

Модель адсорбции на аморфном графене

© С.Ю. Давыдов

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

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики,
197101 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergej_Davydov@mail.ru

(Получена 7 июля 2015 г. Принята к печати 8 сентября 2015 г.)

Предложена модель плотности состояний аморфного однолистного графена, включающая как близкую к точке Дирака, так и периферийную области энергий. С помощью предложенной модели решена задача об адсорбции с использованием аппроксимации, позволяющей представить зонные вклады n_b в числа заполнения адатома n_a в аналитическом виде. Сделаны оценки вызванного аморфизацией изменения чисел заполнения адатомов щелочных металлов и галогенов.

1. Введение

Изучение влияния топологических дефектов в графене на его электронную структуру и транспортные свойства [1–3] естественным образом трансформировалось в интерес к аморфному графену (АГ) [4–12]. Теоретически было установлено [4–6,8,12], что присутствие в двумерной сетке конечной концентрации пентагонов и гептагонов (дефекты Стоуна–Уэлса [13]) наряду с характерными для идеального графена (ИГ) гексагонами приводит к ненулевой плотности состояний (ПС) в окрестности точки Дирака, которую в данном случае правильнее называть точкой зарядовой нейтральности [5]. Такое изменение ПС не является единственным эффектом наличия колец с нечетным количеством звеньев. Так, например, в [5] показано, что при этом нарушается электронно-дырочная симметрия ПС. Валентная (дырочная) часть ПС по-прежнему сохраняет черты, свойственные ИГ, но сингулярность ван Хофа сглаживается. Электронная часть ПС, отвечающая зоне проводимости, приобретает второй (не ванхововский) максимум, расположенный ближе к верхнему краю ПС, соответствующему потолку зоны проводимости.

В настоящее время разработаны различные методы получения аморфного графена (см., например, [6,7,10,11]) и ссылки, приведенные в этих работах), в том числе путем перевода ИГ в АГ при бомбардировке электронами в ТЕМ-экспериментах.

Здесь мы рассмотрим задачу об адсорбции на АГ. Для получения функции Грина адсорбированного атома необходимо задать ПС подложки [14]. Модель ПС для АГ была предложена в работе [15]. При этом мы игнорировали нарушение электронно-дырочной симметрии и сосредоточились только на главном, т.е. на наличии у АГ ненулевой плотности состояний в окрестности точки зарядовой нейтральности, которую мы для краткости по-прежнему будем называть точкой Дирака. Стоит отметить, что при учете взаимодействия вторых соседей в случае ИГ симметричность ПС относительно точки Дирака также отсутствует [1], так что

асимметрия ПС не является следствием одной лишь аморфизации.

Теория адсорбции на АГ была развита в работе [16]. При этом принималась во внимание только область малых энергий вблизи середины полосы сплошного спектра, что отвечает линейной дисперсии в ИГ. В работе [17], однако, показано, что использование такого низкоэнергетического приближения в задаче об адсорбции может приводить к определенным ошибкам. Поэтому в настоящей работе будет предложена модель ПС АГ, отвечающая всей оси энергий. При этом мы будем, с одной стороны, использовать результаты работы [16], а с другой — пользоваться моделью [18], предложенной ранее для описания адсорбции на ИГ.

2. Плотности состояний подложки и адатома

Воспользовавшись результатами работы [16], запишем плотность состояний АГ $\rho_{ag}(\omega)$, где ω — энергетическая переменная, в виде

$$\rho_{ag}(\omega) = B \begin{cases} \sqrt{\omega^2 + \Delta^2}, & 0 \leq |\omega| \leq t, \\ \text{sgn}(\omega) \frac{tR}{\omega}, & t < |\omega| \leq 3t, \\ 0, & |\omega| > 3t. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь B — нормировочный множитель, t — энергия перехода между ближайшими соседями в графене, $R = \sqrt{t^2 + \Delta^2}$. Энергия Δ характеризует аморфизацию — ненулевое значение ПС в точке Дирака, принятой за нуль энергии. Здесь мы не учитываем размытие краев сплошного спектра, обрезая плотность состояний при энергиях $\omega = \pm 3t$, как и в случае ИГ [1,18], что представляется допустимым, исходя из результатов расчетов [4–6]. Множитель B находим из условия нормировки

$$\int_0^{3t} \rho_{ag}(\omega) d\omega = 1, \quad (2)$$

откуда получаем

$$B = 2 \left((1 + 2 \ln 3)tR + \Delta^2 \ln \frac{t+R}{\Delta} \right)^{-1}. \quad (3)$$

Легко показать, что при $\Delta \rightarrow 0$ плотность состояний $\rho_{ag}(\omega)$ переходит в плотность состояний ИГ $\rho_g(\omega)$ (см. выражения (7) и (8) в [18]; отметим, что в [18] под Δ понимается энергия $2t$).

Функция Грина одиночного адатома $G_a(\omega)$ может быть представлена в виде [14,16]

$$G_a^{-1}(\omega) = \omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega) + i\Gamma(\omega). \quad (4)$$

Здесь ε_a — энергия уровня адатома, функция уширения атомного уровня есть

$$\Gamma(\omega) = \pi V^2 \rho_{ag}(\omega), \quad (5)$$

где V — матричный элемент взаимодействия адатом-графен, функция сдвига уровня адатома есть

$$\Lambda(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega', \quad (6)$$

где P — символ главного значения. Подставляя (1) в (5) и используя (6), найдем

$$\Lambda(\omega) = \Lambda_1(\omega) + \Lambda_2(\omega), \quad (7)$$

$$\Lambda_1(\omega) = BV^2 \left[\sqrt{\omega^2 + \Delta^2} \left(\text{Arsh} \frac{\omega t + \Delta^2}{\Delta |t - \omega|} + \text{Arsh} \frac{\omega t - \Delta^2}{\Delta |t + \omega|} \right) - 2\omega \text{Arsh} \frac{1}{\delta} \right], \quad (8)$$

$$\Lambda_2(\omega) = BV^2 \frac{tR}{\omega} \ln \left| \frac{t^2 - \omega^2}{t^2 - (\omega/3)^2} \right|, \quad (9)$$

где $\delta = \Delta/t$ — параметр аморфности. Отметим, что функция $\Lambda_1(\omega)$ совпадает (с точностью до обозначений) с функцией сдвига (7) работы [16], в которой энергия обрезания ξ заменена на t ; функция $\Lambda_2(\omega)$ идентична (также с точностью до обозначений) второму слагаемому функции сдвига (10) для ИГ [18]. Графики функций $\rho_{ag}^*(x) = \rho_{ag}(x)t$ и $\lambda(x) = \Lambda(x)/t$, где введена безразмерная энергия $x = \omega/t$, представлены на рис. 1. Изображены только правые части графиков, так как $\rho_{ag}^*(x)$ является четной, а $\lambda(x)$ — нечетной функцией x .

Значение энергии $0 < \bar{x} < 1$, при котором происходит пересечение двух зависимостей $\rho_{ag1}^*(x)$ и $\rho_{ag2}^*(x)$ на рис. 1, *a*, где индексы 1 и 2 отвечают параметрам аморфности δ_1 и δ_2 , определяется выражением

$$\bar{x} = \sqrt{\frac{b_2^2 \delta_2^2 - b_1^2 \delta_1^2}{b_1^2 - b_2^2}}, \quad (10)$$

где $b = Bt^2 = 2((1 + 2 \ln 3)r + \delta^2 \ln((1+r)/\delta))^{-1}$, $r = R/t = \sqrt{1 + \delta^2}$. Вводя безразмерные величины $b = Bt^2 = 2((1 + 2 \ln 3)r + \delta^2 \ln((1+r)/\delta))^{-1}$, $r = R/t = \sqrt{1 + \delta^2}$

и полагая для простоты $\delta_1 = 0$, $b_1 = b_0 = 2/(1 + 2 \ln 3)$ и $\delta_2 = \delta \ll 1$, $b_2 = b$, получим $\bar{x} \approx (b_0 \ln(2/\delta))^{-1/2}$. Таким образом, с увеличением δ значение \bar{x} слабо возрастает, что и наблюдается на рис. 1, *a*.

Локальная плотность состояний (ЛПС) на адатоме равна, по определению, $\rho_a(\omega) = -\pi^{-1} \text{Im} G_a(\omega)$, откуда с учетом (4) получим

$$\rho_a(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(\omega)}{(\omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega))^2 + \Gamma(\omega)^2}. \quad (11)$$

Рассмотрим характерные особенности ЛПС адатома. Для дальнейшего анализа удобно ввести дополнитель-

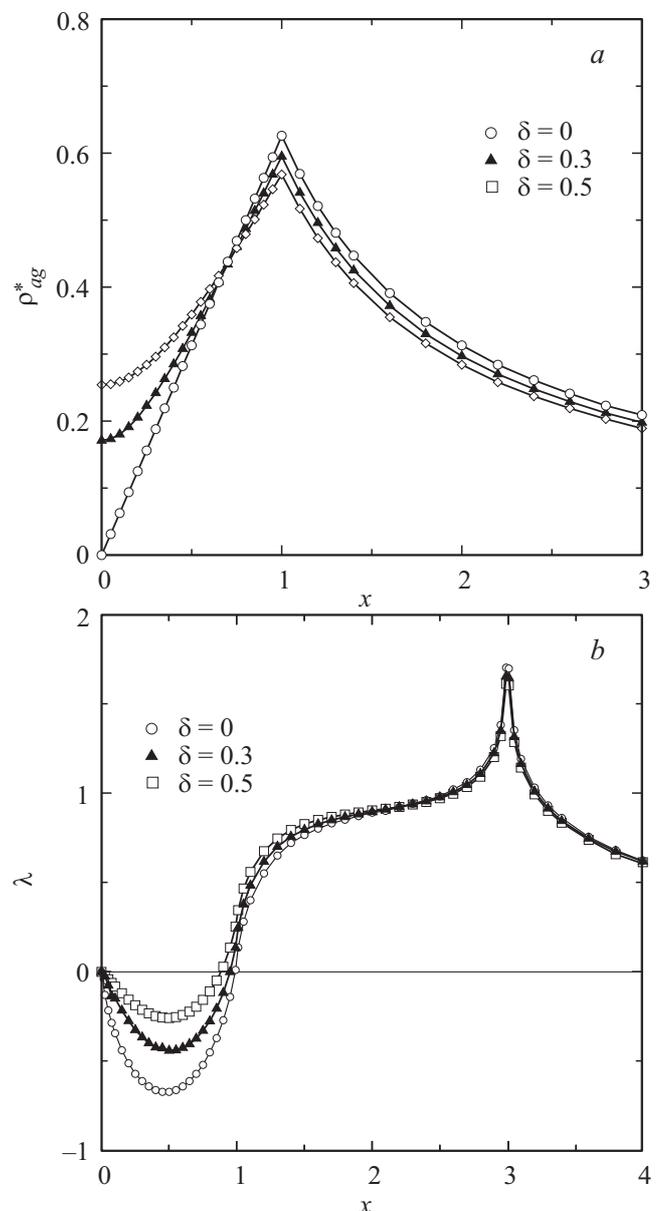


Рис. 1. Зависимости приведенных плотности состояний ρ_{ag}^* (*a*) и функции сдвига λ (*b*) при $\nu = 1$ от безразмерной энергии $x \geq 0$. Примечание: функция $\rho_{ag}^*(x)$ — четная, функция $\lambda(x)$ — нечетная.

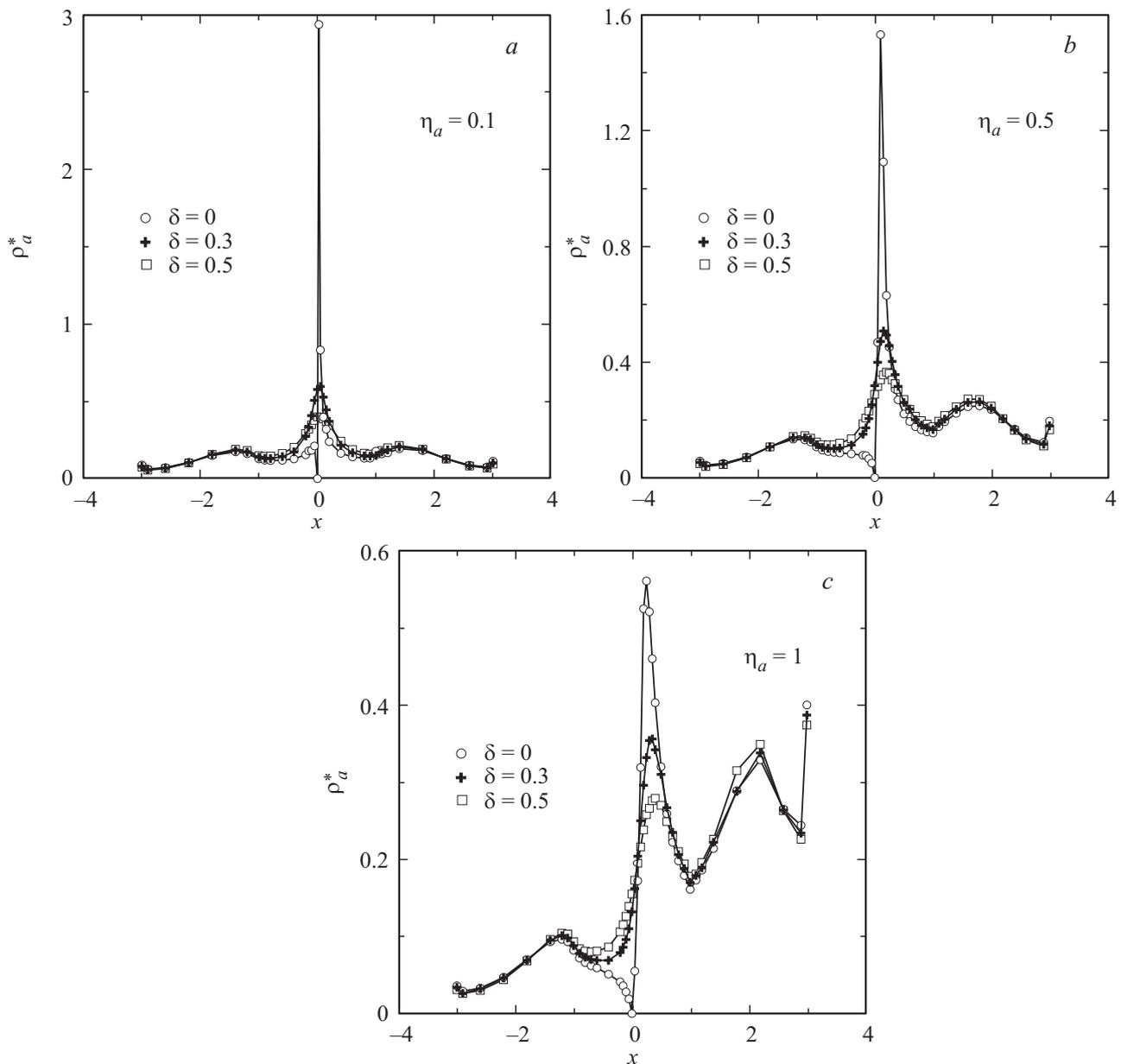


Рис. 2. Зависимости приведенных плотности состояний адатома ρ_a^* при $\nu = 1$ от безразмерной энергии x для различных значений энергии уровня адатома ($\eta_a = 0.1$ (a), 0.5 (b) и 1 (c)) и степеней аморфности $\delta = 0, 0.3, 0.5$.

ные безразмерные величины: $\eta_a = \varepsilon_a/t$, $\nu = V/t$, $\lambda = \Lambda/t$, $\Gamma/t = \pi\nu^2\rho_{ag}^*$, $\rho_a^* = \rho_a t$. Тогда выражение (11) приобретает вид

$$\rho_a^*(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\pi\nu^2\rho_{ag}^*(x)}{(x - \eta_a - \lambda(x))^2 + (\pi\nu^2\rho_{ag}^*(x))^2}. \quad (12)$$

Результаты расчета $\rho_a^*(x)$ для уровней адатома $\eta_a > 0$ приведены на рис. 2. Из соотношений (7)–(9) следует, что одновременная замена $\varepsilon_a(\eta_a)$ на $-\varepsilon_a(-\eta_a)$ и $\omega(x)$ на $-\omega(-x)$ не изменяет ЛПС (11), (12). Таким образом, графики $\rho_a^*(x)$ для $\eta_a < 0$ получаются из приведенных на рис. 2 зависимостей путем отражения относительно вертикальной оси.

Прежде всего обращают на себя внимание центральный и два боковых пика. Для ИГ свойства этих максимумов подробно обсуждались в работе [18]. С ростом степени аморфности δ центральный пик понижается и расширяется, а боковые пики меняются незначительно. С удалением уровня адатома от центра главные максимумы также понижаются, правый боковой максимум возрастает, а левый уменьшается. При этом различия для ИГ и АГ крайне малы.

Рассмотрим некоторые частные случаи аналитически, полагая $\delta \neq 0$. Легко показать, что в точке Дирака

$$\rho_a^*(0) = \frac{1}{\pi} \frac{\pi\nu^2 b\delta}{\eta_a^2 + (\pi\nu^2 b\delta)^2}. \quad (13)$$

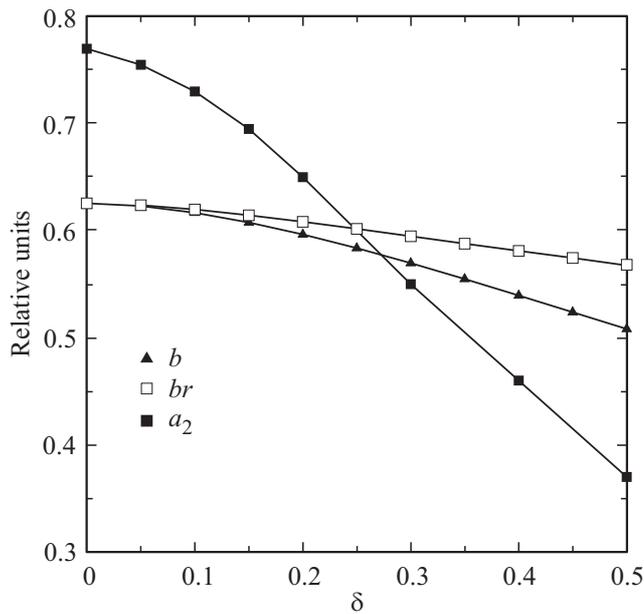


Рис. 3. Зависимости безразмерных параметров модели b , br и a_2 от степени аморфности δ .

При $\eta_a^2 \ll (\pi v^2 b \delta)^2$ получаем $\rho_a^*(0) \propto \delta^{-1}$, тогда как в случае обратного неравенства $\rho_a^*(0) \propto \delta$. Здесь мы учли, что коэффициент b слабо убывает с увеличением δ (рис. 3), так что произведение $b\delta$ растет почти линейно. Отметим, что $\rho_a^*(0)$ представляет собой ЛПС состояний адатома при энергии, соответствующей уровню Ферми собственного (недопированного) АГ.

Определим положение и высоту центрального максимума, полагая $|\eta_a| \ll 1$ и рассматривая область энергий $|x| \ll 1$. Учитывая, что $\lambda_1(x) \approx -2xv^2b \ln(2/\delta)$ при $\ln(2/\delta) > 1$, получим $\lambda(x) \approx -2xv^2kb$, где $k = (4r/9) + \ln(2/\delta)$. Тогда центральному пику отвечает энергия

$$x_0 \approx \frac{\eta_a}{1 + 2v^2kb}. \quad (14)$$

Так как произведение kb с ростом δ убывает, величина $|x_0|$ растет. В рассматриваемом случае ЛПС на адатоме удобно представить в виде

$$\rho_a^*(x) \approx \frac{v^2 \rho_{ag}^*(x_0)}{(x - x_0)^2 + (\pi v^2 \rho_{ag}^*(x_0))^2}. \quad (15)$$

Это выражение справедливо, естественно, лишь в области максимума. Тогда

$$\rho_a^*(x_0) \approx \frac{1}{(\pi v)^2} \frac{1}{b \sqrt{x_0^2 + \delta^2}}, \quad (16)$$

откуда следует, что с увеличением $|\eta_a|$ и ростом δ центральный пик понижается. Так как ширина ЛПС (15) определяется величиной $\rho_{ag}^*(x_0)$, ясно, что с увеличением δ центральный пик также уширяется. Подчеркнем, что здесь речь идет о значениях x_0 , не превосходящих \bar{x} (см. (10)), когда $\rho_{ag}^*(x_0)$ растет с увеличением δ (см. рис. 1, а).

Оценим высоту главных (ближайших к началу координат) минимумов ПС $\rho_{ag}^*(x)$. Как следует из рис. 2, главные минимумы лежат при $x_{\min} \sim \pm 1$. В этих точках ПС АГ достигает максимума, равного br (рис. 1, а), а функция сдвига $|\lambda(x)|$ — минимума $\lambda_{\min} \sim 0$ (рис. 1, б). Тогда получаем

$$\rho_a^*(\pm 1) = \frac{1}{\pi} \frac{\pi v^2 br}{(\pm 1 - \eta_a)^2 + (\pi v^2 br)^2} \sim (\rho_a^*)_{\min}. \quad (17)$$

Из (17) следует, что при $\eta_a > 0$ левый минимум, лежащий в области отрицательных энергий, будет глубже, чем правый минимум, что и наблюдается на рис. 2 (см. случаи b и c). В частности, при $\eta_a = 1$ получаем $\rho_{ag}^*(1) \sim 1/(\pi v)^2 br$ и $\rho_{ag}^*(-1) \sim v^2 br / [4 + (\pi v^2 br)^2]$. Подчеркнем, что произведение br слабо убывает с ростом δ (рис. 3).

Обсудим теперь боковые максимумы, которые наблюдаются в области энергий $1 < |x| < 3$. Этим максимумам отвечают корни $x_+ > 0$ и $x_- < 0$ уравнения

$$x - \eta_a - \lambda(x) = 0, \quad (18)$$

графический метод решения которого описан в работе [18] для ИГ и в работе [16] для АГ. ЛПС на адатоме есть

$$\rho_a^*(x_{\pm}) = \frac{|x_{\pm}|}{(\pi v)^2 b}. \quad (19)$$

С увеличением $|\eta_a|$ значения $|x_-|$ и x_+ растут и при $|\eta_a| \gg 3$ принимают вид $x_{\pm} = \pm 3(1 - \alpha)$, где $\alpha \sim (1/2) \exp(-3|\eta_a|/v^2 br)$. Так как br с ростом δ слабо уменьшается (рис. 3), увеличение степени аморфности сдвигает x_{\pm} к границам ПС. Так как множитель b также убывает с ростом δ (рис. 3), боковые максимумы при этом возрастают (рис. 2). Мы не обсуждаем здесь отдельно роль параметра связи адатом-подложка v , так как в случае АГ роль v такая же, как и в случае ИГ [18].

3. Переход заряда между адатомом и подложкой

При нулевой температуре число заполнения адатома определяется стандартным образом:

$$n_a = \int_{-\infty}^{E_F} \rho_a(\omega) d\omega, \quad (20)$$

где E_F — уровень Ферми. Удобно представить n_a в виде суммы зонного n_b и локального n_l вкладов [14,16]:

$$n_b = \int_{-3t}^{E_F} \rho_a(\omega) d\omega, \quad n_l = \left| 1 - \frac{\partial \Lambda(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega_l}^{-1}, \quad (21)$$

где ω_l — энергия локального уровня, лежащего ниже дна валентной зоны АГ.¹ При рассмотрении адсорбции

¹ Здесь следует отметить, что, строго говоря, в случае АГ локальный уровень отсутствует, так как ПС вне полосы сплошного спектра хоть и мала, но не равна нулю. В нашей модели, однако, мы этого обстоятельства не учитываем.

Параметры задачи и аналитические результаты для атомов, адсорбированных на ИГ (индекс 0 отвечает $\delta = 0$)

	Li	Na	K	Rb	Cs	F	Cl	Br	I
η_a	1.27	1.04	1.07	1.09	1.17	-0.42	-0.21	-0.04	0.17
γ_0	0.43	0.27	0.14	0.12	0.10	8.00	3.29	2.38	1.63
n_{b0}	0.11	0.09	0.04	0.04	0.03	0.05	0.14	0.21	0.31
n_{i0}	0	0	0	0	0	0.47	0.37	0.28	0.12

на ИГ в работе [18] для вычисления зонного вклада была предложена аппроксимационная схема, позволяющая получить аналитические выражения для n_b . Здесь мы модифицируем эту схему для случая адсорбции на АГ.

Будем рассматривать собственный (недопированный) АГ, приняв $E_F = 0$. Представим выражение для зонного вклада n_b в виде суммы, положив $n_b = I_1 + I_2$, где

$$I_1 = \int_{-3}^{-1} \rho_a^*(x) dx, \quad I_2 = \int_{-1}^0 \rho_a^*(x) dx. \quad (22)$$

Из рис. 1 следует, что основные отличия АГ от ИГ проявляются в интервале энергий от нуля до ± 1 (или $\pm t$): действительно, как ПС $\rho_{ag}^*(x)$, так и функция сдвига $\lambda(x)$ существенно меняются с δ только при $|x| \leq 1$. Вне этого интервала различия указанных функций для ИГ и АГ незначительны. Поэтому для оценки интеграла I_1 мы можем положить $\delta = 0$ и воспользоваться формулами работы [18]. Таким образом, нам остается оценить только изменение интеграла I_2 , вызванное аморфизацией.

В работе [18] функция сдвига заменялась двумя константами сдвига $\pm \gamma_0 a_1^0$ для безразмерных энергий $1 < |x| \leq 3$ и $\mp \gamma_0 a_2^0$ для $|x| \leq 1$, где $\gamma_0 = b_0 v^2$, $b_0 \equiv b(\delta = 0)$, $a_{1,2}^0 \equiv a_{1,2}(\delta = 0)$. Воспользовавшись результатом работы [19] и полагая $a_2 \propto |\lambda(0.5)|$ (см. рис. 2, b), получим значения $a_2(\delta)$, приведенные на рис. 3. Тогда интеграл I_2 может быть сведен к выражению

$$I_2(\eta_{a2}, \gamma) = \gamma \int_0^1 \frac{\sqrt{x^2 + \delta^2}}{X} dx, \quad (23)$$

где $X = (1 + (\pi\gamma)^2)x^2 + 2\eta_{a2}x + \eta_{a2}^2 + (\pi\gamma\delta)^2$, $\eta_{a2} = \eta_a + \gamma a_2$, $\gamma = b v^2$. Однако даже в этой упрощенной форме интеграл (23) аналитически не берется.

Обратимся к оценкам для конкретных адсорбционных систем, воспользовавшись результатами работы [19]. Приближенно представим интеграл (23) в виде

$$I_2(\eta_{a2}, \gamma) \approx S_{21} + S_{22},$$

$$S_{21} = \delta\gamma \int_0^\delta \frac{dx}{X}, \quad S_{22} = \gamma \int_\delta^1 \frac{x dx}{X}. \quad (24)$$

Теперь легко получить точные выражения для интегралов S_{21} и S_{22} :

$$S_{21} = \frac{\delta\gamma}{\pi K} \left(\arctan \frac{(1 + (\pi\gamma)^2)\delta + \eta_{a2}}{\pi K} - \arctan \frac{\eta_{a2}}{\pi K} \right), \quad (25)$$

$$S_{22} = \frac{\gamma}{2(1 + (\pi\gamma)^2)} \ln \frac{(1 + \eta_{a2})^2 + (\pi\gamma)^2(1 + \delta^2)}{(\delta + \eta_{a2})^2 + 2(\pi\gamma\delta)^2} - \frac{\gamma}{1 + (\pi\gamma)^2} \frac{\eta_{a2}}{\pi K} \left(\arctan \frac{1 + (\pi\gamma)^2 + \eta_{a2}}{\pi K} - \arctan \frac{(1 + (\pi\gamma)^2)\delta + \eta_{a2}}{\pi K} \right), \quad (26)$$

где $K = [(\gamma\eta_{a2})^2 + \delta^2(1 + (\pi\gamma)^2)]^{1/2}$. Соответствующие параметры для адсорбции на ИГ приведены в таблице (индекс 0 отвечает $\delta = 0$, данные взяты из работы [19] для случая, когда в адсорбции участвуют только $|p_z\rangle$ -орбитали атомов углерода подложки). Там же представлены значения зонных n_{b0} и локальных n_{i0} вкладов, вычисленные по аппроксимационным формулам.

Результаты расчета изменения зонных вкладов

$$\Delta n_b = n_b - n_{b0}, \quad (27)$$

вызванного аморфизацией, представлены на рис. 4 и 5 для адсорбции атомов щелочных металлов и галогенов соответственно. В обоих случаях имеем $\Delta n_b > 0$; для галогенов зависимость $\Delta n_b(\delta)$ является монотонно возрастающей, тогда как для щелочных металлов функция $\Delta n_b(\delta)$ имеет максимум. Отметим также, что значения Δn_b для галогенов приблизительно на порядок превышают соответствующие значения для щелочных металлов, что не удивительно и вытекает из различия

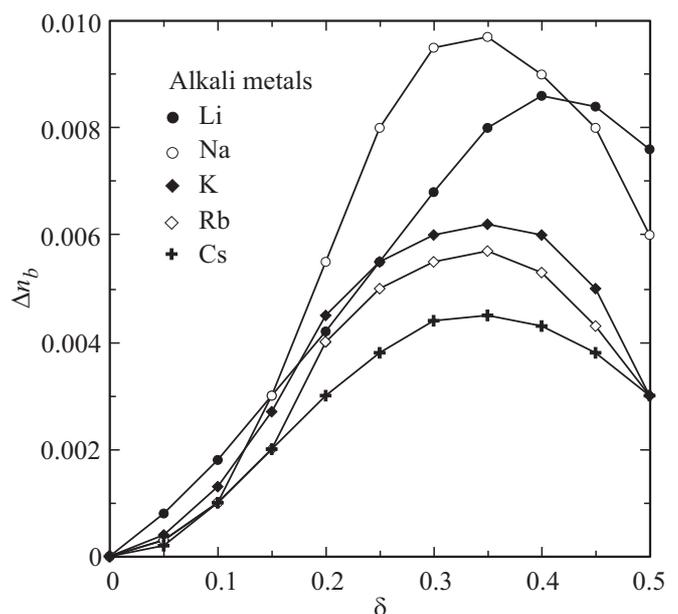


Рис. 4. Зависимости изменения чисел заполнения Δn_a (b) атомов щелочных металлов от степени аморфности δ ($v = 1$).

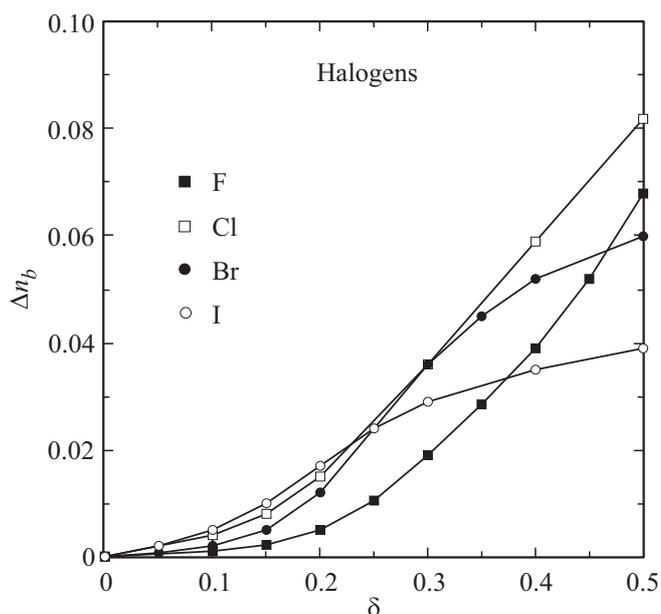


Рис. 5. Зависимости изменения чисел заполнения Δn_a (b) адатомов галогенов от степени аморфности δ ($\nu = 1$).

их величин, приведенных в таблице. На основании сделанных выше предположений мы можем считать, что вызванное аморфизацией изменение полного числа заполнения адатома $\Delta n_a \approx \Delta n_b$. Отметим, что в случае щелочных металлов заряд адатома $Z_a = 1 - n_a$, тогда как для галогенов $Z_a = -n_a$. Таким образом, аморфизация приводит к уменьшению заряда адатомов щелочных металлов и увеличению заряда адатомов галогенов.

Сопоставление полученных здесь результатов с результатами низкоэнергетического приближения [16] показывает, что основное различие связано со значениями параметров связи $\gamma(\gamma_0)$, которые возникают из разницы нормировочных множителей B и C^{-1} . Последнее не удивительно, так как в обоих случаях ПС π - и π^* -зон графена нормируется на один электрон.

4. Заключение

В настоящей работе предложена модель ПС аморфной графеновой подложки, учитывающая как близкую к точке Дирака, так и периферийную область энергий. В рамках этой модели использована аппроксимация, позволяющая представить зонные вклады n_b в числа заполнения адатома n_a в аналитическом виде. Оценки изменения чисел заполнения Δn_a для адсорбции атомов щелочных металлов и галогенов показывают, что значения $\Delta n_a \approx \Delta n_b$ величины при малых параметрах аморфности δ существенно меньше значений n_b^0 для ИГ.

Работа частично субсидирована программой государственной финансовой поддержки ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01).

Список литературы

- [1] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 109 (2009).
- [2] O.V. Yazyev, S.G. Louie. *Nature Materials*, **9**, 806 (2010).
- [3] O.V. Yazyev, S.G. Louie. *Phys. Rev. B*, **81**, 195420 (2010).
- [4] V. Kapko, D.A. Darbold, M.F. Thorpe. *Phys. Status Solidi B*, **247**, 1197 (2010).
- [5] M. Zheng, K. Takei, B. Hsia, H. Fang, X. Zhang, N. Ferralis, H. Ko, Y.-L. Chuen, Y. Zang, R. Maboudian, A. Javey. *Appl. Phys. Lett.*, **96**, 063110 (2010).
- [6] J. Kotakoski, A.V. Krasheninnikov, U. Kaiser, J.C. Meyer. *Phys. Rev. Lett.*, **106**, 105505 (2011).
- [7] A. Kumar, M. Wilson, M.F. Thorpe. *J. Phys.: Condens. Matter*, **24**, 485003 (2012).
- [8] D.V. Tuan, A. Kumar, S. Roche, F. Ortmann, M.F. Thorpe, P. Ordejon. *Phys. Rev. B*, **86**, 121408 (R) (2012).
- [9] J. Zhao, G. Zhu, W. Huang, Z. He, X. Feng, Y. Ma, X. Dong, L. Wang, Z. Hu, Y. Lu, W. Huang. *J. Mater. Chem.*, **22**, 19679 (2012).
- [10] X. Li, B. Wang, J. Yang, Y. Ma, X. Feng, W. Huang, M. Gu. *Synthetic Metals*, **174**, 50 (2013).
- [11] K.K. Chattopadhyay, D. Banerjee, N.S. Das, D. Sarkar. *Carbon*, **72**, 4 (2014).
- [12] Y. Li, D.A. Drabold. *IET Circuits, Devices and Systems*, **9** (1), 13 (2015).
- [13] A.J. Stone, D.J. Wales. *Chem. Phys. Lett.*, **128**, 501 (1986).
- [14] С.Ю. Давыдов. *Теория адсорбции: метод модельных гамильтонианов* (СПб., Изд-во СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, 2013) twirpx.com/file/1596114/
- [15] С.Ю. Давыдов. *ФТП*, **49**, 628 (2015).
- [16] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **57**, 1017 (2015).
- [17] С.Ю. Давыдов. О.В. Посредник. *ФТТ*, **57**, 1654 (2015).
- [18] С.Ю. Давыдов, Г.И. Сабирова. *ФТТ*, **53**, 608 (2011).
- [19] С.Ю. Давыдов, Г.И. Сабирова. *Письма ЖТФ*, **37** (11), 51 (2011).

Редактор А.Н. Смирнов

Model of adsorption on amorphous graphene

S.Yu. Davydov

Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia
St. Petersburg National Research University
of Information Technologies, Mechanics and Optics,
197101 St. Petersburg, Russia

Abstract Density of states model for the one-layer free-standing amorphous graphene included both central (near the Dirac point) and peripheral energy regions is proposed. This model is applied to the problem of adsorption together with the approximation permitted to calculate the band contribution n_b to the adatom's occupation number n_a in an analytical form. Numerical estimations of the graphene amorphization effect on the electronic states of the alkali and halogen adatoms are given.