

PACS numbers: 61.48.Gh, 68.43.Fg, 68.65.Pq, 72.80.Vp, 73.22.Pr, 73.50.Bk, 81.05.ue

Конфігураційні ефекти в електропровідності графенового шару з розподіленими адсорбованими атомами (К)

Т. М. Радченко, В. А. Татаренко, І. Ю. Сагалянов*, Ю. І. Прилуцький*

*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульвар Академіка Вернадського, 36,
03680, МСП, Київ-142, Україна*

**Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
проспект Академіка Глушкова, 4^а,
03022 Київ, Україна*

Виявлено, що зі зміною випадкового на корельований або впорядкований просторові розподіли адатомів над графеновим шаром відбувається підвищення графенової електропровідності в декілька (десятки) разів. За випадкового розподілу адатомів, притягальних щодо вільних носіїв заряду, вони проявляють себе як далекочинні розсіювальні центри, а короткодія їх як притягальних розсіювальних центрів домінує за їхнього близького чи далекого порядків. Показано, що при впорядкованому розташуванні домішкового атомів (наприклад, К) безпосередньо над вузлами графенової ґратниці-адсорбенту відкривається заборонена зона в її енергетичному спектрі електронів, яка розширюється з підвищенням концентрації таких адатомів.

As revealed, with the change of random spatial distribution of adatoms all over the graphene layer for correlated and ordered ones, the electroconductivity enhances in several (tens) times. Randomly arranged adatoms, which are attractive for uncombined charge carriers, manifest themselves as the long-range scattering centres, while they dominate as the short-range attractive scatterers in case of their short-range or long-range ordered distributions. As shown, an ordered arrangement of dopant (e.g., K) atoms directly above the graphene-lattice sites results to the band-gap opening in its energy spectrum of electrons. The band gap widens as the concentration of such adatoms increases.

Обнаружено, что при смене случайного на коррелированное или упорядоченное пространственные распределения адатомов над графеновым слоем происходит повышение графеновой электропроводности в несколько (десятки) раз. При случайном распределении адатомов, притягивающих несвязанные носители заряда, они проявляют себя как дальнедействующие рассеивающие центры, однако короткодействие их как притягивающих рассеивающих центров доминирует при их ближнем или дальнем порядках.

Показано, что при упорядоченном размещении примесных атомов (например, К) непосредственно над узлами графеновой решётки-адсорбента открывается запрещённая зона в её энергетическом спектре электронов, которая расширяется с повышением концентрации таких адатомов.

Ключові слова: щільникова ґратниця, графен, легування, структура адсорбату, густина електронних станів, механізми розсіяння, електропровідність.

(Отримано 4 березня 2015 р.; остаточний варіант — 10 березня 2015 р.)

1. ВСТУП

Серед різних за симетрією двовимірних структур графен є наразі одним з найактуальніших об'єктів у фізиці твердого тіла. Одержання стабільних двовимірних ґратниць скінченних розмірів [1] свідчить про можливість створення на їх основі нового класу матеріалів, що є перспективним для розвитку нанотехнологій. Легування графенового шару, наприклад, атомами заміщення (В [2] чи N [3]), може бути стабілізувальним або ж регулювальним чинником, який сприятиме цілеспрямованій зміні його механічних і електрофізичних властивостей. Наразі дослідження відповідних ефектів є актуальним, адже встановлено, що графен — не лише найміцніший (за певних земних умов) матеріал, а й найліпший (за кімнатної температури) провідник [4]. Зокрема, легування здатне змінити не лише графенову електронну зонну структуру, яка істотно залежить від порядку розташування атомів заміщення, але й електропровідність. Водночас важливо розуміти, що неоднорідності левованої графенової структури спричиняють появу додаткових каналів розсіяння електронів провідності і відповідне зменшення провідності. Цей ефект потрібно враховувати при проєктуванні наноелектронних пристроїв на графеновій основі.

Графенові фізичні властивості істотно змінюються залежно від типу адатомів або атомів заміщення, що уможлиблює створення відповідних композитних матеріалів із заданими характеристиками. (До того ж наявність графенових монопрошарків і можливість осадження на них домішкових атомів істотно розширили кількість інтеркальованих сполук на неграфітовій основі.) За адсорбції атомів Калію формуються стабільні структури, які складаються з графенового шару і адсорбованих атомів (найчастіше в серединях шестикутників). Експериментальні дослідження виявили, що має місце істотне (в чотири рази) підвищення провідності за корельованого розташування адатомів К порівняно з їхнім випадковим розміщенням на графеновій поверхні [5–9]. Це відкриває реальний шлях до ефективного використання графенових шарів із зарядженими домішковими атомами (йонами) у наноелектроніці. Регулювання

графенової електропровідності за допомогою просторового перерозподілу точкових дефектів, таких як атоми заміщення, вакансії або адсорбовані атоми, є наразі актуальною фундаментальною і прикладною проблемою, розв'язання якої лише починаються.

2. МЕТОДОЛОГІЯ РОЗРАХУНКІВ

Розрахунки було проведено з використанням формалізму Кубо–Грінвуда у наближенні сильного зв'язку [10–27]. Для оцінювання електропровідності потрібно розрахувати електронний транспортний коефіцієнт, що має розмірність дифузійного [10–27]:

$$D_x(E, t) \propto \frac{\langle \hat{X}^2(E, t) \rangle}{t}, \quad (1)$$

де $\langle \hat{X}^2(E, t) \rangle$ — середньоквадратичне розширення з плином часу t електронного хвильового пакету з енергією E вздовж вісі Ox по графеновій площині [10–27]:

$$\langle \hat{X}^2(E, t) \rangle = \frac{\text{Tr}\{[\hat{X}(E, t) - \hat{X}(E, 0)]^2 \delta(E - \hat{H})\}}{\text{Tr}[\delta(E - \hat{H})]}. \quad (2)$$

Електропровідність σ розраховується за формулою Кубо–Грінвуда, що ґрунтується й на Айнштайновому співвідношенні [10–27]:

$$\sigma_x = e^2 \rho(E) D_x^{\max}(E), \quad (3)$$

де e — заряд електрона, $\rho(E)$ є густина електронних станів (electron density of states—DOS), а $D_x^{\max}(E)$ — максимум залежності $D_x(E)$.

Незв'язані носії заряду у графеновій ґратниці описуватимемо Гамільтоніаном у наближенні сильного зв'язку [28, 29]:

$$\hat{H} = -u \sum_{i,i'} c_i^+ c_{i'} + \sum_i V_i c_i^+ c_i, \quad (4)$$

де $u \cong 2,7$ еВ [28, 29] — інтеграл перескоку, c_i^+ і $c_{i'}$ оператори народження та знищення (квази)частинки-носія заряду у сусідніх місцях розташування i й i' (зокрема у сусідніх вузлах на віддалі a_0 один від другого, де $a_0 \cong 1,42$ Å [28, 29] — довжина сторони найменшого шестикутника з вершинами у вузлах графенової ґратниці).

Моделювання домішкових атомів виконано з використанням значень розсіювального потенціалу $\{V_i\}$, одержаного у роботі [30] для Калійових атомів над вуглецевою щільниковою ґратницею на висоті у 2,4 Å. Для його апроксимації було застосовано декілька різних функцій: двоекспонентну, Кулонову та Гауссову. Серед них найліпшою виявилася двоекспонентна апроксимація:

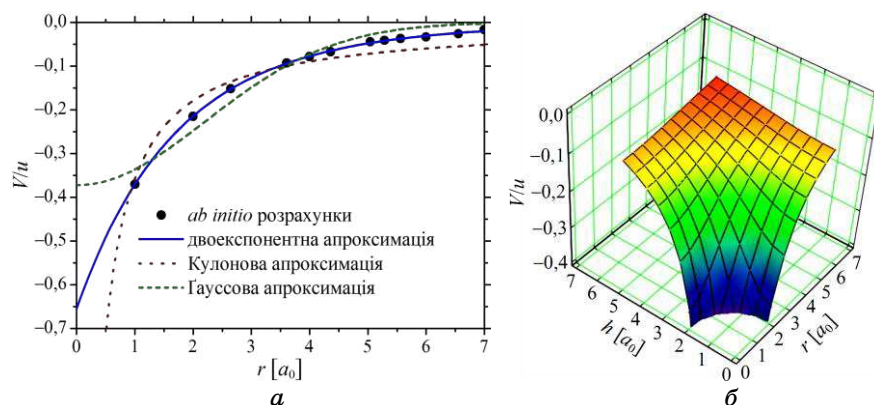


Рис. 1. Апроксимований різними функціями розсіювальний потенціал (●) [30] для адатомів Калію на фіксованій висоті адсорбції $h = 2,4 \text{ \AA}$ (а) та на різних висотах величиною h (б).

$$V(r) \approx -0,45u \exp\left(-\frac{r}{1,47a_0}\right) - 0,20u \exp\left(-\frac{r}{2,73a_0}\right). \quad (5)$$

Цей розсіювальний (через притягання) потенціал, очевидно, є короткосяжним, хоча й простягається на десятки координаційних «кіл», що видно з рис. 1, а (де для порівняння його зведені значення для різних віддалей r від йона К наближено різними функціями).

3. ПОЛОЖЕННЯ АДАТОМІВ НА ГРАФЕНОВІЙ ПОВЕРХНІ

Згідно із симетрією графенової ґратниці на рис. 2 зазначено три типи нееквівалентних положень для адсорбції домішкових атомів: H -положення (hollow adsorption sites), B -положення (bridge sites) і T -

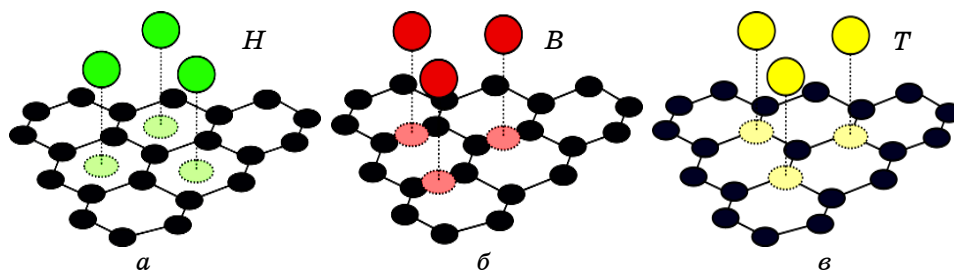


Рис. 2. Можливі положення адатомів над графеновим шаром: H -положення над центрами шестикутників (а), B -положення над центрами містків між сусідніми вузлами, T -положення безпосередньо над вузлами (в).

положення (top sites).

Залежно від виду домішки (заряджений йон або нейтральний атом, поодинокий атом або молекула) визначали її найімовірніше місце розташування над графеновим шаром. Саме для такої задачі зручно було використати методологію функціоналу густини електронів. Наразі з'ясовано, що: 1) найбільш вигідним (за енергією) положенням для металевих атомів є середина шестикутників — *H*-положення; проміжним за стабільністю є *B*-положення, а найменш вигідним — *T*-положення; 2) різниця між енергіями адсорбції у них для атомів лужних металів є незначною, що свідчить про можливість для таких металів як Калій перебувати у будь-якому з тих трьох нееквівалентних положень.

Як видно з рис. 3, різні типи просторових розподілів адатомів зу-

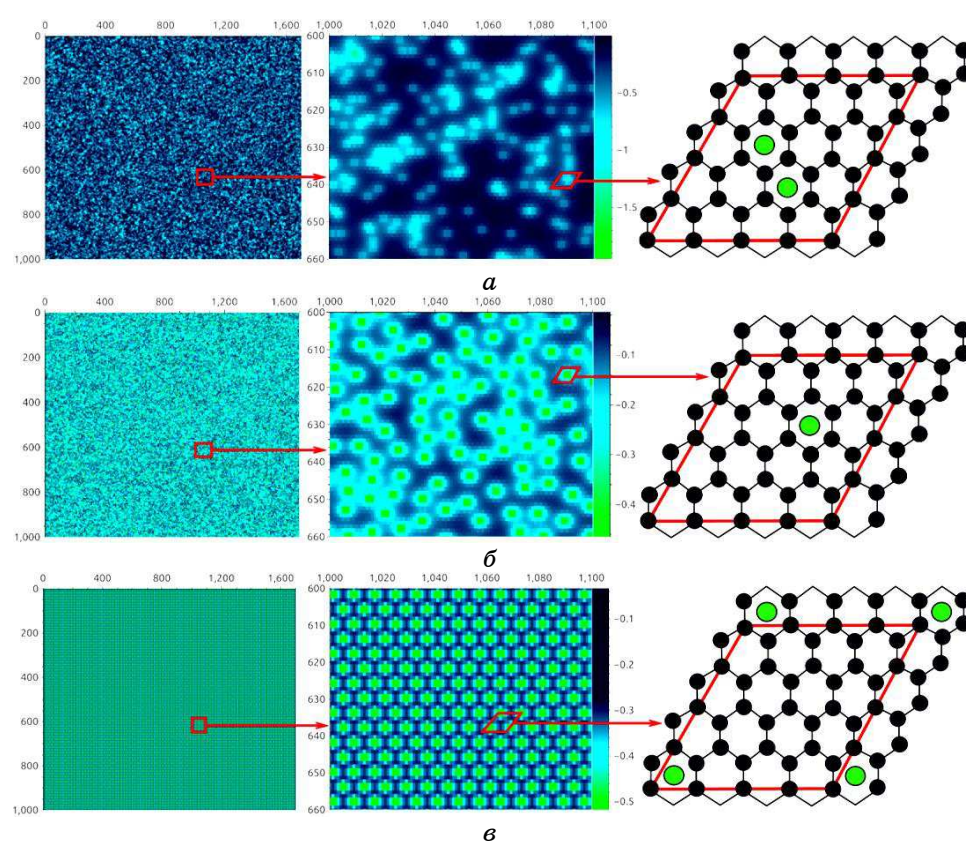


Рис. 3. Сумарні розсіювальні потенціали для різних просторових розподілів поодиноких адатомів К, адсорбованих у *H*-положеннях; значення потенціалу наведено в одиницях *u*; атоми К адсорбуються: (*a*) випадково, (*б*) корельовано з максимальним радіусом «блокування» чи (*в*) впорядковано.

мовляють різні розподіли сумарних розсіювальних потенціалів. Випадкове розташування адатомів уможливорює підвищити максимальне значення сумарного розсіювального потенціалу втричі, що унеможливорюється у випадку корельованого розташування адатомів (із ненульовим радіусом «блокування» — параметром кореляції [7]) або ж далекого порядку в їх взаємному розташуванні.

Крім того, як виявилось, важливу роль у регулюванні графенових електротранспортних властивостей відіграє висота положення адатомів над графеновим шаром.

При формуванні корельованих розподілів адатомів над графеновим шаром доцільним є створення їх із максимальним радіусом «блокування» (кореляційною довжиною [7]), адже нерозвинутий близький порядок (з малим радіусом «блокування») не приводить до істотного зростання провідності. Але для кожної концентрації адатомів є своє максимальне значення радіуса «блокування». Певно, зі збільшенням їх концентрації максимальне значення радіуса «блокування» може зменшуватися.

4. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ

4.1. Густина електронних станів

Густини електронних станів для адсорбції атомів у різних положеннях слабо відрізняються; тому можна навести її лише для випадку розташування адатомів у H -положеннях (рис. 2, a), як найбільш імовірних для адатомів К. Через притягальний характер розсіювального потенціалу, криві густини електронних станів (DOS) зсуваються відносно нульового значення E/u , що відповідає n -типу провідності. Як видно з рис. 4, a , адсорбції у H -положення відповідають майже еквівалентні криві DOS для усіх (випадкового, корельованого й упорядкованого) типів розподілу адатомів.

Індикатором впорядкованого просторового розподілу адатомів над графеновим шаром є набуття кривими DOS істотної «квазиосциляційної» структури. Характерні для впорядкованого розташування атомів К «квазиосциляції» кривих DOS набагато менші, аніж у випадку легування атомами N. Заборонена зона не виникає. Водночас, поблизу рівня Фермі криві густини електронних станів для корельованого і впорядкованого просторових розподілів майже дотикаються до нуля, що робить їх подібними до кривих DOS для чистого графенового шару, зсунутих відносно значення $E/u = 0$.

Адатами К у H - і B -положеннях не призводять до відкриття забороненої зони, але адсорбовані у T -положення атоми К проявляють себе подібно до Нітрогенових атомів заміщення, яких розглянуто у [31]: у останньому випадку має місце відкриття забороненої зони. Для опису залежності ширини забороненої зони від концентрації

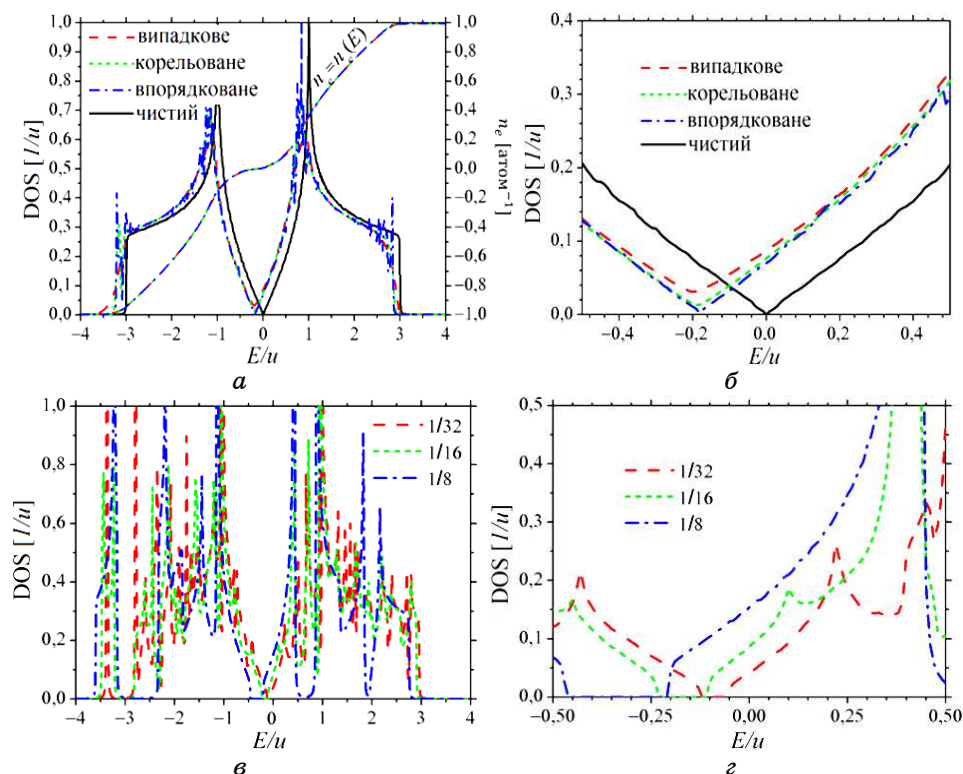


Рис. 4. Криві густини електронних станів графенового шару із 3,125% атомів К, адсорбованих у H -положеннях за різними типами просторового розподілу, та без адатомів К (а), (б). Криві DOS для впорядковано розташованих адатомів із модельним Гауссовим розсіювальним потенціалом, але за різних стехіометрій (в), (г). Рисунок у випадках (б) і (г) відтворюють випадки (а) і (в) відповідно, але зі збільшеним масштабом шкали енергій.

домішкових адатомів доцільно використати Гауссів модельний потенціал з малим радіусом дії ($< a_0$; рис. 4, в). Відповідно до розглянутих стехіометрій ($1/32$, $1/16$ і $1/8$), адсорбція домішки, модельованої таким потенціалом, припускалася у T -положення, і впорядковані адатоми займали позиції лише однієї підґратниці. Збільшення концентрації адатомів приводить до більш виразної «квази-осцилювної» структури кривих DOS і розширює заборонену зону, що спричинено періодичністю сумарного розсіювального потенціалу.

Розрахована густина електронних станів має пік поблизу Діракової точки, що відповідає домішковій зоні. На кривих спостерігаються також сингулярності типу Ван Говових, які розвиваються за достатньо протяжного розсіювального потенціалу. При упорядкуванні за короткосяжного потенціалу, особливо в режимі сильного

розсіяння, виникають дискретні енергетичні піки, які розширюються зі збільшенням вмісту домішкових атомів. Це є наслідком періодичності сумарного потенціалу (як і для модельного потенціалу Кроніга–Пенні). А для чистого графенового шару такі піки, як і той, що мав би бути в околі Діракової точки, відсутні.

Заборонена зона в енергетичному спектрі може відкриватися лише для тих впорядкованих розташувань домішкових (ад)атомів, які описуються вельми короткосяжним розсіювальним потенціалом і проявляють себе як дефекти заміщення. Появу забороненої зони спричинено зміною симетрії ґратниці надструктури порівняно з симетрією ґратниці неупорядкованого твердого розчину (завдяки впорядкованому розташуванню таких дефектів переважно лише в одній підґратниці). Ширина забороненої зони становить 0,16, 0,32 і 0,67 еВ для відносних концентрацій у 3,125%, 6,25% і 12,5% адсорбованих домішкових атомів (рис. 4, з) відповідно.

У випадку впорядкування адатомів, що не проявляють себе як дефекти заміщення, заборонена зона відсутня. Наразі відкритими залишаються питання стосовно кількості піків, їх висот і залежностей цих параметрів від типу та концентрації домішки, а також про зв'язок ширини забороненої зони та параметрів «квазиосциляцій» у зонній структурі леґованого графенового шару, що є предметом подальших досліджень. Впорядкована адсорбція домішкових атомів у T -положення, що призводить до відкриття забороненої зони, також робить адатоми у таких положеннях подібними до атомів заміщення або вакансій [32].

4.2. Електропровідність

Залежності графенової електропровідності від концентрації носіїв заряду, що настають за різних типів адсорбційних положень (H , V й T) та просторових розподілів по них адатомів, наведено на рис. 5; тут концентрація носіїв n_e ($-n_e > 0$) відповідає учасникам електронного (діркового) транспорту. Трьом типам просторового розташування та трьом типам адсорбційних положень відповідають дев'ять кривих електропровідності на рис. 5 для відносної концентрації адатомів 1/32 (3,125%).

Залежно від типу просторового розподілу адатомів провідність демонструє лінійний або нелінійний характер поведінки $\sigma(n_e)$.

Хоча заданий розсіювальний потенціал адатомів Калію є короткосяжним, саме завдяки його «хвостовій» частині скупчення їх деінде у групи підвищує там сумарний розсіювальний потенціал. Так стається для випадкового просторового розподілу адатомів К, а за інших типів (впорядкованого — далекого й близького) взаємного розташування віддалей між однаковими адатомами максимізується, що нівелює внесок потенціальних «хвостів». Саме тому й відбува-

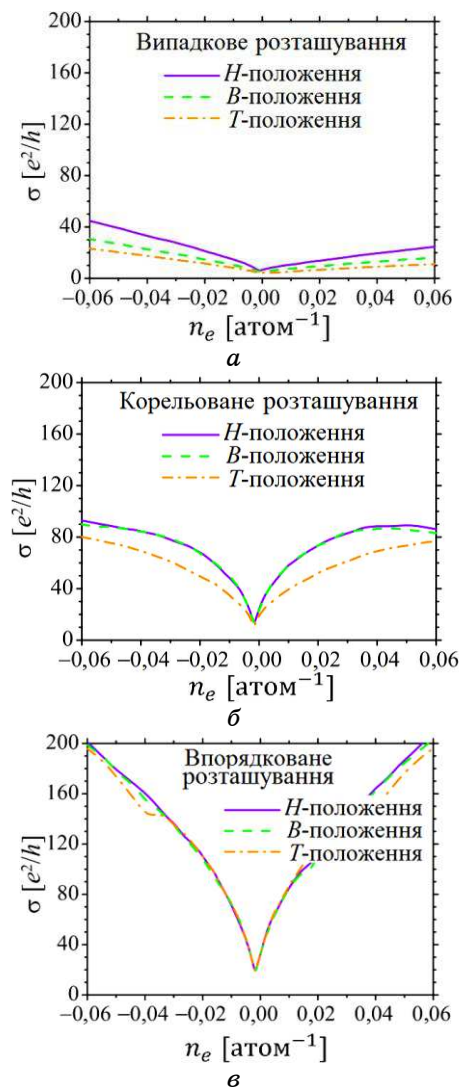


Рис. 5. Графенова електропровідність за випадкового, корельованого і впорядкованого розподілів 3,125% адатомів К по H -, B - або T -положеннях.

ється зміна від лінійної до нелінійної залежності провідності $\sigma(n_e)$.

Аналізуючи результати, яких наведено на рис. 5, можна зробити певні висновки у вигляді співвідношень між електричними провідностями, що відповідають різним розподілам адатомів (табл. 1).

Збільшення провідності відбувається у $\cong 7$ ($\cong 15$) разів у випадку корельованого (впорядкованого) просторового розподілу адатомів. Положення для їхньої адсорбції даються взнаки у електропровідно-

ТАБЛИЦЯ 1. Співвідношення між електропровідностями графенового адсорбенту, де верхні індекси позначають тип адсорбційних положень (H , B чи T), а нижні вказують на тип адатомового розподілу: випадковий (rnd), корельований (cor) або впорядкований (ord) за стехіометрії $1/32$.

Ефект кореляції у взаємному розташуванні	Ефект впорядкування взаємного розташування	Ефект типу адсорбційного осідку
$2 \leq \sigma_{\text{cor}}^H / \sigma_{\text{rnd}}^H \leq 5$	$3 \leq \sigma_{\text{ord}}^H / \sigma_{\text{rnd}}^H \leq 8$	$\sigma_{\text{rnd}}^T \leq \sigma_{\text{rnd}}^B \leq \sigma_{\text{rnd}}^H$
$2 \leq \sigma_{\text{cor}}^B / \sigma_{\text{rnd}}^B \leq 6$	$3 \leq \sigma_{\text{ord}}^B / \sigma_{\text{rnd}}^B \leq 9$	$\sigma_{\text{cor}}^T \leq \sigma_{\text{cor}}^B \leq \sigma_{\text{cor}}^H$
$2 \leq \sigma_{\text{cor}}^T / \sigma_{\text{rnd}}^T \leq 7$	$4 \leq \sigma_{\text{ord}}^T / \sigma_{\text{rnd}}^T \leq 15$	$\sigma_{\text{ord}}^T \leq \sigma_{\text{ord}}^B \leq \sigma_{\text{ord}}^H$

сті лише для випадкового просторового розподілу (електропровідність графенового шару з адатомами в H -положеннях перевищує провідність його з адатомами в інших адсорбційних положеннях).

У випадку адатомів, що впорядковуються, тип положення адсорбції перестає відігравати істотну роль, оскільки радіус дії розсіювального потенціалу Калію близький до параметру графенової ґратниці, і носіями слабше відчувається відмінність між адсорбційними положеннями за впорядкованого (та й корельованого) просторового розподілу таких адатомів.

Наведені в табл. 1 співвідношення виконуються для будь-якого розсіювального потенціалу, який має параметри, ідентичні до параметрів потенціалу, зображеного на рис. 1. Значну роль у підтримці співвідношень в третьому стовпчику таблиці має розподіл сумарного розсіювального потенціалу в околі атому домішки до найближчих сусідів. За адсорбції у H -положення число найближчих сусідів по вузлах складає шість; водночас, B -положенню відповідають два, а T -положенню — три найближчих сусіди по вузлах. Відповідно до цього, максимальні значення сумарного розсіювального потенціалу, залежно від типу адсорбційного положення, враховують від двох до шестиох вузлів. У T -положеннях адсорбції адатоми діють подібно до атомів заміщення, адже, як видно з рис. 5, провідність у випадку корельованого розподілу домішки по цих положеннях поступається провідності за інших адсорбційних положень розсіювальних центрів. Також ці висновки корелюють зі значеннями максимально допустимих радіусів «блокування» для різних положень адсорбції. Впорядковані розташування адатомів по них утворюють надґратниці з однаковим періодом. Наслідком цього є майже однакова провідність графенового адсорбенту для усіх трьох типів адсорбційних положень (рис. 5, e).

Окремою проблемою є дослідження залежності електропровідності від висоти h положення адатомів. Їх висота впливає на просторовий розподіл значень сумарного розсіювального потенціалу (рис. 6): чим вище знаходяться адатоми, тим більшою буде віддаль

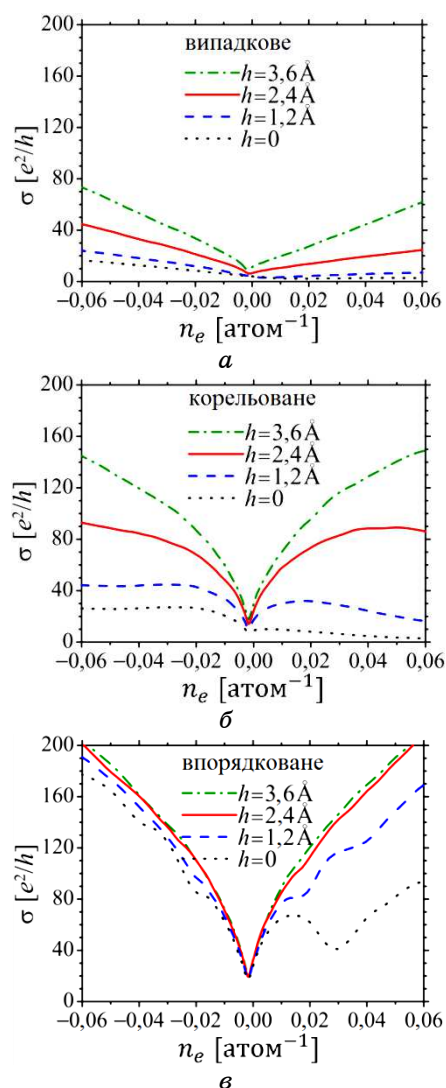


Рис. 6. Графенова електропровідність за різних адсорбційних висот випадково, корельовано та впорядковано розподілених адатомів Калію.

від них до вузлів ґратниці (рис. 1, б), а це робить вагомішими внески саме «хвостів» розсіювальних потенціалів адатомів (рис. 1, а).

За неупорядкованого (випадкового) розташування адатомів збільшення їх висоти над графеновою ґратницею нівелює електронно-діркову асиметрію провідності. Таке пригнічення асиметрії в провідності електронів і дірок є ще виразнішим за корельованого та/чи впорядкованого просторового розподілу домішки-адсорбату.

Водночас, зменшення h мало б посилювати вплив на електропровідність саме «серцевинної» частини розсіювального потенціалу.

Враховуючи за літературними даними наявні у *ab initio* розрахунках відмінності у висоті положень адатомів К над графеновою ґратницею, відзначимо доцільність дослідження зміни електропровідності від висоти адсорбційних положень. (І значення висоти варіювали від 0 Å безпосередньо у центрі шестикутників до 3,6 Å.)

За результатами розрахунків провідності залежно від концентрації носіїв заряду для різних висот і типів просторового розподілу адатомів К, яких наведено на рис. 6, лінійний або нелінійний характер кривих провідності зберігаються у всьому діапазоні розглянутих висот. Зі збільшенням висоти положення адатомів над графеновою ґратницею має місце підвищення провідності, причому це підвищення приблизно лінійно пропорційне збільшенню адатомової висоти h (принаймні, за невеликих значень h). За впорядкованого розподілу адатомів зміна h слабо впливає на провідність дірок у всьому інтервалі їх концентрації ($-n_e > 0$), а для електронної провідності її зростання зі збільшенням h майже відсутнє для реалістичних значень ($n_e \leq 0,01$ атом⁻¹) густини вільних електронів у графеновому шарі (рис. 6, в).

Результати проведених розрахунків корелюють з експериментальними даними за наступними рисами:

- 1) криві DOS зсунуті у бік від'ємних енергій;
- 2) має місце вища провідність у випадку корельованого та/чи впорядкованого розташування адатомів порівняно з випадковим;
- 3) є асиметрія між провідністю для електронів і дірок, яка зменшується у випадку корельованого чи впорядкованого розташувань адатомів по адсорбційних положеннях заданого типу на фіксованій висоті, а також зі збільшенням висоти положення адатомів над графеновою ґратницею;
- 4) збігаються характер кривих електронної та діркової провідностей (лінійний або нелінійний) для різних типів просторового розподілу адатомів.

5. ВИСНОВКИ

З використанням формалізму Кубо–Грінвуда у наближенні сильного зв'язку досліджено вплив точкових дефектів заміщення й адсорбції та їх просторового розподілу на графенові електротранспортні властивості. Зокрема встановлено наступне.

♦ Для випадкового розташування адатомів, притягальних щодо носіїв заряду, домінуючим є далекочинне розсіяння ними, водночас, як для інших типів просторового розподілу таких адатомів (корельованого та/чи впорядкованого) домінуючим є саме короточинне розсіяння, що свідчить про різні механізми розсіяння для

різних типів взаємного розташування адатомів.

♦ Впорядковане розташування адатомів у T -положеннях приводить до того, що вони проявляють себе у розсіянні носіїв заряду як атоми заміщення. При цьому може відкриватися заборонена зона в графеновому енергетичному спектрі (внаслідок зміни симетрії надгратниці), що не має місця для графенового шару з адатомами у інших адсорбційних (H - і B -) положеннях. Чим більша (менша) амплітуда розсіювального потенціалу та/чи концентрація T -адатомів, тим більша (менша) ширина забороненої зони.

♦ На прикладі адатомів К для різних адсорбційних положень і просторових розподілів їх встановлено співвідношення для графенової провідності. Збільшення провідності у ≈ 7 (≈ 15) разів відбувається за корельованого (впорядкованого) просторового розподілу адатомів. Тип положень адсорбції істотно впливає на електропровідність для випадкового просторового розподілу адатомів (електропровідність графенового шару з адатомами у H -положеннях перевищує провідність його з адатомами в інших адсорбційних положеннях). У випадку впорядкованих адатомів тип положень адсорбції перестав відігравати істотну роль. Ці ефекти пов'язані з тим, що радіус дії розсіювального потенціалу адатомів Калію близький до параметру графенової ґратниці і за їхніх корельованого і, тим паче, впорядкованого просторових розподілів носії заряду слабше відчують різницю між адсорбційними положеннями.

♦ За неупорядкованого (випадкового) розподілу адатомів на малих (порівнянних з параметром ґратниці) висотах над графеновим шаром його електропровідність приблизно лінійно залежить від їхньої адсорбційної висоти, а за впорядкованого розподілу графенова електропровідність практично не залежить від висоти адсорбції (принаймні, для реалістичних значень ($\leq 0,01$ атом⁻¹) густини вільних електронів).

ПОДЯКА

Роботу виконано в рамках науково-дослідницького проєкту між Національною академією наук України та Польською академією наук згідно з розпорядженням НАН України від 15.12.2014 р. № 793.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, *Proc. of the N.A.S. of the U.S.A.*, **102**, No. 30: 10451 (2005).
2. S. Dutta and S. K. Pati, *J. Phys. Chem. B*, **112**, No. 5: 1333 (2008).
3. D. Wei, Y. Liu, Yu Wang, H. Zhang, L. Huang, and G. Yu, *Nano Lett.*, **9**, No. 5: 1752 (2009).
4. E. H. Hwang, S. Adam, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.*, **98**: 186806 (2007).

5. J. H. Chen, C. Jang, S. Adam, M. S. Fuhrer, E. D. Williams, and M. Ishigami, *Nat. Phys.*, **4**: 377 (2008).
6. S. Xiao, J.-H. Chen, S. Adam, E. D. Williams, and M. S. Fuhrer, *Phys. Rev. B*, **82**: 041406 (2010).
7. J. Yan and M. S. Fuhrer, *Phys. Rev. Lett.*, **107**: 206601 (2011).
8. C. A. Howard, M. P. M. Dean, and F. Withers, *Phys. Rev. B*, **84**: 241404(R) (2011).
9. M. Xue, G. Chen, H. Yang, Y. Zhu, D. Wang, J. He, and T. Cao, *J. Am. Chem. Soc.*, **134**: 6536 (2012).
10. O. Madelung, *Introduction to Solid-State Theory* (Berlin: Springer: 1996).
11. S. Roche and D. Mayou, *Phys. Rev. Lett.*, **79**: 2518 (1997).
12. S. Roche, N. Leconte, F. Ortmann, A. Lherbier, D. Soriano, and J.-Ch. Charlier, *Solid State Comm.*, **153**: 1404 (2012).
13. T. Markussen, R. Rurali, M. Brandbyge, and A.-P. Jauho, *Phys. Rev. B*, **74**, 245313 (2006).
14. F. Triozon, J. Vidal, R. Mosseri, and D. Mayou, *Phys. Rev. B*, **65**: 220202(R) (2002).
15. F. Triozon, S. Roche, A. Rubio, and D. Mayou, *Phys. Rev. B*, **69**: 121410(R) (2004).
16. A. Lherbier, B. Biel, Y.-M. Niquet, and S. Roche, *Phys. Rev. Lett.*, **100**: 036803 (2008).
17. A. Lherbier, X. Blase, Y.-M. Niquet, F. Triozon, and S. Roche, *Phys. Rev. Lett.*, **101**: 036808 (2008).
18. A. Lherbier, S. M.-M. Dubois, X. Declerck, S. Roche, Y.-M. Niquet, and J.-Ch. Charlier, *Phys. Rev. Lett.*, **106**: 046803 (2011).
19. N. Leconte, A. Lherbier, F. Varchon, P. Ordejon, S. Roche, and J.-C. Charlier, *Phys. Rev. B*, **84**: 235420 (2011).
20. A. Lherbier, S. M.-M. Dubois, X. Declerck, Y.-M. Niquet, S. Roche, and J.-Ch. Charlier, *Phys. Rev. B*, **86**: 075402 (2012).
21. G. Trambly de Laissardiere and D. Mayou, *Mod. Phys. Lett. B*, **25**: 1019 (2011).
22. H. Ishii, N. Kobayashi, and K. Hirose, *Phys. Rev. B*, **82**: 085435 (2010).
23. D. V. Tuan, J. Kotakoski, T. Louvet, F. Ortmann, J. C. Meyer, and S. Roche, *Nano Lett.*, **13**: 1730 (2013).
24. T. M. Radchenko, A. A. Shylau, and I. V. Zozoulenko, *Phys. Rev. B*, **86**: 035418 (2012).
25. T. M. Radchenko, A. A. Shylau, I. V. Zozoulenko, and A. Ferreira, *Phys. Rev. B*, **87**: 195448 (2013).
26. T. M. Radchenko, A. A. Shylau, and I. V. Zozoulenko, *Solid State Comm.*, **195**: 88 (2014).
27. T. M. Radchenko, V. A. Tatarenko, I. Yu. Sagalianov, and Yu. I. Prylutskyy, *Graphene: Mechanical Properties, Potential Applications and Electrochemical Performance* (Ed. B. T. Edwards) (New York: Nova Science Publishers: 2014), Ch. 7, pp. 219–259; arXiv:1406.0783.
28. N. M. R. Peres, *Rev. Mod. Phys.*, **82**: 2673 (2010).
29. S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.*, **83**: 407 (2011).
30. Ch. Adessi, S. Roche, and X. Blase, *Phys. Rev. B*, **73**: 125414 (2006).
31. T. M. Radchenko, V. A. Tatarenko, I. Yu. Sagalianov, and Yu. I. Prylutskyy, *Phys. Lett. A*, **378**: 2270 (2014).
32. R. Martinazzo, S. Casolo, G. F. Tantardini, *Phys. Rev. B*, **81**: 245420 (2010).