

PACS numbers: 71.15.Ap, 71.20.Tx, 71.27.+a, 71.28.+d, 72.10.-d, 72.25.-b, 72.80.Vp

## Енергетичний спектр та електропровідність графену з домішкою хрому

С. П. Репецький, І. Г. Вишивана\*, Д. К. Чешківський, В. В. Шастун

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
фізичний факультет,  
вул. Володимирська, 64,  
01033 Київ, Україна*  
*\*Інститут високих технологій,  
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
просп. Акад. Глушкова, 4-г,  
03022 Київ, Україна*

На основі моделі сильного зв'язку досліджено електронну структуру, вільну енергію та спін-залежний транспорт графену з домішкою атомів Cr, адсорбованих на поверхні. Виконано геометричну оптимізацію кристалічної структури графену з домішкою Cr шляхом мінімізації вільної енергії. Досліджено вплив зовнішнього магнітного поля на перенос заряду та локалізовані магнітні моменти. З'ясовано природу спін-залежного електронного транспорту графену з атомами Cr. Показано, що величина спін-залежного транспорту пов'язана з відносним зсувом у зовнішньому магнітному полі енергетичних рівнів електронів (Кулонівських щілин, що виникають в області рівня Фермі) для різних проєкцій спіну.

Based on the model of strong coupling, the electronic structure, free energy, and spin-dependent transport of graphene with impurity Cr atoms adsorbed on the surface are studied. Geometric optimization of the crystal structure of graphene with Cr admixture is performed by minimizing the free energy. The influence of external magnetic field on electron transport and localized magnetic moments is studied. The nature of the spin-dependent electron transport in graphene with Cr atoms is ascertained. As shown, the magnitude of the spin-dependent transport is associated with a relative shift of the energy levels of electrons (Coulomb gaps arising at the Fermi level) for different spin projections in the external magnetic field.

На основе модели сильной связи исследованы электронная структура, свободная энергия и спин-зависимый транспорт графена с примесью атомов Cr, адсорбированных на поверхности. Выполнена геометрическая оптимизация кристаллической структуры графена с примесью Cr путём ми-

нимизации свободной энергии. Исследовано влияние внешнего магнитного поля на перенос заряда и локализованные магнитные моменты. Выяснена природа спин-зависимого электронного транспорта графена с атомами Cr. Показано, что величина спин-зависимого транспорта связана с относительным смещением во внешнем магнитном поле энергетических уровней электронов (кулоновских щелей, возникающих в области уровня Ферми) для разных проекций спина.

**Ключові слова:** графен з домішкою хрому, модель сильного зв'язку, електронні кореляції, енергетичний спектр електронів і фононів, електропровідність, спінова поляризація струму.

(Отримано 7 червня 2012 р.)

Після порівняно недавно відкритого явища спин-залежного транспорту стало актуальним вивчення спінової поляризації електронів. Велику увагу останнім часом приділено системам на основі вуглецю з домішками перехідних металів.

Для з'ясування механізму спин-залежного транспорту інтенсивно розробляються різні теоретичні моделі. Зокрема, в роботах [1, 2] теоретично передбачено високий ступінь спінової поляризації електронів у вуглецевих нанотрубках, а в роботі [3] теоретично передбачена майже 100% спінова поляризація електричного струму в кристалоподібних вуглецевих нанотрубках з домішками перехідних металів Cr, V. Графен є за своїми властивостями спорідненою до вуглецевої нанотрубки системою. Одним зі шляхів цілеспрямованої зміни властивостей графену з метою застосування його в наноелектроніці і спіновій електроніці є внесення домішок інших елементів. У роботах [4, 5] в Ліфшицевій моделі неупорядкованого кристалу показано, що наявність домішки призводить, починаючи з деякої концентрації, до зниження симетрії кристалічної ґратки, зняття виродження в енергетичному спектрі електронів і появи енергетичної щілини, ширина якої зростає зі збільшенням концентрації. Однак вплив природи домішки на електронну структуру та пов'язані з нею властивості графену досліджено недостатньо.

У нашій роботі на основі моделі сильного зв'язку досліджено електронну структуру, вільну енергію, електропровідність і спин-залежний транспорт графену з домішкою хрому. Електронні кореляції в кристалах описуються в багатозонній моделі сильного зв'язку. Враховано процеси розсіяння електронів на потенціалах іонних остовів різного сорту та коливаннях кристалічної ґратниці.

Густина електронних станів описується виразом [6, 9]

$$g_e(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_{i,\gamma,\sigma,\lambda} P_{0i}^\lambda g_{0i\gamma\sigma}^\lambda(\varepsilon), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} g_{0i\gamma\sigma}^{\lambda}(\varepsilon) &= \\ &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \tilde{G} + \tilde{G} t_{0i}^{\lambda} \tilde{G} + \sum_{\substack{(nj) \neq (0i) \\ \lambda'}} P_{nj0i}^{\lambda'/\lambda} \tilde{G} \left[ t_{nj}^{\lambda'} + T^{(2)\lambda 0i, \lambda' nj} + T^{(2)\lambda' nj, \lambda 0i} \right] \tilde{G} \right\}^{0i\gamma\sigma, 0i\gamma\sigma}. \end{aligned}$$

У виразі (1)  $n$  — номер вузла кристалічної ґратниці;  $i$  — номер підґратниці;  $v$  — число підґратниць;  $\gamma$  — номер енергетичної зони;  $\sigma = -1/2, 1/2$  — квантове число проєкції спіну електрона на вісь  $z$ .

Тут  $T^{(2)n_1i, n_2i_2} = \left[ I - t^{n_1i} \tilde{G} t^{n_2i_2} \tilde{G} \right]^{-1} t^{n_1i} \tilde{G} t^{n_2i_2} \left[ I + \tilde{G} t^{n_1i} \right]$ ,  $\tilde{G} = \tilde{G}^{aa^+}(\varepsilon)$ ,  $t^{n_1i}$  — оператор розсіяння на одному вузлі, що визначається виразом:

$$t^{n_1i} = \left[ I - \left( \Sigma^{n_1i} - \sigma^{n_1i} \right) \tilde{G} \right]^{-1} \left( \Sigma^{n_1i} - \sigma^{n_1i} \right). \quad (2)$$

Ґрінову функцію ефективного середовища для підсистеми електронів визначимо виразом [7]

$$\tilde{G}^{aa^+}(\varepsilon) = \left[ \left[ G_0^{aa^+}(\varepsilon) \right]^{-1} - \left( \tilde{\Sigma}_{ef}^A(\varepsilon) + \tilde{\Sigma}_{ee}(\varepsilon) + \sigma_e(\varepsilon) \right) \right]^{-1}, \quad (3)$$

де масовий оператор електрон-фононої взаємодії для атомів сорту  $A$  в ефективному середовищі дорівнює

$$\tilde{\Sigma}_{ef}^A(\varepsilon) = \sum_{n_1i_1} \tilde{\Sigma}_{ef}^{An_1i_1}(\varepsilon), \quad \tilde{\Sigma}_{ee}(\varepsilon) = \sum_{n_2i_2} \tilde{\Sigma}_{ef}^{An_1i_1, An_2i_2}(\varepsilon).$$

Ґрінова функція нульового наближення  $G_0^{aa^+}(\varepsilon)$  у виразі (3) дорівнює  $G_0^{aa^+}(\varepsilon) = \left[ \varepsilon - H_0^{(1)} \right]^{-1}$ ,  $H_0^{(1)} = \left\| h_{ni\gamma, n'i'\gamma'}^{(0)} \right\|$ , де  $\varepsilon = \hbar\omega$ ,  $h_{ni\gamma, n'i'\gamma'}^{(0)}$  — матричні елементи Гамільтоніана чистого кристалу, що складається з атомів сорту  $A$ . Одноцентровий оператор розсіяння  $t^{\lambda n_1i_1}$  у формулі (1) дається виразом (2), в якому величина  $\Sigma_e^{\lambda n_1i_1}(\varepsilon)$ , що описує розсіяння електронів [6], має вигляд:

$$\Sigma_{eni\gamma\sigma, n'i'\gamma'\sigma'}^{\lambda n_1i_1}(\varepsilon) = w_{ni\gamma\sigma, n'i'\gamma'\sigma'}^{\lambda n_1i_1} + \frac{1}{2} \sum_{\gamma_1\sigma_1} \tilde{v}_{n_1i_1\gamma_1\sigma_1, n'i'\gamma'\sigma'}^{(2)n_1i\gamma\sigma, n_1i_1\gamma_1\sigma_1} \left( Z_{n_1i_1\gamma_1\sigma_1}^{m_{n_1i_1}} - \tilde{Z}_{i_1\gamma_1\sigma_1} \right). \quad (4)$$

У виразі (4)  $Z_{ni\gamma\sigma}^{\lambda}$  — число заповнення одноелектронного стану  $(ni\gamma\sigma)$  за умови, що у вузлі  $(ni)$  знаходиться атом сорту  $\lambda$ . Величина  $Z_{ni\gamma\sigma}^{\lambda}$  дорівнює:

$$Z_{ni\gamma\sigma}^{\lambda} = Z_{i\gamma\sigma}^{\lambda} = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon, \varepsilon_F) g_{ni\gamma\sigma}^{\lambda}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (5)$$

Повне число електронів у валентних станах на атом сорту  $\lambda$  дорів-

нює

$$Z_{\lambda i} = \sum_{\gamma\sigma} Z_{i\gamma\sigma}^{\lambda}. \quad (6)$$

Ефективний заряд атома сорту  $\lambda$  визначається виразом

$$\Delta Z_{\lambda i} = Z_{\lambda i} - Z_{\lambda}^0, \quad (7)$$

де  $Z_{\lambda}^0$  — число електронів у валентних станах невзаємодійного атома сорту  $\lambda$ .

Локалізований магнітний момент атома сорту  $\lambda$  дорівнює

$$m_{\lambda i} = \sum_{\gamma} (Z_{i\gamma\sigma}^{\lambda} - Z_{i\gamma-\sigma}^{\lambda}). \quad (8)$$

Когерентний потенціал визначається з умови  $\langle t^{0i} \rangle = 0$  і задовольняє рівняння [8]:

$$\begin{aligned} \sigma_e^{0i}(\epsilon) = & \left\langle \left[ 1 - (\Sigma_e^{0i}(\epsilon) - \sigma_e^{0i}(\epsilon)) \tilde{G}^{aa^+}(\epsilon) \right]^{-1} \right\rangle^{-1} \times \\ & \times \left\langle \left[ 1 - (\Sigma_e^{0i}(\epsilon) - \sigma_e^{0i}(\epsilon)) \tilde{G}^{aa^+}(\epsilon) \right]^{-1} \Sigma_e^{0i}(\epsilon) \right\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

Умовна ймовірність  $P_{nj0i}^{\lambda'/\lambda}$  у формулі (1) визначається виразом

$$P_{0ijn}^{\lambda\lambda'} = P_{0i}^{\lambda} P_{nj0i}^{\lambda'/\lambda} = \langle c_{0i}^{\lambda} c_{nj}^{\lambda'} \rangle \quad (10)$$

і пов'язана з параметрами парних міжатомних кореляцій  $\epsilon_{nj0i}^{BB}$  співвідношеннями [8]:

$$P_{nj0i}^{\lambda'/\lambda} = P_{nj}^{\lambda'} + \frac{\epsilon_{nj0i}^{BB}}{P_{0i}^{\lambda}} (\delta_{\lambda'B} - \delta_{\lambda'A}) (\delta_{\lambda B} - \delta_{\lambda A}), \quad (11)$$

де  $\delta$  — Кронекерові символи,  $\epsilon_{nj0i}^{BB} = \langle (c_{nj}^B - c_j^B)(c_{0i}^B - c_i^B) \rangle$ .

Вільна енергія  $F$  як функція об'єму системи  $V$ , температури  $T$ , числа електронів  $N_e$  та параметрів міжатомної кореляції ( $\epsilon_{n_1 i_1, n_2 i_2}, \eta$ ) пов'язана з термодинамічним потенціалом  $\Omega$  співвідношенням  $F = \Omega + \mu_e \langle N_e \rangle$ . В наближенні слабкої залежності масових операторів від енергії електронів та фононів, вільну енергію  $F$  можна подати у вигляді:

$$F = \Omega_c + \Omega_e + \Omega_f + \mu_e \langle N_e \rangle. \quad (12)$$

Конфігураційна складова термодинамічного потенціалу  $\Omega_c$  в формулі (12), що залежить від розподілу атомів різного сорту по вузлах

кристалічної ґратниці, визначається як

$$\Omega_c = \langle \Phi_0 \rangle - \Theta S_c, \quad (13)$$

де  $S_c = -\langle \ln P_c \rangle$  — конфігураційна ентропія;  $P_c$  — функція розподілу атомів на вузлах кристалічної ґратниці.

Конфігураційну ентропію можна подати у вигляді [9]:

$$S_c = -\frac{1}{V} \left[ \sum_{\lambda, i} P_{0i}^\lambda \ln P_{0i}^\lambda + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda, i, \\ \lambda', nj \\ (0i) \neq (nj)}} P_{0ijn}^{\lambda\lambda'} \ln \frac{P_{0ijn}^{\lambda\lambda'}}{P_{0i}^\lambda P_{nj}^{\lambda'}} + \dots \right]. \quad (14)$$

Термодинамічний потенціал електронної підсистеми  $\epsilon$ :

$$\Omega_e = -\Theta \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{(\mu_e - \epsilon)/\Theta}) g_e(\epsilon) d\epsilon. \quad (15)$$

Термодинамічний потенціал підсистеми фононів  $\epsilon$ :

$$\Omega_f = \Theta \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 - e^{-\epsilon/\Theta}) g_f(\epsilon) d\epsilon,$$

де  $g_f(\epsilon)$  — густина станів фононів, яка розраховується за формулою, що аналогічна формулі (1) [6, 9].

Вільну енергію  $F$  у виразі (12) розраховано на один атом.

Тензор статичної електропровідності можна подати у вигляді [7]:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} = & \frac{e^2 \hbar}{4\pi V_1} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_1 \frac{\partial f}{\partial \epsilon_1} \sum_{s, s' = +, -} (2\delta_{ss'} - 1) \sum_{\sigma, i} \left[ [v_\beta \tilde{K}(\epsilon_1^s, v_\alpha, \epsilon_1^{s'})] + \right. \right. \\ & + \sum_{\lambda} P_{0i}^\lambda \tilde{K}(\epsilon_1^{s'}, v_\beta, \epsilon_1^s) (t_{0i}^\lambda(\epsilon_1^s) \tilde{K}(\epsilon_1^s, v_\alpha, \epsilon_1^{s'}) t_{0i}^\lambda(\epsilon_1^{s'}) + \\ & + \sum_{\lambda} P_{0i}^\lambda \sum_{\substack{lj \neq 0i, \\ \lambda'}} P_{lj0i}^{\lambda'/\lambda} \left[ [\tilde{K}(\epsilon_1^{s'}, v_\beta, \epsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\epsilon_1^{s'})] \times \right. \\ & \times T^{(2)\lambda 0i, \lambda' lj}(\epsilon_1^{s'}) + [\tilde{K}(\epsilon_1^{s'}, v_\beta, \epsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\epsilon_1^{s'})] T^{(2)\lambda' lj, \lambda 0i}(\epsilon_1^{s'}) + \\ & + [\tilde{K}(\epsilon_1^s, v_\alpha, \epsilon_1^{s'}) v_\beta \tilde{G}(\epsilon_1^s)] T^{(2)\lambda 0i, \lambda' lj}(\epsilon_1^s) + \\ & + [\tilde{K}(\epsilon_1^s, v_\alpha, \epsilon_1^{s'}) v_\beta \tilde{G}(\epsilon_1^s)] T^{(2)\lambda' lj, \lambda 0i}(\epsilon_1^s) + \\ & + \tilde{K}(\epsilon_1^{s'}, v_\beta, \epsilon_1^s) \left[ (t_{ij}^{\lambda'}(\epsilon_1^s) \tilde{K}(\epsilon_1^s, v_\alpha, \epsilon_1^{s'}) t_{0i}^\lambda(\epsilon_1^{s'}) + \right. \\ & \left. + t_{ij}^{\lambda'}(\epsilon_1^s) \tilde{K}(\epsilon_1^s, v_\alpha, \epsilon_1^{s'}) T^{(2)\lambda 0i, \lambda' lj}(\epsilon_1^{s'}) + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +T^{(2)\lambda'lj,\lambda 0i}(\epsilon_1^s)\tilde{K}(\epsilon_1^s, v_\alpha, \epsilon_1^{s'})t_{0i}^\lambda(\epsilon_1^{s'}) + \\
 & +T^{(2)\lambda'lj,\lambda 0i}(\epsilon_1^s)\tilde{K}(\epsilon_1^s, v_\alpha, \epsilon_1^{s'})T^{(2)\lambda 0i,\lambda'lj}(\epsilon_1^{s'}) + \\
 & +T^{(2)\lambda'lj,\lambda 0i}(\epsilon_1^s)\tilde{K}(\epsilon_1^s, v_\alpha, \epsilon_1^{s'})T^{(2)\lambda'lj,\lambda 0i}(\epsilon_1^{s'}) \Big] \Big] \Big] \Big\}^{0i\gamma\sigma, 0i\gamma\sigma},
 \end{aligned} \tag{16}$$

де

$$\begin{aligned}
 \tilde{K}(\epsilon_1^s, v_\alpha, \epsilon_1^{s'}) &= \tilde{G}^{aa^+}(\epsilon_1^s)v_\alpha\tilde{G}^{aa^+}(\epsilon_1^{s'}), \\
 \tilde{G}^{aa^+}(\epsilon_1^+) &= \tilde{G}_r^{aa^+}(\epsilon_1), \\
 \tilde{G}^{aa^+}(\epsilon_1^-) &= \tilde{G}_a^{aa^+}(\epsilon_1) = \left(\tilde{G}_r^{aa^+}\right)^*(\epsilon_1);
 \end{aligned}$$

$V_1$  — об'єм примітивної комірки;  $e$  — заряд електрона;  $\hbar$  — Планкова стала.

Оператор  $\alpha$ -проекції швидкості електрона  $v_\alpha$  у формулі (16) дорівнює:

$$v_{\alpha i, i'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial h_{i, i'}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}.$$

У нерелятивістському наближенні за наявності зовнішнього магнітного поля оператор кінетичної енергії електрона в матричному елементі  $h_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{(0)}$  (3) Гамільтоніана системи необхідно замінити на

$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2 / 2m$ , де  $\hat{\mathbf{p}}$  — оператор імпульсу,  $m$  — маса електрона,  $c$  — швидкість світла у вакуумі,  $\mathbf{A}$  — векторний потенціал електромагнітного поля. Крім того, в Гамільтоніані системи маємо включити доданок, що є оператором енергії взаємодії власного магнітного моменту частинки із зовнішнім магнітним полем:

$$H' = \sum_{n_1 i_1 \gamma_1 s_1} 2\mu_B S_1 N a_{n_1 i_1 \gamma_1 s_1}^+ a_{n_1 i_1 \gamma_1 s_1}, \tag{17}$$

де  $\mu_B$ ,  $N$ ,  $S_1$  — Борів магнетон, напруженість зовнішнього магнітного поля, напрямленого перпендикулярно вісі нанотрубки, та проекція спіну електрона на напрямок магнітного поля відповідно.

У випадку слабого зовнішнього магнітного поля, що розглядається в даній роботі, врахуємо лише залежний від проекції спіну доданок (48) в Гамільтоніані системи та знехтуємо незалежним від проекції спіну доданком у матричному елементі  $h_{n_1 i_1 \gamma_1, n_2 i_2 \gamma_2}^{(0)}$ .

Наведемо результати розрахунку енергетичного спектру електронів і фононів та електропровідності графену з домішками Cr. В роз-

рахунках нехтувалося перенормуванням вершинних частин масових операторів електрон-електронної і електрон-фононої взаємодій. Як базис обираються дійсні хвильові функції  $2s$ -,  $2p$ -,  $3s$ -,  $3d$ -станів нейтральних незваєомодійних атомів вуглецю. При розрахунках недіагональних за номером вузлів ( $ni$ ) матричних елементів Гамільтоніана [6] враховувалися перші три координаційні сфери. В розрахунках нехтується внеском статичних зміщень атомів та членів ангармонізму. Розрахунки виконано для температури  $T = 300$  К.

У роботі виконано геометричну оптимізацію кристалічної структури графену з домішкою Cr. Геометрична оптимізація кристалічної структури досягалася шляхом мінімізації вільної енергії (12). Шляхом дослідження мінімуму вільної енергії встановлено (рис. 2), що атоми Cr випадково розташовані на поверхні графену навпроти центра шестикутників, у вершинах яких розташовані атоми вуглецю. На це вказує те, що ймовірності розташування атомів Cr при  $\epsilon_{nj0i}^{BB} = 0$  у виразі (11)  $P_{nj0i}^{\lambda/\lambda} = P_{nj}^{\lambda} = c^{\lambda}$ , де  $c^{\lambda} = c^{Cr}$  — відносна частка зайнятих атомами Cr можливих положень на поверхні. Графен з домішкою Cr має структуру двовимірного кристалу. Атоми в примітивній комірці займають 3 нееквівалентних положення. Відстань між атомами вуглецю складає 0,142 нм. Відстань між атомами вуглецю та Cr складає 0,22 нм.

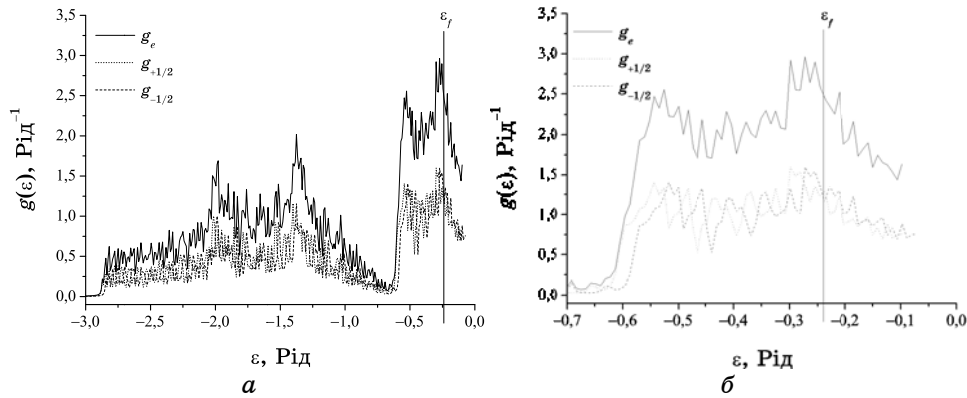
Значення проекції локалізованого магнітного моменту атома Cr та наведеного локалізованого магнітного моменту атома C на напрямок магнітного поля зростають із збільшенням величини поля. Для графену з концентрацією атомів хрому  $c^{Cr} = 70\%$  значення проекції магнітного моменту атома Cr змінюється в межах  $m_{Cr} = (1,02; 2,24)\mu_B$ , а магнітного моменту атома C — в межах  $m_C = (0,0036; 0,02)\mu_B$  при збільшенні значення магнітного поля від нуля до  $H = 200$  А/м.

На рисунку 1 зображено парціальну  $g_{e\sigma}(\epsilon) = \frac{1}{V} \sum_{i,\gamma,\lambda} P_{0i}^{\lambda} g_{0i\gamma\sigma}^{\lambda}(\epsilon)$  та повну  $g_e(\epsilon) = \sum_{\sigma} g_{e\sigma}(\epsilon)$  густини електронних станів графену з домішкою Cr за відсутності зовнішнього магнітного поля, що розрахована за формулою (1). Вертикальною лінією показано положення рівня Фермі  $\epsilon_F$ .

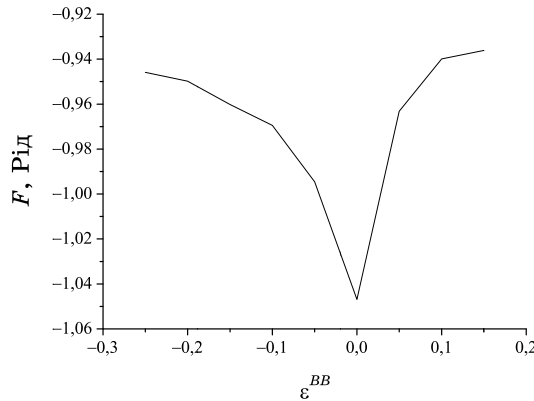
Як видно з рис. 1, наявність атомів Cr зумовлює різне значення парціальних густин електронних станів для двох значень проекції спіну на вісь  $z$ .

На рисунку 2 точками зображено залежність вільної енергії  $F$  (12) від параметра парних кореляцій у розташуванні домішки Cr по вузлах ґратниці  $\epsilon^{BB} = \epsilon_{nj0i}^{BB}$  для першої координаційної сфери (показано залежність  $F(\epsilon^{BB})$  в області мінімуму). Параметр далекого атомного порядку  $\eta_a = 0$ .

На рисунку 3 зображено парціальну  $g_{e\sigma}(\epsilon)$  та повну  $g_e(\epsilon)$  густини



**Рис. 1.** Густини електронних станів графену з домішкою Cr. *a* — повний спектр густини електронних станів; *б* — частина спектру поблизу рівня Фермі.



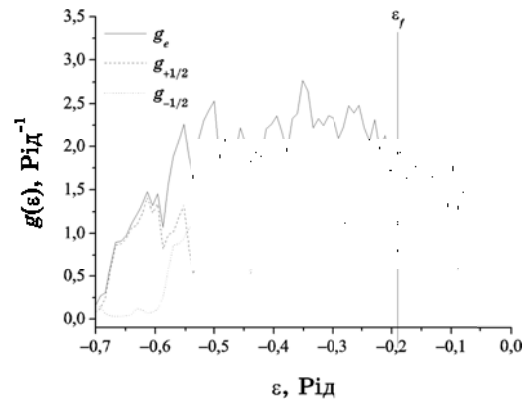
**Рис. 2.** Залежність вільної енергії  $F$  графену з концентрацією атомів Cr  $c^{\text{Cr}} = 70\%$  від параметра парних кореляцій в орієнтації локалізованих магнітних моментів по вузлах ґратниці  $\epsilon^{BB}$ .

електронних станів графену з концентрацією атомів хрому  $c^{\text{Cr}} = 70\%$  у зовнішньому магнітному полі  $H = 100 \text{ А/м}$ . Зображено частину енергетичного спектру, що близька до положення рівня Фермі.

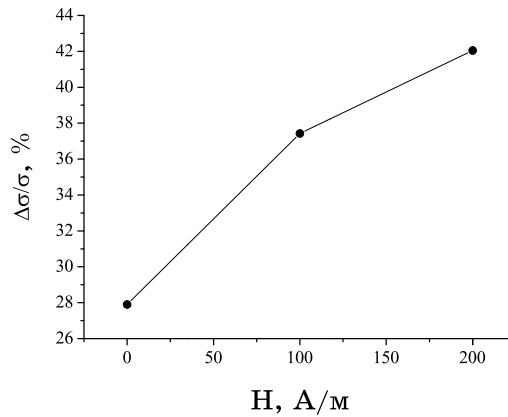
Як видно з рис. 1, 3, наявність атомів Cr призводить до відкриття квазищільни в енергетичному спектрі в станах електронів з проекцією спіну  $\sigma = -1/2$ .

На рисунку 4 показано залежність спінової поляризації електричного струму  $\Delta\sigma/\sigma = (\sigma_{1/2} - \sigma_{-1/2})/\sigma$  в графені від величини зовнішнього магнітного поля  $H$ , що розрахована за формулою (16) для те-





**Рис. 3.** Густина електронних станів графену з концентрацією атомів Cr  $c^{Cr} = 70\%$  у зовнішньому магнітному полі  $H = 100$  А/м.



**Рис. 4.** Залежність спінової поляризації  $\Delta\sigma/\sigma = (\sigma_{1/2} - \sigma_{-1/2})/\sigma$  електричного струму в графені від величини зовнішнього магнітного поля  $H$ .

мператури 300 К.

Як видно з рис. 4, величина спінової поляризації електричного струму в графені зростає із збільшенням напруженості зовнішнього магнітного поля.

Таким чином, явище спін-залежного електронного транспорту в графені виникає внаслідок сильних електронних кореляцій, зумовлених наявністю атомів хрому. Величина спінової поляризації електронного транспорту визначається різницею парціальних густин станів (рис. 1, 2) електронів з протилежною проекцією спіну на рівні Фермі та різницею часів релаксації, зумовленою різним числом заповнення одноелектронних станів  $Z_{ni\sigma}^\lambda$  атомів вуглецю та

хромум (див. вираз (4)). Величина спінової поляризації електричного струму в графені зростає зі збільшенням напруженості зовнішнього магнітного поля.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. C. Yang, J. Zhao, and J. P. Lu, *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 257203-1 (2003).
2. C. Yang, J. Zhao, and J. P. Lu, *Nano Lett.*, **4**: 561 (2004).
3. E. Durgun and S. Ciraci, *Phys. Rev. B*, **74**: 125404 (2006).
4. Yu. V. Skrypnuk and V. M. Loktev, *Phys. Rev. B*, **73**, No. 24: 241402(R) (2006).
5. Yu. V. Skrypnuk and V. M. Loktev, *Phys. Rev. B*, **75**: 245401 (2007).
6. С. П. Репецький, І. Г. Вишивана, В. В. Шастун, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **8**, вип. 3: 603 (2010).
7. С. П. Репецький, І. Г. Вишивана, В. В. Шастун, А. Ф. Мельник, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 4: 425 (2011).
8. S. P. Repetskii, I. G. Vyshivanaya, and D. K. Cheshkovskii, *The Physics of Metals and Metallography*, **113**: 213 (2012).
9. S. P. Repetsky and T. D. Shatnii, *Theoretical and Mathematical Physics*, **131**, No. 3: 832 (2002).