

13,18

# Органическая макромолекула на графене со структурными дефектами: оценки перехода заряда и энергии адгезии

© С.Ю. Давыдов

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

E-mail: Sergei\_Davydov@mail.ru

Поступила в Редакцию 24 ноября 2022 г.

В окончательной редакции 24 ноября 2022 г.

Принята к публикации 8 декабря 2022 г.

Предложенная ранее модель оборванных связей органической макромолекулы (ММ), адсорбированной на идеальном однослойном графене (SLG), обобщена на наличие в SLG структурных дефектов: включений двухслойного или аморфного графена. Получены аналитические оценки перехода заряда между ММ и подложкой и энергии адгезии.

**Ключевые слова:** макромолекула с оборванными связями, одно- и двухслойный графен, аморфный графен.

DOI: 10.21883/FTT.2023.03.54750.534

## 1. Введение

Выявленная в работе [1] уникальная способность детектировать адсорбцию одиночной молекулы сделала графен одним из самых привлекательных материалов для резистивных газовых сенсоров [2–5], а затем и для биосенсоров [6–10]. Характерные объекты исследования в последнем случае — макромолекулы (ММ), — представляют собой системы (бляшки — plaques) с большим количеством атомов и линейными размерами порядка сотни Å. Причем ни геометрия такой бляшки, ни площадь ее контакта с подложкой не только неизвестны, но и не являются строго фиксированными. Ясно, что прямое применение методов DFT (density functional theory) в данном случае неприемлемо. Поэтому в работе [11] для описания энергии взаимодействия (адгезии) ММ с однолистным графеном (SLG) была предложена модель оборванных связей, которые как раз и считаются ответственными за сшивку (stitching) ММ с SLG (см. рис. 1 в [11]). Благодаря упрощенной схеме рассмотрения задачи, удалось получить аналитические выражения для перехода заряда между ММ и SLG и энергии адгезии. В настоящей работе используется та же модель ММ, но графеновая подложка считается неидеальной. Рассматриваются две причины отклонения от идеального SLG. Это, во-первых, наличие включений двухслойного графена (BLG — bilayer graphene), когда долю  $(1 - x)$  площади подложки представляет собой SLG, а долю  $x$  — BLG. Такую структуру будем в дальнейшем обозначать как  $S_{1-x}B_x$ . Во-вторых, это аморфные включения в упорядоченный монослой графена.

## 2. Макромолекула на подложке $S_{1-x}B_x$

Рассмотрим подложку, состоящую из SLG и BLG, или структуру  $S_{1-x}B_x$ . Отметим, что такая ситуация действи-

тельно имеет место в реальных приборных структурах (см., например, [6]). Обобщая результаты работы [11], где для описания взаимодействия ММ с SLG была введена модель оборванных связей, учтем, что теперь оборванные связи ММ взаимодействуют не только с SLG, но и с BLG. Поэтому вместо гамильтониана (1) для системы ММ/SLG из [11], запишем гамильтониан для системы ММ/ $S_{1-x}B_x$  в виде

$$H = \sum_{\mathbf{k}, J} \varepsilon_J(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \sum_i \varepsilon_i a_i^{\dagger} a_i + \sum_{i, \mathbf{k}, J} \frac{V_{iJ}^2 (c_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_i + a_i^{\dagger} c_{\mathbf{k}})}{\omega - \varepsilon_J(\mathbf{k}) + i0^+}, \quad (1)$$

где  $\omega$  — энергетическая переменная,  $\varepsilon_i$  — энергия  $i$ -ой оборванной (свободной) связи ММ,  $\varepsilon_J(\mathbf{k})$  — закон дисперсии электронов в  $J = \text{SLG}$  или  $J = \text{BLG}$ ,  $V_{iJ}$  — энергия взаимодействия  $i$ -ой связи с электронным спектром SLG или BLG,  $c_{\mathbf{k}}^{\dagger} (c_{\mathbf{k}})$  — оператор рождения (уничтожения) электрона SLG или BLG в состоянии  $|\mathbf{k}\rangle$ ,  $a_i^{\dagger} (a_i)$  — аналогичные операторы для  $i$ -ой оборванной связи ММ. Легко показать, что вследствие адсорбции на SLG или BLG плотность состояний (DOS) электрона на  $i$ -ой связи (на одну проекцию спина) равна

$$\rho_{iJ} = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{iJ}(\omega)}{(\omega - \varepsilon_i - \Lambda_{iJ}(\omega))^2 + \Gamma_{iJ}^2(\omega)}, \quad (2)$$

где функции уширения и сдвига квазиуровня  $\varepsilon_i$  равны соответственно

$$\Gamma_{iJ}(\omega) = \pi V_{iJ}^2 \rho_J(\omega), \quad \Lambda_{iJ}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma_{iJ}(\omega') d\omega'}{\omega - \omega'}. \quad (3)$$

Для подложки  $S_{1-x}B_x$  представим DOS электронов  $\rho_{sub}(\omega, x)$  в виде

$$\rho_{sub}(\omega, x) = (1 - x)\rho_{\text{SLG}} + x\rho_{\text{BLG}}(\omega). \quad (4)$$

Выражение для DOS  $\rho_{\text{SLG}}$  SLG в низкоэнергетическом приближении, когда  $\varepsilon_{\text{SLG}}(\mathbf{k}) \approx \pm(3t/2)|\mathbf{k}|a$ , где  $a$  — расстояние между ближайшими соседями (б.с.) в графене,  $t$  — энергия перескока (hopping energy) электрона между б.с., хорошо известно [12] и имеет вид

$$\rho_{\text{SLG}}(\omega) = |\omega|/\xi^2, \quad |\omega| < \xi, \quad (5)$$

где  $\xi = \sqrt{\pi\sqrt{3}/4t} \sim t$  — энергия обрезания. Для BLG с АВ-упаковкой в том же низкоэнергетическом приближении для ближайших к точке Дирака  $l$ -зон (где  $l$  означает lower) имеем

$$\varepsilon_{\text{BLG}}^l(\mathbf{k}) \approx \pm\varepsilon_{\text{SLG}}^2(\mathbf{k})/t_{\perp},$$

где  $t_{\perp} \sim 0.4$  eV — энергия перескока электрона между плоскостями BLG [12,13]. Воспользовавшись результатом [14], можем представить  $\rho_{\text{BLG}}^l(\omega)$  как

$$\rho_{\text{BLG}}^l(\omega) = t_{\perp}/2\xi^2, \quad |\omega| < \xi, \quad (6)$$

где мы использовали те же энергии точки Дирака  $\varepsilon_D = -$  и обрезания  $\xi$ , что и в случае SLG. Для  $u$ -зон (где  $u$  означает upper)

$$\varepsilon_{\text{BLG}}^u(\mathbf{k}) \approx \pm\sqrt{t_{\perp}^2 + \varepsilon_{\text{SLG}}^2}. \quad (7)$$

Тогда по аналогии с [11] для соответствующей DOS можно записать

$$\rho_{\text{BLG}}^u(\omega) = \begin{cases} |\omega|/\xi^2, & t_{\perp} \leq |\omega| < \xi, \\ 0, & |\omega| < t_{\perp}. \end{cases} \quad (8)$$

DOS на  $i$ -ой связи (на одну проекцию спина) равна

$$\rho_i(\omega, x) = (1-x)\rho_{\text{SLG}}(\omega) + x\rho_{\text{BLG}}(\omega), \quad (9)$$

где

$$\rho_{\text{BLG}}(\omega) = \rho_{\text{BLG}}^l(\omega)\Theta(\xi - |\omega|) + \rho_{\text{BLG}}^u(\omega)\Theta(|\omega| - t_{\perp})\Theta(\xi - |\omega|),$$

где  $\Theta(\dots)$  — функция Хевисайда, и

$$\rho_{ij}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{ij}(\omega)}{(\omega - \varepsilon_i - \Lambda_{ij}(\omega))^2 + \Gamma_{ij}^2(\omega)}. \quad (10)$$

Согласно [11],

$$\Gamma_{\text{ISLG}}(\omega) = \pi V_{\text{ISLG}}^2 \rho_{\text{ISLG}}(\omega),$$

$$\Lambda_{\text{ISLG}}(\omega) = (\omega V_{\text{ISLG}}^2 / \xi^2) \ln |\omega^2 / (\xi^2 - \omega^2)|. \quad (11)$$

Воспользовавшись выражениями (6), (7) и (3), для  $|\omega| < \xi$  получим

$$\Gamma_{\text{IBLG}}^l = \pi (V_{\text{IBLG}}^l)^2 \rho_{\text{IBLG}}^l = \text{const},$$

$$\Lambda_{\text{IBLG}}^l(\omega) = (\Gamma_{\text{IBLG}}^l / \pi) \ln \left| \frac{\xi - \omega}{\xi + \omega} \right|, \quad (12)$$

$$\Gamma_{\text{IBLG}}^u(\omega) = \pi (V_{\text{IBLG}}^u)^2 \rho_{\text{IBLG}}^u(\omega),$$

$$\Lambda_{\text{IBLG}}^u(\omega) = \frac{(V_{\text{IBLG}}^u)^2 \omega}{\xi^2} \ln \left| \frac{t_{\perp}^2 - \omega^2}{\xi^2 + t_{\perp}^2 - \omega^2} \right|. \quad (13)$$

Прибегая к упрощению, описанному в [11], и заменяя DOS (10) на

$$\rho_{ij}(\omega) \approx \frac{1}{\pi} \frac{\bar{\Gamma}_{ij}}{(\omega - \bar{\varepsilon}_{ij})^2 + \bar{\Gamma}_{ij}^2}, \quad (14)$$

где  $\bar{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon_i + \Lambda_{ij}(\varepsilon_i)$  и  $\bar{\Gamma}_{ij} = \pi V_{ij}^2 \rho_j(\varepsilon_i)$ , для заряда  $i$ -ой связи  $Z_i(x)$  получим

$$Z_i(x) = (1-x)Z_{\text{IBLG}} + xZ_{\text{ISLG}}. \quad (15)$$

Для недопированного графена, когда уровень Ферми  $\varepsilon_F = \varepsilon_D = 0$ , заряд  $Z_{ij} \approx (2/\pi) \arctan(\bar{\varepsilon}_{ij}/\bar{\Gamma}_{ij})$ . Отметим, что более строгое рассмотрение задачи об адсорбции одиночного атома на BLG представлено в [15].

Суммарный заряд, переходящий с ММ на подложку, равен  $Z(x) = -\sum_i Z_i(x)$ , так что в изначально недопированной неоднородной пленке возникают носители тока с концентрацией  $n(x) = |Z(x)|/S$ . При  $Z(x) < 0$  носителями тока являются электроны, при  $Z(x) > 0$  — дырки. Таким образом, проводимость SLG становится равной  $\sigma(x) = en(x)\mu_{\text{int}}(x)$ , где  $\mu_{\text{int}}(x)$  — интегральная подвижность носителей в структуре  $S_{1-x}\text{B}_x$ .

Так же как и в случае SLG, энергия адгезии  $E_{\text{ads}}$  на BSL может быть представлена в виде суммы ионной  $E_{\text{adh}}^{\text{ion}}$  и металлической  $E_{\text{adh}}^{\text{met}}$  составляющих, определяемых формулами (10)–(15) работы [11]. Для подложки, образованной SLG и BLG, можно записать

$$E_{\text{adh}}^{\text{ion}(\text{met})}(x) = \sum_i E_i^{\text{ion}(\text{met})}(x) N_i,$$

$$E_i^{\text{ion}(\text{met})}(x) = (1-x)E_{\text{ISLG}}^{\text{ion}(\text{met})} + xE_{\text{IBLG}}^{\text{ion}(\text{met})}, \quad (16)$$

где  $N_i = m_i/S$  — концентрация оборванных  $i$ -связей числом  $m_i$ , приходящихся на элементарную ячейку графена с площадью  $S = 3\sqrt{3}a^2/2$  ( $a = 1.42$  Å — расстояние между ближайшими соседями в графене).

Переходя к численным оценкам, используем те же значения  $\varepsilon_i$ ,  $d_i = d = 2.5$  Å,  $V_{\text{IBSL}}^{l,u} = V_{\text{ISLG}} = 2.7$  eV,  $\varepsilon_{st} = 3$ ,  $\xi = 3$  eV, что и в [11]. Результаты расчета зарядов и составляющих энергии адгезии сведены в таблицу. Главное, что следует отметить, сопоставляя характеристики BLG и SLG, это близость значений этих характеристик для всех рассмотренных фрагментов ММ кроме отношения  $z = Z_{\text{IBLG}}/Z_{\text{ISLG}}$  для NO и NH. Дело в том, что для NO и NH  $\varepsilon_i^2 \sim t_{\perp}^2$ , тогда как для других фрагментов ММ  $\varepsilon_i^2 \gg t_{\perp}^2$ . В этом случае  $\rho_{\text{ISLG}}(\omega) \sim \rho_{\text{IBLG}}^u(\omega)$ , а вкладом  $\rho_{\text{IBLG}}^l(\omega)$  можно пренебречь, так что  $\Gamma_{\text{ISLG}}(\omega) \sim \Gamma_{\text{IBLG}}(\omega)$  и  $\Lambda_{\text{ISLG}}(\omega) \sim \Lambda_{\text{IBLG}}(\omega)$ . Переписывая выражение (15) в виде

$$Z_i(x) = Z_{\text{ISLG}}[1 + x(z - 1)], \quad (17)$$

Характеристики BLG с АВ-упаковкой: энергии оборванных связей  $\epsilon_i$ , значения зарядов  $Z_i$ , энергий адсорбции  $E_{iBLG}^{ion}$ ,  $E_{i1BLG}^{met}$ ,  $E_{i2BLG}^{met}$ ,  $E_{iBLG}^{ads}$  (все энергетические величины приведены в eV) и отношения  $z = Z_{iBLG}/Z_{iSLG}$ ,  $e_{met} = E_{iBLG}^{met}/E_{iSLG}^{met}$  и  $e_{ads} = E_{iBLG}^{ads}/E_{iSLG}^{ads}$

Фрагмент ММ →	O <sub>2</sub>	NO	NH	CH <sub>2</sub>	NH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>
$\epsilon_i$	-1.78	-0.47	-0.32	-1.02	-0.96	-0.96
$Z_{iBLG}$	-0.125	0.45	-0.33	0.16	0.19	0.19
$E_{iBLG}^{ion}$	0.015	0.19	0.10	0.02	0.04	0.04
$E_{i1BLG}^{met}$	0.30	1.10	0.80	0.39	0.46	0.46
$E_{i2BLG}^{met}$	1.60	1.01	1.23	1.54	1.48	1.48
$E_{iBLG}^{ads}$	1.92	2.30	2.13	1.95	1.98	1.98
$z$	1.04	0.67	-0.62	0.80	0.83	0.83
$e_{met}$	1.00	0.94	1.015	0.99	0.99	0.99
$e_{ads}$	1.015	0.86	0.94	0.98	0.98	0.98

и учитывая, что типичное значение  $x \sim 0.1$  [6], с хорошей точностью получаем  $Z_i(x) \approx Z_{iSLG}$ . Тогда наведенная адсорбцией ММ проводимость изначально недопированного графена равна  $\sigma(x) \approx en_{SLG}\mu_{int}(x)$ . Отметим высокую подвижность носителей в BLG: так, например, в [13] приводится значение  $\mu_{BLG} = 40000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ . Если  $\mu_{SLG} \approx \mu_{BLG}$ , то минимального значения  $\mu_{int}(x)$ , возникающего в структуре  $S_{1-x}B_x$  из-за появления дополнительного рассеяния на границах областей SLG и BLG, следует ожидать при промежуточных концентрациях  $x$ . С другой стороны, имеем  $x|e_{ads} - 1| \ll 1$  (см. таблицу), так что включения BLG слабо влияют на энергию адгезии.

Рассмотрим теперь включение BLG с АА-упаковкой [16], для которого в низкоэнергетическом приближении закон дисперсии и DOS равны соответственно

$$\epsilon'_{BLG}(\mathbf{k}) = \pm [|\epsilon_{SLG}|/\sqrt{3} \pm t_{\perp}],$$

$$\rho'_{BLG}(\omega) = [|\omega - t_{\perp}| + |\omega + t_{\perp}|]/(\xi')^2. \quad (18)$$

Здесь  $\xi' = \sqrt{\pi/4\sqrt{3}t}$ , где учтено, что скорость Ферми  $v'_{FBLG} = v_{FSLG}/\sqrt{3}$  (штрих у символа отвечает АА-упаковке). В интервале энергий  $(-t_{\perp}, t_{\perp})$  DOS  $\rho'_{BLG}(\omega) = 2t_{\perp}/(\xi')^2$  представляет собой аналог  $\rho'_{BLG}(\omega) = t_{\perp}/2\xi^2$  для АВ-упаковки (6); при  $|\omega| \geq t_{\perp}$  получаем  $\rho'_{BLG}(\omega) = 2|\omega|/(\xi')^2$  — аналог DOS  $\rho''_{BLG}(\omega) = |\omega|/\xi^2$  (7). Учитывая эти соответствия, легко переписать выражения (12)–(16) для АА-упаковки. Предложенная здесь схема позволяет в качестве включений в SLG рассмотреть также трехслойный графен (TLG — trilayer graphene) [16,18,19], положив  $\rho(x, y) = (1 - x - y)\rho_{SLG} + x\rho_{BLG} + y\rho_{TLG}$ .

### 3. Макромолекула на SLG с аморфными включениями

Среди разнообразных отклонений графена от идеальной структуры [20], рассмотрим аморфный SLG, или

*a*-SLG, содержащий, как известно [21], пенто-, гексо- и гептогоны атомов углерода [21]. Отметим, что *a*-SLG, трактуемый здесь как дефектное включение, представляет непосредственный интерес для применений в качестве межфазного покрытия или затравки для процессов осаждения атомного слоя [21]. В дальнейшем будем использовать модель [22,23], согласно которой DOS  $\rho_{am}(\omega)$  для *a*-SLG в низкоэнергетическом приближении имеет вид

$$\rho_{am}(\omega) = \sqrt{\omega^2 + \Delta^2}/\xi^2, \quad |\omega| < \xi, \quad (19)$$

где энергия  $\Delta$  характеризует аморфизацию и точка Дирака принята за нуль энергии. Легко видеть, что DOS (19) при  $\Delta = 0$  переходит в (5). Зависимость (19) в области  $(-t, t)$  качественно совпадает с результатами численных расчетов (см., например, рис. 2 в [21], рис. 3 в [24], рис. 6 в [25]). Здесь для  $\rho_{am}(\omega)$  (как и для  $\rho_{SLG}(\omega)$ ), мы используем упрощенное по сравнению с работами [22,23] выражение, основания для которого представлены в пункте 2 Приложения в [11]. Подчеркнем, что DOS (19) отражает главную особенность *a*-SLG — увеличение плотности состояний в окрестности точки Дирака. Интересно отметить, что сходный с (19) вид имеет DOS графена, разупорядоченного вследствие высокой концентрации вакансий [26–28].

Воспользовавшись (19), получим функции уширения  $\Gamma_{am}(\omega) = \pi V_{am}^2 \rho_{am}(\omega)$  и сдвига

$$\Lambda_{iam}(\omega) = \frac{V_{iam}^2}{\xi^2} \left[ \sqrt{\omega^2 + \Delta^2} \left( \text{Arsh} \frac{\omega\xi + \Delta^2}{\Delta|\xi - \omega|} + \text{Arsh} \frac{\omega\xi - \Delta^2}{\Delta|\xi + \omega|} \right) - 2\omega \text{Arsh} \frac{\xi}{\Delta} \right], \quad (20)$$

где  $V_{iam}$  — матричный элемент взаимодействия *i*-ой связи ММ с *a*-SLG. При  $\Delta = 0$  функция  $\Lambda_{iam}(\omega)$  переходит в функцию сдвига для SLG (см. формулу (5) в [11]). Используя те же упрощения, что и выше, для заряда на

$i$ -ой связи получим

$$Z_{iam} \approx \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\bar{\varepsilon}_{iam} - \varepsilon_F}{\Gamma_{iam}(\varepsilon_i)}, \quad (21)$$

где  $\bar{\varepsilon}_{iam} = \varepsilon_i + \Lambda_{am}(\varepsilon_i)$ . Для дальнейших оценок полагаем  $V_{iam} = V_{SLG} = V$ ,  $\varepsilon_F = 0$  и используем те же значения остальных параметров, что и выше. Введем в качестве безразмерной характеристики степени аморфности параметр  $\delta = \Delta/\xi$  и относительные единицы  $e_i = \varepsilon_i/\xi$ ,  $v = V/\xi$  и рассмотрим частные случаи.

При  $|e_i| \ll \delta^2 \ll 1$  получаем  $\lambda_{am}(e_i) \equiv \Lambda_{iam}(\varepsilon_i)/\xi \approx -2e_i v^2 \ln(2/\delta)$  [22] и  $\gamma_{am}(e_i) \equiv \Gamma_{am}(\varepsilon_i)/\xi = \pi v^2 \delta \times (1 + e_i^2/2\delta^2)$ . Тогда в первом порядке по  $e_i$  заряд на  $i$ -ой связи ММ равен

$$Z_{iam} \approx \frac{2}{\pi} \arctan \frac{e_i[1 - v^2 \ln(2/\delta)]}{\pi v^2 \delta}. \quad (22)$$

В режиме слабой связи ММ с  $a$ -SLG, когда  $v \ll 1$  и  $L(\delta) \equiv 1 - v^2 \ln(2/\delta) > 0$ , увеличение  $\delta$  ведет к уменьшению  $|Z_{iam}|$  и при  $\delta_0 = 2 \exp(-1/v^2)$  получаем  $Z_{am} = 0$ . В режиме сильной связи, когда  $v \gg 1$  и  $L(\delta) < 0$ , знак заряда изменяется, но опять: рост  $\delta$  понижает  $|Z_{iam}|$ . В случае, когда  $e_i \rightarrow \pm 1$ , оставаясь в интервале  $(-1, 1)$ , имеем  $\lambda_{am}(e_i) \rightarrow \pm v^2 \sqrt{1 + \delta^2} \ln[2/\delta(1 \pm e_i)]$  [11], так что

$$Z_{iam} \approx \pm \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\ln[2/\delta(1 \pm e_i)]}{\pi}. \quad (23)$$

Отсюда следует, что увеличение степени аморфности  $a$ -SLG ведет к уменьшению величины заряда на ММ. Так как ионная составляющая энергии адсорбции  $E_i^{ion} \propto Z_i^2$  и металлическая составляющая  $E_i^{met} \propto |Z_i|$  [11], то для рассмотренных случаев энергия адгезии убывает с ростом степени аморфности  $a$ -SLG. Следует отметить, что зависимость  $Z_{iam}(\delta)$  немонотонна, так как функция  $\Lambda_{iam}(\omega)$  в интервале  $(-\xi, \xi)$  имеет положительный и отрицательный экстремумы соответственно в интервалах  $-\xi < \omega^* < 0$  и  $0 < \omega^* < \xi$  (см. рис. 1 в [11,12]).

Как и в [11], мы считаем, что заряд, перешедший с ММ на подложку, равен  $Z_{am} = -\sum_i Z_i$ , так что проводимость  $a$ -SLG есть  $\sigma_{am} = en_{am}\mu_{am}$ , где  $n_{SLG} = |Z_{am}|/S$  ( $S$  — площадь элементарной ячейки графена) и  $\mu_{am}$  — концентрация и подвижность носителей заряда соответственно. В настоящее время известно [21], что  $\mu_{am} \sim 1-10 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  (на воздухе при комнатной температуре) и длиной андерсоновской локализации [29] порядка  $\ell \sim 10 \text{ nm}$ , т.е.  $a$ -SLG является изолятором. Таким образом, результирующая проводимость SLG с включениями  $a$ -SLG приближенно равна  $\sigma(x) \approx en_{SLG}\mu_{SLG}(1-x)$ . Отметим, что свободный (free-standing)  $a$ -SLG был получен в 2020 году [30].

Для оценок энергии адгезии ММ на  $a$ -SLG можно использовать формулы (11)–(13) работы [11]. Вообще говоря, в (12) и (13) следует заменить множитель  $r_{ai}^2$  на  $(r_{ai}^{-2} - \ell^{-2})$ . Так как, однако,  $r_{ai}^{-2} \gg \ell^{-2}$ , можно по-прежнему пользоваться результатами [11].

## 4. Заключение

В настоящей работе в рамках модели оборванных связей  $\varepsilon_i$  мы предложили схему учета дефектных включений в SLG. Эта схема позволила оценить переход заряда  $Z = -\sum_i Z_i$  между ММ и подложкой и энергию адгезии, определяемую величинами  $Z_i$  и делокализацией электронов изначально оборванных  $i$ -связей. К сожалению, соответствующая экспериментальная информация, насколько нам известно, отсутствует. Более того, подчеркнем, что экспериментальные данные даже для состоящих из нескольких атомов молекул газа, адсорбированных на реальных углеродных структурах, во многом противоречивы (см. обсуждение этой ситуации в [31]). Еще больше вопросов вызывает описание подвижности носителей на подложках с дефектными включениями. Разработка соответствующих теоретических схем только начинается [32,33]. Таким образом, для создания достаточно простой (рабочей) модели биосенсора на графене требуются дополнительные экспериментальные и теоретические исследования.

## Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 22-12-00134.

## Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] F. Schedin, A.K. Geim, S.V. Morozov, E.W. Hill, P. Blake, M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov. Nature Mater. **6**, 652 (2007).
- [2] D.J. Buckley, N.C.G. Black, E.G. Castanon, C. Melios, M. Hardman, O. Kazakova. 2D Mater. **7**, 032002 (2020).
- [3] S.Z.N. Demon, A.I. Kamisan, N. Abdullah, S.A.M. Noor, O.K. Khim, N.A.M. Kasim, M.Z.A. Yahya, N.A.A. Manaf, A.F.M. Azmi, N.A. Halim. Sens. Mater. **32**, 759 (2020).
- [4] U. Yaqoob, M.I. Younis. Sensors **21**, 2877 (2021).
- [5] S. Dhall, B.R. Mehta, A.K. Tyagi, K. Sood. Sensors Int. **2**, 100116 (2021).
- [6] A.A. Lebedev, S.Yu. Davydov, I.A. Eliseyev, A.D. Roenkov, O. Avdeev, S.P. Lebedev, Y. Makarov, M. Puzyk, S. Klotchenko, A.S. Usikov. Materials **14**, 590 (2021).
- [7] V. Naresh, N. Lee. Sensors **21**, 1109 (2021).
- [8] S. Shahriari, M. Sastry. S. Panjekar, RK Singh Raman. Nanotechnology, Sci. Appl. **14**, 197 (2021).
- [9] Laxmia, B. Mahapatrab, R.V. Krishnac, P.K. Patel. AIP Conf. Proc. **2327**, 020011 (2021).
- [10] S. Wang, X. Qi, D. Hao, R. Moro, Y. Ma, L. Ma. J. Electrochem. Soc. **169**, 027509 (2022).
- [11] С.Ю. Давыдов. ФТТ **64**, 2050 (2022).
- [12] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- [13] E. McCann, M. Koshino. Rep. Prog. Phys. **76**, 056503 (2013).
- [14] M.I. Katsnelson. Graphene: carbon in two dimensions. Cambridge Univ. Press, N.Y. (2012). Ch. 1.

- [15] З.З. Алисултанов. ФТП **47**, 954 (2013).
- [16] C.J. Tabert, E.J. Nicol. Phys. Rev. B **86**, 075439 (2012).
- [17] Ajay Kumar. Eur. Phys. J. B **86**, 111 (2013).
- [18] C.H. Lui, Z. Li, K.F. Mak, E. Cappelluti, T.F. Heinz. Nature Phys. **7**, 943 (2011).
- [19] S. Uddin, K.S. Chan. J. Appl. Phys. **116**, 203704 (2014).
- [20] G. Yang, L. Li, W.B. Lee, M.C. Ng. Sci. Technol. Adv. Mater. **19**, 613 (2018).
- [21] A. Antidormi, L. Colombo, S. Roche. Nano Mater. Sci. **4**, 10 (2022).
- [22] С.Ю. Давыдов. ФТТ **57**, 1018 (2015).
- [23] С.Ю. Давыдов. ФТП **50**, 382 (2016).
- [24] V. Kapko, D.A. Drabold, M.F. Thorpe. Phys. Status Solidi B **247**, 1197 (2010).
- [25] E. Holmström, J. Fransson, O. Eriksson, R. Lizarraga, B. Sanya, S. Bhandary, M.I. Katsnelson. Phys. Rev. B **84**, 205414 (2011).
- [26] N.M.R. Peres, F. Guinea, A.H. Castro Neto. Phys. Rev. B **73**, 125411 (2006).
- [27] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов, А.К. Нухов. Письма в ЖТФ **39**, 3, 63 (2013).
- [28] З.З. Алисултанов. ФТТ **55**, 1211 (2013).
- [29] Дж. Займан. Модели беспорядка. Мир, М. (1982). Гл. 9.
- [30] C.-T. Toh, H. Zhang, J. Lin, A.S. Mayorov, Y.-P. Wang, C.M. Orofeo, D.B. Ferry, H. Andersen, N. Kakenov, Z. Guo, I.H. Abidi, H. Sims, K. Suenaga, S.T. Pantelides, B. Özyilmaz. Nature **577**, 199 (2020).
- [31] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. ЖТФ **87**, 4, 635 (2017).
- [32] V.K. Sangwan, M.C. Hersam. Annu. Rev. Phys. Chem. **69**, 299 (2018).
- [33] V.K. Tewary, E.J. Garboczi. Phys. Lett. A **384**, 1 (2021).

*Редактор К.В. Емцев*