

О переходе заряда в системе адсорбированные молекулы–монослой графена–SiC-подложка

© С.Ю. Давыдов [†]

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

(Получена 7 октября 2010 г. Принята к печати 22 октября 2010 г.)

Переходы заряда в трехслойной структуре молекула (М)–однослойный графен (G)–SiC-подложка рассматриваются поэтапно. На первом этапе предлагается простая модель плотности состояний адсорбированного на карбиде кремния монослоя графена (система G–SiC), позволяющая вычислить соответствующие числа заполнения атомов графена. Показано, что монослой G накапливает отрицательный заряд. На втором этапе система G–SiC рассматривается как подложка, на которой адсорбируются молекулы с высоким значением сродства к электрону. Вычисляется заряд этих молекул в зависимости от их поверхностной концентрации. Показано, что при монослойном покрытии плотность отрицательного поверхностного заряда молекул в системе M–G–SiC значительно превосходит плотность поверхностного заряда, перешедшего с SiC-подложки на графен. Последнее свидетельствует о возможности нейтрализации избыточного заряда в графене путем адсорбции на нем соответствующих частиц.

1. Уникальные электронные свойства однослойного графена (G), в первую очередь высокая подвижность носителей при комнатной температуре и электронно-дырочная симметрия, делают этот материал весьма перспективным для нанoeлектроники [1]. Один из способов получения графена состоит в тепловом воздействии на карбид кремния (тепловая декомпозиция), в результате чего атомы кремния покидают поверхностные слои SiC, а оставшиеся атомы углерода выстраиваются в гексагоны, образуя эпитаксиальный графеновый слой (см. соответствующие ссылки и оценки в работе [2]). При этом, однако, монослой графена приобретает отрицательный заряд, в результате чего уровень Ферми ϵ_F смещается от своего начального положения в дираковой точке ϵ_D вверх, что нарушает электронно-дырочную симметрию [1,3]. Для того чтобы избежать такой ситуации, можно, например, разорвать ковалентные связи в системе G–SiC путем интеркалирования водорода в пространство между листом графена и SiC-подложкой [3–5]. Существует и другой путь: компенсировать избыточный заряд с помощью адсорбции акцепторных частиц на графене [6]. В качестве такой частицы удобно взять молекулу F4-TCNQ (tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane), или C₁₂N₄F₄ [6–8]. Эта молекула обладает очень высоким электронным сродством $A = 5.24$ эВ [6], что и определяет ее акцепторный характер. В данной работе все эти эффекты будут рассмотрены в рамках простых моделей, основанных на теории адсорбции Андерсона–Ньюнса [9,10].

2. Начнем с рассмотрения листа графена, находящегося на поверхности карбида кремния. Такой лист можно рассматривать как монослой атомов углерода, адсорбированных на поверхности SiC и выстроенных в структуру графена (система G–SiC). Рассмотрим структуру графена и выделим из нее 3 атома углерода (рис. 1). Координаты этих атомов есть: атом 1 — $a(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$,

атом 2 — $a(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$, атом 3 — $a(0, -1)$, где $a = 1.42$ Å — расстояние между ближайшими соседями в графене. Воспользуемся подходом, первоначально предложенным в работе [11], и зададим функцию Грина одиночного (изолированного) атома углерода с координатами (0, 0, 0) в виде

$$g_{00} = (\Omega_c + i\Gamma_c)^{-1}. \quad (1)$$

Здесь $\Omega_c = \omega - \epsilon_c$, где ω — энергетическая переменная, ϵ_c — положение центра квазиуровня атома углерода, Γ_c — полуширина квазиуровня, возникающая из-за взаимодействия атома углерода с подложкой. Локальная плотность состояний на атоме $\rho_0 = -\pi^{-1} \text{Im } g_{00}$ имеет вид лоренцева контура:

$$\rho_0 = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_c}{\Omega_c^2 + \Gamma_c^2}. \quad (2)$$

Строго говоря, функция Грина вида (1) отвечает случаю „бесконечно широкой зоны“, когда плотность состояний подложки можно считать константой, не зависящей от энергии [9]. Такое приближение с известными оговорками приемлемо для адсорбции на металлах. В работах [12,13] показано, однако, что такой вид функции Грина может быть использован и для описания адсорбции на проводниках.

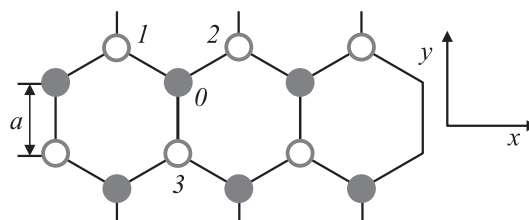


Рис. 1. Структура графена. Начало координат находится на атоме 0.

[†] E-mail: sergei_davydov@mail.ru

Воспользовавшись уравнением Дайсона, запишем выражение для функции Грина G_{00} для центрального адатома, взаимодействующего с ближайшими соседними адатомами:

$$G_{00} = g_{00} + g_{00}(t_{01}G_{10} + t_{02}G_{20} + t_{03}G_{30}), \quad (3)$$

где $t = t_{01} = t_{02} = t_{03}$ — матричный элемент перехода между соседними узлами решетки адатомов. Теперь используем трансформационные свойства функций Грина:

$$\begin{aligned} G_{10} &= G_{00} \exp \left[-i(a/2) \left(-k_x \sqrt{3} + k_y \right) \right], \\ G_{20} &= G_{00} \exp \left[-i(a/2) \left(k_x \sqrt{3} + k_y \right) \right], \\ G_{30} &= G_{00} \exp(iak_y), \end{aligned} \quad (4)$$

где k_x, k_y — квазиволновые векторы для движения электрона в плоскости графена. Подставляя (4) в (3), получим после ряда преобразований

$$G_{00}^{-1} = \Omega_c + i\Gamma_c - t\bar{f}(k_x, k_y), \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{f}(k_x, k_y) &= \bar{f}_1(k_x, k_y) - i\bar{f}_2(k_x, k_y), \\ \bar{f}_1(k_x, k_y) &= 2 \cos \left(\frac{k_x a \sqrt{3}}{2} \right) \cos \left(\frac{k_y a}{2} \right) + \cos(k_y a), \quad (6) \\ \bar{f}_2(k_x, k_y) &= 2 \sin \left(\frac{k_y a}{2} \right) \left[\cos \left(\frac{k_x a \sqrt{3}}{2} \right) - \cos \left(\frac{k_y a}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Воспользуемся приемом работы [14], заменив \bar{f} на $\pm \sqrt{|\bar{f}|^2}$ и положив $f = \sqrt{|\bar{f}|^2}$. Теперь функцию Грина для эпитаксиального графена можно представить в виде

$$\begin{aligned} G_{\pm}^{-1} &= \Omega_c + i\Gamma_c \mp tf(k_x, k_y), \\ f(k_x, k_y) &= 3 + 2 \cos(k_x a \sqrt{3}) \\ &+ 4 \cos \left(\frac{k_x a \sqrt{3}}{2} \right) \cos \left(\frac{3k_y a}{2} \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Отметим, что функция f описывает закон дисперсии для графена $\varepsilon_{\pm}(k_x, k_y) = \varepsilon_c \pm tf(k_x, k_y)$, где знак плюс относится к верхней зоне π^* , а минус — к нижней зоне π [1,14]. В случае свободного листа графена уровень ε_c переходит в ε_D , а Γ_c обращается в нуль. Таким образом, энергия ε_c является аналогом точки Дирака для графена, взаимодействующего с подложкой.

Здесь небезынтересно будет подчеркнуть еще один момент. При получении функции Грина G_{\pm} для эпитаксиального графена (7) мы исходили из функции Грина одиночного адатома (1). Мы, однако, могли бы поступить и по другому: например, взять в качестве затравочной функцию Грина графенового листа, имеющую вид $g_{\pm}^{-1} = \omega - \varepsilon_c \pm tf(k_x, k_y)$, и простейшим образом учесть взаимодействие листа с подложкой, позволяя его (листа) электронным состояниям затухать, т.е. заменяя ω на $\omega + i\Gamma_c$. Такая замена переводит функцию Грина g_{\pm} в G_{\pm} .

Плотность состояний эпитаксиального графена, отвечающая функции Грина (7), есть

$$\rho_{\pm} = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_c}{(\omega - \varepsilon_{\pm})^2 + \Gamma_c^2}. \quad (8)$$

Эта плотность состояний является функцией переменных k_x, k_y и ω . Для нахождения энергетической плотности состояний $\rho_{\pm}(\omega)$ требуется проинтегрировать выражение (8) по зоне Бриллюэна графена. Такое интегрирование, однако, можно выполнить только численно. Для того чтобы получить аналитические выражения, мы прибегнем к упрощениям [1,14], положив

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{q}) = \varepsilon_c \pm \frac{3}{2} ta|\mathbf{q}|. \quad (9)$$

Здесь $\mathbf{q} = \mathbf{K} - \mathbf{k}$, где

$$\mathbf{K} = a^{-1} \left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{3} \right)$$

— волновой вектор точки Дирака. Выражение (9) справедливо только для малых значений $|\mathbf{q}|$. Мы, однако, воспользуемся им для интегрирования плотности состояний (8) по зоне Бриллюэна, введя вектор обрезания q_B . Тогда получим

$$\begin{aligned} \rho_{\pm}(\Omega_c) &= \frac{\Gamma_c}{\pi\xi^2} \left[\ln \frac{(\pm\xi - \Omega_c)^2 + \Gamma_c^2}{\Omega_c^2 + \Gamma_c^2} \right. \\ &+ \left. \frac{2\Omega_c}{\Gamma_c} \left(\arctg \frac{\Omega_c}{\Gamma_c} - \arctg \frac{\Omega_c \mp \xi}{\Gamma_c} \right) \right], \end{aligned} \quad (10)$$

где $\xi = (3taq_B/2)$ — энергия обрезания, знаку плюс соответствует энергия $\Omega_c > 0$, знаку минус — $\Omega_c < 0$. Легко видеть, что $\rho_{+}(\Omega_c) = \rho_{-}(-\Omega_c)$.

Введем безразмерные величины

$$\alpha = \Omega_c/\Gamma_c, \quad \mu = \xi/\Gamma_c, \quad \rho_{\pm}^* = \pi\xi\rho_{\pm}.$$

Тогда выражение (9) можно переписать в виде

$$\rho_{\pm}^*(\alpha) = \frac{1}{\mu} \ln \frac{(\alpha \mp \mu)^2 + 1}{\alpha^2 + 1} + \frac{2\alpha}{\mu} [\arctg \alpha - \arctg(\alpha \mp \mu)], \quad (11)$$

причем $\rho_{+}^*(\alpha) = \rho_{-}^*(-\alpha)$. Вид функции $\rho_{+}^*(\alpha)$ представлен на рис. 2 для разных значений параметра μ (график функции $\rho_{-}^*(-\alpha)$ является зеркальным отражением $\rho_{+}^*(\alpha)$ в область энергий $\alpha < 0$). Отметим, что параметр $\mu = \xi/\Gamma_c$ описывает отношение энергии взаимодействия между адатомами ($\xi \propto t$) к энергии взаимодействия адатома с подложкой ($\Gamma_c = \pi\rho_s V^2$, где ρ_s — плотность состояний подложки, V — матричный элемент взаимодействия адатом-подложка [9]).

Из рис. 2 следует, во-первых, что при $\alpha \rightarrow 0$ ($\Omega_c \rightarrow 0$) зависимость $\rho_{\pm}^*(\alpha)$ имеет линейный характер, что является характерной особенностью графена [1]. Это легко

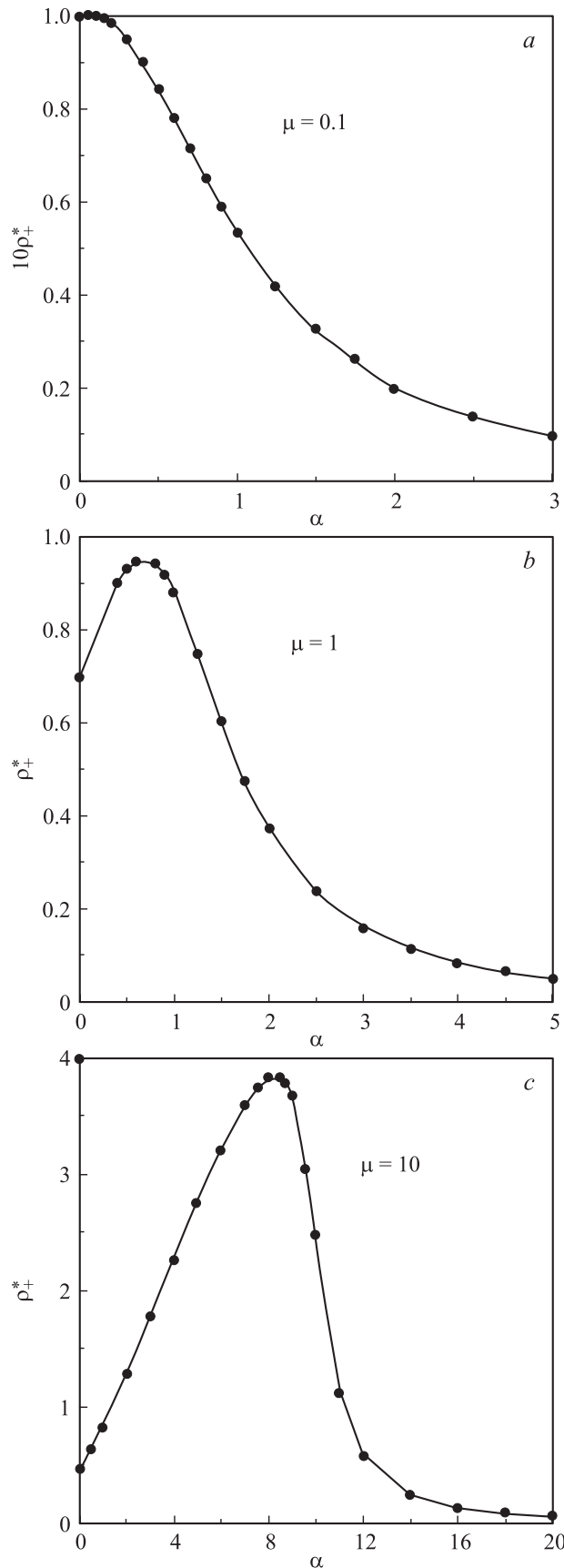


Рис. 2. Приведенная плотность состояний адсорбированного монослоя графена ρ_+^* , соответствующая верхней π^* -зоне, для разных значений параметра μ .

показать аналитически, предположив, что имеет место неравенство $|\alpha| \ll \mu$. Тогда из (11) получим

$$\rho_{\pm}^*(\alpha) \approx \frac{\ln(1 + \mu^2)}{\mu} \pm \frac{2\alpha}{\mu} \arctg \mu. \quad (12)$$

Во-вторых, из рис. 2 следует, что с ростом μ величина $\rho_+^*(\alpha)$ возрастает (то же относится и к $\rho_-^*(-\alpha)$). Из (12) также следует, что для $\mu \ll 1$ плотность состояний $\rho_{\pm}^* \propto \mu$. Ту же зависимость демонстрируют рис. 2, *a* и *b*. Если же $\mu \gg 1$, то $\rho_{\pm}^* \approx \mu^{-1}(2 \ln \mu \pm \pi \alpha)$, что явно видно из сравнения рис. 2, *b* и *c*. Для не слишком больших значений μ ($\mu < 1$) можно приближенно найти значение $\pm \alpha_{\max}$ (для $\alpha > 0$ и $\alpha < 0$ соответственно), соответствующее положению максимумов функций $\rho_{\pm}^*(\alpha)$. Положив $\alpha_{\max} = (\mu/2) + \delta$, в линейном приближении по δ получим

$$\delta \approx \frac{1}{4\mu} \left(\frac{4 + \mu^2}{2\mu} \arctg \left(\frac{\mu}{2} \right) - 1 \right). \quad (13)$$

При $\mu \ll 1$ поправка $\delta \propto \mu^2$, так что максимальные значения плотности состояний есть $\rho_{\pm}^* \approx 2 \arctg(\mu/2)$. Рост пиковых значений плотности состояний с увеличением μ наглядно демонстрируется рис. 2. Из рис. 2 также следует, что с ростом μ одnogорбая плотность состояний вида (2), характерная для изолированного адатома, превращается в двугорбую кривую (второй горб находится в области $\alpha < 0$ и не изображен на рис. 2), причем с ростом μ горбы раздвигаются. Этот эффект уже отмечался в работе [11].

Полученные результаты позволяют упростить выражения для локальной плотности состояний $\rho_{\pm}(\Omega_c)$, представив ее в виде контура Лоренца:

$$\rho_{\pm}(\Omega_c) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_c}{(\Omega_c - \Omega_{\pm})^2 + \Gamma_c^2}, \quad (14)$$

где $\Omega_{\pm} = \pm \alpha_{\max} \Gamma_c$, причем опять ρ_+ соответствует $\Omega_c > 0$, $\rho_- - \Omega_c < 0$.

Так как монослой графена, адсорбированный на карбиде кремния, приобретает отрицательный заряд, уровень Ферми сдвигается из дираковской точки вверх и приобретает энергию ε_F . Интегрируя плотность состояний $\rho_+(\Omega_c)$ от 0 до $\Omega_F = \varepsilon_F - \varepsilon_c$, имеем

$$n_+ = \frac{1}{\pi} \left[\arctg \alpha_{\max} - \arctg \left(\alpha_{\max} - \frac{\varepsilon_F}{\Gamma_c} \right) \right]. \quad (15)$$

Если $\varepsilon_F/\Gamma_c \ll 1$, то

$$n_+ \approx \rho(\Omega_+) \varepsilon_F, \quad (16)$$

где плотность состояний адатома углерода в точке $\Omega_c = 0$ есть

$$\rho(0) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_c}{\Omega_+^2 + \Gamma_c^2}. \quad (17)$$

Сделаем некоторые простые оценки. По данным [6], плотность электронов, перешедших на графен, есть

$N_e \approx 10^{-3} \text{ \AA}^{-2}$. С другой стороны, $N_e = n_+ N_c$, где N_c — плотность упаковки атомов графена. Так как на один атом графена приходится площадь $S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$, то $N_c = S_1^{-1} = 0.38 \text{ \AA}^{-2}$. Отсюда получаем $n_+ \approx 2.6 \cdot 10^{-3}$. Так как $\varepsilon_F = 0.42 \text{ эВ}$ [6], то $\rho(0) \approx 6 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}^{-1}$.

3. Перейдем теперь к рассмотрению адсорбции молекул F4-TCNQ на поверхности адсорбированного графена (система M–G–SiC). Простая модель адсорбции одиночного атома на графене предложена в работе [15]. Здесь, однако, мы имеем случай адсорбции не на чистом графене, а на структуре G–SiC. Поэтому воспользуемся здесь простой моделью адсорбции Андерсона–Ньюнса, включив в нее диполь-дипольное отталкивание адмолекул в соответствии со схемой, разработанной в [16]. При этом число заполнения адмолекулы n_a определяется из уравнения

$$n_a(\Theta) = \frac{1}{\pi} \operatorname{arcsctg} \frac{\Omega_a - \bar{\xi} \Theta^{3/2} Z_a(\Theta)}{\Gamma_a} \quad (18)$$

$$\bar{\xi} = 2e^2 \lambda^2 N_{\text{ML}}^{3/2} \bar{A}.$$

Здесь Ω_a — энергия квазиуровня адмолекулы относительно уровня Ферми подложки, Γ_a — полуширина квазиуровня, Z_a — заряд адмолекулы, $\Theta = N/N_{\text{ML}}$ — степень покрытия (N — концентрация адчастиц, N_{ML} — концентрация адчастиц в монослое), $\bar{\xi}$ — константа диполь-дипольного отталкивания адмолекул, λ — длина адсорбционной связи, $\bar{A} \approx 10$ — численный множитель, слабо зависящий от геометрии адсорбированного слоя, e — заряд позитрона. Для акцепторной частицы $Z_a = -n_a$ и $\Omega_a = A - \varphi$, где φ — работа выхода системы G–SiC-подложка. Для F4-TCNQ мы принимаем $A = 5.24 \text{ эВ}$ и $\varphi = 4.28 \text{ эВ}$ [6], откуда $\Omega_a = 0.98 \text{ эВ}$. Длину адсорбционной связи λ принимаем равной длине связи C–N, равной $d_{\text{C–N}} = 1.15 \text{ \AA}$ [8], так как вслед за авторами [6] предполагаем, что молекулы F4-TCNQ располагаются перпендикулярно поверхности графена, „опираясь“ на нее атомами азота (см. рис. 3 в работе [6]). Для определения N_{ML} воспользуемся результатами работы [8], из которой следует, что расстояние между ближайшими соседними атомами азота в молекуле F4-TCNQ равно $d_{\text{N–N}} = 2[(d_{\text{C–C}} + d_{\text{C–N}}) \times \cos(\pi - \varphi)/2] = 2.43 \text{ \AA}$ ($d_{\text{C–C}} = 1.40 \text{ \AA}$, $\varphi = 57^\circ$ [8]). Величина $d_{\text{N–N}}$ близка к максимальному расстоянию между атомами углерода в гексагоне графена, равному 2.45 \AA . Поэтому будем считать, что одна молекула F4-TCNQ приходится в монослое на одну элементарную ячейку графена. Тогда $N_{\text{ML}} = S^{-1}$, где $S = 3\sqrt{3}a^2/2$ — площадь элементарной ячейки, что дает $N_{\text{ML}} = 0.19 \text{ \AA}^{-2}$. Подставляя найденные значения параметров в выражение (18), получим $\bar{\xi} = 31.5 \text{ эВ}$.

Для определения параметра Γ_a воспользуемся экспериментальными данными по изменению работы выхода $\Delta\varphi$ системы G–6H–SiC(0001) при адсорбции F4-TCNQ [6], согласно которым в состоянии насыщения $\Delta\varphi = 1.01 \text{ эВ}$. Согласно теории адсорбции,

$$\Delta\varphi(\Theta) = -\Phi\Theta Z_a, \quad \Phi = 4\pi e^2 N_{\text{ML}} \lambda. \quad (19)$$

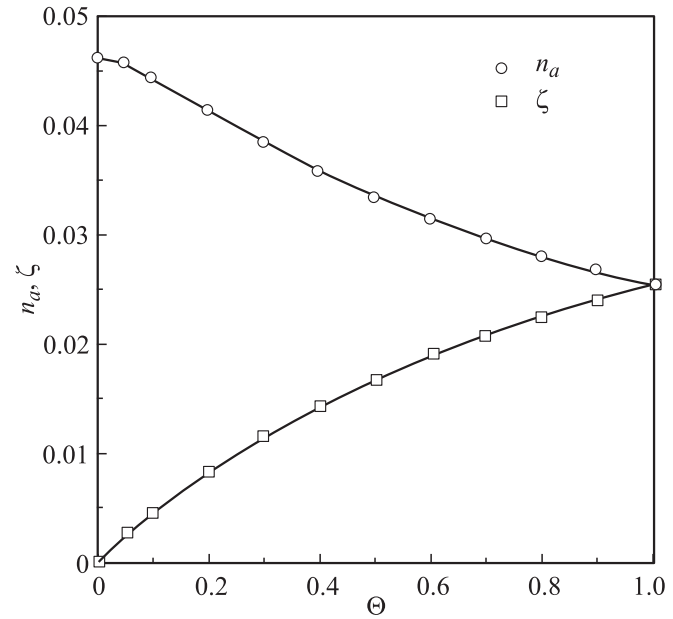


Рис. 3. Зависимость числа заполнения n_a и функции $\xi = \Theta n_a$ от степени покрытия Θ молекулами F4-TCNQ поверхности системы G–6H–SiC(0001).

Будем считать, что экспериментальное значение $\Delta\varphi \approx 1.01 \text{ эВ}$ соответствует монослойному покрытию $\Theta = 1$. Так как $Z_a = -n_a$, то из (19) получаем $n_a(1) = \Delta\varphi/\Phi$. Так как $\Phi = 39.5 \text{ эВ}$, имеем $n_a(1) \approx 2.55 \cdot 10^{-2}$. Тогда из выражения (18) находим $\Gamma_a = 0.14 \text{ эВ}$. Теперь можно рассчитать концентрационные зависимости числа заполнения $n_a(\Theta)$ и функции

$$\xi(\Theta) = \Theta n_a(\Theta) = \Delta\varphi(\Theta)/\Phi.$$

Отметим, что поверхностная плотность заряда есть $\sigma_a(\Theta) = e\xi(\Theta)N_{\text{ML}}$. Результаты численного расчета представлены на рис. 3 (светлые кружки и квадраты). По данным расчета, при монослойном покрытии $\sigma_a(1) \approx e 4.85 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-2}$, тогда как на графене под действием подложки возникает плотность заряда $\sigma_c = en_+ N_c \approx e 10^{-3} \text{ \AA}^{-2}$. Таким образом, монослой молекул F4-TCNQ может „оттянуть на себя“ плотность электронов, почти в 5 раз превосходящую ту, которая возникает на графене из-за взаимодействия с подложкой 6H–SiC(0001). При этом получаем слой графена, обогащенный дырками.

Нужно, однако, заметить, что известные нам экспериментальные данные неоднозначны. Так, например, в работе [7] для работы выхода системы G–6H–SiC(0001) приводится значение $\varphi_0 = 4 \text{ эВ}$, а в работе [17] — $\varphi_0 = 5.11 \text{ эВ}$. Далее, по данным [6], работа выхода системы G–6H–SiC(0001) достигает насыщения при нанесении слоя молекул F4-TCNQ толщиной 0.8 нм , при этом рост работы выхода $\Delta\varphi \approx 1 \text{ эВ}$. С другой стороны, в работе [7] приводится значение покрытия, при котором наблюдается насыщение, равное $2\text{–}3 \text{ нм}$, а максимальный рост работы выхода составляет 1.5 эВ . Таким

образом, экспериментальные данные довольно сильно различаются и требуются дополнительные исследования.

Работа выполнена в рамках программы президиума РАН „Квантовая физика конденсированных сред“ и ФАНИ (контракт № 02.740.11.0108 от 15.06.2009), ОФН РАН „Новые материалы“ и программы президиума РАН „Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов“, целевой программы „Развитие научного потенциала высшей школы (2009–2010)“ Министерства образования и науки РФ № 2.1.1/2503 и поддержана грантом РФФИ (проект № 07-0200636а).

Список литературы

- [1] A.H. Castro Nero, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Rev. Mod. Phys.*, **81** (1), 109 (2008).
- [2] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, Н.Ю. Смирнова. *ФТТ*, **51** (3), 452 (2009).
- [3] C. Riedel, C. Coletti, T. Iwasaki, A.A. Zakharov, U. Starke. *Phys. Rev. Lett.*, **103**, 246 804 (2009).
- [4] J. Soltys, J. Piechota, M. Lopuszynski, S. Krukowski. arXiv: 10002.4717v1.
- [5] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев. *Письма ЖТФ*, **36** (18), 55 (2010).
- [6] C. Coletti, C. Riedel, D.S. Lee, B. Krauss, L. Patthey, K. von Klitzing, J.H. Smet, U. Starke. *Phys. Rev. B*, **81**, 235 401 (2010).
- [7] W. Chen, S. Chen, D. Chen Qi, X.Y. Gao, A.T.S. Wee, J. Amer. Chem. Soc., **129** (34), 10 422 (2007).
- [8] H. Pinto, R. Jones, J.P. Goss, P.R. Briddon. *J. Phys.: Condens. Matter*, **21**, 402 001 (2009).
- [9] P.W. Anderson. *Phys. Rev.*, **124** (1), 41 (1961).
- [10] D.M. Newns. *Phys. Rev.*, **178** (3), 1123 (1969).
- [11] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **20** (6), 1752 (1978).
- [12] С.Ю. Давыдов, А.В. Павлык. *ФТТ*, **35** (7), 831 (2001).
- [13] С.Ю. Давыдов, С.В. Трошин. *ФТТ*, **49** (8), 1508 (2007).
- [14] P.R. Wallace. *Phys. Rev.*, **71** (9), 622 (1947).
- [15] С.Ю. Давыдов, Г.И. Сабирова. *ФТТ*, **53** (3), (2011).
- [16] J.P. Muscat, D.M. Newns. *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, **7** (15), 2630 (1974).
- [17] A. Mattausch, O. Pankratov. *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 076 802 (2007).

Редактор Т.А. Полянская

On the charge transfer in the system of adsorbed molecules–graphene monolayer–SiC-substrate

S.Yu. Davydov

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Charge transfer effects within the three-layer structure molecule (M)–one layer graphene (G)–SiC substrate are considered step by step. Firstly, the simple density-of-states model for the graphene monolayer adsorbed on the silicon carbide (G–SiC system) is proposed, which make it possible to calculate corresponding occupation numbers of the graphene atoms. It is shown that the graphene monolayer accumulates negative charges. Then the G–SiC system is considered as the substrate for the adsorption of molecules with high electron affinity. These molecules charge is calculated as a function of their surface concentration. It is demonstrated that for the monolayer coverage the molecules surface negative charge density in the M–G–SiC system is much greater than the charge density resulting due to charge transfer from the SiC substrate to graphene. This proves the possibility to neutralize the extra charge in graphene by the adsorption of the corresponding particles.