

# 12 Наноструктуры AlN и GaN: аналитические оценки характеристик электронного спектра

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergei\_Davydov@mail.ru

Поступила в Редакцию 20 января 2020 г.

В окончательной редакции 20 января 2020 г.

Принята к публикации 21 января 2020 г.

Для бесконечных плоских листов, свободных и декорированных нанолент с зигзагообразными кромками и цепочек нитридов алюминия и галлия получены аналитические выражения для ширины запрещенных зон, характерных скоростей и эффективных масс носителей заряда. Полученные значения сравниваются с вычисленными в рамках тех же моделей характеристиками для наноструктур карбида кремния и углерода. Кратко обсуждается также роль подложки.

**Ключевые слова:** двумерный лист, нанолента, линейная цепочка, ширина запрещенной зоны, характерная скорость и эффективная масса электрона.

DOI: 10.21883/FTT.2020.06.49357.007

## 1. Введение

Открытие уникальных свойств графена [1] породило поиск других двумерных (2D) материалов [2–7], обладающих, в отличие от графена, щелью в электронном спектре, или запрещенной зоной. Среди таких материалов заметное место занимают графеноподобные соединения (GLC), являющиеся 2D-аналогами классических 3D-полупроводников  $A_N B_{8-N}$  [3,8–14]. Модельное описание таких структур предложено в [15]. В настоящей работе, используя простые модели для различных наноструктур нитридов алюминия и галлия (листов, нанолент, цепочек), получим аналитические выражения для важнейших характеристик электронного спектра, таких как ширина запрещенной зоны, характерная скорость (аналог скорости Ферми в графене) и эффективная масса носителей. При этом будем следовать работе [16], где та же задача решалась для различных наноструктур карбида кремния, находящихся как в свободном состоянии, так и сформированных на твердотельной подложке.

## 2. Гексагональные наноструктуры AlN и GaN

### 2.1. Идеальные плоские листы

Как показано в [15], для идеального GLC, находящегося в свободном состоянии, закон дисперсии  $\pi$ -электронов в имеет вид

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \bar{\varepsilon} \pm R(\mathbf{k}), \quad R(\mathbf{k}) = \sqrt{\Delta^2 + (3atq/2)^2}. \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{q}$  — волновой вектор, отсчитываемый от точки  $\mathbf{K}$  зоны Бриллюэна,  $a$  — расстояние между ближайшими

соседями;  $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_A + \varepsilon_B)/2$ ,  $\Delta = |\varepsilon_A - \varepsilon_B|/2$ , где  $\varepsilon_{A(B)}$  — энергия  $p$ -орбитали атома A (B);  $E_+(\mathbf{k})$  — отвечает зоне проводимости,  $E_-(\mathbf{k})$  — валентной зоне;  $t$  — энергия перехода электрона между ближайшими соседями (б.с.). Ширина прямой запрещенной зоны в точке  $\mathbf{K}$  равна  $E_g = 2\Delta$ . Согласно таблице атомных термов Хермана–Скиллмана [17], энергии  $p$ -состояний атомов N, Al и Ga относительно вакуума равны соответственно  $\varepsilon_N = -11.47$  eV,  $\varepsilon_{Al} = -4.86$  eV и  $\varepsilon_{Ga} = -4.90$  eV, так что  $E_g(\text{AlN}) = 6.61$  eV и  $E_g(\text{GaN}) = 6.57$  eV. Численный расчет [11] дает для AlN и GaN соответственно  $E_g = 5.03$  и  $4.00$  eV. Запрещенная зона, однако, не прямая: потолок валентной зоны находится в точке  $\mathbf{K}$ , дно зоны проводимости — в точке  $\Gamma^1$ . Для дальнейших оценок мы примем вычисленные в [11] значения  $E_g$ , положив  $\Delta = 2.5$  и  $2.0$  eV для AlN и GaN соответственно. Так как, согласно [11], значения  $a = 1.80$  и  $1.88$  Å и, в соответствии с методом связывающих орбиталей Харрисона [18], матричный элемент  $\pi$ -взаимодействия  $p_z$ -орбиталей  $t = \eta_{pp\pi}(\hbar^2/m_0 a^2)$ , где  $\eta_{pp\pi} = 0.63$ ,  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка,  $m_0$  — масса свободного электрона, получим  $t = 1.48$  и  $1.36$  eV соответственно для AlN и GaN.

В свободном листе GLC эффективные массы электронов ( $e$ ) и дырок ( $h$ ), определяемые стандартным выражением  $m_{e,h}^{-1} = \pm \hbar^{-2}(\partial^2 R(q)/\partial q^2)_{q=0}$ , удобно пред-

<sup>1</sup> При этом щели в электронных спектрах AlN и GaN при  $\mathbf{k} = \mathbf{K}$  близки к полученным нами значениям (см. рис. 4 в [11]). Отметим, однако, что расчеты, выполненные в рамках различных вариантов DFT (density functional theory), дают большой разброс значений  $E_g$  (см. например, табл. III и IV в [14]). В частности, в [14] приводятся максимальные значения  $E_g$ , равные соответственно  $5.57$  и  $5.53$  eV для AlN и GaN, которые сравнительно близки к нашим элементарным оценкам (особенно к оценке для AlN).

ставить в виде

$$\frac{1}{m_e} = \frac{c^2}{\Delta}, \quad (2)$$

где  $c = 3at/2\hbar$  — параметр с размерностью скорости (аналог скорости Ферми в графене). Отсюда получаем значения  $m^* \equiv m_e/m_0 = -m_h/m_0$ , равные 1.19 (AlN) и 1.04 (GaN). По данным [11] имеем  $m_e/m_0 = 1.24$ ,  $m_h/m_0 = 2.33$  для AlN и  $m_e/m_0 = 0.69$ ,  $m_h/m_0 = 1.97$  для GaN, тогда как согласно расчету [19]  $m_e/m_0 = 0.52$ ,  $m_h/m_0 = 1.47$  для AlN и  $m_e/m_0 = 0.27$ ,  $m_h/m_0 = 1.16$  для GaN. Единственное, что объединяет результаты расчетов [11] и [19], это вывод о том, что значения  $m_h$  в разы больше значений  $m_e$ .

Перейдем теперь к слоям AlN и GaN, находящимся на подложке, и оценим, как при этом изменится эффективная масса носителей. Воспользовавшись результатами работ [20,21], в общем случае имеем  $m^*/\tilde{m}^* = F(\bar{\varepsilon})$ , где  $\tilde{m}^*$  — эффективная масса в эпитаксиальном слое,  $F(\omega) = (1 - d\Lambda(\omega)/d\omega)^{-1}$ ,  $\Lambda(\omega) = V^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\text{sub}}(\omega') d\omega' / (\omega - \omega')$  — сдвиг энергетических уровней GLC, вызванный взаимодействием  $V$  монослоя с подложкой,  $\rho_{\text{sub}}(\omega)$  — плотность состояний подложки,  $\omega$  — энергетическая переменная. Для простых моделей  $\rho_{\text{sub}}(\omega)$  в работах [16,20,21] показано, что для металлической подложки  $m^*/\tilde{m}^* \geq 1$ , а для диэлектрической и полупроводниковой подложек  $m^*/\tilde{m}^* < 1$ . Подчеркнем, что, в рамках предложенной в [20,21] простой модели, специфика эпитаксиальной наноструктуры проявляется только через параметр  $V$ . Поэтому в дальнейшем речь пойдет только о свободных (не связанных с подложкой) наноструктурах.

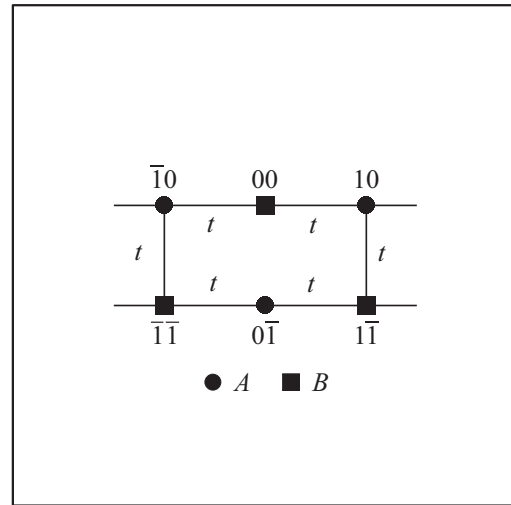
## 2.2. Наноленты

Для описания наноленты с зигзагообразными краями (ZNR — zigzag-type nanoribbon) воспользуемся двухцепочечной моделью, предложенной ранее для нанолент SiC в [16] и представленной на рис. 1. Здесь атомы типа 00 и 0–1, имеющие двух б.с., моделируют атомы зубцов зигзагообразной кромки, а остальные представленные на рисунке атомы, имеющие трех б.с., представляют собой внутренние атомы наноленты. Здесь атомы типа 00 и 0–1, имеющие двух б.с., моделируют атомы зубцов зигзагообразной кромки, а остальные представленные на рисунке атомы, имеющие трех б.с., представляют собой внутренние атомы зигзагообразной кромки. Как показано в [16], закон дисперсии для такой наноленты имеет вид

$$E_l(k) = \pm R'_\pm(k),$$

$$R'_\pm(k) = \left\{ 4\Delta^2 + t^2 [(1 + 4\Phi)^{1/2} \pm 1]^2 \right\}^{1/2} / 2, \quad (3)$$

где  $\Phi = 4 \cos^2(ka)$ ,  $k$  — волновой вектор для движения электрона вдоль наноленты,  $a$  — расстояние между б.с., индекс  $l$  нумерует зоны (здесь и ниже принимаем  $\bar{\varepsilon} = 0$ ). Условимся, что нумерация зон идет в сторону убывания



**Рис. 1.** Простейшая модель наноленты с зигзагообразными краями (ZNR) для соединения AB ( $t$  — энергия перехода электрона между атомами A и B). Атомы типа 00 и 0–1, имеющие двух б.с., моделируют атомы зубцов зигзагообразной кромки, атомы –10, –1–1, 10, 1–1, имеющие трех б.с., представляют собой внутренние атомы наноленты.

энергии:  $l = 1$  соответствует знакам плюс перед  $R'(k)$  и в квадратной скобке,  $l = 2$  — плюсу перед  $R'(k)$  и минусу в квадратной скобке,  $l = 3$  — минусам в обоих случаях,  $l = 4$  — минусу перед  $R'(k)$  и плюсу в квадратной скобке. Таким образом, при  $\bar{\varepsilon} = 0$  имеем  $E_1(k) = -E_4(k)$  и  $E_2(k) = -E_3(k)$ . Характерный вид зависимости  $E_l(k)$  представлен на рис. 2, а в [16].

По аналогии с выражением (2), электронную эффективную массу для зоны  $E_1(k)$  можно представить в виде  $m_1^{-1} = c_1^2/\Delta_1$ , где  $c_1 = 2\sqrt{2}at/\hbar$  и  $\Delta_1 = \sqrt{\Delta^2 + t^2}$ , откуда  $E_g = 2\Delta_1 = 5.82$  eV,  $m_1^* = 0.39$  и  $E_g = 4.84$  eV,  $m_1^* = 0.35$  для AlN и GaN. Для зоны  $E_2(k)$  вблизи границы одномерной зоны Бриллюэна ZNR, т.е. при малых  $q' = (\pi/2a) - k$ , получаем дисперсию  $R'_-(q') \approx \Delta + 8t^2(q'a)^4/\Delta$  (плоский участок зоны), которая не позволяет использовать стандартное определение эффективной массы (см. подробнее [16]).

Усложним теперь модель путем специфического декорирования зубцов ZNR собственными атомами, а именно: присоединим к атомам B типа 00 и атомам A типа 0–1 соответственно атомы A и B, полагая, что вновь образованные связи имеют ту же длину  $a$  и, следовательно, отвечают взаимодействию  $t$ . Такая декорированная нанолента (DZNR), строго говоря, уже не является ни ZNR, ни ANR (armchair-type nanoribbon), поскольку декорирующие атомы имеют только одного б.с. В результате, в данном случае невозможно представить дисперсию электронов в простом аналитическом виде типа (1) или (3). В данном случае имеется уже 6 зон  $E_l(k)$ , где  $l = 1, 2, 3$  нумерует зоны, отвечающие положительной энергии,  $l = 4, 5, 6$  — отрицательной, причем  $E_1(k) = -E_6(k)$ ,  $E_2(k) = -E_5(k)$

и  $E_3(k) = -E_4(k)$ , так что декорирование вызывает появление двух дополнительных ветвей спектра  $l = 3, 4$ . Дисперсия этих ветвей качественно отличаются от дисперсии остальных ветвей спектра:  $dE_3(k)/dk > 0$ , тогда как  $dE_{1,2}(k)/dk < 0$ . Расчеты [16] позволяют представить дисперсию зон  $E_3(k)$  и  $E_4(k)$  в интервале  $k \sim (0, \pi/4a)$  в виде  $E_3(k) = -E_4(k) \approx \Delta + \hbar^2 k^2 / 2m_0 m^*$ , где  $m^* \gg 1$ . Ширина запрещенной зоны  $E_g = 2E_3(0) = 2\Delta(1 + \vartheta)$ , где  $\vartheta \approx 0.03t/\Delta$ .

Вблизи границы зоны Бриллюэна, т.е. при  $k = \pi/2a$ , дисперсия зон  $E_l(k) > 0$  имеет вид

$$E_2(q') \approx \sqrt{\Delta^2 + t^2} \left( 1 + \frac{2(q'a)^2 t^2}{\Delta^2 + t^2} \right), \quad (4)$$

$$E_l(q') \approx \sqrt{\Delta^2 + t^2} \left( 1 \pm \frac{\sqrt{2} q' a t^2}{\Delta^2 + t^2} \right), \quad (5)$$

где в (5) знак плюс относится к  $l = 1$ , а знак минус — к  $l = 3$ . Зоне  $E_2$  отвечает электронная эффективная масса  $m_2^{-1} \approx c_2^2 / \sqrt{\Delta^2 + t^2}$ , где  $c_2 = 2at/\hbar$ , откуда получаем  $m_2^* = 0.78$  и  $0.70$  для AlN и GaN. Зоны  $E_1$  и  $E_3$ , с линейной дисперсией со скоростями  $c_{1,3} \approx \sqrt{2} at^2 / \hbar \sqrt{\Delta^2 + t^2}$ , откуда для AlN и GaN имеем соответственно  $c_{1,3} \approx 0.29 \cdot 10^6$  м/с и  $0.31 \cdot 10^6$  м/с. Отметим, что при  $k = \pi/2a$  имеем трехкратно вырожденные значения  $E_l = \pm \sqrt{\Delta^2 + t^2}$ , где знак плюс соответствует зонам 1, 2, 3, знак минус — зонам 4, 5, 6. Таким образом, энергетические щели на границе зоны Бриллюэна для AlN и GaN равны 5.82 и 4.84 eV, т.е. (при сделанных выше приближениях (4) и (5)) равны значениям для ZNR.

### 2.3. Линейные цепочки

Так как закон дисперсии двухатомной линейной цепочки (LC) имеет вид

$$E(k) = \pm \sqrt{\Delta^2 + t^2 \Phi}, \quad (6)$$

то  $E_g = 2\Delta$  и электронная эффективная масса дается выражением  $m^{-1} = c^2/\Delta$ , где  $c = 2at/\hbar$ , откуда  $m^* = 0.67$  и  $0.58$  для AlN и GaN, где мы использовали те же значения параметров  $a$  и  $t$ , что и выше.

Как показано в [16], для декорированной линейной цепочки (DLC), изображенной на рис. 2, закон дисперсии в области положительных энергий имеет вид

$$E_{\pm}(k) = \sqrt{\Delta^2 + \frac{1}{2} t^2 (2 + \Phi \pm \sqrt{\Phi(2 + \Phi)})}. \quad (7)$$

Типичные графики зависимости (7) представлены на рис. 2, b работы [16].

Ширина запрещенной зоны при  $k = 0$  (т.е. в центре зоны Бриллюэна) равна  $E_g = 2\sqrt{\Delta^2 + t^2(3 - \sqrt{6})}$ , так что получаем  $E_g = 5.46$  и  $4.48$  для AlN и GaN соответственно. При этом  $m^* \gg 1$ .

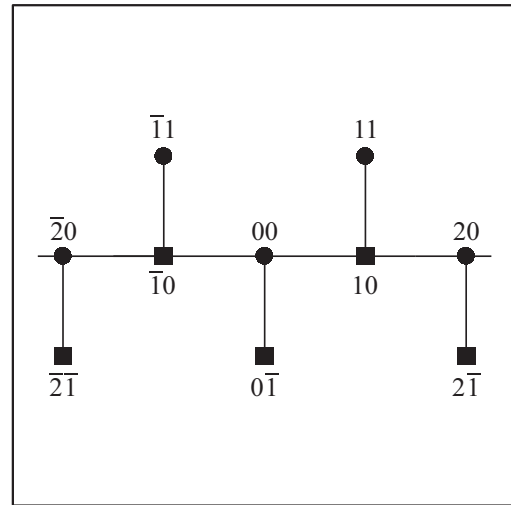


Рис. 2. Декорированная линейная цепочка (DLC) для соединения АВ.

Вблизи границы зоны Бриллюэна для положительных (по энергии) ветвей спектра имеем

$$E_{\pm}(q') \approx (\Delta^2 + t^2)^{1/2} \left( 1 \pm \frac{q' a t^2}{\Delta^2 + t^2} \right), \quad (8)$$

т.е. спектр со щелью и линейной дисперсией, характеризуемой скоростью  $c_+ \approx at^2/\hbar\sqrt{\Delta^2 + t^2}$ , равной  $0.21 \cdot 10^6$  м/с для AlN и  $0.22 \cdot 10^6$  м/с для GaN. Для центра зоны Бриллюэна из (8) получаем  $m_-^{-1} = c_-^2/\Delta_-$ , где  $c_- \approx at\sqrt{(3\sqrt{2}/4) - 1}/\hbar$  и  $\Delta_- \approx \sqrt{\Delta^2 + t^2}$ , так что  $m_-^* \gg 1$ . Таким образом для DLC, как и в случае DZNR, получаем anomalously высокие (поляронные) значения эффективных масс электронов.

### 3. Заключение

Полученные в предыдущем разделе аналитические результаты сведены в табл. 1. В табл. 2 представлены соответствующие численные оценки для AlN и GaN. Туда же, для сравнения, включены оценки для наноструктур карбида кремния [16] и углерода (формулы для вычисления последних взяты из работ [21–23] и приведены в Приложении). Подчеркнем, что все результаты получены в рамках цепочечных моделей, в основу которых положена решетка типа кирпичной стенки (brick-type lattice), топологически эквивалентная гексагональной решетке [24,25].

Из табл. 1 следует, в частности, что эффективные массы для границ зон Бриллюэна ZNR и LC даются одной и той же формулой, но значения  $at$  для них различны. Аналогичной формулой, но с другим численным коэффициентом описывается и эффективная масса бесконечного листа. Также с точностью до численного множителя совпадают эффективные массы для DZNR

**Таблица 1.** Формулы для расчета ширины запрещенной зоны  $E_g$ , эффективной массы  $m^* = m_e/m_0$  и характерной скорости электрона на границе (BZB) и в центре (BZC) зоны Бриллюэна для различных наноструктур (NS) графеноподобных соединений (GLC). (Аббревиатуры: ZNR — нанолента с зигзагообразными краями, DZNR — декорированная ZNR, LC — линейная цепочка, DLC — декорированная LC)

NS↓	GLC
Sheet	$E_g = 2\Delta, m^* = 2\hbar^2 E_g / 9m_0(at)^2$ (BZB)
ZNR	$E_g = 2\sqrt{\Delta^2 + t^2}, m^* = \hbar^2 E_g / 8m_0(at)^2$ (BZB)
DZNR	$E_g \approx 2\Delta(1 + 0.03t/\Delta), m^* \gg 1$ (BZC) $E'_g = 2\sqrt{\Delta^2 + t^2}, m^* = \hbar^2 E'_g / 8m_0(at)^2,$ $c = 2\sqrt{2}at^2 / \hbar E'_g$ (BZB)
LC	$E_g = 2\Delta, m^* = \hbar^2 E_g / 8m_0(at)^2$ (BZB)
DLC	$E_g = 2\sqrt{\Delta^2 + t^2(3 - \sqrt{6})}, m^* \gg 1$ (BZC) $E'_g \approx 2\sqrt{\Delta^2 + t^2}, m^* \approx \hbar^2 E'_g / 2((3\sqrt{24}) - 1)(at)^2,$ $c = 2at^2 / \hbar E'_g$ (BZB)

Примечание.  $E'_g (> E_g)$  — энергетическая щель на границе зоны Бриллюэна.

**Таблица 2.** Запрещенные зоны  $E_g$  (в eV) на границе (BZB) и в центре (BZC) зоны Бриллюэна, эффективные массы  $m^*$  и характерные скорости  $c$  (в ед.  $10^6$  m/s) для наноструктур карбида кремния, нитридов алюминия и галлия и углерода)

GLC↓	NS →	Sheet	ZNR	DZNR	LC	DLC
SiC	$E_g$ , BZB	3.06	3.06		3.096	3.81
	BZC			3.12		
	$m^*$ , BZB	0.71	0.28	0.56	0.40	
AlN	$E_g$ , BZB	5.00	5.82		5.00	5.46
	BZC			5.09		
	$m^*$ , BZB	1.19	0.39		0.67	
GaN	$E_g$ , BZB	4.00	4.84		4.00	4.48
	BZC			4.08		
	$m^*$ , BZB	1.04	0.35		0.58	
C	$E_g$ , BZB	0	0		0 ( $c$ ), 0.32 ( $p$ )	8.26
	$k_0 \approx 0.84/a$			3.17		
	$m^*$ , BZB		0.20		0.03 ( $p$ )	
	$k_0 \approx 0.84/a$			0.05		
	$c$ , BZB	0.78			0.57 ( $c$ )	

Примечание. 1) здесь, в отличие от [16], для листа SiC приведены значения  $E_g$  и  $m^*$  при  $\Delta = t = 1.53$  eV; 2) для цепочек графена аббревиатуры „с“ и „р“ означают кумулен и полиин, остальные обозначения те же, что и в табл. 1.

и DLC. Такое сходство объясняется использованием цепочечных моделей.

Как уже отмечалось выше, в теории Харрисона  $t = \eta_{pp\pi}(\hbar^2/m_0a^2)$ , где  $\eta_{pp\pi} = 0.63$  [18]. Тогда для GLC получаем  $m^* \propto E_g a^2$  и  $c \propto 1/E'_g a^3$ , где  $E'_g$  — энергетическая щель на границе зоны Бриллюэна в том случае, когда запрещенная зона  $E_g$  находится в центре зоны Бриллюэна и  $E_g < E'_g$  (см. табл. 1). Отметим, что для полупроводников теория Харрисона оперирует только значениями термов  $s$ - и  $p$ -состояний  $\varepsilon_{A(B)}$ , расстояниями между б.с.  $a$  и набором коэффициентов  $\eta_{ll'\sigma}$  и  $\eta_{ll'\pi}$  для  $\sigma$ - и  $\pi$ -взаимодействий ( $l = s, p$ ). В настоящей работе, однако, мы не использовали эти значения для определения  $E_g = |\varepsilon_A - \varepsilon_B|$ , так как при этом получаются завышенные значения ширины запрещенной зоны — обычная ситуация в теории сильной связи.

В заключение отметим, что полученные в настоящей работе аналитические результаты могут быть использованы для экспресс-оценок параметров электронного спектра других 2D-бинарных соединений.

## Приложение

В соответствии с теорией Харрисона [17,18] при  $a = 1.42$  Å получаем для  $\pi$ -связи  $p$ -орбиталей  $t = 2.38$  eV. Для бесконечного листа графена (Gr) скорость Ферми (характерная скорость) равна  $c = 3at/2\hbar$ .

Для углеродной ZNR в рамках той же двухцепочечной модели наноленты но при  $A = B$ , закон дисперсии имеет вид  $E(k) = 0$  и  $E(k) = \pm t(1 \pm \sqrt{1 + 4\Phi})/2$ , где энергия  $p$ -состояния атома углерода принята за нуль [22]. Таким образом, для низкоэнергетических ветвей на границе зоны Бриллюэна получаем  $E_g = 0$ . При  $q = \pi/2 - k \rightarrow 0$  для положительной низкоэнергетической ветви спектра получаем  $E(q) \approx t\Phi(q)$ , откуда  $m^* = \hbar^2/8m_0a^2t$ . В случае DZNR дело обстоит сложнее: низкоэнергетические ветви  $E(k)$  имеют экстремумы при  $k_0a \approx 0.84$ , так что в спектре появляется запрещенная зона  $E_g \approx 4t/3$  (см. [22], рис. 2,а для случая  $\varepsilon_a = 0, \tau = 1$ ). Полагая в области минимума  $E(k) \approx \hbar^2(k - k_0)^2/2m_0m^*a^2$ , получим численно  $m^* \approx 0.05$ .

В случае одномерной цепочки атомов углерода (карбина) нужно различать металлический карбин, или кумулен ( $c$ ), обладающий двойными связями ( $\dots = C=C=\dots$ ), и полупроводниковый карбин, или полиин с чередующимися одинарными и тройными связями ( $\dots \equiv D-C \equiv C-C \equiv \dots$ ) [21–23]. В отсутствие декорирования для кумулена имеем  $E_g = 0$  и  $c = at/\hbar$ , где  $a = 1.28$  Å,  $t = 2.92$  eV. Для полиина получаем  $E_g = 2\Delta t$  и  $m^* = \hbar^2 \bar{\tau}^2 / m_0 a^2 \Delta t$ , где  $\bar{\tau} = \Delta t / t$ ,  $\Delta t = t_1 - t_2$  и  $t_1 = 3.00$  eV и  $t_2 = 2.84$  eV — энергии перехода для одинарной и тройной связей [21].

Декорирование кумулена рассматривалось в работе [22]. Если кумулен декорируется углеродными атомами, то по-прежнему совмещая начало отсчета энергии с

положением  $p$ -уровня атома углерода, получим дисперсию вида  $E(k) = 0$  и  $E_{\pm}(k) = \pm t\sqrt{\Phi + 2}$ . Следовательно, ширина запрещенной зоны, расположенной на границе зоны Бриллюэна, равна  $E_g = 2t\sqrt{2}$ , а эффективная масса  $m^* = \hbar^2/2\sqrt{2}m_0a^2t$ .

Приведем здесь дополнительно результаты работы [23], где в рамках цепочечной модели рассматривались свободная и декорированная зигзагообразная кромки графена. В отсутствии декорирования  $E(k) = \pm(t/\sqrt{2})(1 + \Phi \pm \sqrt{1 + 2\Phi + \Phi^2})^{1/2}$ , так что  $E_g = 0$ . При  $k \rightarrow \pi/2a$  низкоэнергетические зоны  $E(k) = \pm(t/\sqrt{2})(1 + \Phi - \sqrt{1 + 2\Phi + \Phi^2})^{1/2}$  уплощаются и ввести понятие эффективной массы, как и в случае DZNR, нельзя.

В случае декорирования атомами углерода дисперсия электронов принимает вид

$$E(k) = \pm(1 + 2\cos^2(ka) \pm \cos(ka)\sqrt{1 + \cos^2(ka)})^{1/2},$$

так что на границе зоны Бриллюэна имеем  $E_g = 2t = 4.76 \text{ eV}$  и  $c = at/\hbar = 0.52 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ .

## Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] A.K. Geim, I.V. Grigorieva. *Nature* **499**, 419 (2013).
- [3] C.-J. Tong, H. Zhang, Y.-N. Zhang, H. Liu, L.-M. Liu. *J. Mater. Chem. A* **2**, 17971 (2014).
- [4] И.В. Антонова. *ФТП* **50**, 67 (2016).
- [5] S. Yang, C. Jiang, S. Wei. *Appl. Phys. Rev.* **4**, 021304 (2017).
- [6] X. Li, L. Tao, Z. Chen, H. Fang, X. Li, X. Wang, J.-B. Xu, H. Zhu. *Appl. Phys. Rev.* **4**, 021306 (2017).
- [7] S. Hastrup, M. Strange, M. Pandey, T. Deilmann, P.S. Schmidt, N.F. Hinsche, M.N. Gjerding, D. Torelli, P.M. Larsen, A.C. Riis-Jensen, J. Gath, K.W. Jacobsen, J.J. Mortensen, T. Olsen, K.S. Thygesen. *2D Mater.* **5**, 042002 (2018).
- [8] H. Şahin, S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Bekaroglu, E. Akturk, R.T. Senger, S. Ciraci. *Phys. Rev. B* **80**, 155453 (2009).
- [9] T. Suzuki, Y. Yokomizo. *Physica E* **42**, 2820 (2010).
- [10] S. Wang. *J. Phys. Soc. Jpn* **79**, 064602 (2010).
- [11] H.L. Zhuang, A.K. Singh, R.G. Hennig. *Phys. Rev. B* **87**, 165415 (2013).
- [12] A.K. Singh, H.L. Zhuang, R.G. Hennig. *Phys. Rev. B* **89**, 245431 (2014).
- [13] A. Onen, D. Kecik, E. Durgun, S. Ciraci. *Phys. Rev. B* **95**, 155435 (2017).
- [14] D. Kecik, A. Onen, M. Konuk, E. Gribüz, F. Ersan, S. Cahangirov, E. Aktürk, E. Durgun, S. Ciraci. *Appl. Phys. Rev.* **5**, 011105 (2018).
- [15] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **58**, 779 (2016).
- [16] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **54**, 446 (2012).
- [17] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел*. Мир, М. (1983) Т. 1.
- [18] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B* **27**, 3592 (1983).
- [19] G. Mukhopadhyay, H. Behera. *World J. Engineering* **10**, 39 (2013).
- [20] З.З. Алисултанов. *Письма в ЖТФ* **39**, 13, 32 (2013).
- [21] С.Ю. Давыдов. *Письма в ЖТФ* **45**, 13, 14 (2019).
- [22] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **61**, 610 (2019).
- [23] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **53**, 83 (2019).
- [24] J. Cserti. *Am. J. Phys.* **68**, 896 (2000).
- [25] G. Jose, R. Malla, V. Srinivasan, A. Sharma, S. Gangadharaiyah. arXiv: 1711.08204v1.

Редактор Т.Н. Василевская