

12,13

## К теории электронных состояний системы эпитаксиальный графен — размерно-квантованная пленка

© 3.3. Алисултанов<sup>1</sup>, Р.П. Мейланов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup> Институт проблем геотермии ДагНЦ РАН, Махачкала, Россия

E-mail: zaur0102@gmail.com, lanten50@mail.ru

(Поступила в Редакцию 28 ноября 2011 г.  
В окончательной редакции 8 декабря 2011 г.)

Рассматривается задача об эпитаксиальном графене, сформированном на тонкой металлической пленке при наличии внешнего магнитного поля. Показано, что задача может быть решена с помощью техники функций Грина в формализме Каданова–Бейма. Получены аналитические выражения для переходящего заряда как функции магнитного поля и толщины пленки.

1. Повышенный интерес к изучению графена вызван двумя обстоятельствами. Во-первых, графен благодаря своим уникальным свойствам находит широкое применение в нанoeлектронике [1–3]. Во-вторых, графен представляет собой идеальную систему для развития и проверки теоретических моделей, так как он дает возможность использовать безмассовые фермионы, не имеющие аналогов среди элементарных частиц. Последнее обстоятельство позволяет наблюдать в графене квантово-электродинамические эффекты, в частности клейновское туннелирование [4,5], что обычно сопряжено с созданием больших полей.

Одним из актуальных направлений физики графена является исследование электронных состояний графена, сформированного на поверхности металлов и полупроводников (см., например, [6–12]). Интерес к изучению свойств эпитаксиального графена, находящегося на поверхности металла, обусловлен тем, что при создании приборных структур на основе графена, а также экспериментальном изучении свойств самого графена необходимо иметь металлические контакты. Кроме того, каталитический рост графена на поверхности переходных металлов является одним из методов получения графена. Большинство теоретических расчетов в этом направлении делаются численными методами в рамках формализма функционала плотности. Наряду с этим для исследования системы графен–другая электронная система, где в качестве другой электронной системы могут выступать адатом, металлическая или полупроводниковая подложка, можно применить подход, основанный на модельных гамильтонианах типа Андерсона–Ньюнса [13,14], Халдейна–Андерсона [15]. Такой подход позволяет получать аналитические выражения, что полезно для применения. В работах [10–12] в рамках этих моделей были рассмотрены электронные состояния эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металла и полупроводника, и исследован зарядовый обмен между графеном и подложкой. В этих

работах было показано, что в рамках указанных моделей удается получить вполне адекватные результаты.

Особый интерес представляет исследование электронных состояний графена, сформированного на поверхности низкоразмерных систем. Это связано с возможностью варьирования свойств низкоразмерных структур и создания на их основе твердотельных структур с управляемыми параметрами [16–20], что в свою очередь интересно с точки зрения возможности создания управляемого воздействия на электронные состояния графена. Следует отметить, однако, что исследование системы графен–низкоразмерная структура по сравнению со случаем системы графен–макроскопическая структура имеет иные аспекты. Дело в том, что графен и низкоразмерная подложка находятся по типу структуры в равных условиях (низкоразмерная структура на низкоразмерной структуре). Следовательно, существенно не только влияние подложки на электронные состояния графена, но и влияние графена на электронные состояния подложки.

В настоящей работе в рамках модели Андерсона–Ньюнса рассматриваются электронные состояния системы эпитаксиальный графен–металлическая пленка при наличии магнитного поля. В духе теории линейного отклика рассматривается влияние невозмущенной подложки на эпитаксиальный графен. В Приложении с тех же позиций обсуждается влияние графена на электронные состояния пленки. Самосогласованное решение этой проблемы, когда учитывается как влияние графена на подложку, так и влияние подложки на графен, достаточно затруднено.

2. Лист графена, находящегося на поверхности пленки, можно представить как хемосорбированные атомы углерода на этой поверхности, выстроенные в структуру графена [10–12]. В связи с этим приведем общие выражения, получаемые в рамках техники функции Грина в формализме Каданова–Бейма применительно к хемосорбции одиночного атома на поверхности пленки [16,21]. Исход-

ные уравнения имеют вид

$$[\omega - \varepsilon_\lambda]g_{\lambda,\lambda'}^<(\omega) - \sum_{\lambda''} \{ \sigma_{\lambda,\lambda''}^<(\omega)g_{\lambda'',\lambda'}^A(\omega) + \sigma_{\lambda,\lambda''}^R(\omega)g_{\lambda'',\lambda'}^<(\omega) \} = 0,$$

$$[\omega - \varepsilon_\lambda]g_{\lambda,\lambda'}^{R,A}(\omega) - \sum_{\lambda''} \{ \sigma_{\lambda,\lambda''}^{R,A}(\omega)g_{\lambda'',\lambda'}^{R,A}(\omega) \} = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (1)$$

Здесь  $\lambda$  — совокупность квантовых чисел, описывающих движение электронов адатома,  $\varepsilon_\lambda$  — энергия электронов,  $g^<, g^{R,A}$  — корреляционная функция, запаздывающая и опережающая функции Грина электрона адатома,  $\sigma^{R,A}$  — соответствующие массовые операторы,  $\sigma^<$  — обобщенный интеграл столкновений. Массовый оператор  $\sigma^{R,A}$  состоит из двух частей:  $\sigma^{R,A} = \sigma_0^{R,A} + \sigma_{\text{int}}^{R,A}$ , где  $\sigma_0$  — массовый оператор изолированного адатома,  $\sigma_{\text{int}}$  — вклад в массовый оператор адатома, обусловленный взаимодействием с подложкой. Этот вклад имеет вид

$$\sigma_{\text{int},\lambda,\lambda'}^{<(R,A)}(\omega) = \sum_{\substack{ik \\ i'k'}} V_{\lambda,ik}(\omega)G_{ik,i'k'}^{<(R,A)}(\omega)V_{i'k',\lambda'}(\omega), \quad (2)$$

где  $G$  — функция Грина электрона подложки;  $i, k$  — совокупность квантовых чисел, описывающих движение электрона в подложке,  $V$  — потенциал гибридизации.

Система уравнений (1), (2) совместно с уравнениями движения для функций Грина электронов подложки описывает общий случай, когда учтены все возможные взаимодействия адатомов с подложкой и между собой. Случай графена интересен тем, что взаимодействие между его атомами приводит к линейному (вблизи точки Дирака) энергетическому спектру электронов. Следовательно, в дальнейших выражениях мы опускаем часть массового оператора для изолированного адатома, считая  $\sigma_0$  учтенным при определении энергетического спектра графена в отсутствие взаимодействия с подложкой. Кроме того, будем считать, что адатом имеет один энергетический уровень. В этом случае выражение для корреляционной функции адатома, согласно (1), принимает вид

$$g^<(\omega) = g^R(\omega)\sigma_{\text{int}}^<(\omega)g^A(\omega). \quad (3)$$

Полагая, что потенциал гибридизации — постоянная величина, можно показать, что для  $\sigma_{\text{int}}^<(\omega)$  имеет место выражение

$$\sigma_{\text{int}}^<(\omega) = |V|^2 \sum_{ik} G_{ik}^<(\omega). \quad (4)$$

Для корреляционной функции электрона подложки имеем

$$G_{ik}^<(\omega) = f(\omega)A_{ik}(\omega), \quad (5)$$

$f(\omega)$  — функция распределения Ферми–Дирака,  $A_{ik}(\omega)$  — спектральная функция подложки,

$$A_{ik}(\omega) = \frac{\Gamma_{ik}(\omega)}{(\omega - \varepsilon_{ik}(\omega) - \text{Re}\Sigma_{ik}(\omega))^2 + \Gamma_{ik}^2(\omega)}.$$

Здесь  $\varepsilon_{ik}$  — энергия электронов подложки,  $\Gamma$  — затухание одночастичных состояний в подложке,  $\text{Re}\Sigma$  — перенормировка одночастичных состояний за счет взаимодействия (кулоновского и кристаллического потенциалов). Определяя самосогласованную энергию электронов подложки согласно соотношению

$$E_{ik} = \varepsilon_{ik}(\omega = E_{ik}) + \text{Re}\Sigma_{ik}(\omega = E_{ik}),$$

получим выражение для спектральной функции

$$A_{ik}(\omega) = z_{ik} \frac{\Gamma_{ik}(\omega)}{(\omega - E_{ik})^2 + z_{ik}^2 \Gamma_{ik}^2(\omega)}, \quad (6)$$

где

$$z_{ik}^{-1} = 1 - \frac{\partial}{\partial \omega} (\varepsilon_{ik}(\omega) + \text{Re}\Sigma_{ik}(\omega))_{\omega=E_{ik}}$$

— константа перенормировки. Используя (1)–(6), окончательно можно получить следующее выражение для корреляционной функции адатома:

$$g^<(\omega) = f(\omega)a(\omega), \quad (7)$$

где спектральная функция адатома имеет вид

$$a(\omega) = \frac{|V|^2 \sum_{ik} A_{ik}(\omega)}{[\omega - \varepsilon_a(\omega) - \Lambda_a(\omega)]^2 + |V|^4 \left( \sum_{ik} A_{ik}(\omega) \right)^2}. \quad (8)$$

Здесь

$$\Lambda_a(\omega) = |V|^2 \sum_{ik} \frac{\omega - \varepsilon_{ik}(\omega) - \text{Re}\Sigma_{ik}(\omega)}{(\omega - \varepsilon_{ik}(\omega) - \text{Re}\Sigma_{ik}(\omega))^2 + \Gamma_{ik}^2(\omega)}.$$

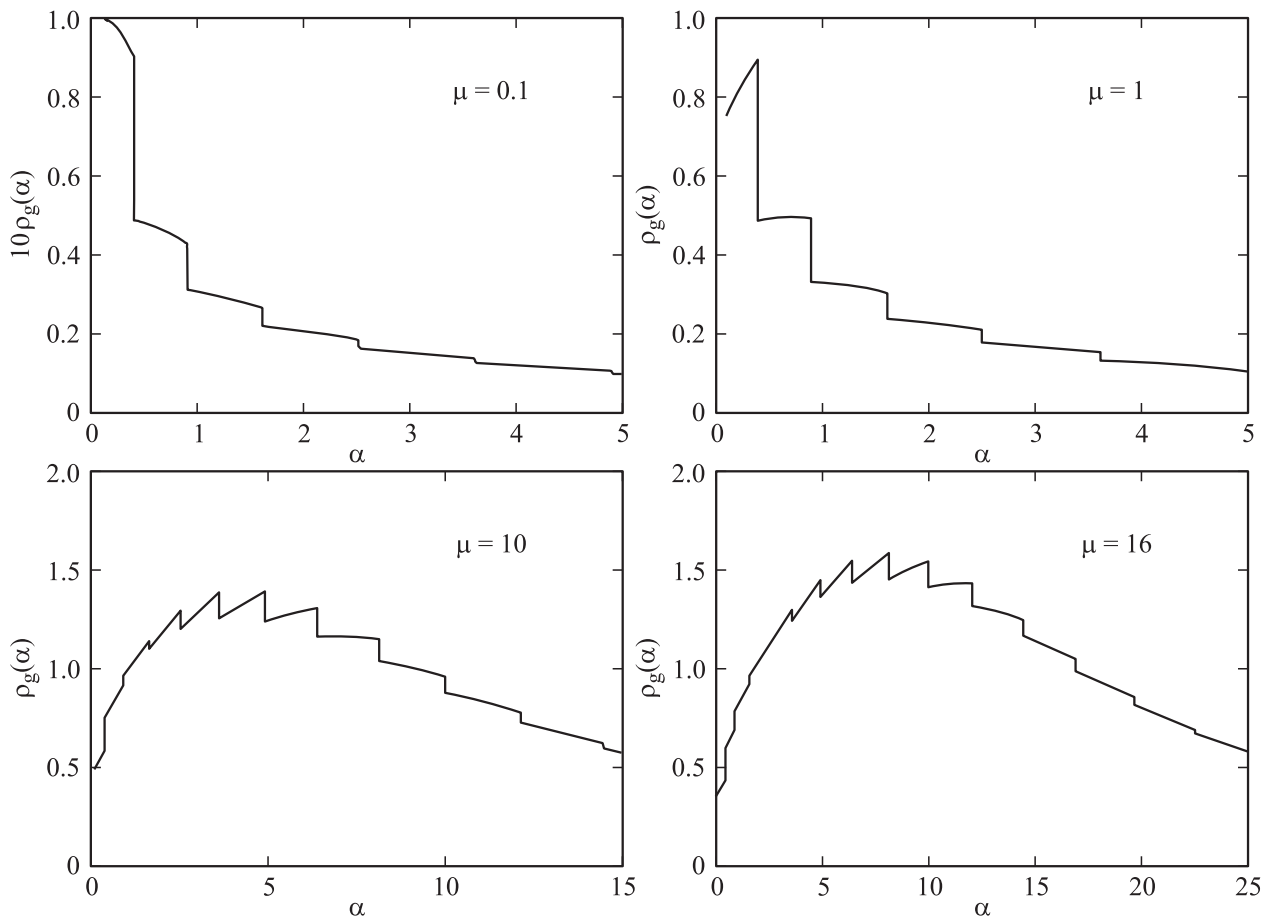
При анализе выражения для энергии адатома вводится самосогласованная энергия согласно определению  $E_a = (\varepsilon_a(\omega) + \Lambda_a(\omega))_{\omega=E_a}$ , которая в свою очередь перенормируется обычным образом:  $E_a = \varepsilon_a + Un$ , где  $U$  — внутриатомное кулоновское отталкивание,  $n$  — возмущение электронной плотности атома при взаимодействии с подложкой,  $\varepsilon_a$  — квазиуровень адатома. Возмущение электронной плотности адатома при взаимодействии с подложкой дается выражением  $n = \int_{-\infty}^{\infty} g^<(\omega)d\omega$ .

В настоящей работе, однако, мы пренебрегаем внутриатомным кулоновским взаимодействием.

Переход от одиночного адатома к эпитаксиальному графену можно осуществить, следуя схеме, развитой в работе [11]. Она заключается в том, что графен представляется в виде адатомов углерода, выстроенных в структуру графена, а далее учитывается взаимодействие между этими адатомами. В работах [1,11] было показано, что такая система обладает следующим законом дисперсии:

$$\varepsilon_{\pm}(k_x, k_y) = \varepsilon_c \pm tf(k_x, k_y),$$

где знак плюс относится к верхней зоне  $\pi^*(\Omega = \omega - \varepsilon > 0)$ , а минус — к нижней зоне



**Рис. 1.** Приведенная плотность состояний для эпитаксиального графена при различных значениях  $\mu$ . При построении кривых условно принято, что  $n_F = 20$ .

$\pi(\Omega = \omega - \varepsilon < 0)$  [9],  $t$  — матричный элемент перехода между соседними узлами решетки адатомов,  $k_x, k_y$  — квазиволновые векторы, описывающие движение электрона в плоскости графена,  $\varepsilon_c$  — положение центра квазиуровня изолированного адатома углерода. Функция  $f(k_x, k_y)$  имеет вид

$$f^2(k_x, k_y) = 3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_x d) + 4 \cos(\sqrt{3}/2 k_x d) \cos(3k_y d/2),$$

$d$  — расстояние между соседними атомами решетки. Нас, однако, будет интересовать случай малых волновых чисел, когда закон дисперсии можно представить в виде

$$\varepsilon = \varepsilon_c \pm \frac{3}{2} td|q|, \tag{9}$$

где  $q = K - k$ ,  $K$  — волновой вектор точки Дирака.

Дальнейшее рассмотрение зависит от конкретного выражения спектра электронов подложки.

3. Рассмотрим сначала случай отсутствия магнитного поля. В этом случае энергия электронов в направлении  $OZ$ , перпендикулярном плоскости пленки,

квантуется:

$$E = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \varepsilon_i.$$

Для спектральной функции подложки при этом имеем

$$A(\omega) = z_\eta \frac{\Gamma(\omega)}{\left(\omega - \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) - \varepsilon_i\right)^2 + z_{p_x, p_y}^2 \Gamma^2(\omega)}.$$

Плотность состояний подложки

$$\rho(\omega) = z_\eta \frac{m}{\pi L \hbar^2} \sum_{i=1}^{n_F} \left\{ \arctg \left( \frac{\omega - \varepsilon_i}{z_\eta \Gamma} \right) + \frac{\pi}{2} \right\},$$

где  $L$  — толщина пленки,  $n_F$  — число состояний под уровнем Ферми. Для получения аналитических выражений воспользуемся приближением, в котором  $\Gamma \rightarrow 0$ . Тогда для плотности состояний пленки имеем

$$\rho(\omega) = z_\eta \frac{m}{\pi L \hbar^2} \sum_i \Theta(\omega - \varepsilon_i). \tag{10}$$

Для плотности состояний графена с помощью (8) и (9) получим

$$\rho_g(\omega) = \frac{2\Gamma_c}{3tdq_B} \ln \frac{\left(\frac{\omega_c}{\Gamma_c} \mp \frac{3tdq_B}{2\Gamma_c}\right)^2 + 1}{\frac{\omega_c^2}{\Gamma_c^2} + 1} + \frac{4\Gamma_c\omega_c}{3tdq_B} \times \left[ \arctg \frac{\omega_c}{\Gamma_c} - \arctg \left(\frac{\omega_c}{\Gamma_c} \mp \frac{3tdq_B}{2\Gamma_c}\right) \right], \quad (11)$$

где  $\Gamma_c(\omega) = \pi|V|^2\rho(\omega) = \pi|V|^2z_\eta \frac{m}{\pi L\hbar^2} \sum_i \Theta(\omega - \varepsilon_i) = \Gamma_0 \sum_i \Theta(\omega - \varepsilon_i)$ ,  $\omega_c = \omega - \varepsilon_c$ ,  $q_B$  — импульс обрезания [8], индекс  $g$  указывает на то, что данное выражение относится к графену.

В безразмерных переменных

$$\rho_g(\alpha) = \frac{M(\alpha)}{\mu} \ln \frac{\left(\frac{\alpha \mp \mu}{M(\alpha)}\right)^2 + 1}{\left(\frac{\alpha}{M(\alpha)}\right)^2 + 1} + \frac{2\alpha}{\mu} \times \left[ \arctg \frac{\alpha}{M(\alpha)} - \arctg \left(\frac{\alpha \mp \mu}{M(\alpha)}\right) \right], \quad (12)$$

где  $\alpha = \omega_c/\Gamma_0$ ,  $\mu = \xi/\Gamma_0$ ,  $\xi = 3tdq_B/2$ ,  $M(\alpha) = \sum_i \Theta(\Gamma_0\alpha + \varepsilon_c - \varepsilon_i)$ ,  $\mu$  — отношение энергии взаимодействия атомов графена друг с другом к энергии взаимодействия графена с подложкой.

Для построения кривых плотности состояний воспользуемся следующей аппроксимацией. Если рассматривать пленку в направлении оси  $OZ$  как прямоугольную потенциальную яму, то энергию уровней в пленке с достаточной степенью точности можно выразить через толщину пленки с помощью соотношения  $\varepsilon_i = \frac{\hbar^2 i^2}{mL^2} = \varepsilon_0 i^2$ . Если взять пленку толщиной  $L \approx 10^{-8}$  м, то для энергии основного уровня  $\varepsilon_0$  получим значение порядка 0.01 eV. Далее положим  $\varepsilon_c = 0$ . Константу взаимодействия  $\Gamma_0$  возьмем равной 0.1 eV. На рис. 1 изображены зависимости плотности состояний от энергетической переменной при различных значениях величины  $\mu$ .

Кривые, изображенные на рис. 1, похожи на кривые плотности состояний, приведенные в работе [11]. Отличие заключается в том, что на каждый дискретный уровень пленки графен реагирует отдельно.

Интегрируя (10) по энергетической переменной от 0 до  $\varepsilon_F$ , получим величину переходящего заряда

$$n_\pm = |V|^2 \int_0^{\varepsilon_F} d\omega \rho_g(\omega) \times \int_0^{q_B} \frac{qdq}{[\omega - \varepsilon_c \mp \frac{3}{2}tdq]^2 + |V|^4(\rho(\omega))^2}, \quad (13)$$

где знак плюс соответствует переходу заряда из подложки в графен, а минус — переходу заряда из графена в

подложку. Проводя сначала интегрирование по энергетической переменной, получим

$$n_\pm = \sum_{i=1}^{n_F=1} \int_0^{q_B} \left[ \arctg \left( \frac{\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_c \mp \frac{3}{2}tdq}{i\rho_\eta} \right) - \arctg \left( \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_c \pm \frac{3}{2}tdq}{i\rho_\eta} \right) \right] dq, \quad (14)$$

где  $\rho_\eta = z_\eta \frac{m}{\pi L\hbar^2} |V|^2$ . Интегрирование по импульсу дает следующее выражение для переходящего заряда:

$$n_\pm = \sum_{i=1}^{n_F=1} \{ A_{\varepsilon(i+1)} - A_{\varepsilon(i)} + B_{\varepsilon(i+1)} - B_{\varepsilon(i)} \mp (C_{\varepsilon(i+1)} - C_{\varepsilon(i)}) \}, \quad (15)$$

где

$$A_{\varepsilon(i)} = \frac{1}{2} q_B^2 \arctg \left( (\varepsilon_i - \varepsilon_c)/i\rho_\eta \mp \mu \right),$$

$$B_{\varepsilon(i)} = \frac{i^2 \Gamma_0^2}{2} \left[ 1 \pm ((\varepsilon_i - \varepsilon_c)/i\rho_\eta)^2 \right] \times \left[ \arctg \left( (\varepsilon_i - \varepsilon_c)/i\rho_\eta \mp \mu \right) - \arctg \left( (\varepsilon_i - \varepsilon_c)/i\rho_\eta \right) \right],$$

$$C_{\varepsilon(i)} = \frac{i^2 \Gamma_0^2 (\varepsilon_i - \varepsilon_c)}{2i\rho_\eta} \ln \left[ \frac{((\varepsilon_i - \varepsilon_c)/i\rho_\eta \mp \mu)^2 + 1}{((\varepsilon_i - \varepsilon_c)/i\rho_\eta)^2 + 1} \right],$$

$\mu = \xi/i\rho_\eta$ ,  $\xi = 3tdq_B/2$ . При аппроксимации пленочного потенциала прямоугольной ямой с бесконечно высокими стенками для энергии Ферми и толщины пленки, при которой заполняется  $(i + 1)$ -энергетический уровень, имеют место следующие выражения [22]:

$$\varepsilon_F = \frac{\pi \hbar^2 N L}{m n_F} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar}{L} \right)^2 (n_F + 1)(2n_F + 1),$$

$$L_s^3 = \frac{\pi}{12N} s(s + 1)(4s + 5), \quad (16)$$

где  $N$  — концентрация электронов в пленке. На рис. 2 приведены результаты численного расчета зависимости

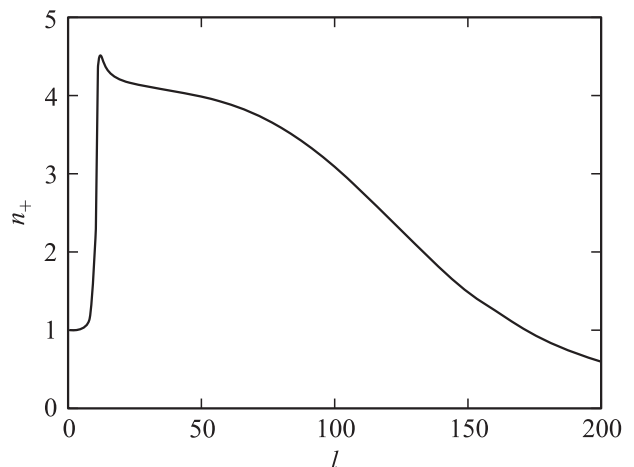


Рис. 2. Зависимость величины переходящего заряда от приведенной толщины пленки. Кривая построена для  $\mu = 1$ .

переходящего заряда от приведенной толщины пленки  $l = L/10^{-10}$  м. Условно положено  $q_B^2/2 = 1$ .

Как видно из рис. 2, переходящий заряд достаточно большой и существенно зависит от толщины пленки. Интересно, что при некоторой толщине величина переходящего заряда максимальна. По-видимому, при этой толщине реализуется некоторое резонансное состояние между графеном и пленкой.

Как показывает численный расчет, при толщине 800 Å величина переходящего заряда составляет всего 0.055. Для больших толщин размерные эффекты перестают действовать. Вследствие этого величина переходящего заряда перестает зависеть от толщины пленки. Значение 0.055 хорошо согласуется с экспериментальными данными работы [23], в которой исследовалась адсорбция графена на Ru(0001), а переходящий с субстрата на графен заряд равен 0.06.

4. Рассмотрим систему эпитаксиальный графен–металлическая пленка во внешнем магнитном поле, которое направлено параллельно поверхности подложки. Ось  $OZ$  направим перпендикулярно поверхности подложки. Считаем, что величина магнитного поля такая, что магнитная длина  $l_B = (\hbar/eB)^{1/2}$  ( $e$  — заряд электрона,  $B$  — индукция магнитного поля) одного порядка с толщиной  $L$  пленки. Полагая, что пленочный потенциал аппроксимируется выражением  $V(z) = m\omega_0^2 z^2/2$ , можно точно решить уравнение Шредингера и получить выражение для энергии электрона

$$E_{p_x, p_y, p_z} = \frac{1}{2m} \left( p_x^2 + \frac{\omega_0^2}{\omega_1^2} p_y^2 \right) + \omega_1 \left( n + \frac{1}{2} \right),$$

где  $\omega_1 = \sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2}$ ,  $\omega_c = eB/m$  — циклотронная частота,  $n = 0, 1, 2, \dots$ .

Для плотности состояний подложки получим

$$\rho(\omega) = z_{\parallel} \frac{m}{\pi \hbar L} \frac{\omega_1}{\omega_0} \times \sum_{n=1}^{n_F} \left\{ \arctg \left( \frac{\omega - \omega_1(n + 1/2)}{z_{\parallel} \Gamma} \right) + \frac{\pi}{2} \right\}.$$

В приближении  $\Gamma \rightarrow 0$  имеем следующее выражение для плотности состояний подложки:

$$\rho(\omega) = z_{\parallel} \frac{m}{\hbar L} \frac{\omega_1}{\omega_0} \sum_{n=1}^{n_F} \Theta(\omega - \omega_1(n + 1/2)). \quad (17)$$

Интегрируя по энергетической переменной плотность состояний графена, получим следующее выражение для переходящего заряда:

$$n_{\pm} = \sum_{n=1}^{n_F-1} \int_0^{q_B} \left[ \arctg \left( \frac{\omega_1(n + 3/2) - \varepsilon_c \pm \frac{3}{2} tdq}{n\rho_{\parallel}} \right) - \arctg \left( \frac{\omega_1(n + 1/2) - \varepsilon_c \mp \frac{3}{2} tdq}{n\rho_{\parallel}} \right) \right] dq,$$

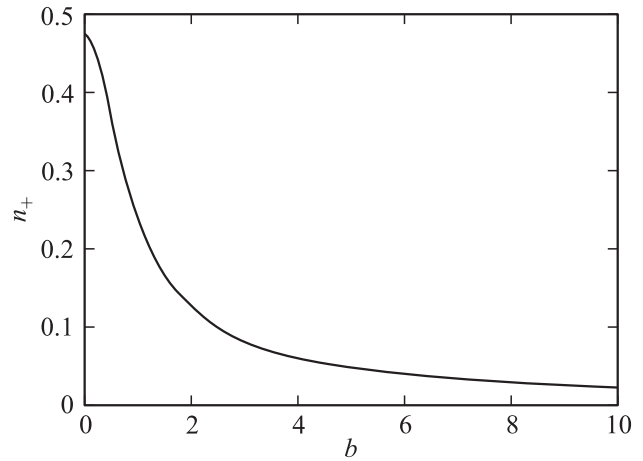


Рис. 3. Зависимость величины переходящего заряда от приведенной величины продольного магнитного поля  $b = B/L$ . Кривая построена для  $\mu = 10$ .

где  $\rho_{\parallel} = |V|^2 z_{\parallel} \frac{m}{\pi L \hbar} \frac{\omega_1}{\omega_0}$ . Интегрирование по импульсу дает

$$n_{\pm} = \sum_{n=1}^{n_F-1} \left\{ A_{\varepsilon(n+1)} - A_{\varepsilon(n)} + B_{\varepsilon(n+1)} - B_{\varepsilon(n)} \mp (C_{\varepsilon(n+1)} - C_{\varepsilon(n)}) \right\}, \quad (18)$$

где

$$A_{\varepsilon(n)} = \frac{1}{2} q_B^2 \arctg((\varepsilon_n - \varepsilon_c)/n\rho_{\parallel} \mp \mu),$$

$$B_{\varepsilon(n)} = \frac{n^2 \Gamma_0^2}{2} \left[ 1 \pm ((\varepsilon_n - \varepsilon_c)/i\rho_{\parallel})^2 \right] \times \left[ \arctg((\varepsilon_n - \varepsilon_c)/n\rho_{\parallel} \mp \mu) - \arctg((\varepsilon_n - \varepsilon_c)/n\rho_{\parallel}) \right],$$

$$C_{\varepsilon(n)} = \frac{n^2 \Gamma_0^2 (\varepsilon_n - \varepsilon_c)}{2n\rho_{\parallel}} \ln \left[ \frac{((\varepsilon_n - \varepsilon_c)/n\rho_{\parallel} \mp \mu)^2 + 1}{((\varepsilon_n - \varepsilon_c)/n\rho_{\parallel})^2 + 1} \right],$$

$$\varepsilon_n = \omega_1(n + 1/2), \quad \mu = \xi/n\rho_{\parallel}, \quad \xi = 3tdq_B/2.$$

Полученное выражение для переходящего заряда содержит продольное магнитное поле. С помощью последнего можно регулировать величину переходящего заряда. На рис. 3 изображена зависимость переходящего заряда от приведенного магнитного поля. При построении кривой были использованы результаты работы [24], где экспериментально измерялось поглощение инфракрасного излучения системой двумерных квантовых точек. В этой работе, для теоретических оценок измеряемых величин, латеральный потенциал для квантовых точек был аппроксимирован выражением  $V(r) = m\omega_0^2 r^2/2$ . Такая параболическая аппроксимация была подтверждена во многих экспериментальных и теоретических работах (см. например [25]) и используется в настоящей работе. В работе [24] были использованы следующие значения параметров:  $\hbar\omega_0 = 0.01$  eV,  $m \approx 0.01m_e$ . Мы также используем эти значения.

Из рис. 3 видно, что переходящий заряд существенно зависит от величины продольного магнитного поля. При больших значениях магнитного поля переход заряда практически прекращается. Это можно объяснить тем, что при больших магнитных полях электроны все больше оказываются локализованными внутри пленки.

5. Особый интерес представляет рассмотрение системы графен–размерно-квантованная пленка в поперечном магнитном поле, так как в этом случае от магнитного поля начинают зависеть как спектр подложки, так и спектр графена. Энергия электронов подложки оказывается полностью квантованной, т. е.

$$E_{i,n} = \varepsilon_i + \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right).$$

Плотность состояний подложки

$$\rho(\omega) = \sum_{i,n} z_{\perp} \frac{\Gamma}{\left( \omega - \varepsilon_i - \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \right)^2 + z_{\perp}^2 \Gamma^2}.$$

Для того чтобы найти плотность состояний графена, заметим, что спектр его электронов также полностью квантован

$$E_g = \varepsilon_c \pm \hbar v_F \sqrt{2neB/(\hbar c)}. \quad (19)$$

С учетом этого получаем

$$\rho_g(\omega) = |V|^2 z_{\perp} \times \sum_{n,i} \frac{\delta \left( \omega - \varepsilon_i - \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \right)}{\left[ \omega - \varepsilon_c \pm \hbar v_F \sqrt{2neB/(\hbar c)} \right]^2 + |V|^4 \rho_{\perp}^2 [K(\omega)]^2}, \quad (20)$$

где

$$K(\omega) = \sum_{n',i'} \frac{\Gamma_{n',i}}{\left( \omega - \varepsilon_i - \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \right)^2 + \Gamma_{n',i}^2}.$$

Интегрируя это выражение по энергетической переменной, получим выражение для переходящего заряда

$$n_{\pm} = \sum_{n,i}^{n_F} \left[ \left( \varepsilon_i + \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) - \varepsilon_c \mp \hbar v_F \sqrt{2neB/(\hbar c)} \right)^2 + |V|^4 \frac{\rho_{\perp}^2}{\Gamma_{n,i}^2} \right]^{-1}, \quad (21)$$

содержащее поперечное магнитное поле. Для получения последнего выражения пренебрегли величинами  $\sim (\Gamma/\omega_c)^2 \ll 1$ . Как показывают расчеты, качественная зависимость переходящего заряда от величины поперечного магнитного поля остается такой же, как и в случае продольного магнитного поля.

Таким образом, величина переходящего заряда в системе графен–размерно-квантованная пленка существенно зависит от толщины пленки и приложенного магнитного поля. Зависимость перехода заряда от магнитного

поля качественно совпадает с результатом работы [16], где этот вопрос исследовался для отдельного адатома. Зависимость же переходящего заряда от толщины пленки в отличие от работы [16], уменьшается с увеличением толщины. По-видимому, это связано с особенностями электронных свойств графена.

Авторы выражают благодарность С.Ю. Давыдову за интерес к работе и ценные замечания.

## Приложение

Рассмотрим возможность учета влияния графена на электронные состояния размерно-квантованной пленки. Спектральную функцию пленки с учетом взаимодействия с подложкой можно записать в виде

$$A(p, \omega) = \frac{\Gamma + \pi |V|^2 \rho_{ig}(\omega)}{\left( \omega - \frac{p^2}{2m} - \varepsilon_i \right)^2 + (\Gamma + \pi |V|^2 \rho_{ig}(\omega))^2}. \quad (П1)$$

Легко показать, что плотность состояний изолированно графена имеет вид

$$\rho_{ig}(\omega) = \frac{4\omega}{3tdq_B} \Theta \left( \frac{3}{2} tdq_B - \omega \right). \quad (П2)$$

Тогда для плотности состояний пленки можно записать

$$\rho(\omega) = \int A(p, \omega) dp = \begin{cases} \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^{n_F} \left\{ \arctg \left( \frac{\omega - \varepsilon_i}{\Gamma + 4\omega \pi |V|^2 / 3tdq_B} \right) + \frac{\pi}{2} \right\} & \text{при } \omega < \frac{3}{2} tdq_B, \\ \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^{n_F} \left\{ \arctg \left( \frac{\omega - \varepsilon_i}{\Gamma} \right) + \frac{\pi}{2} \right\} & \text{при } \frac{3}{2} tdq_B < \omega. \end{cases} \quad (П3)$$

Таким образом, влияние графена существенно лишь в области  $\omega < \frac{3}{2} tdq_B$ . С учетом этого плотность состояний пленки можно записать в виде

$$\rho(\omega) = \Theta \left( \frac{3}{2} tdq_B - \omega \right) \frac{m}{\pi L \hbar^2} \times \sum_{i=1}^{n_F} \left\{ \arctg \left( \frac{\omega - \varepsilon_i}{\Gamma + 4\omega \pi |V|^2 / 3tdq_B} \right) + \frac{\pi}{2} \right\} + \Theta \left( \omega - \frac{3}{2} tdq_B \right) \frac{m}{\pi L \hbar^2} \sum_{i=1}^{n_F} \left\{ \arctg \left( \frac{\omega - \varepsilon_i}{\Gamma} \right) + \frac{\pi}{2} \right\}. \quad (П4)$$

В приближении  $\Gamma \rightarrow 0$  получаем

$$\rho(\omega) = \Theta \left( \frac{3}{2} tdq_B - \omega \right) \frac{m}{\pi L \hbar^2} \times \sum_{i=1}^{n_F} \left\{ \arctg \left( \frac{\omega - \varepsilon_i}{2\gamma\omega} \right) + \frac{\pi}{2} \right\} + \Theta \left( \omega - \frac{3}{2} tdq_B \right) \frac{m}{\pi L \hbar^2} \sum_{i=1}^{n_F} \Theta(\omega - \varepsilon_i), \quad (П5)$$

где  $\gamma = 2\pi |V|^2 / 3tdq_B$ . Заметим, что величина  $\gamma\omega$  в первом слагаемом выражения (П5) всегда меньше единицы.

Если рассматривать пленку в направлении оси  $OZ$  как прямоугольную потенциальную яму, то энергию уровней в пленке с достаточной степенью точности можно выразить через толщину пленки с помощью соотношения  $\varepsilon_i = \frac{\hbar^2 i^2}{mL^2} = \varepsilon_0 i^2$ . Пусть энергия обрезания  $\frac{3}{2}tdq_B$  порядка энергии первого уровня пленки  $\varepsilon_0$ . Тогда влияние графена существенно лишь в области  $\omega < \varepsilon_0$ , т.е. графен занимает лишь первый уровень пленки. Получим значение толщины пленки, при котором занимает первый уровень,

$$\frac{3}{2}tdq_B = \frac{\hbar^2}{mL^2}.$$

Отсюда получаем

$$L = \sqrt{\frac{2\hbar^2}{3tdq_B m}}.$$

Взяв в качестве энергии обрезания значение  $0.1 \text{ eV}$ , получим толщину  $L = 10^{-8} \text{ м}$ . Это значит, что, когда толщина пленки меньше полученного значения, графен занимает лишь первый дискретный уровень.

Расчеты проведены для первого уровня. Однако нельзя утверждать, что при увеличении толщины увеличивается также и влияние графена на пленку. Дело в том, что при увеличении толщины увеличивается также и общее количество заполненных уровней, и здесь уже важно не заполнение графеном определенного количества уровней, а отношение общего количества заполненных уровней к числу уровней, занимаемых графеном. Можно сказать, что отношение количества уровней, занимаемых графеном, к общему числу заполненных уровней (т.е. уровню Ферми) есть параметр, определяющий влияние графена на пленку. Этот параметр зависит от толщины.

## Список литературы

- [1] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2008).
- [2] Ю.Е. Лозовик, С.П. Меркулова, А.А. Соколик. *УФН* **178**, 757 (2008).
- [3] M. Hongki, R. Bistritzer, Jung-Jung Su, A.H. Mac Donald. *arXiv:0802.3462v2* (2008).
- [4] M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Nature Phys.* **2**, 620 (2006).
- [5] C.W.-J. Beenakker. *arXiv:0710.3848*.
- [6] G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, V.M. Karpan, J. Van den Brink, P.J. Kelly. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 026 803 (2008).
- [7] P.A. Khomyakov, G. Giovannetti, P.C. Rusu, J. Van den Brink, P.J. Kelly. *Phys. Rev. B.* **79**, 195 425 (2009).
- [8] P.A. Khomyakov, A.A. Starikov, G. Brocks, P.J. Kelly. *arXiv:0911.2027*.
- [9] M. Vanin, J.J. Martensen, A.K. Kelkkanen, J.M. Garcia-Lastra, K.S. Thygesen, K.W. Jacobsen. *arXiv:0912.3078*.
- [10] С.Ю. Давыдов. *Письма в ЖТФ* **37**, 10, 64 (2011).
- [11] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **45**, 629 (2011).
- [12] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **45**, 1102 (2011).
- [13] P.W. Anderson. *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [14] D.M. Newns. *Phys. Rev.* **178**, 1123 (1969).
- [15] F.D.M. Haldane, P.W. Anderson. *Phys. Rev. B* **13**, 2553 (1976).
- [16] Р.П. Мейланов, Б.А. Абрамова, М.М. Гаджиалиев, В.В. Джабраилов. *ФТТ* **44**, 12 (2002).
- [17] Р.П. Мейланов, Б.А. Абрамова, Г.М. Мусаев, М.М. Гаджиалиев. *ФТТ* **46**, 1076 (2004).
- [18] Р.П. Мейланов, Б.А. Абрамова. *ФТТ* **50**, 2097 (2008).
- [19] Ю.Е. Лозовик, С.Ю. Волков. *ФТТ* **45**, 345 (2003).
- [20] Р.З. Витлина, А.В. Чаплик. *Письма в ЖЭТФ* **78**, 1147 (2003).
- [21] Л. Каданов, Г. Бейм. *Квантовая статистическая механика. Мир, М.* (1964). 256 с.
- [22] А.С. Кондратьев, А.Е. Кучма. *Электронная жидкость нормальных металлов. Изд-во ЛГУ, Л.* (1980). 200 с.
- [23] L. Kong, C. Bjekevig, S. Gaddam, M. Zhou, Y.H. Lee, G.H. Han, H.K. Jeong, N. Wu, Z. Zhang, J. Xian, P.A. Dowben, A. Kelber. *J. Phys. Chem. C. In press*.
- [24] Ch. Sikorski, U. Merkt. *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2164 (1989).
- [25] А.В. Чаплик. *Письма в ЖЭТФ* **50**, 38 (1989).