривая 1), а щели  $\Delta_{-2}$  и  $\Delta_{+2}$  сужаются. Действительно, для варианта I имеем  $\Delta_{-2} = 0.68$  и  $\Delta_{+2} = 0.37$ , для варианта II имеем  $\Delta_{-2} = 0.45$ ,  $\Delta_{+2} = 0.06$  и  $\Delta_{-1} = 0.10$ .

<sup>1</sup> Здесь и далее индекс  $-(+)$  у символа  $\Delta$  означает, что щель примыкает к валентной зоне (зоне проводимости), индекс 1(2) указывает, что значение ширины щели соответствует матричному элементу  $V_1(V_2)$ .



**Рис. 1.** К решению неравенства (19) при  $\xi = 1$  и  $\eta = 0$ . *a* (вариант I) —  $c_1 = 0.5$ ,  $c_2 = 5$ ; *b* (вариант II) —  $c_1 = 1$ ,  $c_2 = 2.5$ . Цифры 1 и 2 на графиках отвечают расчетам с использованием значений  $c_1$  и  $c_2$ . Горизонтальная линия отвечает значению  $\xi = 3$ .

Для области запрещенной зоны субстрата выражение (18) с учетом (14) можно переписать в виде

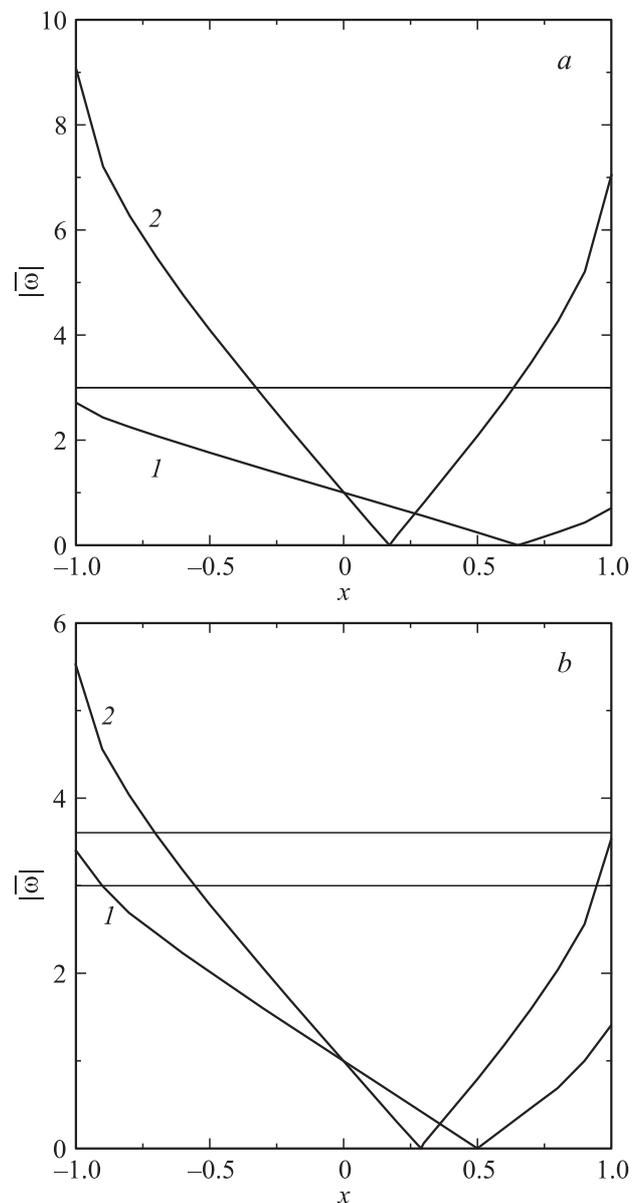
$$g^*(x, \vartheta) = \frac{2}{\xi^2} [\vartheta |\bar{\omega}_1^<| + (1 - \vartheta) |\bar{\omega}_2^<|], \quad (20)$$

где  $\bar{\omega}^< = 2\bar{\Omega}^</math>/ $E_g$ . Формула (20) при  $\vartheta = 0$  соответствует случаю сильной связи (кривые 2 на рис. 1 и 2), так что  $g^*(x, 0) = g_2^*(x)$ . При  $\vartheta = 1$  имеем случай слабой связи (кривые 1 на рис. 1 и 2), когда  $g^*(x, 1) = g_1^*(x)$ . Для значений  $\vartheta$ , отличных от 0 и 1, в плотности состояний графенового слоя „выживает“ только меньшая по$

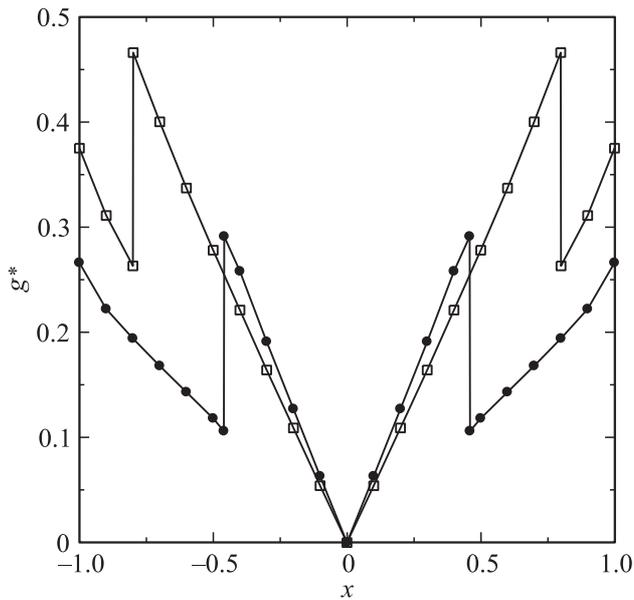
ширине щель, перекрывающаяся по энергии с большей по ширине щелью. В рассмотренных нами случаях это щель  $\Delta_{-1} = 0.10$  (рис. 2, *b*), что в случае политипа 6H-SiC равно 0.15 эВ.

На рис. 3 представлена функция  $g^*(x, 0.7)$ , моделирующая буферный слой графена, сформированный на поверхности Si(0001), когда только 30% атомов углерода графена сильно (ковалентно) связаны с подложкой. Параметры задачи такие же, как и для рис. 1. Та же функция  $g^*(x, 0.7)$  приведена и на рис. 4, но для параметров, отвечающих рис. 2. Следует отметить, что в общем случае (рис. 4) плотность состояний буферного слоя представляет собой довольно сложную структуру с целым набором особенностей.

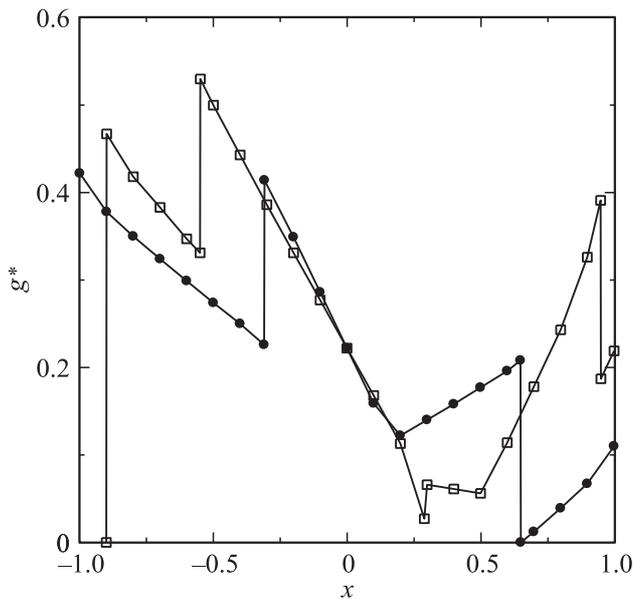
Таким образом, в рамках использованного здесь приближения бесконечных зон критерий появления щели в



**Рис. 2.** То же, что на рис. 1, но при  $\eta = 1$ .



**Рис. 3.** Приведенная плотность состояний  $g^*(x, 0.7)$  для буферного слоя графена при  $\xi = 1$  и  $\eta = 0$ . Темные кружки — вариант I, светлые квадраты — вариант II.



**Рис. 4.** То же, что на рис. 3, но при  $\eta = 1$ .

плотности состояний неоднородно связанного с подложкой монослоя графена есть

$$\xi^\mp < \xi_{\max}^\mp = \left| \frac{1}{2} E_g \pm \varepsilon_a + \pi A V_1^2 \sqrt{E_g} \right|, \quad (21)$$

где индекс  $-(+)$  относится к щели, примыкающей к валентной зоне (зоне проводимости). Критерий для конечных значений ширины зон приведен в работе [16].

В заключение отметим, что полученные нами общие результаты не сводятся только к буферным слоям гра-

фена на карбиде кремния, а могут быть применены к любым другим подложкам, на которых сформирован буферный слой. Более того, полученные результаты легко обобщаются на три, четыре и т.д. типа связей слой–субстрат.

Работа выполнена в рамках программ президиума РАН „Квантовая физика конденсированных сред“ и „Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов“ и поддержана грантами РФФИ (проекты № 11-02-00662а и 12-02-00165а).

### Приложение

Функции Грина свободных графена и субстрата равны соответственно  $g_{kk'}^g(\omega) = (\omega - \varepsilon_{gk} + is)^{-1} \delta_{kk'}$  и  $g_{\kappa\kappa'}^s(\omega) = (\omega - \varepsilon_{s\kappa} + is)^{-1} \delta_{\kappa\kappa'}$  (см. обозначения в основном тексте статьи). Введем теперь матричный элемент взаимодействия между графеном и субстратом  $V_{k\kappa}$ . Исходя из уравнения Дайсона получим для функций Грина взаимодействующей системы  $G_{\alpha\beta}$ , где индексы  $\alpha$  и  $\beta$  проходят значения  $\mathbf{k}$  и  $\kappa$ , следующие выражения:

$$G_{kk'} = g_{kk'}^g + g_{kk}^g \sum_{\kappa} V_{k\kappa} G_{\kappa k'},$$

$$G_{\kappa\kappa} = g_{\kappa\kappa}^s \sum_{k'} V_{k\kappa} G_{k' \kappa}. \quad (\text{П.1})$$

В первом приближении (с учетом только диагональных членов в сумме правой части второго уравнения (П.1), полагая  $G_{\kappa\kappa}^{(1)} = g_{\kappa\kappa}^s V_{k\kappa} G_{kk}^{(1)}$ , получим функцию Грина эпитаксиального графена в виде

$$G_{kk}^{(1)} = \left( \omega - \varepsilon_{gk} - \sum_{\kappa} \frac{V_{k\kappa} V_{\kappa k}}{\omega - \varepsilon_{s\kappa} + is} \right)^{-1}. \quad (\text{П.2})$$

Полагая  $V_{k\kappa} V_{\kappa k} = V^2$ , получим выражение (6).

Во втором приближении (с учетом недиагональных членов) имеем  $G_{\kappa\kappa}^{(2)} = g_{\kappa\kappa}^s V_{k\kappa} G_{kk}^{(2)} + g_{\kappa\kappa}^s \sum_{k' \neq k} V_{\kappa k'} g_{k' k}^g V_{k' \kappa} G_{\kappa k}^{(2)}$ , откуда

$$G_{kk}^{(2)} = \left( \omega - \varepsilon_{gk} - \sum_{\kappa} \frac{V_{k\kappa} V_{\kappa k}}{\omega - \varepsilon_{s\kappa} - \sum_{k' \neq k} \frac{V_{k\kappa'} V_{\kappa' k}}{\omega - \varepsilon_{gk'} + is}} \right)^{-1} \quad (\text{П.3})$$

и  $G^{g(2)}(\omega) = \sum_k G_{kk}^{(2)}$ . Таким образом, выражения (6)

и (П.2) справедливы в „диагональном“ приближении, т.е. без учета недиагональных членов.

Приведем явные выражения для безразмерных функций  $\gamma_{1,2}(x)$  и  $\lambda_{1,2}(x)$ :

$$\gamma_{1,2}(x) = c_{1,2} \begin{cases} \sqrt{-x-1}, & x < -1, \\ \sqrt{x-1}, & x > 1, \\ 0, & -1 < x < 1, \end{cases} \quad (\text{П.4})$$

$$\lambda_{1,2}(x) = c_{1,2} \begin{cases} \sqrt{-x+1}, & x < -1, \\ \sqrt{-x+1} - \sqrt{x+1}, & -1 < x < 1, \\ -\sqrt{x+1}, & x > 1, \end{cases} \quad (\text{П.5})$$

где  $c_{1,2} = \pi AV_{1,2}^2 \sqrt{2/E_g}$ .

## Список литературы

- [1] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Rev. Mod. Phys.*, **81** (1), 109 (2008).
- [2] D.R. Cooper, B. D'Anjou, N. Ghattamaneni, B. Harack, M. Hilke, A. Horth, N. Majlis, M. Massicotte, L. Vandsburger, E. Whiteway, V. Yu. arXiv: 1110.6557.
- [3] Y.H. Wu, T. Yu, Z.X. Shen. *J. Appl. Phys.*, **108**, 071 301 (2010).
- [4] J. Haas, W.A. de Heer, E.H. Conrad. *J. Phys.: Condens. Matter*, **20**, 323 202 (2008).
- [5] Th. Seyller, A. Botzwick, K.V. Emtsev, K. Horn, L. Ley, J.L. McChestney, T. Ohta, J.D. Riley, E. Rotenberg, F. Speck. *Phys. Status Solidi B*, **245** (7), 1436 (2008).
- [6] C. Mathieu, N. Barret, J. Rault, Y.Y. Mi, B. Zhang, W.A. de Heer, C. Berger, F.H. Conrad, O. Renault. arXiv: 1104.1359.
- [7] N. Srivastava, G. He, Luxmi, R.M. Feenstra. *Phys. Rev. B*, **85**, 041 404 (2012).
- [8] S. Goler, C. Coletti, V. Pellegrini, K.V. Emtsev, U. Starke, F. Beltram, S. Heun. arXiv: 1111.4918.
- [9] T. Jayasekera, S. Xu, K.W. Kim, M.B. Nardelli. *Phys. Rev. B*, **84**, 035 442 (2011).
- [10] I. Deretzis, A. La Magna. arXiv: 1103.0839.
- [11] С.Ю. Давыдов. *Письма ЖТФ*, **37** (10), 64 (2011).
- [12] С.Ю. Давыдов. *ФТП*, **47** (1), 97 (2012).
- [13] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **54** (6), 1619 (2012).
- [14] С.Ю. Давыдов. *Письма ЖТФ*, **39** (2), 7 (2013).
- [15] F.D.M. Haldane, P.W. Anderson. *Phys. Rev. B*, **13** (6), 2553 (1976).
- [16] С.Ю. Давыдов. *ЖТФ* (в печати).
- [17] A. Mattausch, O. Pankratov. *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 076 802 (2007).
- [18] S. Kim, J. Ihm, H.J. Choi, Y.-W. Son. *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 176 802 (2008).
- [19] C. Riedl, C. Coletti, T. Iwasaki, A.A. Zakharov, U. Starke. *Phys. Rev. Lett.*, **103**, 246 804 (2009).
- [20] J. Soltys, J. Piechota, M. Lopuszynski, S. Krukowski. arXiv: 1002.4717.
- [21] O. Pankratov, S. Hensel, M. Bockstedte. arXiv: 1009.2185.
- [22] B. Lee, S. Han, Y.-S. Kim. *Phys. Rev. B*, **81**, 075 432 (2010).
- [23] B. Huang, H.J. Xiang, S.-H. Wei. *Phys. Rev. B*, **83**, 161 405(R) (2011).
- [24] F. Speck, J. Jobst, F. From, M. Ostler, D. Waldmann, M. Hundhausen, H.B. Weber, Th. Seyller. arXiv: 1103.3997.
- [25] I. Deretzis, A. La Magna. arXiv: 1103.0839.
- [26] J. Rohrer, E. Ziambaras, P. Hyldgaard. arXiv: 1102.2111.
- [27] C.-H. Hsu, W.-H. Lin, V. Ozolins, F.-C. Chuang. *Appl. Phys. Lett.*, **100**, 063 115 (2012).
- [28] P.W. Anderson. *Phys. Rev.*, **124** (1), 41 (1961).
- [29] Ч. Киттель. *Квантовая теория твердых тел* (М., Наука, 1967).
- [30] П.С. Киреев. *Физика полупроводников* (М., Вышш. шк., 1969).
- [31] C. Persson, U. Lindefelt. *Mater. Sci. Forum*, **264-268**, 275 (1998).
- [32] N.T. Son, W.M. Chen, O. Kordina, A.O. Konstantinov, B. Monemar, E. Janzen, D.M. Hafman, D. Volm, M. Dreckslor, R.K. Mever. *Appl. Phys. Lett.*, **66** (9), 1074 (1995).

Редактор Т.А. Полянская

## Energy gaps in the density of states for graphene buffer layer on silicon carbide: effect of layer-substrate coupling inhomogeneity

S.Yu. Davydov

Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia  
St.-Petersburg Electrotechnical University „LETI“,  
197376 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Within the scope of diagonal approach Green's function and density of states for epitaxial graphene formed on the surface of semiconductor are obtained. Graphene buffer layer on silicon carbide is considered in detail. Two states of weak and strong coupling between the buffer layer and substrate are supposed. It is shown that if the energy gap in the buffer layer density of states exists, its presence and width are defined by the weak coupling state.