

# РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ И НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ТЕРМОДИНАМИКИ ГРАФЕНОВЫХ СЛОЕВ

**З. З. Алисултанов\***

*Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук  
119991, Москва, Россия*

*Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра Российской академии наук  
367003, Махачкала, Россия*

*Дагестанский государственный университет  
367000, Махачкала, Россия*

Поступила в редакцию 3 августа 2015 г.

С помощью метода квантовых функций Грина получены выражения для энергетических спектров однослойного, двухслойного и многослойного графена, а также эпитаксиального графена. Получены аналитические выражения для плотностей состояний рассматриваемых систем. Показано, что в спектре эпитаксиального бислоя графена может открыться запрещенная щель. В качестве приложений рассмотрен ряд вопросов термодинамики электронов в свободных и эпитаксиальных графеновых слоях. Получены аналитические выражения для химического потенциала и теплоемкости для предельных случаев низких и высоких температур. Исследованы квантовые осцилляции теплоемкости в графене с учетом кулоновского взаимодействия. Исследована фаза Берри эпитаксиального графена.

DOI: 10.7868/S0044451016020176

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Первое исследование графена было проведено, по-видимому, в 1947 г. Уоллесом для описания электронных свойств графита [1]. Хотя в этой работе теоретически продемонстрирован ряд свойств графена, принципиально отличающих этот материал от других известных в то время, она не вызвала большого интереса у научного сообщества. В промежутке между 1947 г. и 2004 г. можно отметить лишь несколько очень важных работ, связанных с графеном (см., например, [2–7]). Слабый интерес к результатам Уоллеса по графену был обусловлен тем, что известная теорема Ландау – Пайерлса – Мермина – Вагнера [8–10] запрещала существование двумерных кристаллов. Действительно, согласно этой теореме, в двумерном случае не может существовать дальнего порядка из-за расходимости тепловых флуктуаций, т. е. двумерный графит был чисто теоретическим объектом. Вследствие этого результаты, полученные для графена рассматрива-

лись всего лишь как основа для графита. С 2004 г., когда группой Гейма и Новоселова была экспериментально продемонстрирована возможность получения графена и были исследованы его необычные свойства [11, 12], интерес к этому материалу значительно возрос. В 2010 г. Гейму и Новоселову была вручена Нобелевская премия за открытие и исследование нового материала — графена. Реальность двумерного кристалла заставила пересмотреть теорему Ландау – Пайерлса – Мермина – Вагнера, которая была выведена в гармоническом приближении. Более строгое рассмотрение вопроса о существовании дальнего порядка с учетом ангармонических вкладов показало, что в двумерных системах может существовать квазидальний порядок.

Сегодня можно уверенно утверждать, что исследование графена является одним из актуальных вопросов физики конденсированного состояния. С каждым днем увеличивается количество публикаций, в которых графен исследуется для весьма широкого диапазона практических интересов, начиная с оптоэлектрических [13–18] и термоэлектрических [19] применений и заканчивая улучшением за счет графена добычи природного газа [20] и опреснения воды [21]. Уникальная цитотоксичность графе-

\* E-mail: zaur0102@gmail.com

на делает его идеальным материалом для очистки воды от биообрастания [22–24]. Очень большое число работ посвящено исследованиям графена для медицинских приложений. Это и транспорт лекарств по организму и нейроонкология [25–27], и нейромониторинг [28–30] и многое другое. Графен и другие углеродные аллотропы могут быть использованы для защиты от химического оружия [31]. Все это связано со своеобразной геометрией графена (истинно двумерная система) и дираковским спектром носителей [32], устойчивым относительно кулоновского взаимодействия [33]. Необычный электронный спектр графена есть следствие симметрии кристаллической решетки (гексагональная структура — пчелиные соты). Графен относят к полуметаллам или к бесцелевым полупроводникам, поскольку валентная зона графена полностью заполнена, а зона проводимости полностью пустая. Тот факт, что уровень Ферми электронов графена проходит через точку Дирака (точка пересечения валентной зоны и зоны проводимости), связан с валентностью атома углерода (атом углерода в  $2p_z$ -состоянии содержит один электрон вместо двух, которые в этом состоянии могут находиться согласно принципу Паули).

Одним из основных направлений физики графена является изучение эпитаксиального графена (ЭГ), сформированного на поверхности металлов или полупроводников [34–40]. Интерес к изучению ЭГ вызван несколькими причинами. Во-первых, при выращивании кристаллов на карбиде кремния различными методами (например, методом молекулярно-лучевой эпитаксии) может произойти рост графена, что сильно влияет на свойства кристаллов. Существуют специальные методы подавления роста графена. Во-вторых, графеновый слой на поверхности металлов и полупроводников может быть рассмотрен в качестве эффективного контакта в приборных устройствах. Этот вопрос для подложки из карбида кремния был рассмотрен в работе [35]. В-третьих, для того, чтобы в полной мере использовать свойства графеновых слоев в электронике, необходимо варьировать их структуру, химический состав, морфологию и т. д., что можно сделать с помощью соответствующей подложки. Кроме того, существует известное обстоятельство, ограничивающее реальное применение изолированного графена в электронике. Это отсутствие щели в энергетическом спектре носителей. Получение щели в спектре графена (выбором соответствующей подложки, приложением внешнего электрического поля к бислою графена, добавлением примесей и т. д.) является актуальной проблемой физики графена. Существует

достаточное количество экспериментальных работ по исследованию электронных свойств ЭГ (см., например, работы [34, 36–40]), а также многочисленные работы группы Уолта де Хира (W. de Heer).

Одним из существенных следствий необычного спектра является необычное поведение графена в магнитном поле [32]. Так, уровни Ландау в графене являются неэквидистантными, причем имеется нулевой уровень. Расстояние между уровнями Ландау аномально большое (разность между двумя первыми уровнями Ландау в магнитном поле 10 Тл составляет более 1000 К). Это приводит к гигантским магнитооптическим [41] и термомагнитным эффектам [42], а также к необычному квантовому эффекту Холла, который в графене, в отличие от других материалов, можно наблюдать даже при комнатной температуре [11, 43]. Большой интерес представляет исследование графена, помещенного в скрещенные магнитное и электрическое поля. В случае наличия продольного электрического поля уровни Ландау в графене зависят от последнего [44, 45]. Такая зависимость связана с неквадратичностью энергетического спектра носителей. Действительно, еще Лифшицем и Кагановым было показано [46], что в случае неквадратичной зависимости энергии электрона от импульса циклотронная частота электронов в магнитном поле зависит от приложенного электрического поля. Дело в том, что только для квадратичного спектра циклотронная масса носителей не зависит от энергии. В недавней работе [47] были исследованы осцилляции намагниченности, а в [48, 49] — осцилляции Нернста–Эттингсгаузена в графене в скрещенных полях. Было показано, что период и форма осцилляций зависят от электрического поля. Кроме фундаментального интереса возможность перестраивать диамагнитные свойства вещества с помощью электрического поля представляет большой интерес для потенциальных практических приложений графена.

В основе всех свойств графена лежит необычный энергетический спектр квазичастиц. Безусловно, расчет последнего, исследование влияния на него кулоновского взаимодействия, рассеяния на дефектах и т. д. является одной из основных задач физики графена. В настоящей работе мы с помощью единого подхода, основанного на квантовых функциях Грина, получили энергетические спектры и плотности состояний однослойного, двухслойного, трехслойного и  $N$ -слойного графена с разными типами упаковок: берналловским и ромбоэдрическим. Кроме того, мы показали, как в рамках указанного подхода исследовать влияние дефектов на энерге-

тический спектр. При этом мы ограничились приближением  $T$ -матрицы рассеяния, а также привели борновское и самосогласованное борновское приближения рассеяния.

Настоящая работа построена следующим образом. В разд. 2 мы привели выводы электронных спектров многослойного графена и эпитаксиального графена. В разд. 3 исследуются химический потенциал, теплоемкость и ее квантовые осцилляции для частных случаев: монослоя и бислоя графена, а также для однослойного эпитаксиального графена. Для последнего исследована фаза Берри.

## 2. ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ОДНОСЛОЙНОГО, ДВУХСЛОЙНОГО И МНОГОСЛОЙНОГО ГРАФЕНА

Здесь мы продемонстрируем вывод энергетического спектра для исследуемых систем с помощью метода функций Грина в приближении сильной связи. При этом мы будем учитывать лишь наиболее существенные интегралы перекрытия. На протяжении всей статьи не учитываются эффекты, связанные со спином.

### 2.1. Монослой графена

Кристаллическая структура и зона Бриллюэна однослойного графена представлены на рис. 1. Графен имеет гексагональную кристаллическую решетку с двумя примитивными решетками Бравэ. Эти решетки называются подрешетками А и В. В физике графена принадлежность электрона к какой-либо из этих подрешеток описывается так называемым

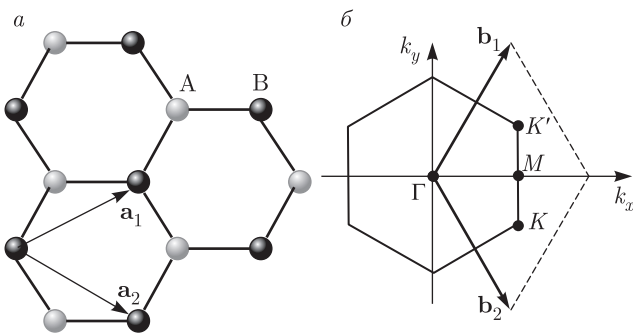


Рис. 1. *a*) Кристаллическая решетка графена; подрешетки А и В — соответственно светлые и темные кружки; *б*) обратная решетка и некоторые специальные точки в зоне Бриллюэна.  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  и  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  — векторы соответственно прямой и обратной решеток

псевдоспином. Благодаря тому что псевдоспин может принять два значения (подрешетка А или подрешетка В), волновая функция электронов графена представляет собой спинор. Гамильтониан монослоя графена в приближении ближайших соседних атомов записывается в следующем виде:

$$H = \sum_i E_0 \left( a_i^\dagger a_i + b_{i+\delta_j}^\dagger b_{i+\delta_j} \right) + \sum_{i,j} t \left( a_i^\dagger b_{i+\delta_j} + \text{H.c.} \right), \quad (1)$$

где  $E_0$  — энергия, соответствующая  $2p_z$ -орбитали атома углерода в структуре графена,  $a_i$  и  $a_i^\dagger$  — операторы уничтожения и рождения электрона, принадлежащего  $i$ -му атому подрешетки А,  $b_i$  и  $b_i^\dagger$  — операторы уничтожения и рождения электрона, принадлежащего  $i$ -му атому подрешетки В,  $t$  — энергия перескока между ближайшими соседними атомами (между подрешетками А и В),

$$\delta_1 = \frac{a}{2} \left( 1, \sqrt{3} \right), \quad \delta_2 = \frac{a}{2} \left( 1, -\sqrt{3} \right), \quad \delta_3 = \frac{a}{2} \left( -1, 0 \right)$$

— векторы расстояний между ближайшими соседними атомами,  $a \approx 1.42 \text{ \AA}$  — расстояние между ближайшими атомами углерода. Переходя от координатного пространства к импульсному с помощью соотношений

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k a_k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i), \quad (2)$$

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k b_k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i),$$

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k a_k^\dagger \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i), \quad (3)$$

$$b_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k b_k^\dagger \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i),$$

где  $N_a$  — число атомов в одной подрешетке, получим

$$H = \sum_k E_0 \left( a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k \right) + \sum_k \left[ f(\mathbf{k}) a_k^\dagger b_k + \text{H.c.} \right], \quad (4)$$

$$f(\mathbf{k}) = \sum_j t \exp(i\mathbf{k} \cdot \delta_j), \quad (5)$$

$$f^*(\mathbf{k}) = \sum_j t \exp(-i\mathbf{k} \cdot \delta_j).$$

Введем следующие функции Грина при нулевой температуре:

$$G_A = \langle\langle a_k | a_k^\dagger \rangle\rangle, \quad G_B = \langle\langle b_k | b_k^\dagger \rangle\rangle, \quad (6)$$

$$G_{AB} = \langle\langle a_k | b_k^\dagger \rangle\rangle, \quad G_{BA} = \langle\langle b_k | a_k^\dagger \rangle\rangle, \quad (7)$$

где  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$  означает квантовомеханическое усреднение. Воспользуемся известным соотношением для произвольных операторов  $A$  и  $B$ :

$$\varepsilon \langle\langle A|B \rangle\rangle = \langle[A, B]_\eta\rangle + \langle\langle \{AH - HA\} | B \rangle\rangle, \quad (8)$$

где  $[A, B]_\eta = AB + \eta BA$ ,  $\eta = +1$  для фермионов,  $\eta = -1$  для бозонов. Используя это соотношение, получим следующее выражение для функции Грина электронов, принадлежащих подрешетке A:

$$G_A = \left( \varepsilon - E_0 - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon - E_0} \right)^{-1}. \quad (9)$$

Здесь и далее под  $\varepsilon$  в функциях Грина подразумевается величина  $\varepsilon + i0$ . Энергетический спектр определяется из условия  $\text{Re } G^{-1} = 0$ , что дает

$$\varepsilon_k = E_0 \pm |f(\mathbf{k})|. \quad (10)$$

Спектральная функция определяется следующим образом:

$$A(\mathbf{k}, \varepsilon) = -\pi^{-1} \text{Im } G(\varepsilon + i0). \quad (11)$$

Заметим, что

$$G_A = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\varepsilon - E_0 - |f(\mathbf{k})|} + \frac{1}{\varepsilon - E_0 + |f(\mathbf{k})|} \right) = \frac{1}{2} \sum_{\nu_b = \pm 1} \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \nu_b |f(\mathbf{k})|}, \quad (12)$$

т. е. полная функция Грина состоит из функций Грина электронов валентной зоны ( $\nu_b = -1$ ) и зоны проводимости ( $\nu_b = +1$ ). Итак, для спектральной функции получаем

$$A(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{2} \sum_{\nu_b = \pm 1} \delta(\varepsilon - E_0 - \nu_b |f(\mathbf{k})|). \quad (13)$$

Вблизи точки Дирака с координатами  $\mathbf{K} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$  для энергетического спектра имеем

$$f(\mathbf{k}) = \nu_b v_F (-ip_x - py),$$

где  $\mathbf{p} = \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{K})$ ,  $v_F = 3ta/2\hbar$  — скорость Ферми для электронов графена. Как легко видеть, точке Дирака соответствует энергия  $E_0$ . Будем энергию отсчитывать от этой точки, в связи с чем, положим  $E_0 = 0$ . На самом деле, в зоне Бриллюэна есть две неэквивалентные точки Дирака,  $\mathbf{K}$  и  $\mathbf{K}'$ , вблизи которых спектр линеен. Окрестности этих точек называются долинами по аналогии с физикой полупроводников. Таким образом, электроны графена дву-

кратно вырождены по долинам. В окрестности точки Дирака для плотности состояний с учетом вырождения по спину и по долинам получаем

$$\rho(\varepsilon) = \frac{|\varepsilon| S}{\pi v_F^2 \hbar^2} \theta(\xi^2 - \varepsilon^2), \quad (14)$$

где  $S$  — площадь поверхности графена,  $\xi$  — энергетический параметр порядка ширины зоны. Величину  $\xi$  определим из естественного условия, что один атом недопированного графена содержит один электрон в  $2p_z$ -состоянии, т. е.  $\int_{-\xi}^{\xi} \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 1$ , где  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми, равная нулю для недопированного графена. Из этого условия имеем  $\xi = \sqrt{\pi\sqrt{3}} t$ . При получении выражения (14) мы воспользовались формулой

$$\delta(\varepsilon - x) + \delta(\varepsilon + x) = 2|\varepsilon| \delta(\varepsilon^2 - x^2). \quad (15)$$

Теперь обсудим случай щелевого графена. Если нарушить симметрию между двумя подрешетками (дефекты, примеси и т. д.), то в спектре графена возникает запрещенная щель. Нарушение симметрии между подрешетками с физической точки зрения означает, что атомы углерода, принадлежащие различным подрешеткам в графене, находятся в разных физических условиях. Например, при наличии вакансий или примесей разные атомы окружены различным числом соседних атомов. Это приводит к тому, что энергии  $2p_z$ -орбиталей, которые перенормируются в кристалле за счет кристаллического поля, для атомов различных подрешеток будут различными. В общем виде гамильтониан следовало бы написать в следующем виде:

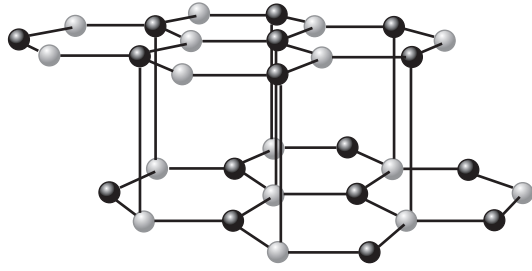
$$H = \sum_i \left( E_i^A a_i^\dagger a_i + E_{i+\delta_j}^B b_{i+\delta_j}^\dagger b_{i+\delta_j} \right) + \sum_{i,j} t \left( a_i^\dagger b_{i+\delta_j} + \text{H.c.} \right).$$

Такая запись существенно усложняет задачу. Будем использовать предположение о том, что все атомы данной подрешетки обладают одинаковой энергией, но энергии, соответствующие разным подрешеткам, разные. Тогда гамильтониан запишется в виде

$$H = \sum_i \left( E^A a_i^\dagger a_i + E^B b_{i+\delta_j}^\dagger b_{i+\delta_j} \right) + \sum_{i,j} t \left( a_i^\dagger b_{i+\delta_j} + \text{H.c.} \right).$$

После фурье-преобразования имеем

$$H = \sum_k \left( E^A a_k^\dagger a_k + E^B b_k^\dagger b_k \right) + \sum_k \left[ f(\mathbf{k}) a_k^\dagger b_k + \text{H.c.} \right].$$



**Рис. 2.** Кристаллическая структура бислоя графена. Линии соединяющие два слоя обозначают взаимодействие  $t_{\perp}$ , которое является наиболее существенным из всех возможных интегралов перекрытия

Такой гамильтониан приводит к следующему выражению для функции Грина:

$$G_A = \left( \varepsilon - E^A - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon - E^B} \right)^{-1}.$$

Полагая, что  $E^A - E^B = 2\Delta$ , или  $E^A = E_0 + \Delta$ ,  $E^B = E_0 - \Delta$ , для спектра получаем

$$\varepsilon_k = E_0 \pm \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2 + \Delta^2}.$$

Именно такой спектр в основном и используется при исследовании щелевого графена (см., например, [32]). Как легко видеть, ширина щели равна  $2\Delta$ .

### 2.2. Бислой графена

Рассмотрим теперь бислой графена. Второй слой повернут относительно первого на угол  $60^\circ$ . Кристаллическая структура бислоя показана на рис. 2. В случае бислоя имеются электронные перескоки как внутри слоев, так и между различными слоями. Из рис. 2 видно, что в общем случае между слоями имеется несколько интегралов перекрытия. Мы оставим только один наиболее существенный. Для ситуации, показанной на рис. 2, наиболее существенным интегралом перекрытия является  $t_{\perp}$ .

Гамильтониан бислоя запишется в виде

$$H = \sum_i E_0 \left( a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i \right) + \sum_i E_0 \left( a_i^2 a_i + b_i^2 b_i \right) + \sum_{i,j} t \left( a_i^\dagger b_j + \text{H.c.} \right) + \sum_{i,j} t \left( a_i^2 b_j + \text{H.c.} \right) + \sum_i t_{\perp} \left( a_i^\dagger b_i + \text{H.c.} \right), \quad (16)$$

где индексы над операторами рождения и уничтожения электронов соответствуют номеру слоя. Переход к импульсному пространству дает

$$H = \sum_k \left[ f(\mathbf{k}) \left( a_k^\dagger b_k + a_k^2 b_k \right) + \text{H.c.} \right] + \sum_k t_{\perp} \left( a_k^\dagger b_k + \text{H.c.} \right), \quad (17)$$

где мы положили  $E_0 = 0$ . Поступая так же, как и в предыдущем случае, получим

$$G_A = \left[ \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} - t_{\perp}^2 \left( \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} \right)^{-1} \right]^{-1}. \quad (18)$$

Соответственно, для спектра вблизи точки Дирака получаем

$$\varepsilon_p = \pm \sqrt{v_F^2 p^2 + \frac{t_{\perp}^2}{2}} \pm \sqrt{v_F^2 p^2 t_{\perp}^2 + \frac{t_{\perp}^4}{4}}. \quad (19)$$

Заметим, что

$$G_A = \frac{1}{4} \times \sum_{\nu_b, \nu_{sb} = \pm 1} \frac{1}{\varepsilon - \nu_b \sqrt{v_F^2 p^2 + \frac{t_{\perp}^2}{2}} - \nu_{sb} \sqrt{v_F^2 p^2 t_{\perp}^2 + \frac{t_{\perp}^4}{4}}}, \quad (20)$$

где  $\nu_{sb} = \pm 1$  — индексы подзон. Поступая аналогично предыдущему разделу, получим

$$A(p, \varepsilon) = |\varepsilon| \left| \varepsilon^2 - v_F^2 p^2 - \frac{t_{\perp}^2}{2} \right| \times \delta \left( \left( \varepsilon^2 - v_F^2 p^2 - \frac{t_{\perp}^2}{2} \right)^2 - \left( v_F^2 p^2 t_{\perp}^2 + \frac{t_{\perp}^4}{4} \right) \right). \quad (21)$$

Приложение внешнего электрического поля нарушает электронейтральность слоев из-за электронного обмена между последними. Именно, заряд одного слоя становится отрицательным из-за избытка электронов, а заряд второго — положительным. Если обозначить потенциал поля, индуцируемого на атомах первого слоя, через  $U$ , то потенциал атомов второго слоя будет равен  $-U$ . Соответствующий гамильтониан, очевидно, запишется как

$$H = \sum_k (E_0 + U) \left( a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k \right) + \sum_k (E_0 - U) \left( a_k^2 a_k + b_k^2 b_k \right) + \sum_k \left[ f(\mathbf{k}) \left( a_k^\dagger b_k + a_k^2 b_k \right) + \text{H.c.} \right] + \sum_k t_{\perp} \left( a_k^\dagger b_k + \text{H.c.} \right). \quad (22)$$

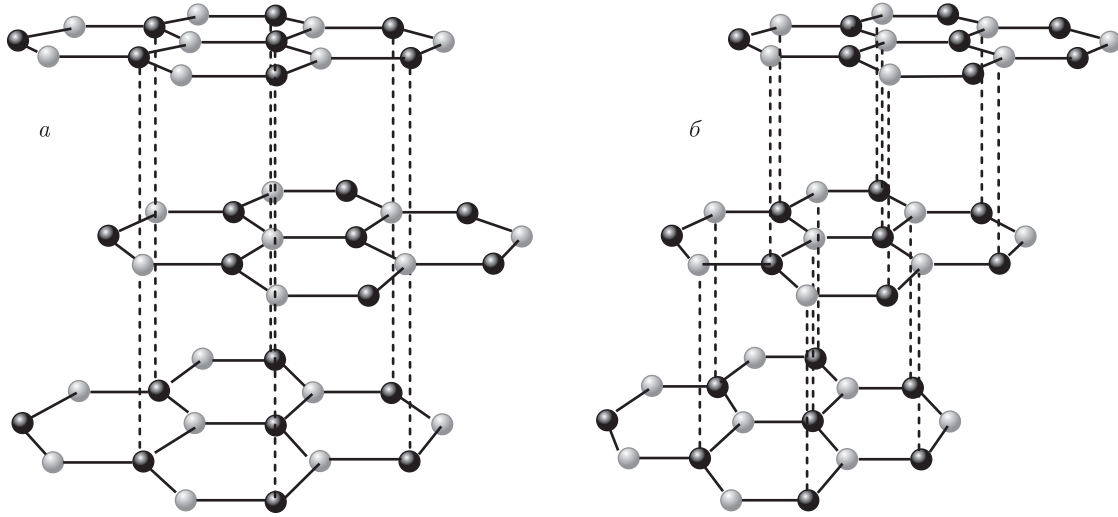


Рис. 3. Кристаллическая структура трислоя графена с упаковками АВА (а) и АВС (б). Линии, соединяющие слои, обозначают взаимодействие  $t_{\perp}$

Нетрудно показать, что спектр такой системы имеет вид

$$\varepsilon_p = \pm \sqrt{v_F^2 p^2 + U^2 + \frac{t_{\perp}^2}{2}} \pm \sqrt{v_F^2 p^2 (t_{\perp}^2 + 4U^2) + \frac{t_{\perp}^4}{4}}. \quad (23)$$

Проводя суммирование по зонным и подзонным индексам, получаем

$$G_A(U, \varepsilon) = \frac{\varepsilon(\varepsilon^2 - v_F^2 p^2 - t_{\perp}^2/2 - U^2)}{(\varepsilon^2 - v_F^2 p^2 - t_{\perp}^2/2 - U^2)^2 - [(t_{\perp}^2 + U^2)v_F^2 p^2 + t_{\perp}^4/4]}. \quad (24)$$

Проводя в (24) суммирование по  $p$ , окончательно можно написать

$$G_A(U, \varepsilon) = -\frac{\varepsilon S}{2\pi\hbar^2 v_F^2} \times \ln \frac{(\xi^2 + C)^2 + 3U^4/4 - B^2 + t_{\perp}^2 U^2}{C^2 + 3U^4/4 - B^2 + t_{\perp}^2 U^2} + \frac{B^2 S}{4\pi\hbar^2 v_F^2 \varepsilon \sqrt{B^2 - t_{\perp}^2 U^2 - 3U^4/4}} \times \ln \left| \frac{A_+ + \xi^2}{A_- - \xi^2} \right| \left| \frac{A_-}{A_+} \right|, \quad (25)$$

где введены обозначения

$$A_{\pm} = \sqrt{B^2 - t_{\perp}^2 U^2 - 3U^4/4} \pm C,$$

$$B = \sqrt{t_{\perp}^2 + U^2} \varepsilon, \quad C = U^2/2 - \varepsilon^2.$$

Для дальнейшего удобно пользоваться упрощенным вариантом выражения (6). Для соответствующего упрощения заметим, что  $t_{\perp}^2, U^2 \ll 1$ , а следовательно, членами, содержащими  $U^4$  и  $t_{\perp}^2 U^2$  можно пренебречь, после чего соотношение (25) принимает вид

$$G_A(U, \varepsilon) = -\frac{\varepsilon}{2\pi\hbar^2 v_F^2} \ln \frac{(\xi^2 + C)^2 - B^2}{C^2 - B^2} + \frac{\sqrt{t_{\perp}^2 + U^2}}{4\pi\hbar^2 v_F^2} \ln \left| \frac{B + C + \xi^2}{B - C - \xi^2} \right| \left| \frac{B - C}{B + C} \right|. \quad (26)$$

При  $U \rightarrow 0$ , (26) дает функцию Грина бислоя графена.

Для плотности состояний перестраиваемого бислоя графена имеем

$$\rho(U, \varepsilon) = \pi^{-1} \text{Im} G^0(U, \varepsilon - i0^+) = \frac{S}{2\pi^2 \hbar^2 v_F^2} \times [F(U, \alpha = 1) + F(U, \alpha = -1)], \quad (27)$$

$$F(U, \alpha) = \left( \varepsilon + \frac{\alpha \sqrt{t_{\perp}^2 + U^2}}{2} \right) \times \left[ \text{arctg} \frac{\alpha \sqrt{t_{\perp}^2 + U^2} \varepsilon + \varepsilon^2 - U^2/2}{S (\alpha \sqrt{t_{\perp}^2 + U^2} + 2\varepsilon)} - \text{arctg} \frac{\alpha \sqrt{t_{\perp}^2 + U^2} \varepsilon + \varepsilon^2 - \xi^2 - U^2/2}{S (\alpha \sqrt{t_{\perp}^2 + U^2} + 2\varepsilon)} \right]. \quad (28)$$

Как легко заметить, при  $t_{\perp} \rightarrow 0$  и  $U \rightarrow 0$  выражение (27) дает плотность состояний монослоя графена (14).

### 2.3. Трислой графена

Третий слой может быть расположен над вторым двумя способами (рис. 3). Первый способ — это так называемая берналловская упаковка (АВА), при которой третий слой повернут относительно второго на угол  $-60^\circ$ , т. е. непосредственно над первым слоем. Такая упаковка наиболее часто встречается в природе. Второй способ — это так называемая ромбоэдрическая упаковка (АВС), при которой третий слой повернут относительно второго на угол  $60^\circ$ . Такая упаковка графеновых слоев встречается значительно реже. Мы рассмотрим оба случая.

В случае берналловской упаковки гамильтониан трислоя пишется моментально. Для этого достаточно к гамильтониану бислоя добавить еще члены, соответствующие третьему слою. Именно, к гамильтониану бислоя нужно добавить электронные перескоки внутри третьего слоя и взаимодействие этого слоя со вторым:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_k E_0 \left( a_k^\dagger a_k + a_k^\dagger a_k + a_k^\dagger a_k \right) + \\
 & + \sum_k E_0 \left( b_k^\dagger b_k + b_k^\dagger b_k + b_k^\dagger b_k \right) + \\
 & + \sum_k \left[ f(\mathbf{k}) \left( a_k^\dagger b_k + a_k^\dagger b_k + a_k^\dagger b_k \right) + \text{H.c.} \right] + \\
 & + \sum_k t_\perp \left( a_k^\dagger b_k + \text{H.c.} \right) + \\
 & + \sum_k t_\perp \left( b_k^\dagger a_k + \text{H.c.} \right). \quad (29)
 \end{aligned}$$

Для трислоя имеем следующие функции Грина

$$G_A^1 = \langle\langle a_k^1 | a_k^\dagger \rangle\rangle, \quad G_B^1 = \langle\langle b_k^1 | b_k^\dagger \rangle\rangle,$$

$$G_A^2 = \langle\langle a_k^2 | a_k^\dagger \rangle\rangle, \quad G_B^2 = \langle\langle b_k^2 | b_k^\dagger \rangle\rangle,$$

$$G_A^3 = \langle\langle a_k^3 | a_k^\dagger \rangle\rangle, \quad G_B^3 = \langle\langle b_k^3 | b_k^\dagger \rangle\rangle.$$

Гамильтониан (29) дает следующее выражение для функции Грина:

$$\begin{aligned}
 G_A^1 = G_A^2 = G_A^3 = & \left\{ \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} - \right. \\
 & \left. - t_\perp^2 \left[ \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} - t_\perp^2 \left( \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} \right)^{-1} \right]^{-1} \right\}^{-1}, \quad (30)
 \end{aligned}$$

где мы опять положили  $E_0 = 0$ . Это уравнение имеет шесть решений (три решения для электронов, три для дырок). Для различных ветвей спектра получаем

$$\begin{aligned}
 \left( \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} \right)^2 - 2t_\perp^2 &= 0, \\
 \left( \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} \right)^2 &= 0.
 \end{aligned} \quad (31)$$

Соответственно, для спектра имеем

$$\varepsilon_k^n = \pm \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2 + (3 - a_n) \frac{t_\perp^2}{2}} \pm \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2 (3 - a_n) t_\perp^2 + (3 - a_n)^2 \frac{t_\perp^4}{4}}, \quad (32)$$

где  $n = 1, 2, 3$ ,  $a_1 = 1$ ,  $a_2 = -1$ ,  $a_3 = 3$ . Нетрудно показать, что

$$\begin{aligned}
 G_A = & \frac{1}{6} \times \\
 & \times \sum_{\nu_b, \nu_{sb} = \pm 1} \sum_n \left[ \varepsilon - \nu_b \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2 + (3 - a_n) \frac{t_\perp^2}{2}} - \right. \\
 & \left. - \nu_{sb} \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2 (3 - a_n) t_\perp^2 + (3 - a_n)^2 \frac{t_\perp^4}{4}} \right]^{-1}. \quad (33)
 \end{aligned}$$

Рассмотрим трислой с упаковкой АВС (см. рис. 3). В этом случае гамильтониан запишется в виде

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_k \left[ f(\mathbf{k}) \left( a_k^\dagger b_k + a_k^\dagger b_k + a_k^\dagger b_k \right) + \text{H.c.} \right] + \\
 & + \sum_k t_\perp \left( a_k^\dagger b_k + \text{H.c.} \right) + \\
 & + \sum_k t_\perp \left( b_k^\dagger a_k + \text{H.c.} \right). \quad (34)
 \end{aligned}$$

Для функции Грина имеем следующее выражение:

$$G_A^1 = \left\{ \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} - t_{\perp}^2 \left[ \varepsilon - |f(\mathbf{k})|^2 \times \left( \varepsilon - t_{\perp}^2 \left( \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} \right)^{-1} \right)^{-1} \right]^{-1} \right\}, \quad (35)$$

из которого для спектра получаем

$$\varepsilon^2 \left( 1 + \frac{t_{\perp}^2}{|f(\mathbf{k})|^2 - \varepsilon^2} \right)^2 = |f(\mathbf{k})|^2. \quad (36)$$

Вблизи точек Дирака  $f(\mathbf{k}) \rightarrow 0$  соответствующее разложение в ряд Тейлора дает

$$\varepsilon_k \approx \pm \frac{|f(\mathbf{k})|^3}{t_{\perp}^2}. \quad (37)$$

Очевидно, что при приложении перпендикулярного электрического поля электронейтральность слоев нарушится. Легко показать, что в случае трислоя в электрическом поле, направленном вертикально вверх, получим, что нижний слой заряжен положительно с потенциалом  $U$  из-за нехватки электронов, средний слой сохраняет свою электронейтральность, а верхний слой заряжен отрицательно

с потенциалом  $-U$  из-за избытка электронов. Гамильтониан трислоя в этом случае запишется следующим образом:

$$H = \sum_k (E_0 + U) \left( a_k^{\dagger 1} a_k^1 + b_k^{\dagger 1} b_k^1 \right) + \sum_k E_0 \left( a_k^{\dagger 2} a_k^2 + b_k^{\dagger 2} b_k^2 \right) + \sum_k (E_0 - U) \left( a_k^{\dagger 3} a_k^3 + b_k^{\dagger 3} b_k^3 \right) + \sum_k \left[ f(\mathbf{k}) \left( a_k^{\dagger 1} b_k^1 + a_k^{\dagger 2} b_k^2 + a_k^{\dagger 3} b_k^3 \right) + \text{H.c.} \right] + \sum_k t_{\perp} \left( a_k^{\dagger 1} b_k^2 + \text{H.c.} \right) + \sum_k t_{\perp} \left( b_k^{\dagger 2} a_k^3 + \text{H.c.} \right). \quad (38)$$

Для функции Грина получим

$$G_A^1 = \left( \varepsilon - U - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon - U} - \frac{t_{\perp}^2}{\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon + U} - \frac{t_{\perp}^2}{\varepsilon + U - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon + U}}} \right)^{-1}, \quad (39)$$

где мы положили  $E_0 = 0$ . Спектр определяется из решения уравнения

$$\left( \varepsilon - U - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon - U} \right) \left( \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon + U} \right) \times \left( \varepsilon + U - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon + U} \right) - 2\varepsilon t_{\perp}^2 \left( 1 - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon^2 - U^2} \right) = 0. \quad (40)$$

Очевидно, что из-за несимметричности этого уравнения относительно энергетической переменной, в отличие от (31), в некоторых ветвях спектра появится запрещенная щель.

#### 2.4. Многослойный графен

Начнем со случая многослойного графена, когда число слоев  $N$  все еще мало, чтобы образовать непрерывный спектр вдоль оси  $z$ . Рассмотрим сначала многослойный графен с берналловской (АВА) упаковкой. Введем следующие гамильтонианы:

$$H_n^{(0)} = \sum_k E_0 \left( a_k^{\dagger n} a_k^n + b_k^{\dagger n} b_k^n \right), \quad (41)$$

$$H_n^{(1)} = \sum_k \left[ f(\mathbf{k}) a_k^{\dagger n} b_k^n + \text{H.c.} \right], \quad (42)$$

$$H_n^{(2)} = \sum_k t_{\perp} \left( a_k^{\dagger n} a_k^{n+1} + \text{H.c.} \right), \quad (43)$$

где  $n$  — номер слоя. Тогда гамильтониан  $N$ -слоеного графена запишется как

$$H = \sum_{n=1}^N \left( H_n^{(0)} + H_n^{(1)} \right) + \sum_{n=1}^{N-1} H_n^{(2)}. \quad (44)$$

Из (44) видно, что в случае  $N$ -слоеного графена для функции Грина получаем рекуррентное соотношение

$$G_A^N G_A^{N-1} = \left[ \left( \varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} \right)^2 - (N-1)t_{\perp}^2 \right]^{-1} \quad (45)$$



с очевидным граничным условием  $G_A^0 = 1$ . Это рекуррентное соотношение дает

$$(G_A^N)^{-1} = \left[ \frac{\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - (N-1)t_\perp^2}{\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - (N-2)t_\perp^2} \right] \times$$

$$\times \left[ \frac{\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - (N-3)t_\perp^2}{\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - (N-4)t_\perp^2} \right] \dots$$

$$\dots \left[ \frac{\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - t_\perp^2}{\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2} \right].$$

Отсюда можно получить энергетический спектр для любого числа слоев. Понятно, что для этого необходимо решить следующее уравнение порядка  $2N$ :

$$\left[ \left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - (N-1)t_\perp^2 \right] \times$$

$$\times \left[ \left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - (N-3)t_\perp^2 \right] \dots$$

$$\dots \left[ \left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - t_\perp^2 \right] = 0.$$

Это уравнение имеет  $2N$  решений ( $N$  решений для электронов,  $N$  — для дырок). Для различных ветвей спектра получаем

$$\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - (N-1)t_\perp^2 = 0,$$

$$\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - (N-3)t_\perp^2 = 0,$$

$$\vdots$$

$$\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - t_\perp^2 = 0.$$

Эту последовательность можно представить в общем виде:

$$\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right)^2 - (N - a_m)t_\perp^2 = 0, \quad (47)$$

где  $m = 1, \dots, N$ , а

$$a_m = \sum_{i=1}^N (2i-1) (\delta_{(2i-1)m} - \delta_{(2i)m}), \quad (48)$$

где  $\delta_{mn}$  — символ Кронекера. Отсюда получаем явное выражение для энергетического спектра:

$$\varepsilon_k^m = \pm \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2 + (N - a_m) \frac{t_\perp^2}{2}} \pm \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2 (N - a_m) t_\perp^2 + (N - a_m)^2 \frac{t_\perp^4}{4}}. \quad (49)$$

Интересно рассмотреть случай большого числа слоев, когда в третьем измерении образуется зона Бриллюэна из-за периодичности расположения слоев. Для этого возьмем три произвольных слоя с номерами  $n-1$ ,  $n$  и  $n+1$ . Гамильтониан этих слоев имеет вид

$$H = \sum_k \left[ f(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k \\ a_k^\dagger & b_k \end{pmatrix} + \text{H.c.} \right] +$$

$$+ \sum_k t_\perp \begin{pmatrix} a_k^\dagger & a_k \\ a_k^\dagger & a_k \end{pmatrix} + \text{H.c.} + \sum_k t_\perp \begin{pmatrix} a_k^\dagger & a_k \\ a_k^\dagger & a_k \end{pmatrix} +$$

$$+ \sum_k t_\perp \begin{pmatrix} a_k^\dagger & a_k \\ a_k^\dagger & a_k \end{pmatrix} + \text{H.c.} + \sum_k t_\perp \begin{pmatrix} a_k^\dagger & a_k \\ a_k^\dagger & a_k \end{pmatrix} + \text{H.c.} \quad (50)$$

Соотношение (8) дает

$$\left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon}\right) \langle\langle a_k^n | a_k^\dagger \rangle\rangle =$$

$$= 1 + t_\perp \langle\langle a_k^{n+1} | a_k^\dagger \rangle\rangle + t_\perp \langle\langle a_k^{n-1} | a_k^\dagger \rangle\rangle. \quad (51)$$

В случае большого числа слоев условие периодичности дает

$$a_k^n = a_k e^{in\zeta}, \quad (52)$$

где параметр  $\zeta = 2k_z c$ ,  $2c$  — период кристаллической решетки  $N$ -слоистого графена в третьем измерении,  $c$  — расстояние между слоями,  $k_z$  — волновой вектор в третьем измерении. Учитывая это условие, получаем

$$G_A^n = \left(\varepsilon - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon} - 2t_\perp \cos \zeta\right)^{-1}. \quad (53)$$

Для спектра имеем

$$\varepsilon_k = t_{\perp} \cos \zeta \pm \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2 + t_{\perp}^2 \cos^2 \zeta}. \quad (54)$$

Для конечного числа слоев параметр  $\zeta$  принимает дискретные значения [32],

$$\zeta_m = \frac{m\pi}{N+1}, \quad m = 1, \dots, N.$$

Итак

$$\varepsilon_m = t_{\perp} \cos \left( \frac{m\pi}{N+1} \right) \pm \sqrt{|f(\mathbf{k})|^2 + t_{\perp}^2 \cos^2 \left( \frac{m\pi}{N+1} \right)}. \quad (55)$$

Для плотности состояний нетрудно получить

$$\rho(\varepsilon) = \pi^{-1} \text{Im} G(\varepsilon) = \frac{S_1}{\pi N v_F^2 \hbar^2} \times \sum_{i=1}^N \left[ (\varepsilon - t_{\perp} \cos \zeta) \theta(\varepsilon - t_{\perp}(\cos \zeta + |\cos \zeta|)) \times \theta \left( t_{\perp} \cos \zeta + \sqrt{\xi^2 + t_{\perp}^2 \cos^2 \zeta} - \varepsilon \right) \right]. \quad (56)$$

В случае многослойного графена с упаковкой АВА будем использовать формулу (55) для электронного спектра. Рассмотрим теперь многослойный графен с ромбоэдрической (АВС) упаковкой. В этом случае зона Бриллюэна в третьем измерении не возникает, так как перескоки между ближайшими соседними слоями осуществляются для разных слоев разными электронами: А1 → А2, В2 → В3, А3 → В4 и т. д. В случае упаковки АВА эти перескоки могут осуществляться одним и тем же электроном. Последовательное рассмотрение трехслойного, четырехслойного и т. д. графена дает следующую формулу для спектра вблизи точек Дирака [32]:

$$\varepsilon_k \approx \pm \frac{|f(\mathbf{k})|^N}{t_{\perp}^{N-1}}. \quad (57)$$

## 2.5. Эпитаксиальный графен

Большинство теоретических расчетов ЭГ делаются численными методами в рамках формализма функционала плотности. Наряду с этим для исследования системы «графен – полупроводниковая подложка» есть и аналитический подход. Такой подход основан на модельном гамильтониане Халдейна – Андерсона [50] и впервые предложен в работах Давыдова [51], где были рассмотрены случаи металлической и полупроводниковой подложек. Модель

Давыдова заключается в том, что лист графена, находящегося на поверхности подложки, можно представить как адсорбированные на этой поверхности атомы углерода, выстроенные в структуру графена. В работах [51–53] было показано, что эта модель приводит к вполне адекватным результатам. В работах [54–58] в рамках этой модели были исследованы электронные состояния системы «ЭГ – размерно-квантованная пленка», а в [59, 60] эта модель использовалась для исследования электронных состояний системы «квантовая точка – графен – SiO<sub>2</sub>». В работах [61–63] обсуждаются некоторые вопросы электронного и термоэлектронного транспорта, а также перенормировка скорости Ферми в ЭГ. Суть подхода подробно изложена в работах [51–53], а также ряде работ авторов [58, 61–63]. В наиболее общем виде выражение для функции Грина в случае ЭГ можно записать следующим образом [58, 61–63]:

$$G_k^{-1}(\varepsilon) = \tilde{G}_0^{-1}(\varepsilon) - t f(\mathbf{k}) - i\gamma, \quad (58)$$

где  $\gamma$  – энергия затухания квазичастиц за счет внутренних столкновительных процессов, таких как рассеяние на фононах, на примесных атомах, на дефектах кристаллической решетки и т. д. (остаточное рассеяние). Здесь нас не будет интересовать явный вид величины  $\gamma$ . В настоящей работе предполагается, что в случае ЭГ величина  $t$  остается такой же, как и для изолированного графена. Кроме того, предполагается справедливость приближения сильной связи для ЭГ. Вообще говоря, указанные допущения требуют более строгого обоснования, что представляет самостоятельный интерес и выходит за рамки данной статьи. В выражении (58)  $\tilde{G}_0(\varepsilon)$  – функция Грина изолированного атома углерода,

$$\tilde{G}_0(\varepsilon) = [\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_a - \Lambda(\varepsilon) - i\Gamma_c(\varepsilon)]^{-1}, \quad (59)$$

где

$$\Gamma_c(\varepsilon) = \pi |V|^2 \rho(\varepsilon)$$

и

$$\Lambda(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma_c(\varepsilon') d\varepsilon'}{\varepsilon - \varepsilon'}$$

– соответственно полуширина и функция сдвига квазиуровня,  $\rho(\varepsilon)$  – плотность состояний подложки, знак «P» означает интегрирование в смысле главного значения,  $V$  – потенциал гибридизации,  $\tilde{\varepsilon}_a$  – квазиуровень атома углерода, перенормированный за счет кристаллического потенциала. Величина  $\tilde{\varepsilon}_a$  есть аналог точки Дирака в ЭГ. При  $V \rightarrow 0$  величина  $\tilde{\varepsilon}_a \rightarrow \varepsilon_c$ , где  $\varepsilon_c$  – точка Дирака изолированного графена. При исследовании ЭГ мы не можем, вообще говоря, положить  $\varepsilon_c = 0$ , как в случае

изолированного графена. Это связано с тем, что мы имеем дело с двумя системами (графен и подложка), которые характеризуются разными характерными энергиями (точка Дирака, края зоны разрешенных энергий в полупроводнике). Из (59) видно, что в случае ЭГ необходимо осуществить замену  $\varepsilon \rightarrow \varepsilon - \Lambda(\varepsilon)$ . Тогда

$$\begin{pmatrix} \Lambda(\varepsilon) & tf(\mathbf{k}) \\ tf^*(\mathbf{k}) & \Lambda(\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}, \quad (60)$$

где  $\psi_A$  и  $\psi_B$  — волновые функции электронов под решеток А и В.

Энергетический спектр определяется из условия

$$\begin{vmatrix} -\varepsilon + \Lambda(\varepsilon) & t^*(\mathbf{k}) \\ t(\mathbf{k}) & -\varepsilon + \Lambda(\varepsilon) \end{vmatrix} = 0.$$

Рассмотрим вопрос о плотности состояний ЭГ, сформированного на поверхности полупроводника. Используя выражение (59), получим

$$\begin{aligned} \rho_{epitax}(\varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{2N} \sum_{k, \nu_b = \pm 1} G_k(\varepsilon) = \\ &= \frac{\Gamma_c S}{2\pi^2 v_F^2 \hbar^2} \ln \frac{(\xi^2 + \Gamma_c^2 - \bar{\varepsilon}^2)^2 + 4\Gamma_c^2 \bar{\varepsilon}^2}{(\Gamma_c^2 + \bar{\varepsilon}^2)^2} + \\ &+ \frac{S\bar{\varepsilon}}{\pi^2 v_F^2 \hbar^2} \left( \text{arctg} \frac{\xi^2 + \Gamma_c^2 - \bar{\varepsilon}^2}{2\Gamma_c \bar{\varepsilon}} - \right. \\ &\quad \left. - \text{arctg} \frac{\Gamma_c^2 - \bar{\varepsilon}^2}{2\Gamma_c \bar{\varepsilon}} \right), \quad (61) \end{aligned}$$

где  $\bar{\varepsilon} = \varepsilon - \Lambda(\varepsilon)$ . Отметим, что здесь и дальше подразумевается плотность состояний, приходящаяся на один атом графена. В связи с этим  $S = S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$ .

Рассмотрим эпитаксиальный бислои графена (рис. 4). Покажем, что в спектре бислоя, сформированного на полупроводниковой подложке, может возникнуть запрещенная щель. Физическая причина, по которой должна появиться щель, ясна из следующих рассуждений. Нижний слой взаимодействует с подложкой сильнее, чем верхний. Тем самым нарушается симметрия между слоями, что должно привести к возникновению щели. В настоящей работе мы считаем, что с подложкой взаимодействует только нижний слой. Это взаимодействие будем описывать с помощью модели Давыдова.

Для качественного анализа используем здесь простейшие выражения для функций  $\Lambda(\varepsilon)$  и  $\Gamma_c(\varepsilon)$ , предполагая, что подложка двумерная. Имеем [63]

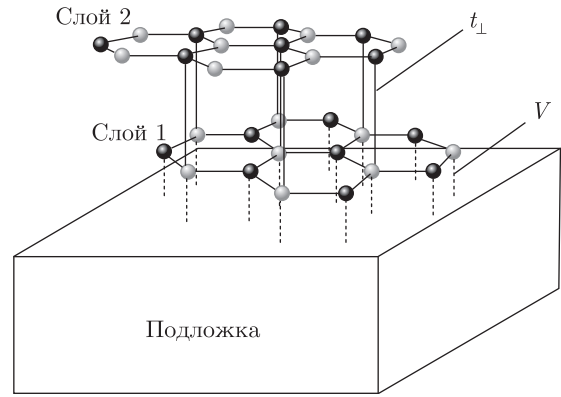


Рис. 4. Бислои графена, сформированный на поверхности подложки

$$\Gamma_c = |V|^2 \frac{m^* S_1}{\hbar^2} [\theta(\Delta\varepsilon - \Delta_s - \varepsilon) + \theta(\varepsilon - \Delta\varepsilon - \Delta_s)],$$

$$\Lambda(\varepsilon) = -|V|^2 \frac{m^* S_1}{\pi \hbar^2} \ln \left| \frac{\varepsilon - \Delta\varepsilon + \Delta_s}{\varepsilon - \Delta\varepsilon - \Delta_s} \right|,$$

где  $m^*$  — эффективная масса электрона в подложке,  $\Delta_s$  — полуширина запрещенной зоны полупроводниковой подложки,  $\Delta\varepsilon$  — расстояние между точкой Дирака и центром запрещенной зоны подложки. В настоящей работе все энергии отсчитываются от точки Дирака. Оценки величины  $\Delta\varepsilon$  (см. [55]) показывают, что для подложек SiC она по модулю не превышает 0.8 эВ. Учитывая, что для этих подложек величина  $\Delta \approx 1.5$  эВ, получаем, что  $\Gamma_c = 0$  для энергий  $|\varepsilon| \leq 0.7$  эВ. Именно эти энергии и рассматриваются дальше. Таким образом, энергии атомов нижнего слоя сдвигаются на величину  $\Lambda(\varepsilon)$ ,

$$\tilde{\varepsilon}_c = \varepsilon_c + \Lambda(\tilde{\varepsilon}_c). \quad (62)$$

Энергия атомов углерода верхнего слоя остается равной  $\varepsilon_c$ . С учетом сказанного запишем теперь гамильтониан бислоя:

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \tilde{\varepsilon}_c \left( a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i \right) + \sum_i \varepsilon_c \left( a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i \right) + \\ &+ \sum_{i,j} t \left( a_i^\dagger b_j + \text{H.c.} \right) + \sum_{i,j} t \left( a_i^\dagger b_j + \text{H.c.} \right) + \\ &+ \sum_i t_\perp \left( a_i^\dagger b_i + \text{H.c.} \right). \quad (63) \end{aligned}$$

Переход к импульсному пространству дает

$$H = \sum_k \tilde{\varepsilon}_c \left( a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k \right) + \sum_k \varepsilon_c \left( a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k \right) + \sum_k \left[ f(\mathbf{k}) \left( a_k^\dagger b_k + a_k^\dagger b_k \right) + \text{H.c.} \right] + \sum_k t_\perp \left( a_k^\dagger b_k + \text{H.c.} \right).$$

Для ФГ получаем следующее выражение:

$$G_A^1 = G_A^2 = \left[ \varepsilon - \tilde{\varepsilon}_c - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_c} - t_\perp^2 \left( \varepsilon - \varepsilon_c - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\varepsilon - \varepsilon_c} \right)^{-1} \right]^{-1}. \quad (64)$$

Далее введем обозначение  $\varepsilon_0 = \tilde{\varepsilon}_c - \Delta_c/2 = \varepsilon_c + \Delta_c/2$  и перейдем к переменной  $\xi = \varepsilon - \varepsilon_0$ . Тогда вместо (64) получаем

$$G_A^1 = \left[ \xi - \Delta_c - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\xi - \Delta_c} - t_\perp^2 \left( \xi + \Delta_c - \frac{|f(\mathbf{k})|^2}{\xi + \Delta_c} \right)^{-1} \right]^{-1}.$$

Энергетический спектр определяется из условия  $\text{Re } G^{-1} = 0$ . Тогда получаем

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 \pm \sqrt{\frac{\Delta_c^2}{4} + |f(\mathbf{k})|^2 + \frac{t_\perp^2}{2} \pm \sqrt{(\Delta_c^2 + t_\perp^2)|f(\mathbf{k})|^2 + \frac{t_\perp^4}{4}}}. \quad (65)$$

Вблизи точки Дирака имеем

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 \pm \sqrt{\frac{\Delta_c^2}{4} + v_F^2 p^2 + \frac{t_\perp^2}{2} \pm \sqrt{(\Delta_c^2 + t_\perp^2)v_F^2 p^2 + \frac{t_\perp^4}{4}}}. \quad (66)$$

Энергетический спектр (66) показан на рис. 5, где энергии отсчитываются от точки Дирака  $\varepsilon_c$ . Как видно из рисунка, в спектре имеется запрещенная щель шириной  $\sqrt{t_\perp^2 \Delta_c^2 / (t_\perp^2 + \Delta_c^2)}$ . В отличие от случая бислоя графена в перпендикулярном электрическом поле, здесь мы имеем дело с несимметричной относительно точки Дирака запрещенной щелью.

## 2.6. Учет рассеяния на примесях

Учет рассеяния электронов на примесях безусловно является очень важной задачей физики конденсированного состояния. Действительно, реальные образцы материалов всегда содержат примеси и дефекты. Здесь мы в рамках простой модели рассмотрим эту задачу для графена.

Использованные до сих пор гамильтонианы не содержат рассеяния на примесях. Введем примесную часть гамильтониана в следующем виде:

$$H_{imp} = \sum_i V_i \left( a_i^\dagger a_i + b_{i+\delta_j}^\dagger b_{i+\delta_j} \right), \quad (67)$$

где  $V_i$  — случайный потенциал на  $i$ -м узле, обусловленный примесями. Переходя к фурье-образу, получаем

$$H_{imp} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} V_{\mathbf{q}} \left( a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \right). \quad (68)$$

Введем функцию

$$F_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{AB} = \langle \langle A_{\mathbf{k}} | B_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle \rangle, \quad (69)$$

где  $A, B$  — произвольные операторы. Диагональная компонента этой функции есть функция Грина. Соотношение (8) для этой функции имеет вид

$$\varepsilon F_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{AB} = \langle [A_{\mathbf{k}}, B_{\mathbf{k}'}^\dagger]_\eta \rangle + \langle \langle \{A_{\mathbf{k}} H - H A_{\mathbf{k}}\} | B_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle \rangle. \quad (70)$$

Для примесного гамильтониана имеем

$$a_{\mathbf{k}} H_{imp} - H_{imp} a_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}. \quad (71)$$

Обозначая через  $G_0$  функцию Грина идеального графена, получим

$$F_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^a = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_0(\mathbf{k}) + G_0(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'}^a, \quad (72)$$

или

$$F_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^a = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_0(\mathbf{k}) + G_0(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} F_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'}^a. \quad (73)$$

Решение уравнения (73) можно представить в виде итерационного ряда

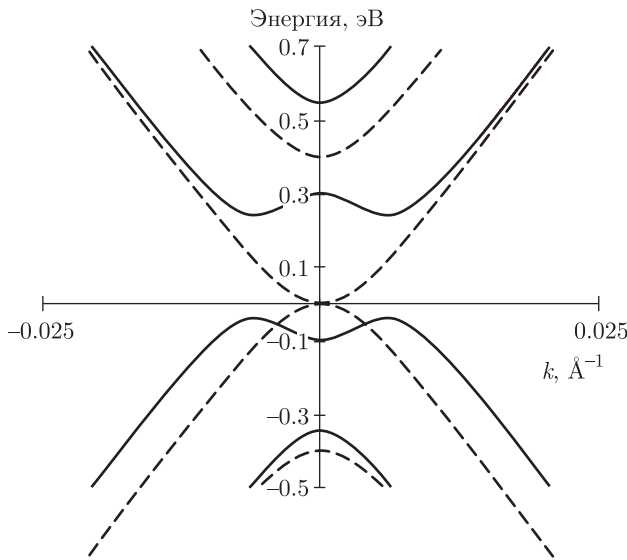


Рис. 5. Энергетический спектр свободного (штриховые линии) и эпитаксиального (сплошные) бислоев графена,  $\Delta_c = 0.2$  эВ

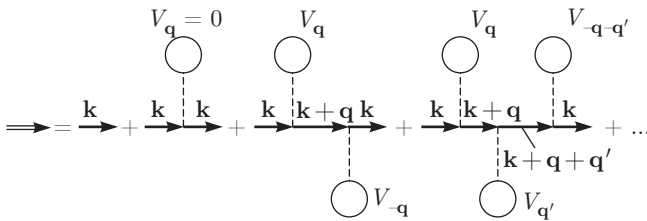


Рис. 6. Диаграммы Фейнмана, соответствующие функции Грина (76)

$$F_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \sum_n F_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(n)}, \quad F_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(0)} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_0(\mathbf{k}). \quad (74)$$

Тогда из (73) следует

$$F_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(n)} = G_0(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} F_{\mathbf{q},\mathbf{k}'}^{(n-1)}. \quad (75)$$

Окончательно для функции Грина получаем

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}) \equiv F_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^a &= G_0(\mathbf{k}) + G_0(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} F_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^2 = \\ &= G_0(\mathbf{k}) + G_0(\mathbf{k}) V_{\mathbf{q}=0} G_0(\mathbf{k}) + G_0(\mathbf{k}) \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}) V_{-\mathbf{q}} G_0(\mathbf{k}) + \\ &+ G_0(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}} G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \times \\ &\times V_{\mathbf{q}'} G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{q}') V_{-\mathbf{q}-\mathbf{q}'} G_0(\mathbf{k}) \dots \end{aligned} \quad (76)$$

Диаграммы Фейнмана, соответствующие функции Грина (76), представлены на рис. 6. Выражение (76) можно переписать, введя собственно-энергетическую часть  $T$ , в виде

$$G(k) = G_0 + G_0 T G_0,$$

а это есть не что иное, как уравнение Дайсона. Собственно-энергетическая часть в данном случае называется  $T$ -матрицей рассеяния, а формализм, основанный на разложении (76), называется приближением  $T$ -матрицы рассеяния. Для одной примеси, задавая потенциал в виде

$$V(\mathbf{r}) = V\delta(\mathbf{r}), \quad (77)$$

выражение (76) можно привести к виду

$$G(\mathbf{k}) = G_0(\mathbf{k}) + G_0(\mathbf{k}) \frac{V/N_a}{1 - V G_0(\varepsilon)} G_0(\mathbf{k}), \quad (78)$$

где  $G_0(\varepsilon) = N_a^{-1} \sum_{\mathbf{k}} G_0(\mathbf{k})$ , т. е. в этом случае  $T$ -матрица имеет вид

$$T(\varepsilon) = \frac{V/N_a}{1 - V G_0(\varepsilon)}. \quad (79)$$

При конечной, но малой концентрации  $n_i$  примесей получаем [64]

$$T(\varepsilon) = \frac{n_i V}{1 - V G_0(\varepsilon)}, \quad (80)$$

а уравнение Дайсона запишется в виде

$$G(\mathbf{k}) = G_0(\mathbf{k}) + G_0(\mathbf{k}) T G(\mathbf{k}), \quad (81)$$

что соответствует борновскому приближению рассеяния. Из (81) следует, что

$$G(\mathbf{k}) = \frac{1}{G_0^{-1} - T} = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}) - T + i0}. \quad (82)$$

И, наконец, приведем самосогласованное борновское приближение рассеяния [64]:

$$T(\varepsilon) = \frac{n_i V}{1 - V G_0(\varepsilon - T(\varepsilon))}. \quad (83)$$

### 3. ТЕРМОДИНАМИКА ЭЛЕКТРОНОВ

Здесь мы рассмотрим ряд вопросов термодинамики электронов монослоя, бислоя графена и эпитаксиального графена. Начнем с бислоя графена. Термодинамика электрон-дырочной жидкости в монослое графена была рассмотрена в работе [65].

### 3.1. Химический потенциал

Рассмотрим прежде всего температурную зависимость химического потенциала. Последний определяется из выражения для числа электронов

$$N_e = 4S \int |f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)| \frac{d^2p}{(2\pi\hbar)^2}, \quad (84)$$

где  $f(\varepsilon) = [\exp(\varepsilon/k_B T) + 1]^{-1}$  — функция распределения Ферми–Дирака,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $S$  — площадь графена,  $T$  — температура. Положительный химический потенциал соответствует электронам, а отрицательный — дыркам. В настоящей работе мы рассматриваем случай электронного допирования, т. е.  $\mu(T = 0) \equiv \varepsilon_F > \Delta$ . Чтобы перейти в выражении (84) к интегрированию по энергии, в общем случае мы не можем воспользоваться непосредственно выражением (23), так как функция  $\varepsilon(U, k)$  не является однозначной. Поэтому разделим энергетический спектр на два промежутка:  $0 < k < k_0$  и  $k_0 < k$ , в которых, как легко видеть, зависимость энергии от волнового числа является однозначной. Значение  $k_0$  определяется из условия определения экстремума:  $\partial\varepsilon/\partial k|_{k=k_0} = 0$ . Указанные промежутки соответствуют областям энергий:  $\Delta < \varepsilon < U$  и  $U < \varepsilon$ . Такая процедура была использована в работе [66]. Такое разделение, однако, усложняет решение поставленных в настоящей работе задач. В связи с этим, полагая еще, что  $U - \Delta \ll U$ , дальше будем рассматривать лишь область  $U < \varepsilon$ . Тогда, следуя работе [66], получаем

$$p = \sqrt{\varepsilon^2 + U^2 + \sqrt{(4U^2 + t_\perp^2)\varepsilon^2 - U^2 t_\perp^2}},$$

откуда следует

$$2p dp = [2 + Z(\varepsilon, t_\perp, U)] \varepsilon d\varepsilon,$$

где

$$Z(\varepsilon, t_\perp, U) = \zeta^2 (\zeta^2 \varepsilon^2 - U^2 t_\perp^2)^{-1/2}, \quad \zeta^2 = t_\perp^2 + 4U^2.$$

Тогда

$$N_e = \frac{S}{\pi v_F^2 \hbar^2} \int_U^\infty |f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)| \times \\ \times [2 + Z(\varepsilon, t_\perp, U)] \varepsilon d\varepsilon. \quad (85)$$

Из (85) можно найти зависимость химического потенциала от концентрации  $n$  носителей и температуры. При нулевой температуре и электронном допировании из (84) получим

$$\varepsilon_F = \sqrt{\pi v_F^2 \hbar^2 n + t_\perp^2 / 2 + U^2 - \sqrt{\zeta^2 \pi v_F^2 \hbar^2 n + t_\perp^4 / 4}}.$$

Рассмотрим предельные случаи низких и высоких температур.

При низких температурах ( $\mu \gg k_B T$ ) удобно дифференцировать уравнение (84) по температуре. При  $\mu \gg k_B T$  функция  $f(\varepsilon + \mu) \rightarrow 0$ . Учитывая, что число допированных электронов не зависит от температуры, получим

$$0 = 4 \int \frac{d}{dT} [f(\varepsilon - \mu)] \frac{d^2p}{(2\pi\hbar)^2}. \quad (86)$$

Также имеем

$$\frac{d}{k_B dT} [f(\varepsilon - \mu)] = \\ = - \left( \frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} + \frac{d\mu}{k_B dT} \right) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} [f(\varepsilon - \mu)]. \quad (87)$$

Функция (87) лишь в окрестности точки  $\varepsilon = \mu$  заметно отлична от нуля. В связи с этим можно разложить функцию  $\varepsilon Z(\varepsilon, t_\perp, U)$  по степеням  $\varepsilon - \mu$ :

$$\varepsilon Z(\varepsilon, t_\perp, U) \approx \zeta(\mu^2 - K)^{-3/2} (\mu^3 - \varepsilon K),$$

где  $K = t_\perp^2 U^2 / \zeta^2$ . Тогда из (86) можно получить

$$\frac{d\mu}{dT} = - \frac{\pi^2 k_B^2}{3\mu} \left( 1 + \frac{\zeta \mu^2}{2(\mu^2 - K)^{3/2} - \zeta K} \right)^{-1} T,$$

причем химический потенциал при нулевой температуре определен выше. Легко видеть, что при  $t_\perp, U \rightarrow 0$  получается результат для монослоя (см., например, работу [65]).

В случае высоких температур ( $\mu \ll k_B T$ ) выражение (85) можно разложить по степеням  $\mu$ :

$$\pi v_F^2 \hbar^2 n = \frac{\mu}{2k_B T} \int_U^\infty \frac{2 + Z(\varepsilon, t_\perp, U)}{\text{ch}^2(\varepsilon/2k_B T)} \varepsilon d\varepsilon, \quad (88)$$

и легко получить зависимость химического потенциала от температуры. При интегрировании выражения (88) нужно перейти к переменной  $z = \varepsilon/2k_B T$  и положить нижний предел равным нулю, так как условие  $\mu \ll k_B T$  автоматически означает, что  $U \ll k_B T$ , а следовательно,  $U/2k_B T \rightarrow 0$ .

### 3.2. Теплоемкость

Рассмотрим теперь электронную теплоемкость числа графена при постоянном значении площади. Энергия носителей дается выражением

$$E = 4S \int_0^\infty \varepsilon |f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)| \frac{d^2p}{(2\pi\hbar)^2}. \quad (89)$$

Оно с точностью до множителя  $\varepsilon$  совпадает с (84). Следовательно, мы можем использовать приближения, приведенные выше. При низких температурах имеем

$$C_S = \frac{dE}{dT} = -\frac{2S}{\pi v_F^2 \hbar^2} \int_U^\infty \left( \frac{\varepsilon - \mu}{T} + \frac{d\mu}{dT} \right) \frac{\partial f(\varepsilon - \mu)}{\partial \varepsilon} \times \left[ 2\varepsilon + \zeta(\mu^2 - K)^{-3/2}(\mu^3 - \varepsilon K) \right] \varepsilon d\varepsilon.$$

Проводя интегрирование, получаем

$$C_S = \frac{2S}{\pi v_F^2 \hbar^2} \times \left\{ \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T \mu \left[ 4 + (\mu^2 - 2K)\zeta(\mu^2 - K)^{-3/2} \right] + \frac{d\mu}{dT} \left[ 2\mu^2 + 2\frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{3} + \zeta(\mu^2 - K)^{-3/2} \times \left( \mu^4 - K \left( k_B^2 T^2 \frac{\pi^2}{3} + \mu^2 \right) \right) \right] \right\}.$$

Используя результат, полученный выше для химического потенциала, и пренебрегая членами, содержащими  $k_B T/\mu$  в степени больше первой, получим окончательно

$$C_S(k_B T \ll \mu) \approx \frac{2\pi S}{3v_F^2 \hbar^2} k_B^2 \mu \left[ 2 + \zeta(\mu^2 - K)^{-1/2} \right] T. \quad (90)$$

При высоких температурах из выражения (89) имеем

$$E = \frac{\mu S}{2\pi k_B T v_F^2 \hbar^2} \int_U^\infty \frac{2 + Z(\varepsilon, t_\perp, U)}{\text{ch}^2(\varepsilon/2k_B T)} \varepsilon^2 d\varepsilon,$$

а с учетом (88) получаем

$$E = \frac{2nS k_B T \left( \frac{\pi^2}{6} + I_1 \right)}{\ln 2 + I_2},$$

где

$$I_1 = \int_0^\infty \frac{Z(2k_B T z, t_\perp, U)}{\text{ch}^2 z} z^2 dz, \\ I_2 = \int_0^\infty \frac{Z(2k_B T z, t_\perp, U)}{\text{ch}^2 z} z dz.$$

Чтобы рассчитать интегралы  $I_1$  и  $I_2$ , можно воспользоваться условием  $U \ll k_B T$  и пренебречь в выражении для  $Z(2k_B T z, t_\perp, U)$  членом  $t_\perp^2 U^2$ . Тогда

$$I_1 \approx \frac{\zeta \ln 2}{2k_B T}, \quad I_2 \approx \frac{\zeta}{2k_B T},$$

причем  $k_B T < \zeta$ . В результате для теплоемкости получим

$$C_S(k_B T \gg \mu) \approx \frac{2nS k_B}{2k_B T \ln 2 + \zeta} \times \left[ k_B T \left( \frac{\pi^2}{3} + \zeta \frac{\pi^2/3 - 2(\ln 2)^2}{2k_B T \ln 2 + \zeta} \right) + \zeta \ln 2 \right]. \quad (91)$$

При  $t_\perp, U \rightarrow 0$  получается результат для монослоя графена [65]

$$C_S^{MG}(k_B T \ll \mu) \approx \frac{4\pi S}{3v_F^2 \hbar^2} k_B^2 \mu T,$$

$$C_S^{MG}(k_B T \gg \mu) \approx \frac{nS k_B}{\ln 2} \frac{\pi^2}{3}.$$

Уместно отметить, что при малых концентрациях носителей становится существенным кулоновское взаимодействие. Изучение термодинамики носителей монослоя графена с учетом этого взаимодействия было проведено в работе [65]. Однако здесь мы пренебрегли кулоновским взаимодействием.

### 3.3. Квантовые осцилляции теплоемкости в магнитном поле

Один из экспериментальных методов изучения электронного спектра двумерных электронов основан на измерениях электронной теплоемкости в поперечном квантующем магнитном поле [67, 68]. В настоящем разделе мы исследуем осцилляции электронной теплоемкости в монослое графена.

Рассмотрим электронную теплоемкость при постоянном значении площади. Теплоемкость определяется как  $C = T(\partial S/\partial T)$ , где  $S$  — энтропия, которую мы здесь определим через термодинамический потенциал:  $\mathcal{S} = -(\partial \Omega/\partial T)_\mu$ . Термодинамический потенциал двумерного электронного газа в квантующем магнитном поле в общем случае определяется выражением

$$\Omega = -\frac{2eHk_B T S}{\pi \hbar c} \sum_n \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{\mu - \varepsilon_n}{k_B T} \right) \right]. \quad (92)$$

Здесь мы рассматриваем случай электронного допирования, т. е.  $\mu > 0$ . Будем, следуя Лифшицу и Каганову [46] и недавним работам [45–49, 68], использовать квазиклассический подход, основанный на использовании условия квантования Лифшица–Онсагера [69], которое для двумерной системы (здесь и далее считаем, что электронный газ находится в плоскости  $xy$ , а магнитное поле направлено вдоль оси  $z$ ) можно записать в виде

$$A(\varepsilon) = \frac{2\pi\hbar eH}{c}(n + \gamma_\sigma), \quad (93)$$

где  $A(\varepsilon)$  — площадь сечения поверхности  $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon$ ,  $\gamma_\sigma = \gamma + [m_c(\mu)/m]\sigma/2$  с  $\sigma = \pm 1$ ,  $m_c(\varepsilon) = (2\pi)^{-1}dA/d\varepsilon$  — циклотронная масса,  $\gamma$  — постоянная, которая в случае квадратичного спектра равна  $1/2$  (в случае графена  $\gamma = 0$ ),  $m$  — масса электрона. В настоящей работе мы пренебрегаем зеемановским расщеплением уровней, т. е. считаем, что  $m_c(\mu)/m = 0$ . Величину  $A(\varepsilon)$  можно найти из следующего выражения [46]:

$$A(\varepsilon) = \int d\varepsilon \oint \frac{dl}{v(p)}, \quad (94)$$

где  $dl$  — элемент дуги кривой  $\varepsilon = \text{const}$  в импульсном пространстве,  $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ . Хорошо известно, что в квантующем магнитном поле термодинамический потенциал состоит из двух составляющих [70, 71]: из не зависящей от поля части  $\Omega_0$  и части  $\Omega_H^{osc}$ , осциллирующей по магнитному полю:

$$\Omega = \Omega_0 + \Omega_H^{osc},$$

где

$$\Omega_0 = -\frac{S}{(\pi\hbar)^2} \int_0^\infty A(\varepsilon) f(\varepsilon - \mu) d\varepsilon, \quad (95)$$

$$\Omega_H^{osc} = \frac{2m_c(\mu)\omega_c k_B T S}{\pi\hbar} \times \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{k} \frac{\cos[kA(\mu)c/\hbar eH]}{\text{sh } k \frac{2\pi^2 k_B T}{\hbar\omega_c}}, \quad (96)$$

где  $\omega_c = eH/m_c(\mu)c$ . Соответственно, для энтропии получаем

$$S_0 = \frac{S}{4\pi^2\hbar^2} \frac{1}{k_B T^2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \mu}{\text{ch}^2(\varepsilon - \mu)/2kT} A(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (97)$$

$$S_H^{osc} = \frac{\pi m_c(\mu) k_B^2 T S}{\hbar^2} \times \sum_{k=1}^{\infty} \frac{L(x_k) \cos[kA(\mu)c/\hbar eH]}{\text{sh } x_k}, \quad (98)$$

где  $x_k = 2k\pi^2 k_B T/\hbar\omega_c$ ,  $L(x) = \text{cth } x - 1/x$  — функция Ланжевена. В формуле (97) подынтегральное выражение заметно отлично от нуля лишь в окрестности точки  $\varepsilon = \mu$ . Тогда мы можем разложить  $A(\varepsilon)$  вблизи этой точки, что дает

$$S_{H=0}(T) \approx \frac{2\pi m_c(\mu) S k_B^2 T}{3\hbar^2}.$$

Окончательно для теплоемкости получаем

$$C = \frac{\pi m_c(\mu) k_B^2 T S}{\hbar^2} \times \left[ \frac{2}{3} + \sum_{k=1}^{\infty} \Psi(x_k) \frac{\cos[kA(\mu)c/\hbar eH]}{\text{sh } x_k} \right], \quad (99)$$

где

$$\Psi(x_k) = 2 \text{cth } x_k - x_k \left( \frac{1}{\text{sh}^2 x_k} + \text{cth}^2 x_k \right). \quad (100)$$

Необходимо отметить, что мы рассматриваем лишь внутризонный вклад в теплоемкость, т. е. область температур  $k_B T \ll \hbar\omega_c$ . Наконец, нам необходимо учесть, что в квантующем магнитном поле химический потенциал есть осциллирующая функция магнитного поля. Для этого мы воспользуемся условием сохранения числа электронов

$$N_e = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{H,T} = S \frac{A(\mu)}{(\pi\hbar)^2} - \left( \frac{\partial \Omega_H^{osc}}{\partial \mu} \right)_{H,T} = \text{const}. \quad (101)$$

Тогда с помощью (96) при нулевой температуре получаем (см. [19])

$$\frac{cA(\mu)}{eH\hbar} = \frac{\pi^2 \hbar c}{eH} n - \text{arctg} \frac{\sin \left( \frac{2\pi^2 \hbar c}{eH} n \right)}{1 + \cos \left( \frac{2\pi^2 \hbar c}{eH} n \right)}, \quad (102)$$

откуда получаем зависимость химического потенциала от магнитного поля и концентрации электронов. Для функции  $A(\mu)$  имеем

$$A(\mu) = \frac{\pi \mu^2}{v_F^2} \quad \text{для бесщелевого графена,}$$

$$A(\mu) = \frac{\pi}{v_F^2} (\mu^2 - \Delta^2) \quad \text{для щелевого графена.}$$

На рис. 7 показаны зависимости теплоемкостей щелевого и бесщелевого графена от обратной величины магнитного поля. Проанализируем представленные на рисунке зависимости. Осцилляции теплоемкости объясняются квантовыми осцилляциями плотности состояний, от которой зависит полная энергия системы. Вблизи значений магнитного поля, при которых нижние уровни Ландау полностью заполнены, а верхние полностью пусты, происходит резкое изменение плотности состояний. Непосредственно при этих значениях теплоемкость резко уменьшается, что связано с тем, что система с



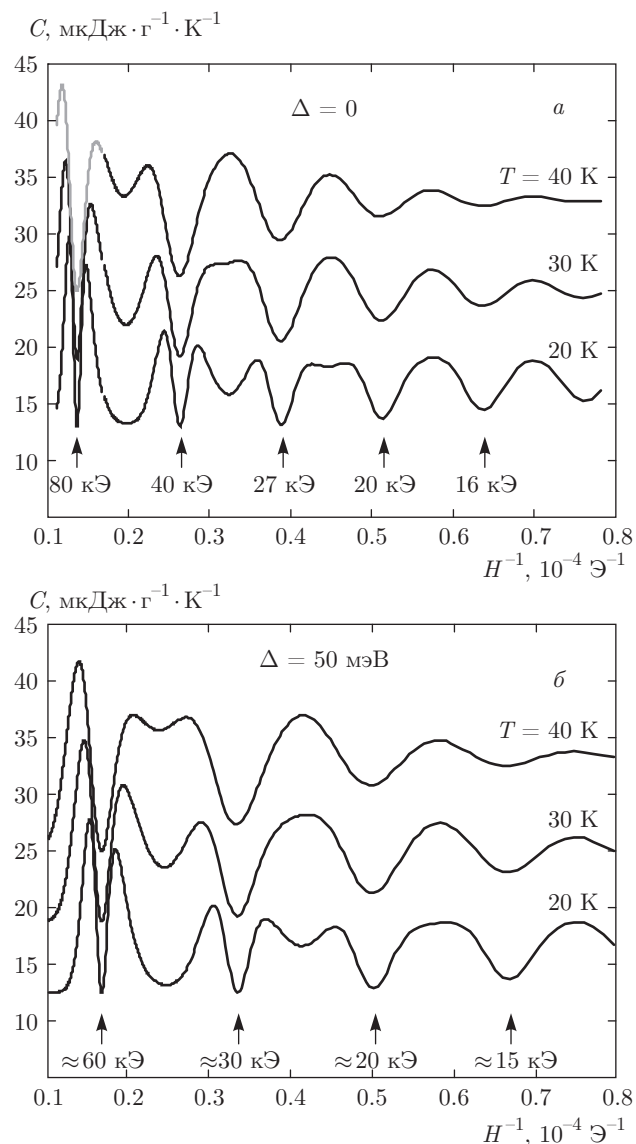


Рис. 7. Зависимости теплоемкостей от обратного магнитного поля в бесщелевом (а) и щелевом (б) графене при различных температурах

полностью заполненными уровнями Ландау не поглощает энергии, так как, во-первых, невозможны межуровневые переходы из-за малости температуры, а во-вторых, невозможны внутриуровневые переходы, поскольку уровни полностью заполнены. В таком состоянии теплоемкость определяется лишь тепловым уширением уровней Ландау. На рис. 7б приведены осцилляции теплоемкости для щелевого графена. Увеличение периода осцилляций связано с тем, что при одном и том же химическом потенциале концентрация электронов в щелевом графене меньше, чем в бесщелевом. Запишем выражение для периода осцилляций по обратному полю:

$$\delta \left( \frac{1}{H} \right) = \frac{2\pi\hbar e}{A(\mu)c}.$$

Тогда становится ясным природа увеличения периода осцилляций в случае щелевого графена: величина  $A(\mu)$  для щелевого графена меньше, чем для бесщелевого при одинаковых значениях химического потенциала.

Рассмотрим влияние кулоновского взаимодействия на осцилляции теплоемкости. Учет кулоновского взаимодействия является очень важной задачей физики графена. Это связано с тем, что в графене это взаимодействие не экранируется из-за двумерности. Строго говоря, на сегодняшний день задача о влиянии кулоновского взаимодействия на магнитные осцилляции не решена. Чтобы включить кулоновское взаимодействие в квазиклассический подход необходимо изменить сами условия квантования. Однако в некоторых работах [45–49, 65] это взаимодействие введено в функцию  $A(\varepsilon)$ , но при этом условия квантования не изменены. В настоящей работе мы также будем использовать этот простой подход.

Перенормированный за счет кулоновского взаимодействия электронный спектр графена имеет вид [72]

$$\varepsilon(p) = v_b v_F p [1 + g \ln(p_0/p)], \quad (103)$$

где  $g = e^2/8\pi\hbar v_F \kappa$ ,  $\kappa$  — диэлектрическая проницаемость (подложки плюс графен),  $p_0 \approx 5 \times 10^{-20}$  эрг·с/см. Нетрудно убедиться, что в первом приближении по малому параметру  $g$  траектория электрона в импульсном пространстве есть эллипс с параметрами

$$a = \varepsilon [1 - g \ln(v_F p_0/\varepsilon)] / v_F,$$

$$b = \varepsilon [1 - g \ln(v_F p_0/\varepsilon)] / v_F.$$

На рис. 8 показаны осцилляции теплоемкости с учетом и без учета межэлектронного взаимодействия. Как видно из рисунка, учет кулоновского взаимодействия приводит к уменьшению теплоемкости, а также к смещению и увеличению периода осцилляций. По-видимому, это связано с тем, что учет кулоновского взаимодействия приводит к уменьшению химического потенциала. Последний эффект рассмотрен в работе [65].

### 3.4. Термодинамика электронов в эпитаксиальном графене

Рассмотрим теперь термодинамику электронов в эпитаксиальном графене на полупроводниковой подложке. Далее ограничимся областью энергий  $|\varepsilon| \ll \Delta_s$ , чтобы расходимости в (62) вблизи  $|\varepsilon| = \Delta_s$

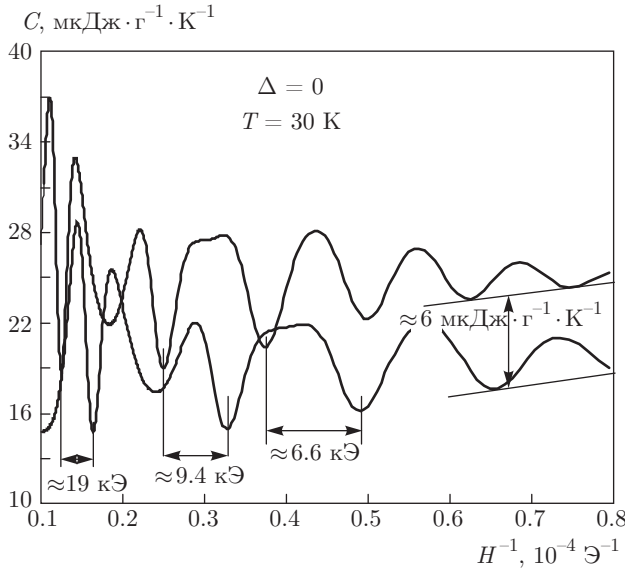


Рис. 8. Зависимости теплоемкости от обратного магнитного поля с учетом (кривая 1) и без учета (кривая 2) кулоновского взаимодействия

(мы положили  $\Delta\varepsilon = 0$ ) не приводили к артефактным результатам. Чтобы перейти в (84) к интегрированию по энергии, воспользуемся выражением

$$p = v_F^{-1} [\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)],$$

которое следует из (62), если вместо  $\tilde{\varepsilon}_c$  подставить  $v_F p$ . Тогда

$$N_e = \frac{2S}{\pi v_F^2 \hbar^2} \int |f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)| \times [\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)] \left(1 - \frac{d\Lambda(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right) d\varepsilon. \quad (104)$$

Из (104) можно найти зависимость химического потенциала  $\mathcal{E}\Gamma$  от концентрации носителей и температуры. При нулевой температуре и электронном допировании из (104) получим

$$n\pi v_F^2 \hbar^2 = 2 \int_0^\mu [\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)] \left(1 - \frac{d\Lambda(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right) d\varepsilon.$$

На рис. 9 приведены результаты численного расчета зависимости химического потенциала от температуры из выражения (104). При построении кривых мы положили, что  $\Delta_s = 1$  эВ,  $n = 10^{10}$  см $^{-2}$ .

При исследовании химического потенциала при низких температурах имеет место разложение

$$p \approx v_F^{-1} [\varepsilon - \Lambda(\mu) - \mathcal{K}(\mu)(\varepsilon - \mu)]. \quad (105)$$

Тогда для случая электронного допирования имеем

$$0 = \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon - \mu}{T} + \frac{d\mu}{dT}\right) \frac{\partial f(\varepsilon - \mu)}{\partial \varepsilon} \times [\varepsilon - \Lambda(\mu) - \mathcal{K}(\mu)(\varepsilon - \mu)] d\varepsilon, \quad (106)$$

где  $\mathcal{K}(\mu) = (d\Lambda(\varepsilon)/d\varepsilon)_{\varepsilon=\mu}$ . Поскольку мы рассматриваем область  $|\varepsilon| \ll \Delta$ , можно разложить функцию  $\Lambda(\varepsilon)$  по степеням  $\varepsilon/\Delta$ :

$$\Lambda(\varepsilon) \approx -2|V|^2 \rho_0 \frac{\varepsilon}{\Delta_s}, \quad \mathcal{K} \approx -\frac{2|V|^2 \rho_0}{\Delta}, \quad (107)$$

где  $\rho_0 = S_1 m^*/\pi \hbar^2$ . Тогда можно интегрировать непосредственно выражение (104), не прибегая к (105). В результате имеем

$$\frac{d\mu}{dT} \approx -\frac{\pi^2 T}{12\mu}. \quad (108)$$

В случае высоких температур ( $|\mu| \ll T$ ) можно разложить (104) по степеням  $\mu$ ,

$$n = \frac{4\mu}{\pi v_F^2 \hbar^2 T} \int_0^\infty \frac{1}{\text{ch}^2(\varepsilon/T)} [\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)] \times \left(1 - \frac{d\Lambda(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right) d\varepsilon, \quad (109)$$

и легко получить зависимость химического потенциала от температуры. Используя разложение (107), имеем

$$\mu \approx \frac{\pi}{4 \ln 2} \frac{nv_F^2 \hbar^2}{(1 - \mathcal{K})T}. \quad (110)$$

Для теплоемкости  $\mathcal{E}\Gamma$  при низких температурах имеем

$$C_S = \frac{dE}{dT} = -\frac{2S}{\pi v_F^2 \hbar^2} (1 - \mathcal{K})^2 \times \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon - \mu}{T} + \frac{d\mu}{dT}\right) \frac{\partial f(\varepsilon - \mu)}{\partial \varepsilon} \varepsilon^2 d\varepsilon = \frac{2S}{\pi v_F^2 \hbar^2} (1 - \mathcal{K})^2 \left(2\mu^2 \frac{d\mu}{dT} + \frac{\pi^2}{3} \mu T\right).$$

Используя (108), получим окончательно

$$C_S(|\mu| \gg T) \approx \frac{S\pi}{3\pi v_F^2 \hbar^2} (1 - \mathcal{K})^2 \mu T.$$

При высоких температурах имеем  $E = \pi S \mu (1 - \mathcal{K})^2 \times T^2 / 3v_F^2 \hbar^2$ , а для теплоемкости с учетом (110) получаем

$$C_S(|\mu| \ll T) \approx \frac{\pi^2}{12 \ln 2} n S (1 - \mathcal{K}).$$

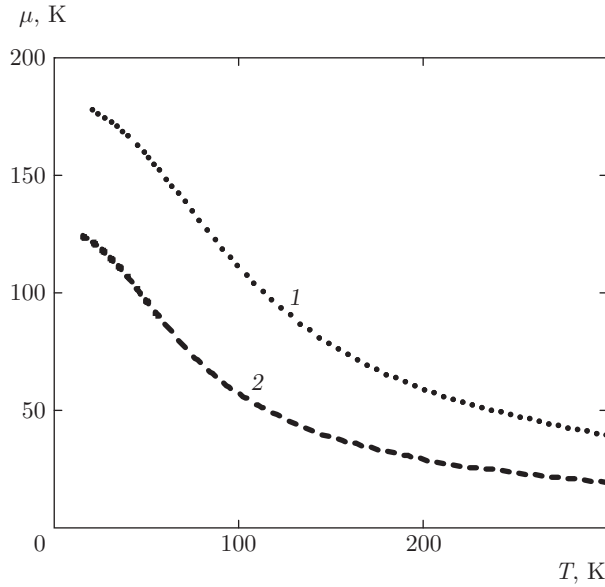


Рис. 9. Зависимости химических потенциалов изолированного ( $V = 0$ , кривая 1) и эпитаксиального ( $V = 2$ , кривая 2) графена от температуры

Приведем маленькое заключение для случая ЭГ. Из представленного исследования видно, что при наличии подложки химический потенциал уменьшается (см. рис. 9), а теплоемкость увеличивается. По-видимому, это можно объяснить тем, что электроны ЭГ более «инертны» из-за наличия взаимодействия. Термодинамика электрон-дырочной жидкости в изолированном графене была исследована в работе Фальковского [65]. Здесь мы в основном следовали духу этой работы. Учет межэлектронного взаимодействия увеличивает химический потенциал [65]. Наличие же какой-либо подложки уменьшает это взаимодействие (из-за возрастания диэлектрической проницаемости среды), а следовательно, должен уменьшиться и химический потенциал. Интересно, что этот вывод качественно совпадает с результатом нашей работы.

### 3.4. Фаза Берри

Необычное поведение дираковских электронов в графене в магнитном поле тесно связано с топологической фазой — фазой Берри. Наиболее интересным явлением в этой связи является полупелочисленный квантовый эффект Холла. Фаза Берри электронов свободного графена равна  $\pi$ .

Рассмотрим случай ЭГ. Чтобы исследовать фазу Берри  $\gamma(\varepsilon)$ , будем следовать статье Фальковского [73], которая была написана задолго до опублико-

вания известной работы Берри [74]. В [73] для  $\gamma(\varepsilon)$  было получено следующее выражение:

$$\gamma(\varepsilon) = -\text{Im} \oint \frac{dk_x}{\varphi_0^* \varphi_0 v_y} \varphi_0^* V_y \frac{d\varphi_0}{dk_x}, \quad (111)$$

где  $V_y = \partial H / \partial k_y$  — оператор скорости,  $\varphi_0$  — собственные функции гамильтониана. Изоэнергетическая траектория электронов в ЭГ в импульсном пространстве есть окружность площадью

$$A(\varepsilon) = \pi p^2 = \frac{\pi}{v_F^2} [\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)]^2. \quad (112)$$

Далее нам необходимо написать гамильтониан ЭГ. Как видно из (60), в общем виде это сделать невозможно. В связи с этим мы рассмотрим случай  $\varepsilon < \Delta_s$ . Тогда имеем

$$\Lambda(\varepsilon) \approx -2|V|^2 m S_1 \varepsilon / \pi \hbar^2 \Delta_s. \quad (113)$$

Легко показать, что гамильтониан ЭГ в этом случае имеет вид

$$H \approx \left( 1 + 2|V|^2 \frac{m S_1}{\pi \hbar^2} \frac{1}{\Delta_s} \right)^{-1} \times \begin{pmatrix} 0 & v_F(-ip_x - p_y) \\ v_F(ip_x - p_y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (114)$$

Этот гамильтониан можно интерпретировать как гамильтониан свободного графена с перенормированной скоростью Ферми

$$\tilde{v}_F = v_F (1 + 2|V|^2 m S_1 / \pi \Delta_s \hbar^2)^{-1}.$$

Следуя работе [73], представим собственные функции гамильтониана (114) в виде

$$\varphi_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon (\tilde{v}_F^2 p^2 - \varepsilon^2) \\ \tilde{v}_F (ip_x - p_y) (\tilde{v}_F^2 p^2 - \varepsilon^2) \end{pmatrix}. \quad (115)$$

Тогда

$$\varphi_0^* \varphi_0 = (\tilde{v}_F^2 p^2 + \varepsilon^2) (\tilde{v}_F^2 p^2 - \varepsilon^2)^2. \quad (116)$$

Далее имеем

$$\text{Im} \varphi_0^* V_y \frac{d\varphi_0}{dk_x} = -\tilde{v}_F^2 \varepsilon (\tilde{v}_F^2 p^2 - \varepsilon^2)^2. \quad (117)$$

Легко показать, что в случае ЭГ оператор  $V_y$  дается матрицей

$$V_y = \tilde{v}_F \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (118)$$

Функции (116) и (117) не зависят от  $k_x$ . Далее имеем  $\oint dk_x/v_y = dA/d\varepsilon$ . Действительно, по определению  $A = \oint dk_x dk_y$ . С другой стороны,  $dk_y = d\varepsilon/(\partial\varepsilon/\partial k_y) = d\varepsilon/v_y$ . Тогда  $A = \oint d\varepsilon dk_x/v_y$ . В нашем случае

$$\frac{dA}{d\varepsilon} = \frac{2\pi}{v_F^2} [\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)] \left(1 - \frac{d\Lambda(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right) \approx \frac{2\pi\varepsilon}{\tilde{v}_F^2}. \quad (119)$$

Таким образом,

$$\gamma(\varepsilon) = \frac{2\pi\varepsilon^2}{\tilde{v}_F^2 p^2 + \varepsilon^2}. \quad (120)$$

Используя выражение (114), окончательно получаем  $\gamma = \pi$ .

Этот результат может быть получен и другим путем. Гамильтониан двукратно-вырожденной электронной системы имеет вид  $H = \mathbf{R}(\mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ ,  $\mathbf{R}$  — параметр, зависящий от импульса,  $\boldsymbol{\sigma}$  — матрицы Паули. Фаза Берри такой системы определяется как  $\gamma = \Omega/2$ ,  $\Omega$  — телесный угол, соответствующий замкнутому контуру в пространстве параметра  $\mathbf{R}$ . Для двумерной системы замкнутому контуру в пространстве импульсов соответствует угол  $\varphi = 2\pi$ . В случае линейного спектра  $\mathbf{R} \propto \mathbf{p}$ . С другой стороны,  $\mathbf{p} \propto e^{i\varphi}$ , а значит, и  $\mathbf{R} \propto e^{i\varphi}$ , т. е. телесный угол в пространстве параметра  $\mathbf{R}$  также равен  $2\pi$ . Отсюда получаем, что в случае двумерных дираковских электронов  $\gamma = \pi$ . Очевидно, что в случае ЭГ

$$\mathbf{R} \propto \left(1 + 2|V|^2 \frac{mS_1}{\pi\hbar^2} \frac{1}{\Delta_s}\right)^{-1} \mathbf{p},$$

т. е. угловая зависимость остается такой же, как и в случае свободного графена. Отсюда получаем, что для ЭГ фаза Берри равна  $\pi$ .

Следует отметить, что полученный результат справедлив только для значений энергий  $\varepsilon < \Delta_s$ , т. е. вблизи точки Дирака. Если это условие не выполняется, то фаза Берри будет отличаться от значения  $\pi$ . Действительно, в этом случае угловая зависимость  $\mathbf{R}(\mathbf{p})$  отклоняется от линейного закона. Разложение следующего порядка малости дает

$$\Lambda(\varepsilon) \approx -\frac{2}{\Delta} |V|^2 \frac{mS_1}{\pi\hbar^2} \varepsilon \left(1 + \frac{2\varepsilon^2}{\Delta_s^2}\right). \quad (121)$$

Тогда энергетический спектр определяется следующим образом:

$$\varepsilon \left[1 + \frac{2}{\Delta_s} |V|^2 \frac{mS_1}{\pi\hbar^2} \left(1 + \frac{2\varepsilon^2}{\Delta_s^2}\right)\right] = v_F(-ip_x - p_y). \quad (122)$$

Далее будем использовать следующую аппроксимацию:

$$\varepsilon \left[1 + \frac{2}{\Delta_s} |V|^2 \frac{mS_1}{\pi\hbar^2} \left(1 + \frac{2(\varepsilon^{(1)})^2}{\Delta_s^2}\right)\right] = v_F(-ip_x - p_y), \quad (123)$$

где  $\varepsilon^{(1)} = \tilde{v}_F(-ip_x - p_y)$  — спектр в первом порядке разложения. Тогда

$$H \approx v_F \begin{pmatrix} 0 & \frac{C - iD}{\mathcal{A}^2 + \mathcal{B}^2} \\ \frac{C + iD}{\mathcal{A}^2 + \mathcal{B}^2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (124)$$

где

$$\mathcal{A} = 1 + \frac{2\rho_0|V|^2}{\Delta_s} + \frac{2\rho_0|V|^2}{\Delta_s} \frac{2\tilde{v}_F^2(p_y^2 - p_x^2)}{\Delta_s^2},$$

$$\mathcal{B} = \frac{8\rho_0|V|^2}{\Delta_s} \frac{\tilde{v}_F^2 p_x p_y}{\Delta_s^2},$$

$$C = -Ap_y - p_x \mathcal{B}, \quad D = p_x \mathcal{A} - p_y \mathcal{B}.$$

Отсюда видно, что

$$\mathbf{R} \propto \frac{(C, D)}{\mathcal{A}^2 + \mathcal{B}^2},$$

т. е.

$$R_x \propto \frac{C}{\mathcal{A}^2 + \mathcal{B}^2}, \quad R_y \propto \frac{D}{\mathcal{A}^2 + \mathcal{B}^2}.$$

Таким образом, угол отличается от  $\Omega$ . Это означает, что фаза Берри будет отличаться от  $\pi$ .

Экспериментально фаза Берри ЭГ на С-границе SiC исследовалась в работах [75–77]. В этих работах сообщается, что образцы ЭГ обладают фазой Берри, равной  $\pi$ . Фаза Берри в ЭГ на Si границе SiC исследована в [78]. В этой работе также показано, что  $\gamma = \pi$ . Таким образом, используемая модель полностью согласуется с экспериментом вблизи точки Дирака.

В случае многослойной АВА-упаковки графена нельзя однозначно ответить на этот вопрос, потому что в спектре такой системы имеется много различных ветвей. Задачу необходимо решать отдельно для каждой ветви. Сразу можно сказать, что для линейных ветвей ( $\cos[p\pi/(N+1)] = 0$ ) фаза Берри равна  $\pi$ . Для ветвей с  $\cos[p\pi/(N+1)] \neq 0$  в непосредственной окрестности точки Дирака, когда  $k \ll t_\perp \cos[p\pi/(N+1)]$  фаза Берри равна  $2\pi$ . Действительно, низкоэнергетический спектр многослойного графена можно записать в виде

$$\varepsilon_p \approx \frac{k^2}{2t_\perp \cos[p\pi/(N+1)]},$$

т. е. телесный угол в пространстве параметра  $\mathbf{R}$  равен  $4\pi$ . Тогда фаза Берри равна  $2\pi$ . В случае небольшого числа слоев  $N$  фазу Берри многослойного графена можно представить в виде

$$\gamma_p = \pi \left( 2 - \delta_{\cos[p\pi/(N+1)]}^0 \right),$$

где  $\delta_n^m$  — символ Кронекера ( $\delta_n^m = 1$ , если  $m = n$ ,  $\delta_n^m = 0$ , если  $m \neq n$ ). В случае ABC-упаковки, очевидно, фаза Берри равна  $N\pi$ .

Работа поддержана грантами РФФИ (№ 15-02-03311а), Президента РФ (МК-4471.2015.2), РНФ (МКН-15-19-10049) и Министерства образования и науки РФ в сфере научной деятельности (№ 3.1262.2014). Автор искренне благодарен фонду Дмитрия Зимина «Династия» за финансовую поддержку.

## ЛИТЕРАТУРА

1. P. R. Wallace, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
2. J. W. McClure, Phys. Rev. **108**, 612 (1957).
3. J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, Phys. Rev. **109**, 272 (1958).
4. W. S. Boyle and P. Nozières, Phys. Rev. **111**, 782 (1958).
5. J. W. McClure, Phys. Rev. **112**, 715 (1958).
6. W. J. Spry and P. M. Scherer, Phys. Rev. **120**, 826 (1960).
7. D. E. Soule, J. W. McClure, and L. B. Smith, Phys. Rev. **134**, A453 (1964).
8. R. E. Peierls, Helv. Phys. Acta **7**, 81 (1934).
9. L. D. Landau, Phys. Z. Sowjetunion **11**, 26 (1937).
10. N. D. Mermin, Phys. Rev. **176**, 250 (1968).
11. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., Nature **438**, 197 (2005).
12. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., Science **306**, 666 (2004).
13. A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nature Mater. **6**, 183 (2007).
14. P. Avouris, Z. Chen, and V. Perebeinos, Nature Nanotech. **2**, 605 (2007).
15. F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan, and A. C. Ferrari, Nature Photon. **4**, 611 (2010).
16. Л. А. Фальковский, УФН **178**, 923 (2008); ЖЭТФ **142**, 1309 (2012).
17. Yu. Yu. Kiselev and L. E. Golub, Phys. Rev. B **84**, 235440 (2011).
18. G. Konstantatos, M. Badioli, L. Gaudreau et al., Nature Nanotech. **7**, 363 (2012).
19. А. А. Варламов, А. В. Кавокин, И. А. Лукьянчук, С. Г. Шарапов, УФН **182**, 1229 (2012).
20. S. P. Koenig, L. Wang, J. Pellegrino, and J. S. Bunch, Nature Nanotech. **7**, 728 (2012).
21. D. Cohen-Tanugi and J. C. Grossman, Nano Lett. **12**, 3602 (2012).
22. Y. Baek, C. Kim, D.-K. Seo et al., J. Membr. Sci. **460**, 171 (2014).
23. J. Yin, G. Zhu, and B. Deng, J. Membr. Sci. **437**, 237 (2013).
24. S. Zinadini, A. A. Zinatizadeh, M. Rahimi et al., J. Membr. Sci. **453**, 292 (2014).
25. T. A. Mattei and A. A. Rehman, Neurosurgery **74**, 499 (2014).
26. K. Yang, S. Zhang, G. Zhang et al., Nano Lett. **10**, 3318 (2010).
27. H. Gu, Y. Yu, X. Liu et al., Biosens. Bioelectron. **32**, 118 (2012).
28. C. Heo, J. Yoo, S. Lee et al., ACS Nano **7**, 4869 (2013).
29. I. V. Lebedeva, A. A. Knizhnik, A. M. Popov et al., Physica E **44**, 949 (2012).
30. S. W. Hong, J. H. Lee, S. H. Kang et al., BioMed Res. Internat. **2014**, 212149 (2014).
31. M. M. Bailey, J. M. Heddleston, J. Davis et al., Nano Res. **7**, 390 (2014).
32. M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge Univ. Press, New York (2012).
33. E. G. Mishchenko, Phys. Rev. Lett. **98**, 216801 (2007).
34. C. Berger, Zh. Song, T. Li et al., J. Phys. Chem. B **108**, 19912 (2004).
35. W. Lua, W. C. Mitchel, C. A. Thornton et al., J. Electrochem. Soc. **150**, G177 (2003).
36. G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 026803 (2008).
37. P. A. Khomyakov, G. Giovannetti, P. C. Rusu et al., Phys. Rev. B **79**, 195425 (2009).

38. P. A. Khomyakov, A. A. Starikov, G. Brocks, and P. J. Kelly, *Phys. Rev. B* **82**, 115437 (2010).
39. M. Vanin, J. J. Mortensen, A. K. Kelkkanen et al., *Phys. Rev. B* **81**, 081408 (2010).
40. C. Riedl, C. Coletti, and U. Starke, *J. Phys. D* **43**, 374009 (2010).
41. L. A. Falkovsky, *Pis'ma v ZhETF* **97**, 496 (2013).
42. I. A. Luk'yanchuk, A. A. Varlamov, and A. V. Kavokin, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 016601 (2011).
43. V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005).
44. V. Lukose, R. Shankar, and G. Baskaran, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 116802 (2007).
45. Z. Z. Alisultanov, *Physica B* **438**, 41 (2014).
46. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, *УФН* **69**, 419 (1959).
47. З. З. Алисултанов, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 258 (2014).
48. Z. Z. Alisultanov, *Phys. Lett. A* **378**, 2329 (2014).
49. З. З. Алисултанов, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 813 (2014).
50. F. D. M. Haldane and P. W. Anderson, *Phys. Rev. B* **13**, 2553 (1976).
51. С. Ю. Давыдов, *Письма в ЖТФ* **37**, 64 (2011).
52. З. З. Алисултанов, Р. П. Мейланов, *ФТТ* **54**, 1398 (2012).
53. З. З. Алисултанов, Р. П. Мейланов, *ТМФ* **172**, 455 (2012).
54. С. Ю. Давыдов, *Письма в ЖТФ* **39**, 7 (2013).
55. С. Ю. Давыдов, *ФТП* **47**, 97 (2013).
56. З. З. Алисултанов, С. В. Гарнов, Р. П. Мейланов, *ФТТ* **54**, 2237 (2012).
57. З. З. Алисултанов, *Письма в ЖТФ* **39**, 23 (2013).
58. З. З. Алисултанов, *ФТП* **47**, 805 (2013).
59. Z. Z. Alisultanov, *Low Temp. Phys.* **39**, 767 (2013).
60. З. З. Алисултанов, *Письма в ЖТФ* **39**, 8 (2013).
61. S. Yu. Davydov, *Phys. Lett. A* **378**, 1850 (2014).
62. З. З. Алисултанов, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 121 (2013).
63. Z. Z. Alisultanov, *Physica E* **69**, 89 (2015).
64. N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **73**, 125411 (2006).
65. L. A. Falkovsky, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 183 (2013).
66. A. Yu. Ozerin and L. A. Falkovsky, *Phys. Rev. B* **85**, 205143 (2012).
67. D. Weiss, K. Klitzing, and V. Mossar, in: *Two-dimensional Systems: New Physics and Devices*, ed. by G. Baner, F. Kuchar, and H. Heinrich, Springer-Verlag, New York (1986), p. 204.
68. И. В. Кукушкин, С. В. Мешков, В. Б. Тимофеев, *УФН* **155**, 219 (1988).
69. L. Onsager, *Phil. Mag.* **43**, 1006 (1952).
70. I. A. Luk'yanchuk and Y. Kopelevich, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 166402 (2004).
71. S. G. Sharapov, V. P. Gusynin, and H. Beck, *Phys. Rev. B* **69**, 075104 (2004).
72. J. Gonzalez, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano, *Nucl. Phys. B* **424**, 595 (1994); *Phys. Rev. B* **59**, 2474 (1999).
73. Л. А. Фальковский, *ЖЭТФ* **49**, 609 (1965).
74. M. V. Berry, *Proc. Roy Soc. Lond. A* **392**, 45 (1984).
75. M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski et al., *Phys. Rev. Lett.* **97**, 226405 (2006).
76. C. Berger, Zh. Song, X. Li et al., *Science* **312**, 1191 (2006).
77. M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski et al., *Sol. St. Comm.* **143**, 123 (2007).
78. W. A. de Heer, C. Berger, X. Wu et al., *J. Phys. D* **43**, 374007 (2010).