

05 Особенности термоэлектрических характеристик 1D свободных и эпитаксиальных структур, сформированных на переходных металлах

© С.Ю. Давыдов

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

E-mail: sergei_davydov@mail.ru

Поступила в Редакцию 1 февраля 2024 г.

В окончательной редакции 1 февраля 2024 г.

Принята к публикации 25 марта 2024 г.

В приближении сильной связи методом функций Грина получены аналитические выражения для дисперсии, эффективных масс носителей и плотностей состояний для свободных кумулена, полиина и 1D-структур АВ, АВ₂ и АВС. Продемонстрировано, что аналитические выражения для плотностей всех рассмотренных структур имеют корневые особенности при стремлении химического потенциала к границам сплошного спектра. Считая проводимость этих структур диффузионной, для двух вариантов аппроксимации времени рассеяния в уравнении Больцмана получены выражения для коэффициента Зеебека и фактора термоэлектрической мощности. Обсуждаются экспериментальные и теоретические предпосылки возможности создания длинных углеродных цепочек на бороздчатых гранях *d*-металлов. Приведены оценки влияния подложки на спектральные характеристики и плотности состояний одномерных структур.

Ключевые слова: кумулен, полиин, 1D-структуры АВ, АВ₂, АВС, коэффициент Зеебека, фактор термоэлектрической мощности.

DOI: 10.61011/FTT.2024.05.58086.16

1. Введение

С появлением графена [1] начался интенсивный поиск других двумерных (2D) соединений: составлялись „библиотеки“ таких материалов [2,3], базы данных [4–6], дорожные карты [7], атласы [8]. Интерес, хотя и в значительно меньшей степени, был проявлен и к одномерным (1D) структурам. В первую очередь, естественно, усилилось внимание к изучаемому уже более полувека (см. обзор [9]) карбину — линейной цепочке атомов углерода. Различают два вида карбинов: металлический кумулен с двойными связями (...=C=C=...) и полупроводниковый полиин с чередующимися одинарными и тройными связями (...≡C–C≡C–C≡...) [10–17]. Теоретически ожидаемые прочность, модуль упругости и жесткость карбинов больше, чем у любого известного материала, включая алмаз, углеродные нанотрубки и графен, что позволяет создавать новые композиционные материалы. Другая по существу неисследованная область применения включают в себя достижение максимального ограничения по ширине канала (толщиной в один атом углерода) для полевых транзисторов. Помимо прочностных характеристик, значительное внимание привлекал кондактанс карбинов (см. 2.2).

Следующими оказались АВ-соединения IV–IV, III–V и II–VI [18–22] и металлы [23,24]. Области применения 1D-материалов обсуждаются в работах [23–30] (отметим, что мы не рассматриваем здесь наноленты и нанотрубки). В настоящей работе мы, помимо карбинов, рассмотрим структуры АВ, АВ₂ и АВС. Последние две

структуры, которые следовало бы строго говоря именовать квазиодномерными, выбраны на основе выводов работ [31,32], где теоретически показано, что среди устойчивых трехатомных 2D-соединений проценты АВ₂ и АВС наивысшие.

В настоящей работе мы обратимся к термоэлектрическим (ТЕ) свойствам 1D-структур, которые до сих пор, насколько известно автору, практически не изучались: исключением является работа [33], где рассматривались прыжковая проводимость карбинов при высоких давлениях и температурах. Такая ситуация выглядит странно, так как изучению ТЕ-свойств 2D-соединений посвящено достаточное число публикаций (см. обзоры [34,35], а также работы [36–38]). В качестве ТЕ характеристик мы рассмотрим коэффициент Зеебека *S* и фактор термоэлектрической мощности $PF = \sigma S^2$, где σ — электропроводность, свободных 1D-структур, и обсудим возможности формирования 1D-структур на бороздчатых гранях переходных металлов.

2. Свободные 1D-структуры

2.1. Электронный спектр

Начнем со структуры АВС, изображенной на рис. 1, которую можно рассматривать как цепочку АВ, декорированную атомами С. Введем атомные функции Грина

$$g_{a,b,c} = (\omega - \varepsilon_{a,b,c} + i0^+)^{-1} \quad (1)$$

соответственно для атомов А, В и С, где ω — энергетическая переменная, $\varepsilon_{a,b,c}$ — энергии p_z - состояний

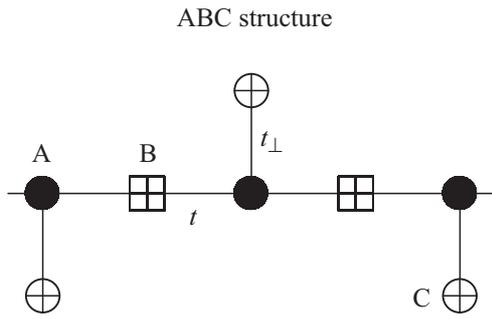


Рис. 1. Схематическое изображение структуры ABC. t и t_{\perp} — интегралы перескока электрона между атомами A–B и A–C соответственно (вид сверху).

атомов A, B, C. Включим теперь π -взаимодействия t и t_{\perp} между атомами A–B и A–C соответственно. Воспользовавшись уравнениями Дайсона получим

$$G_{A0A0} = g_a + g_a t_{\perp} G_{C0A0} + g_a t (G_{B-1} + G_{B+1}),$$

$$G_{C0A0} = g_c t_{\perp} G_{A0A0}, \quad G_{B\pm 1} = g_b t G_{A0A0} + g_b t G_{A\pm 2A0}, \quad (2)$$

получим

$$G_{CC} = g_c (1 - 4g_a g_b t^2) / D, \quad G_{AA} = g_a / D,$$

$$G_{BB} = g_b (1 - g_a g_c t_{\perp}^2) / D, \quad (3)$$

где

$$D = 1 - g_a g_c t_{\perp}^2 - 4g_a g_b t^2 \cos^2(ka)$$

или

$$D = (g_a g_b g_c)^{-1} [\Omega_a \Omega_b \Omega_c - \Omega_b t_{\perp}^2 - 4\Omega_c t^2 \cos^2(ka)]. \quad (4)$$

Электронный спектр рассматриваемых структур определяется уравнением $D = 0$, или

$$\Omega_a \Omega_b \Omega_c - \Omega_b t_{\perp}^2 - 4\Omega_c t^2 \cos^2(ka) = 0. \quad (5)$$

Рассмотрим теперь решение уравнения (5) для рассматриваемых конкретных структур.

1) Спектр структуры AB:

$$t_{\perp} = 0, \quad \omega_{\pm}(k) = \bar{\varepsilon} \pm R(k), \quad R(k) = \sqrt{\Delta^2 + 4t^2 \cos^2(ka)},$$

где

$$\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_a + \varepsilon_b) / 2, \quad \Delta = |\varepsilon_a - \varepsilon_b| / 2, \quad \omega_0 = \varepsilon_c.$$

2) Спектр структуры AB₂:

$$\Omega_b = \Omega_c, \quad R(k) = \sqrt{\Delta^2 + t_{\perp}^2 + 4t^2 \cos^2(ka)}.$$

Отметим наличие плоской зоны $\omega_0 = \varepsilon_c = 0$.

3) Для структуры ABC простого аналитического выражения для дисперсии привести невозможно, так как три электронные зоны являются решением кубического

уравнения. Результирующие законы дисперсии представлены на рис. 2 для значений параметров приведенных в подписях к рисунку. Отметим, что используемым в расчетах условиям $\varepsilon_a = -\varepsilon_b = \varepsilon$, $\varepsilon_c = 0$ или равенству $(\varepsilon_a + \varepsilon_b) / 2 = \varepsilon_c$ (см. подписи к рис. 2) приближенно отвечают энергии p -состояний атома бора (как атома A), азота (как атома B) и углерода (как атома C), взятые из таблиц атомных термов Херманна–Скиллмана [39] и Манна [40]. То же можно сказать об атомах столбцов III, V (как атомы A, B) и IV (как атом C), которые принадлежат одному и тому же ряду периодической системы.

Для структуры ABC в случае, когда $\varepsilon_c \neq 0$, поправки $\xi_i(ka)$ к спектральным ветвям в первом приближении по ε_c равны

$$\xi_i(x) = \varepsilon_c \frac{y_i^2 - (\varepsilon^2 + 4t^2 \cos^2 x)}{3y_i^2 - (\varepsilon^2 + t_{\perp}^2 + 4t^2 \cos^2 x)} \equiv \varepsilon_c \varphi_i(x),$$

$$\varphi_i(x) = \frac{y_i^2 - 1 - 4 \cos^2 x}{3y_i^2 - 2 - 4 \cos^2 x}, \quad (6)$$

где $x = ka$, зависимости $\varphi_i(ka)$ представлены на рис. 2, из которого следует, что максимальные значения имеют поправки $\varphi_3(ka)$ для низкоэнергетической зоны. Качественных изменений учет ненулевого значения ε_c в зонный спектр структуры ABC не вносит. Отметим, что спектры, аналогичные представленному на рис. 2, характерны также для декорированных адчастицами зигзагообразных кромок графена [41] и его нанолент [42],

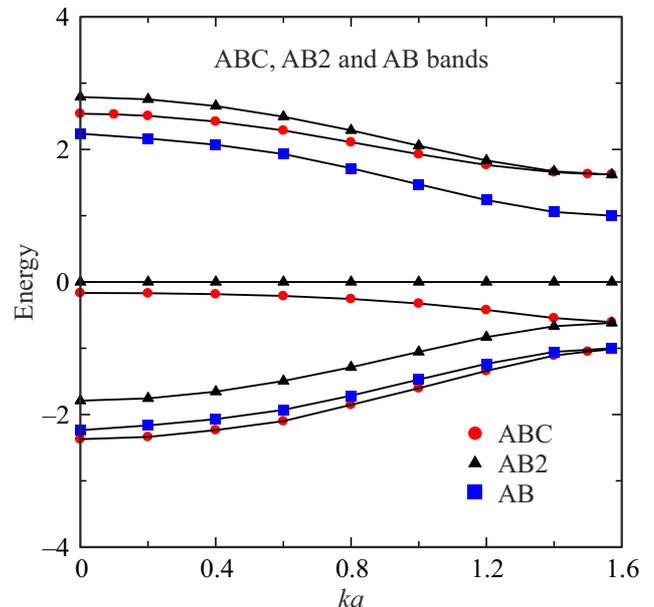


Рис. 2. Зонный спектр структур ABC (кружки), AB₂ (треугольники) и AB (квадраты). Цифрами 1 и 2 обозначены высокоэнергетические зоны (соответственно с положительной и отрицательными энергиями), цифрой 2 отмечены низкоэнергетические зоны. Случай ABC: $\varepsilon_a = -\varepsilon_b = \varepsilon$, $\varepsilon = t = t_{\perp} = 1$, $\varepsilon_c = 0$. Случай AB: $\varepsilon_a = -\varepsilon_b = \varepsilon$, $\varepsilon = t = 1$, $t_{\perp} = 0$, $\varepsilon_c = 0$. Случай AB₂: $\varepsilon_a = \varepsilon$, $\varepsilon_b = \varepsilon_c = 0$, $\varepsilon = t = t_{\perp} = 1$.

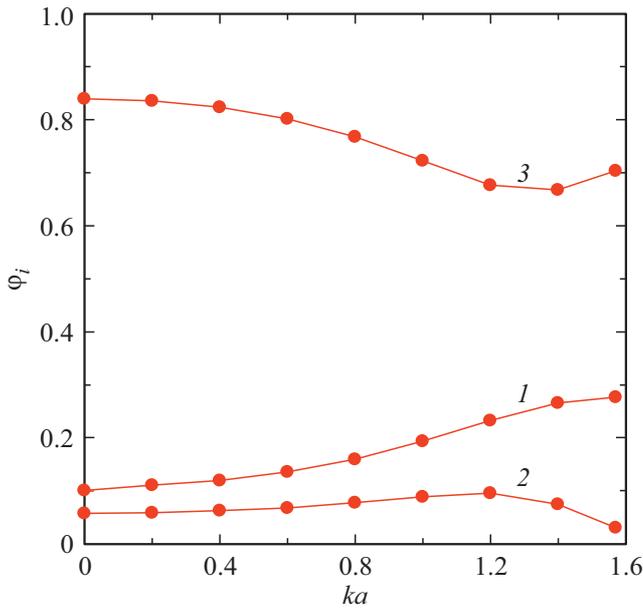


Рис. 3. Поправки $\varphi_i(ka)$ (см. (7)), где $i = 1, 2, 3$ к зонам $i = 1, 2, 3$ для структуры ABC (изображенным на рис. 2), вызванные отличием от нуля энергии ε_c .

причем во всех случаях имеется узкая (малодисперсная) низкоэнергетическая ветвь.

Перейдем теперь к определению зонных характеристик рассматриваемых структур. Легко показать, что в окрестности границы зоны Бриллюэна $k = \pi/2a$, экстремумы энергетических зон рассматриваемых структур характеризуются эффективными массами, равными для биатомной цепочки АВ

$$m_{AB}^1 = -m_{AB}^2 = \frac{\hbar^2 \Delta}{4t^2 a^2},$$

здесь и далее нумерация зон и соответствующих эффективных масс идет в сторону убыли энергии. При значениях параметров принятых при расчете дисперсии (см. подпись к рис. 2) получаем следующие значения безразмерных эффективных масс $m_{AB}^* = m_{AB}^1/m_e \approx 0.94$, и зонных параметров $E_g = 2$, $W = \sqrt{\Delta^2 + 4t^2} - \Delta \approx 1.24$. Для гипотетической структуры АВ₂, представляющей биатомную цепочку АВ, где каждый атом А декорирован атомом В, имеем

$$m_{AB_2}^1 = -m_{AB_2}^2 = \frac{\hbar^2 \sqrt{\Delta^2 + t_{\perp}^2}}{4t^2 a^2},$$

так что при значениях параметров принятых при расчете дисперсии, для безразмерных эффективных масс находим

$$m_{AB_2}^2 = m_{AB_2}^1/m_e \approx 1.06,$$

$$E_g = 2\sqrt{1.25} \approx 2.24, \quad W = \sqrt{\Delta^2 + t_{\perp}^2 + 4t^2} - \Delta \approx 1.17.$$

Для структуры ABC находим

$$m_{ABC}^2 = \frac{3}{2f_1} \frac{\hbar^2 R_{\perp}}{4t^2 a^2}, \quad m_{ABC}^{2,3} = -\frac{\sqrt{3}}{f_{2,3}} \frac{\hbar^2 R_{\perp}}{4t^2 a^2},$$

где для принятых при расчете зон параметров $f_1 = 1.75$, $f_2 = 2.31$, $f_3 = -0.33$, так что приведенные эффективные массы равны соответственно

$$m_{ABC,1}^* = m_{ABC,1}^1/m_e \approx 1.14,$$

$$m_{ABC,2}^* = m_{ABC,2}^2/m_e \approx -1.00,$$

$$m_{ABC,3}^* = m_{ABC,3}^3/m_e \approx 6.99.$$

Для ширины зон получаем $W_1 \approx 0.92$, $W_2 \approx 1.35$, $W_3 \approx 0.44$, $W_i = |y_i(0) - y_i(\pi/2)|$. Для прямых межзонных щелей имеем

$$\Delta_{\uparrow} = \omega_1(\pi/2a) - \omega_3(\pi/2a) = 2.33,$$

$$\Delta_{\downarrow} = \omega_3(\pi/2a) - \omega_2(\pi/2a) = 0.41,$$

а для непрямой щели получаем

$$\Delta_{\text{indir}} = \omega_1(\pi/2a) - \omega_3(0) = 1.79.$$

Возвращаясь к карбинам [15], для кумулена и полиина имеем соответственно

$$\omega_{\text{cum}}(k) = -2t \cos(ka), \quad |k_{\text{cum}}| \leq \pi/a,$$

$$\omega_{\text{pol}}^{\pm}(k) = \pm R(k), \quad R(k) = 2t' \sqrt{A_1^2(k) + A_2^2(k)}, \quad (7)$$

где $|k_{\text{pol}}| \leq \pi/2a$. Спроецировав $\omega_{\text{cum}}(k)$ на зону Бриллюэна полиина, получим закон дисперсии в виде

$$\omega_{\text{cum}}^{\pm}(k) = \pm 2t \cos(ka), \quad |k_{\text{cum}}| \leq \pi/2a. \quad (8)$$

Вследствие малости отношений ($\Delta a/a \approx -0.03$ и $\Delta t/2t \approx 0.03$: см. подробнее [15]) значимые различия спектров (7) и (8) наблюдаются только при $|k| \rightarrow \pi/2a$, где у полиина при $|k| = \pi/2a$ в электронном спектре имеется щель $\Delta_{\text{pol}} = 2R(\pi/2a) = 2\Delta t \approx 0.32$ eV (эта величина хорошо согласуется с результатами других авторов — см. [15]), а у кумулена щель отсутствует. Интересно сопоставить кумулен с бесщелевым, а полиин со щелевым графеном. Тогда на краю зоны Бриллюэна кумулена (т.е. при аналоге точки Дирака графена) спектр (9) можно охарактеризовать фермиевскими скоростями

$$v_F^{1D} = \mp 2ta/\hbar \sim 10^6 \text{ m/s} \quad (9)$$

(оценка для π -зон, см. [15]), т.е. тот же результат, что и для графена. В центре зоны Бриллюэна кумулена можно ввести эффективные массы $(m_{\text{cum}}^{\pm})^* = \hbar^2/m_e 2ta^2 \approx 0.8$.

Сопоставим теперь спектры полиина и структуры АВ. Для кумулена с законом дисперсии $\omega_{\text{cum}}(k) = -2t \cos(ka)$ получаем (в расчете на одну проекцию спина)

$$\rho_{\text{cum}}(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{\pi \sqrt{4t^2 - \omega^2}}, & \omega^2 \leq 4t^2, \\ 0, & \omega^2 > 4t^2. \end{cases} \quad (10)$$

В случае дисперсии вида $\omega_{\text{cum}}^{\pm}(k) = \pm 2t \cos(ka)$, имеем

$$\rho_{\text{cum}}^{\pm}(\omega) = \begin{cases} \frac{\pi/2 \mp \arcsin(\omega^2/4t^2)}{\pi\sqrt{4t^2 - \omega^2}}, & \omega^2 \leq 4t^2, \\ 0, & \omega^2 > 4t^2. \end{cases} \quad (11)$$

Перейдем теперь к рассмотрению плотностей состояний для структур АВ, АВ₂ и АВС. Для структуры АВ, обладающей спектром

$$\omega_{\pm}(k) = \bar{\varepsilon} \pm \sqrt{(\Delta^2 + 2t^2) + 2t^2 \cos(2ka)},$$

где $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_a + \varepsilon_b)/2$, $\Delta = |\varepsilon_a - \varepsilon_b|/2$, $\Omega = \omega - \bar{\varepsilon}$, плотность состояний равна

$$\rho_{\text{AB}}(\Omega) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{|\Omega|}{\sqrt{(W_{\text{top}}^2 - \Omega^2)(\Omega^2 - W_{\text{bot}}^2)}}, \\ \Delta^2 = W_{\text{bot}}^2 \leq \Omega^2 \leq \Delta^2 + 4t^2, \\ 0, & \Omega^2 < \Delta^2, \quad \Omega^2 > \Delta^2 + 4t^2, \end{cases} \quad (12)$$

где энергия $W_{\text{top(bot)}}$ — означает верхнюю (нижнюю) границу сплошного спектра. Для структуры АВ₂ со спектром $\omega_{\pm}(k) = \bar{\varepsilon} \pm R(k)$ и $\omega_0 = 0$, где

$$R(k) = \sqrt{\Delta_{\perp}^2 + 4t^2 \cos^2(ka)},$$

$$\Delta_{\perp} = \sqrt{\Delta^2 + t_{\perp}^2}, \quad \Omega = \omega - \varepsilon_a/2$$

плотности состояний имеют вид $\rho_{\text{AB}_2}^{(3)}(\omega) = \delta(\omega)$,

$$\rho_{\text{AB}_2}^{(1,2)}(\Omega) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{|\Omega|}{\sqrt{(W_{\text{top}}^2 - \Omega^2)(\Omega^2 - W_{\text{bot}}^2)}}, \\ \Delta_{\perp}^2 = W_{\text{bot}}^2 \leq \Omega^2 \leq W_{\text{top}}^2 = \Delta_{\perp}^2 + 4t^2, \\ 0, & \Omega^2 < \Delta_{\perp}^2, \quad \Omega^2 > \Delta_{\perp}^2 + 4t^2. \end{cases} \quad (13)$$

Для структуры АВС плотности состояний для зон 1 и 2 имеют вид

$$\rho_{\text{ABC}}^{(1,2)}(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{|\omega|}{\sqrt{(W_{\text{top}}^2 - \omega^2)(\omega^2 - W_{\text{bot}}^2)}}, \\ W_{\text{bot}}^2 = \varepsilon_{\perp} \leq \omega^2 \leq W_{\text{top}}^2 = \varepsilon_{\perp}^2 + 4t^2, \\ 0, & \omega^2 < \varepsilon_{\perp}^2, \quad \omega^2 > \varepsilon_{\perp}^2 + 4t^2. \end{cases} \quad (14)$$

Можно показать, что для зоны 3 при $t_{\perp}^2/\varepsilon^2 \ll 1$ приближенно получим

$$\rho_{\text{ABC}}^{(3)}(\omega) \approx \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{\omega^2}{\sqrt{W_{\text{top}} - |\omega|} \sqrt{|\omega| - W_{\text{bot}}}}, \\ W_{\text{bot}} \leq |\omega| \leq W_{\text{top}}, \\ 0, & |\omega| < W_{\text{bot}}, \quad |\omega| > W_{\text{top}}, \end{cases} \quad (15)$$

т.е. выражение типа (10), см., также, например, формулы (10) и (12) в [40], где рассматривалась квазиодномерная структура — декорированная адчастицами зигзагообразная кромка наноленты графена. Отметим, что плотности состояний (8)–(10) с корневыми особенностями типичны для 1D систем [43] (то же относится к формулам (10) и (12) работы [41]).

2.2. Кондактанс карбинов

Начнем с наиболее изученного квантового транспорта в карбинах. Первые (по утверждению авторов) измерения проводимости монокристаллической цепочки атомов углерода были выполнены в работе [44]. Цепочки получали отщеплением атомов карбоновой наноленты, через которую протекал электрический ток. Формирование цепочек сопровождалось характерным спадом электропроводности. Оказалось, что проводимость цепочек гораздо ниже предполагаемой проводимости идеальных цепочек. Расчеты из первых принципов показали, что влияние механических напряжений в цепочках на их проводимость возрастает с увеличением длин цепочек. Эти напряжения могут также вызвать переход кумулена в полиин, т.е. переход металл–полупроводник. Согласно [44], кумулен демонстрирует квантовую проводимость $2G_0$, где квант проводимости $G_0 = 2e^2/h$ (e — элементарный заряд, h — постоянная Планка) кондактанс одного канала при баллистическом транспорте (множитель 2 возникает из-за наличия дважды вырожденных π -зон, образованных p_z и p_y орбиталями (цепочка вытянута вдоль оси \hat{x}), что соответствует току $0.15 \mu\text{A}$ при напряжении смещения $V_b = 0.1 \text{ V}$. Там же приводятся значения ширины щелей в спектре полиина, равные 0.38, 0.34 eV. Сходные результаты были получены в [45], где теоретически рассматривались транспортные свойства карбоновой проволоки, „натянутой“ между двумя графеновыми электродами. Было найдено, что кондактанс изолированной проволоки равен $1.06G_0$, а для двойного провода $1.47G_0$, что меньше $2G_0$ вследствие перекрытия волновых функций атомов соседних проволок. В расчетах [44,45] использовались метод функций Грина совместно с DFT (density functional theory) [46] и формула Ландауэра (см. [43], Гл. 5), согласно которой вольт-амперная характеристика $I-V$ определяется выражением

$$I = G_0 \int T(\omega, V_b) [f_L(\omega) - f_R(\omega)] d\omega,$$

где $f_{L(R)}$ — фермиевские функции распределения на левом (правом) электроде, $T(\omega, V_b)$ — коэффициент прохождения [47] при энергии ω и напряжении смещения V_b . Отметим также работу [48], где также в рамках формализма Ландауэра проведен расчет проводимости коротких полииновых нанопечочек. Такой выбор объектов изучения обусловлен тем обстоятельством, что до недавнего времени синтезированы были лишь сравнительно короткие цепочки, например, полиин из 44 атомов углерода, в настоящее время удалось создать сверхдлинную линейную цепочку из 6000 атомов, встроенную

в двустенную углеродную нанотрубку (УНТ) [12,49]. Если длина цепочки L меньше длин релаксации по моменту L_m и фазе L_φ , транспорт называется когерентным (имеет место только упругое рассеяние), при $L \ll L_m, L_\varphi$ имеем баллистический режим; если же $L \geq L_m, L_\varphi$, то имеет место некогерентный транспорт, характеризующийся неупругим рассеянием, при котором необходимо учитывать электрон-электронное и электрон-фононное рассеяния [50]. При учете взаимодействия носителей и наличие рассеивателя в транспортном канале задача усложняется [51].

2.3. Диффузионная проводимость и термоэлектронные характеристики свободных 1D-структур

Воспользовавшись кинетическим уравнением Больцмана в приближении времени релаксации τ [52] и развитым в работах [53–56] подходом к расчету ТЕ характеристик 2D структур, получим выражение для спектральной проводимости [52] вида

$$\sigma(\mu) = e^2 \rho(\mu) v^2(\mu) \tau(\mu), \quad (16)$$

где μ — химический потенциал, e — элементарный заряд, ρ — плотность состояний кумулена (в eV^{-1}), v — групповая скорость электрона (данное выражение, как и последующие формулы раздела 2.3 не применимы к плоской зоне $\omega_0 = \varepsilon_c = 0$, для которой требуется специальное рассмотрение [57]). Для характеристики термоэлектрических свойств часто используем фактор термоэлектрической мощности $PF = \sigma S^2$, где S — коэффициент Зеебека, равный

$$S = C_S (d \ln \sigma(\mu, T=0)/d\mu), \quad C_S = -\pi^2 k_B^2 T / 3e, \quad (17)$$

k_B — постоянная Больцмана, T — температура. Согласно (9), для кумулена $v_{cum} = 2ta/\hbar$ (для бесщелевого графена имеем $v_F/\sqrt{2}$, где v_F — фермиевская скорость). Таким образом, в случае кумулена $S_{cum}(\mu) = 0$ и $PF_{cum}(\mu) = 0$. Для полиина получаем

$$v_{pol}^2(\mu) = v_{cum}^2 \left(\frac{\mu^2 - \Delta_{pol}^2}{\mu^2} \right), \quad \mu^2 > \Delta_{pol}^2, \quad (18)$$

где $E_g = 2\Delta_{pol} = 2\Delta t \approx 0.32 eV$ [15]. Это выражение эквивалентно формуле (4) работы [54] для щелевого графена, где вместо v_{cum}^2 и Δ_{pol}^2 стоят $v_F^2/2$ и Δ^2 . Положив $\tau(\mu) = C_\tau/\rho(\mu)$ [53–56], получим $\sigma(\mu) = e^2 v^2(\mu)$. Тогда из (17) и (18) следует, что

$$S_{pol}(\mu) = 2C_S \frac{\Delta_{pol}^2}{\mu(\mu^2 - \Delta_{pol}^2)},$$

$$PF_{pol}(\mu) = 4C_S^2 C_\tau e^2 \frac{v_{cum}^2 \Delta_{pol}^4}{\mu^4 (\mu^2 - \Delta_{pol}^2)}. \quad (19)$$

Таким образом, при $\mu \rightarrow \pm \Delta_{pol}$ функции $S_{pol}(\mu)$ и $PF_{pol}(\mu)$ испытывают степенные расходимости.

Переходя к другим 1D-структурам, рассмотренным в разделе 2.1, и считая, что их диффузионная проводимость также описывается выражением (16), а закон дисперсии имеет вид $\omega(k) = \pm \Delta \pm \hbar^2 k^2 / 2m$, где знаки \pm относятся соответственно к зоне проводимости и валентной зоне, m — эффективная масса, а энергия отсчитывается от середины запрещенной зоны $E_g = 2\Delta$, для групповой скорости $v(k) = \hbar k / m$ получаем

$$v^2(\mu) = \frac{2(\mu \mp \Delta)}{m}, \quad \mu^2 > \Delta^2, \quad (20)$$

Тогда при $\tau(\mu) = C_\tau / \rho(\mu)$, получим

$$S(\mu) = C_S \frac{1}{\mu \mp \Delta}, \quad PF(\mu) = 2C_S^2 C_\tau e^2 \frac{1}{m(\mu \mp \Delta)}. \quad (21)$$

Если положить $\tau(\mu) = \tau_0 = \text{const}$ (см. Appendix A в [54]), то

$$S(\mu) = C_S \left(\frac{d \ln v(\mu)}{d\mu} + \frac{d \ln \rho(\mu)}{d\mu} \right). \quad (22)$$

Таким образом, к расхождениям, связанным с групповой скоростью, добавляются расхождения, связанные с плотностью состояний. Так как для кумулена первое слагаемое в (22) равно нулю, получаем $S(\mu) = C_S / (2(4t^2 - \mu^2))$. Для остальных рассматриваемых нами 1D структур, легко показать, что аналогичные расходимости коэффициента Зеебека имеют место вблизи границ сплошного спектра W_{top} и W_{bot} . То же можно сказать и о факторе термоэлектрической мощности.

3. Эпитаксиальные 1D-структуры на d -металлах

3.1. Экспериментальная информация

Уже более 30 лет назад сотрудниками Института физики НАН Украины был установлен факт [58,59] весьма своеобразного взаимодействия адатомов на гранях с резко анизотропным атомным рельефом, таких, как грань (112) ОЦК-решетки и (110) ГЦК-решетки (например, W(112), Mo(112), Re(10 $\bar{1}0$)). Эти грани построены из параллельных плотноупакованных рядов атомов, разделенных „бороздками“ атомной глубины (см. рис. 11 в [58] и рис. 9,10 в [59]). На таких поверхностях атомы металлов и неметаллов образуют структуры с ярко выраженным одномерным характером. В качестве адатомов рассматривались в основном щелочные, щелочно-земельные и редкоземельные металлы. Для образования линейных цепочек адатомов при малых покрытиях необходимо, чтобы между адатомами в этих цепочках действовали силы притяжения. Так как указанные выше металлические адсорбаты характеризуются значительной полярностью адсорбционной связи, то между адатомами действует довольно сильное диполь-дипольное отталкивание [43]. Поэтому факт образования цепочек говорит о том, что во взаимодействии адатомов

превалирует прямой и косвенный обмен [43]. Гл. 9). Из сказанного следует, что на бороздчатых поверхностях d -металлов можно попытаться формировать длинные карбиновые цепочки. К такому же выводу, приводит и история силицена, который не удалось синтезировать в свободном виде, но наноленты которого в 2012 г. были выращены на поверхности (111) Ag [60]. Стабилизирующее карбины влияние металлических атомов подтверждается также расчетами [61,62]. В первом из них исследованы атомная структура и электронные транспортные свойства углеродной цепочки с внедренными в нее атомами меди (Cu-металлизированный карбин), что предотвращает пайерлсовский переход карбина в полиин; в результате металлизированный медью карбин ведет себя как одномерный металл. В [62] рассматривалось декорирование карбинов атомами кальция. В частности показано, что атом Ca сильнее связывается с одинарной C–C, а не тройной связью C≡C. Вследствие деформации, вызванной адсорбции Ca, длины связей C–C и C≡C становятся практически одинаковыми (соответственно 1.29 и 1.30 Å).

С другой стороны, следует отметить, что в цикле работ сотрудников ФТИ РАН [63–68], изучавших углеродные покрытия на d -металлах (Ir (111) [64], Mo (100) [65], Ta (100) [66], Re [67], Pt (111) [68]), одномерных структур обнаружено не было. Это и не удивительно, так как использованные в экспериментах [63–68] кристаллические грани d -металлов не обладают бороздчатой структурой.

3.2. Эпитаксиальные цепочки на d -металлах: теоретические оценки

Для описания эпитаксиальных структур воспользуемся так называемым адсорбционным подходом [69], согласно которому, если функция Грина свободной структуры равна $G(\omega)$, то функция Грина эпитаксиальной структуры $\tilde{G}(\omega)$ определяется уравнением Дайсона $\tilde{G}^{-1}(\omega) = G^{-1}(\omega) - \Sigma(\omega)$, где собственно-энергетическая часть $\Sigma(\omega) = \Lambda(\omega) - i\Gamma(\omega)$, а $\Lambda(\omega)$ и $\Gamma(\omega)$ есть соответственно функции сдвига и уширения энергетических уровней свободной структуры вследствие ее взаимодействия с подложкой. При этом $\Gamma(\omega) = \pi V^2 \rho_{\text{sub}}(\omega)$, где V — матричный элемент взаимодействия состояний адатома эпитаксиальной структуры и подложки, плотность состояний которой равна ρ_{sub} , а функция $\Lambda(\omega)$ является гильберт-трансформантой функции $\Gamma(\omega)$, т. е.

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

где P — символ главного значения. Для дальнейшего следует задать плотность состояний подложки. Используя модель Фриделя, положим $\rho_{\text{sub}}(\omega) = \rho_d = 10/W_d$ при $-W_d/2 \leq \Omega_d \leq W_d/2$ и $\rho_{\text{sub}}(\omega) = 0$ в остальных случаях, где $\Omega_d = \omega - E_d$, W_d — ширина зоны проводимости d -металла с центром E_d (см. [39]. Гл. 20). Такой

плотности состояний соответствуют функция уширения $\Gamma_d(\omega) = \pi \rho_d(\omega) V^2$ и функция сдвига

$$\Lambda_d(\omega) = \frac{\Gamma_d}{\pi} \ln \left| \frac{\Omega_d + W_d/2}{\Omega_d - W_d/2} \right|, \quad (23)$$

где $\Gamma_d = \pi \rho_d V^2$. Теперь в выражениях (10)–(15) для плотностей состояний свободных 1D-структур мы должны заменить ω на $\tilde{\omega} = \omega - \Lambda_d(\omega)$ и в выражениях (18)–(22) для $v(\mu)$ и $\rho(\mu)$ заменить μ на $\tilde{\mu} = \mu - \Lambda_d(\mu)$, что естественно смещает полюса. Здесь для порядковых оценок мы примем так называемое приближение широкой зоны, когда полагают $W_d \rightarrow \infty$ (для $5d$ -металлов $W_d \sim 10$ eV), что дает $\Lambda_d(\omega) = 0$ [43, Гл. 8]. Оценим теперь заряд Z_0 одиночного адатома, из которых построена эпитаксиальная цепочка по формуле

$$Z_0 = \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\varepsilon_a - E_F}{\Gamma_d}, \quad (24)$$

где ε_a — энергия орбитали, работающей на адсорбцию и изначально заполненную одним электроном, E_F — энергия Ферми [43, Гл. 8]. Имея в виду адатом углерода, заменим разность $\varepsilon_a - E_F$, на разность работ выхода углеродных структур и d -металла $\varphi_C - \varphi_d$. Такая процедура возможна, так как графен и графит имеют одинаковые работы выхода $\varphi_C = 4.50$ eV [70], слабо различаются и работы выхода монослойного и двуслойного графена [71]. Поэтому для порядковых оценок мы принимаем $\varphi_C = 4.50$ eV и для углеродной цепочки. Для Mo (112) $\varphi_d = 4.36 - 4.53$ [72], для W (112) $\varphi_d \approx 4.7$ eV [73,74]. Согласно [39] (Гл. 19), матричный элемент, связывающий p -состояния углерода с d -состояниями металлической подложки $V = V_{pd\sigma} = 2.95(\hbar^2 r_d^{3/2} / m d^{7/2})$ для σ -связи, r_d — радиус d -оболочки, равный для W и Mo соответственно (1.27 и 1.20 Å). Полагая длину адсорбционной связи $d \sim 2.5$ Å, получим $V_{pd\sigma} \sim 1$ eV, так что $\Gamma_d \sim 3$ eV (для σ -связи. Тогда из (24) следует, что $|Z_0| \ll 1$. Если считать, что атомы углерода в цепочке связаны прямым обменом t и находятся на расстоянии a друг от друга, то цепочка устойчива, когда энергия кулоновского отталкивания соседних адатомов $U_C = \frac{Z_0^2 e^2}{a}$ меньше их энергии связи $U_{\text{bind}} = 2t/3$, где $t = \eta_{sp}(\hbar^2 / m a^2)$ и для σ -связи sp -орбиталей $\eta_{sp} = 3.19$ [76], откуда получаем $Z_0^2 < 1/a$, где a измеряется в Å. Аналогичное условие устойчивости цепочки можно записать и для косвенного взаимодействия соседних адатомов ([43], Гл. 9).

Дополнительно рассмотрим эффект электрон-электронного отталкивания соседних атомов в цепочке $G n_j n_{j\pm 1}$, где $n_j \sim 1$, так как $|Z_j| \ll 1$, где j — номер атома в цепочке. В гл. 9 [43] и работе [77] показано, что при определенных условиях цепочки с однородным распределением электронов по атомам выгодно перейти в состояние с волной зарядовой плотности вследствие межатомного перехода электронов, когда числа заполнения соседних атомов принимают вид $n_j = 1 + \delta n$, $n_{j\pm 1} = 1 - \delta n$, так что между ними возникает притяжения, понижающее энергию цепочки на величину

$G(\delta n)^2$. При этом устойчивость цепочки естественно возрастает.

Следует также, отметить, что при учете диполь-дипольного отталкивания в цепочке как и в других структурах (диполи образуются адатомами и их изображениями в металле) имеет место деполяризация адатомов, т. е. убыль величины заряда адатомов ([43], гл. 9).

3.3. Оценки термоэлектрических характеристик эпитаксиальных цепочек

Для эпитаксиального кумулена плотность состояний

$$\tilde{\rho}(\omega) = \frac{\Gamma}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{d(ka)}{(\omega - 2t \cos(ka))^2 + \Gamma^2}, \quad (25)$$

откуда следует, что максимальное значение $\tilde{\rho}_{\text{cum}} = 1/\pi\Gamma$ (можно показать, что

$$\tilde{\rho}_{\text{cum}}(0) = (4t^2 + \Gamma^2)^{-1/2}$$

и

$$\rho_{\text{cum}}(\pm 2t) \sim \Gamma/\pi(4t^2 + \Gamma^2).$$

Таким образом, расходимости проводимости (16) и термоэлектронных характеристик $S_{\text{cum}}(\mu)$ и $PF_{\text{cum}}(\mu)$, связанные с особенностями плотностей состояний, при аппроксимации времени релаксации константой (второе слагаемое в выражении (22)), у эпитаксиальных структур на d -металлах в приближении широкой зоны отсутствуют. По-прежнему, проявляются, однако, особенности, связанные с групповой скоростью (18), (20), (22). В связи с этим, нужно учесть влияние подложки на групповую скорость, впервые определенную для графена в [78] и для карбина в [77]. Согласно этим работам

$$\tilde{v}(\mu)/v(\mu) = F(\mu), \quad F(\mu) = (1 - (d\Lambda(\mu)/d\mu))^{-1}. \quad (26)$$

Таким образом, в приближении широкой зоны, имеем $\tilde{v}(\mu)/v(\mu) = 1$. Тогда как в модели Фриделя из (23) получаем

$$F(\mu) = \left(1 + \frac{\Gamma_d}{\pi} \frac{W_d}{(W_d/2)^2 - (\mu - E_d)^2}\right)^{-1}. \quad (27)$$

Отношения эффективных масс для эпитаксиальной и свободной структур $\tilde{m}^*/m^* = F(\omega_{\text{extr}})$, где ω_{extr} — энергия экстремума, для которого определены эффективные массы. Более подробные обсуждения зависимостей (26), (27) (в частности, предела $\mu \rightarrow E_d \pm W_d/2$) даны в [78,77].

Из формул (19) и (26) следует, что для кумулена, полина и других рассмотренных в работе 1D структур справедливы отношения

$$\tilde{S}(\mu)/S(\mu) = 1 \text{ и } (PF(\mu))_{\text{epi}}/(PF(\mu))_{\text{free}} = F^2(\mu). \quad (28)$$

4. Заключение

В настоящей работе с использованием приближения сильной связи и функций Грина получены аналитические выражения для характеристик электронного спектра (дисперсии и эффективных масс носителей) для пяти одномерных свободных структур и показано, что плотности состояний всех рассмотренных структур ρ , характеризуется корневыми расходимостями, при приближении химического потенциала к границам сплошного спектра этих структур. В предположении, что время релаксации $\tau \propto \rho^{-1}$, спектральная проводимость $\sigma(\mu) \propto v^2(\mu)$, где v — групповая скорость электрона (такая пропорциональность характерна для кинетического уравнения Больцмана), были получены простые аналитические выражения для коэффициента Зеебека $S(\mu)$ и фактора термоэлектрической мощности $PF(\mu)$ свободных 1D-структур.

Переходу к эпитаксиальным структурам предпослан обзор имеющихся экспериментальных данных по формированию цепочек на бороздчатых гранях переходных металлов. Простые теоретические оценки показали, что такие цепочки, построенные из атомов углерода (т. е. карбины) должны быть устойчивы. Показано также, как наличие d -подложки изменяет величины ρ , v , s и PF .

Интерес к экстремальным значениям термоэлектрических характеристик обусловлен поиском материалов и структур, обладающих значением параметра $ZT > 1$ (именуемого в англоязычной литературе figure of merit), где $Z = \sigma S^2/\kappa$, κ — теплопроводность [79].

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.K. Geim, K.S. Novoselov. Nature Mater. **6**, 183 (2007).
- [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] S. Haastrup, 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).
- [5] L.V. annucci, U. Petralanda, A. Rasmussen, T. Olsen, K.S. Thygesen. J. Appl. Phys. **128**, 105101 (2020).
- [6] M. Fukuda, J. Zhang, Y.-T. Lee, T. Ozakia. Mater. Adv. **2**, 4392 (2021).
- [7] N. Briggs, S. Subramanian, Z. Lin, X. Li, X. Zhang, K. Zhang, K. Xiao, D. Geohegan, R. Wallace, L.-Q. Chen, M. Terrones, A. Ebrahimi, S. Das, J. Redwing, C. Hinkle, K. Momeni, A. van Duin, V. Crespi, S. Kar, J.A. Robinson. 2D Mater. **6**, 022001 (2019).
- [8] J. Nevalaita, P. Koskinen. Phys. Rev. B **97**, 035411 (2018).
- [9] Yu.P. Kudryavtsev, R.B. Heimann, S.E. Evsyukov. J. Mater. Sci. **31**, 5557 (1998).
- [10] F. Banhart. Belstein J. Nanotechnol, **6**, 559 (2015).

- [11] L. Shi, P. Rohringer, K. Suenaga, Y. Niimi, J. Kotakoski, J.C. Meyer, H. Peterlik, M. Wanko, S. Cahangirov, A. Rubio, Z.J. Lapin, L. Novotny, P. Ayala, T. Pichler. *Nature Mater.* **15**, 634 (2016).
- [12] L. Shi, P. Rohringer, M. Wanko, A. Rubio, S. Wassertho, S. Reich, S. Cambre, W. Wenseleers, P. Ayala, T. Pichler. *Phys. Rev. Mater.* **1**, 075601 (2017).
- [13] Z. Salman, A. Nair, S. Tung. Proc. 12th IEEE Int. Conf. on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems (April 9–12, 2017) Los Angeles, USA. P. 667–681.
- [14] C.S. Casar, A. Milani. *MRS Commun.* **8**, 207 (2018).
- [15] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **53**, 971 (2019). [S.Yu. Davydov. *Semiconductors* **53**, 954 (2019)].
- [16] S. Gunasekaran, L. Venkataraman. *J. Chem. Phys.* **153**, 124304 (2020).
- [17] M. Bamdad, H. Mousavi. *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **10**, 031001 (2021).
- [18] R.T. Senger, S. Tongay, E. Durgun, S. Ciraci. *Phys. Rev. B* **72**, 075419 (2005).
- [19] H.L. Zhuang, A.K. Singh, R.G. Hennig. *Phys. Rev. B* **87**, 165415 (2013).
- [20] C.-J. Tong, H. Zhang, Y.-N. Zhang, H. Liu, L.-M. Liu. *J. Mater. Chem. A* **2**, 17971 (2014).
- [21] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **54**, 446 (2020). [S.Yu. Davydov. *Semiconductors* **54**, 523 (2020)].
- [22] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **62**, 955 (2020). [S.Yu. Davydov. *Phys. Solid State* **62**, 1085 (2020)].
- [23] S. Hasegawa. *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 084026 (2010).
- [24] P.D. Bhuyan, S.K. Gupta, Y. Sonvane, A. Kumar. *AIP Conf. Proceed.* **1942**, 110026 (2018).
- [25] P.B. Sorokin, H. Lee, L.Yu. Antipina, A.K. Singh, B.I. Yakobson. *Nano Lett.* **11**, 2660–2665 (2011).
- [26] X. Tu, H. Wang, Z. Shen, Y. Wang, S. Sanvito, S. Hou. *J. Chem. Phys.* **145**, 244702 (2016).
- [27] Z. Salman, A. Nair, S. Tung. Proc. 12th IEEE Intern. Conf. Nano/Micro Engineered and Molecular Systems Los Angeles, USA (2027). p. 677.
- [28] A.P. Piedade, L. Canguieiro. *Nanomaterials* **10**, 780 (2020).
- [29] A. Machín, K. Fontánec, J.C. Arango, D. Ortiz, J. De León, S. Pinilla, V. Nicolosi, F.I. Petrescu, C. Morant, F. Márquez. *Materials* **14**, 2609 (2021).
- [30] M. Aleksandrova, G. Kolev, A. Brigadin, A. Lukin. *Crystals* **12**, 501 (2022).
- [31] M. Ashton, J. Paul, S.B. Sinnott, R.G. Hennig. *Phys. Rev. Lett.* **118**, 106101 (2017).
- [32] M. Fukuda, J. Zhang, Y.-T. Lee, T. Ozakia. *Mater. Adv.* **2**, 4392 (2021).
- [33] С.В. Демишев, А.А. Пронин, В.В. Глушков, Н.Е. Случанко, Н.А. Самарин, М.В. Кондрин, А.Г. Ляпин, В.В. Бражкин, Т.Д. Варфоломеев, С.В. Попова. *ЖЭТФ* **122**, 140 (2002). [S.V. Demisheva, A.A. Pronina, V.V. Glushkova, N.E. Sluchanko, N.A. Samarina, M.V. Kondrin, A.G. Lyapin, V.V. Brazhkin, T.D. Varfolomeeva, S.V. Popova. *JETPh* **95**, 123 (2020)].
- [34] A.M. Dehkordi, M. Zebarjadi, J. He, T. M. Tritt. *Mater. Sci. Eng. R* **97**, 1 (2015).
- [35] D. Li, Y. Gong, Y. Chen, J. Lin, Q. Khan, Y. Zhang, Y. Li, H. Zhang, H. Xie. *Nano-Micro Lett.* **12**, 36 (2020).
- [36] N.T. Hung, A.R.T. Nugraha, R. Saito. *Phys. Rev. Appl.* **9**, 024019 (2018).
- [37] E.H. Hasdeo, L.P.A. Krisna, M.Y. Hanna, B.E. Gunara, N.T. Hung, A.R. Nugraha. *J. Appl. Phys.* **126**, 035109 (2019).
- [38] A. Darmawan, E. Suprayoga, A.R.T. Nugraha, A.A. AlShaikhi. arXiv: 2205.10603.
- [39] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел. Мир, М.* (1983).
- [40] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B* **31**, 2121 (1985).
- [41] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **53**, 83 (2019). [S.Yu. Davydov. *Semiconductors* **53**, 78 (2019)].
- [42] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **61**, 610 (2019). [S.Yu. Davydov. *Phys. Solid State* **61**, 480 (2019)].
- [43] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. *Элементарное введение в теорию наносистем. Лань, СПб* (2014). Гл. 2.
- [44] O. Cretu, A.R. Botello-Mendez, I.M. Janowska, C. Pham-Huu, J.-C. Charlier, F. Banhart. *Nano Lett.* **13**, 3482 (2013).
- [45] L. Shen, M. Zeng, S.-W. Yang, C. Zhang, X. Wang, Y. Feng. *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 11481 (2010).
- [46] G. Onida, L. Reining, A. Rubio. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 601 (2002).
- [47] D.S. Fisher, P.A. Lee. *Phys. Rev. B* **23**, 6851 (1981).
- [48] H. Mousavi, M. Bamdad, S. Jalilvand. *ECS J. Solid State Sci. Technology* **11**, 091003 (2022).
- [49] L. Shi, P. Rohringer, K. Suenaga, Y. Niimi, J. Kotakoski, J.C. Meyer, H. Peterlik, M. Wanko, S. Cahangirov, A. Rubio, Z.J. Lapin, L. Novotny, P. Ayala, T. Pichler. *Nature Mater.* **15**, 634 (2016).
- [50] W.Y. Kim, Y.C. Choi, S.K. Min, Y.C. K.S. Kim. *Chem. Soc. Rev.* **38**, 2319 (2009).
- [51] В.В. Афонин. *ЖЭТФ* **163**, 238 (2023). [V.V. Afonin. *JETP* **163**, N. 2 (2023)].
- [52] Дж. Займан. *Принципы теории твердого тела. Мир, М.* (1974). Гл. 7.
- [53] H. Usui, K. Kuroki. *J. Appl. Phys. Phys. Rev. B* **121**, 165101 (2017).
- [54] E.H. Hasdeo, L.P.A. Krisna, M.Y. Hanna, B.E. Gunara, N.T. Hung, A.R.T. Nugraha. *J. Appl. Phys.* **126**, 035109 (2019).
- [55] J.M. Adhidewata, A.R.T. Nugraha, E. H. Hasdeo, P. Estell, B.E. Gunara. arXiv: 2107.06826.
- [56] A. Darmawan, E. Suprayoga, A.R.T. Nugraha, A.A. AlShaikhi. arXiv: 2205.10603.
- [57] K.-E. Huhtinen, P. Törmä. arXiv: 2212.03192.
- [58] Л.А. Большов, А.П. Напартович, А.Г. Наумовец, А.Г. Федорус. *УФН* **122**, 125 (1977). [L.A. Bol'shov, A.P. Napartovich, A.G. Naumovets, A.G. Fedorus. *Usp. Fiz. Nauk* **122**, 125 (1977)].
- [59] О.М. Браун, В.К. Медведев. *УФН* **157**, 631 (1989). [O.M. Braun, V.K. Medvedev. *Usp. Fiz. Nauk* **157**, 631 (1989)].
- [60] G. Le Lay, D. Solonenko, P. Vogt. *Synthesis of Silicene. In: Silicene. Nano-Science and Technology / Eds P. Vogt, G. Le Lay. Cham. Springer* (2018). https://doi.org/10.1007/978-3-319-99964-7_5.
- [61] P.B. Sorokin, H. Lee, L.Yu. Antipina, A.K. Singh, B.I. Yakobson. *Nano Lett.* **11**, 2660 (2011).
- [62] X. Tu, H. Wang, Z. Shen, Y. Wang, S. Sanvito, S. Hou. *J. Chem. Phys.* **145**, 44702(2016).
- [63] А.Я. Тонтегоде. *Prog. Surf. Sci.* **38**, 201 (1991).
- [64] А.Я. Тонтегоде, Е.В. Рутьков. *УФН* **163**, 57 (1993). [A.Ya. Tontegode, E.V. Rut'kov. *Usp. Fiz. Nauk* **163**, 57 (1993)].
- [65] Н.Р. Галль, Е.В. Рутьков. *Письма в ЖЭТФ* **71**, 671 (2000). [N.R. Gall, E.V. Rut'kov. *JETP letters* **71**, 671 (2000)].

- [66] Н.Р. Галль, Е.В. Рутъков, А.Я. Тонтегоде. Письма в ЖЭТФ **73**, 756 (2001). [N.R. Gall, E.V. Rut'kov, A.Ya. Tontegode. JETP Lett. **73**, 756 (2001)].
- [67] Е.В. Рутъков, Н.Р. Галль. Письма в ЖЭТФ **110**, 683 (2019). [E.V. Rut'kov, N.R. Gall. JETP Lett. **110**, 683 (2019)].
- [68] Е.В. Рутъков, Н.Р. Галль. Письма в ЖЭТФ **113**, 595 (2021). [E.V. Rut'kov, N.R. Gall. JETP Lett. **113**, 595 (2021)].
- [69] С.Ю. Давыдов. ФТТ **58**, 779 (2016). [S.Yu. Davydov. Phys. Solid State **58**, 804 (2016)].
- [70] D. Niesner, T. Fauster. J. Phys.: Condens. Matter **26**, 393001 (2014).
- [71] Y.-J. Yu, Y. Zhao, S. Ryu, L.E. Brus, K.S. Kim, P. Kim. Nanj Lett. **9**, 3430 (2009).
- [72] Физические величины. Справочник / Под. ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. Энергоатомиздат, М. (1991).
- [73] С.А. Шакирова, I. Bayo. Письма в ЖТФ **33**, 13, 56 (2007). [S.A. Shakirova, I. Bayo. Tech. Phys. Lett. **33**, 7, 567 (2007)].
- [74] S.A. Surma, J. Brona, A. Ciszewski. Mater. Sci. (Poland) **36**, 225 (2018).
- [75] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. ФТТ **57**, 819 (2015). [S.Yu. Davydov, O.V. Posrednik. Phys. Solid State **57**, 837 (2015)].
- [76] W.A. Harrison. Phys. Rev. B **27**, 3592 (1983).
- [77] С.Ю. Давыдов. Письма в ЖТФ **45**, 13, 14 (2019). [S.Yu. Davydov. Tech. Phys. Lett. **45**, 650 (2019)].
- [78] З.З. Алисултанов. Письма в ЖТФ **39**(13), 32 (2013). [Z.Z. Alisultanov. Tech. Phys. Lett. **39**, 507 (2013)].
- [79] A.M. Dehkordi, M. Zebarjad, J. He, T.M. Tritt. Mater. Sci. Eng. R **97**, 1 (2015).

Редактор К.В. Емцев