

Энергетическая щель в плотности состояний однолистного графена, наводимая адсорбцией

© С.Ю. Давыдов[†]

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 16 мая 2011 г. Принята к печати 15 июня 2011 г.)

На основании простой модели показано, что монослой адатомов, связанных косвенным обменом, вызывает появление щели в плотности состояний двумерной подложки. Подробно анализируется характер зависимости π - и π^* -зон и ширины щели от положения уровня адатома. Определены числа заполнения для монослоя адатомов и графена. Численные оценки приведены для графана.

1. Введение

В настоящее время взаимодействие атомарного водорода с углеродными наносистемами вызывает пристальный интерес исследователей [1,2]. В особенности это относится к обладающему уникальными свойствами графену [3], что неудивительно, так как в случае однолистного графена любое его взаимодействие с чужеродным атомом можно рассматривать как акт адсорбции. Именно поэтому здесь уже накопился значительный материал (см., например, работы [4–21] и ссылки, приведенные там).

Помимо вопросов, связанных с водородной энергетикой [7,21], выяснилось, что при определенной концентрации адатомов водорода на графене в адсорбционной системе просходит переход полуметалл–полупроводник: в плотности состояний открывается щель [4,6,7,9,10,17]. Возникла даже новая терминология: при одностороннем полумонослойном покрытии листа графена адатомами водорода говорят о новом материале — графоне [10], при двустороннем покрытии с чередованием расположения соседних адатомов по разные стороны графенового листа — о графане [6,9].

В работе [22] для описания адсорбции одиночного атома на однолистном графене была предложена простая модель плотности состояний графена (М-модель), которая позволила описать переход заряда в системе адатом–графен. М-модель была успешно опробована для широкого круга адсорбатов: атомов водорода, щелочных металлов и галогенов [22–24]. В настоящей работе на примере простых моделей плотности состояний подложки („пьедестал“, упрощенная М-модель) мы покажем, что косвенное взаимодействие адатомов через электронный газ двумерной подложки приводит к появлению щели в плотности состояний адсорбционной системы.

2. Простой пример возникновения щели

Вообще говоря, возникновение наведенной адсорбцией щели в бесщелевой плотности состояний двумерной

подложки рассматривалась нами еще в работах [25,26]. Воспользовавшись результатами этих работ, покажем на простом примере, как возникает наведенная адсорбцией щель.

Рассмотрим подложку, покрытую монослоем адатомов, предположив, что адатом связан с одним атомом подложки и расположен непосредственно над ним. Тогда спектр состояний как подложки, так и адсорбированного слоя описывается одинаковым набором двумерных волновых векторов $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. Запишем гамильтониан H такой системы в виде

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \varepsilon_a \sum_{\mathbf{f}} a_{\mathbf{f}}^{\dagger} a_{\mathbf{f}} + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{f}} (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{f}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{f}} + h.c.). \quad (1)$$

Здесь $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ — закон дисперсии электронов подложки, ε_a — энергия атомного уровня, V — матричный элемент, связывающий состояния атома $|a\rangle$ с состояниями подложки $|k\rangle$ (здесь зависимость матричного элемента от \mathbf{k} игнорируется — см. далее), N — число адатомов, равное числу атомов в двумерной подложке (монослой), $c_{\mathbf{k}}^{\dagger} (c_{\mathbf{k}})$ — оператор рождения (уничтожения) электрона в состоянии $|k\rangle$, $a_{\mathbf{f}}^{\dagger} (a_{\mathbf{f}})$ — оператор рождения (уничтожения) электрона в состоянии $|a\rangle$ для атома, адсорбированного на узле \mathbf{f} . Здесь мы опустили спиновый индекс. Отметим, что гамильтониан (1) описывает косвенный обмен адатомов через электронный газ подложки.

Предположим, что плотность состояний чистой (в отсутствие адатомов) подложки $\rho_s(\omega)$, где ω — энергия, можно представить в виде прямоугольника („пьедестала“) шириной D : $\rho_s(\omega) = 2/D$ при $|\omega| < D/2$ и $\rho_s(\omega) = 0$ при $|\omega| > D/2$. Воспользовавшись результатами работы [25], полагая для простоты $\varepsilon_a = 0$, $16V^2 \ll D^2$ и переходя к пределу $\Gamma \rightarrow 0$ (см. выражение (11) в [25]), получим плотность состояний подложки, покрытой монослоем адатомов, в виде $\tilde{\rho}_s(\omega) = 2/D$ при $2V^2/D < |\omega| < D/2 + 2V^2/D$ (рис. 1). Таким образом, в плотности состояний подложки появляется щель шириной $\Delta = 4V^2/D$.

В работах [25,27] нами было показано, что как косвенный обмен, так и обмен прямой (когда спариваются

[†] E-mail: Sergei_Davydov@mail.ru

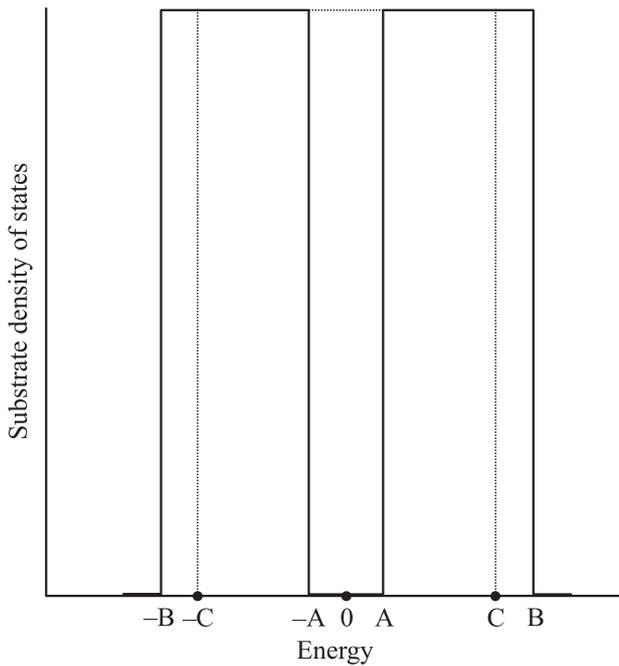


Рис. 1. Приведенная плотность состояний возмущенной адсорбцией модельной подложки, покрытой монослоем адатомов. Штриховой линией показана плотность состояний чистой (без адатомов) подложки. Координаты точек: $A = 2V^2/D$, $B = D/2 + 2V^2/D$, $C = D/2$.

состояния адатомов, расположенных в соседних узлах) ведет в случае трехмерной системы к преобразованию плотности состояний из одnogорбой в двугорбую кривую. При этом там, где в отсутствие взаимодействия наблюдался максимум плотности состояний адатома, появляется минимум. В двумерном случае минимум превращается в щель. Пояснить появление щели можно на простом примере. Пусть, например, между двумя уровнями с одинаковыми энергиями ε включается взаимодействие t (прямой обмен). Тогда в системе появляются уровни $\varepsilon \pm t$, разделенные щелью $2t$. Верхний из этих уровней отвечает антисвязывающему состоянию, нижний — связывающему. Аналогичным образом косвенный обмен адатомов „разрывает“ единую плотность состояний на две половины (рис. 1).

3. Общие соотношения

Воспользуемся гамильтонианом (1), получим функции Грина монослоя адатомов $G_a(\omega)$ и возмущенного адсорбцией графена $G_g(\omega)$:

$$G_g = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\omega - \varepsilon_a}{(\omega - \varepsilon_a)(\omega - \varepsilon_k) - V^2},$$

$$G_a(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\omega - \varepsilon_k}{(\omega - \varepsilon_a)(\omega - \varepsilon_k) - V^2}. \quad (2)$$

Заменим точный спектр состояний графена ε_k на его представление в окрестности точки Дирака, т.е. поло-

жим (см., например, [3])

$$\varepsilon_q = \varepsilon_c \pm 3t_g a |\mathbf{q}|/2, \quad (3)$$

где a — расстояние между ближайшими соседями, t_g — амплитуда перехода электрона между ближайшими соседями в графене, \mathbf{q} — волновой вектор, отсчитываемый от точки Дирака; энергия, соответствующая точке Дирака, принята равной ε_c ; знаки \pm относятся соответственно к зонам π^* ($\omega > \varepsilon_c$) и π ($\omega < \varepsilon_c$) [3]. Подчеркнем, что такая аппроксимация справедлива, строго говоря, лишь в окрестности точки Дирака. Мы, однако, будем ею пользоваться для интегрирования по q в зоне Бриллюэна от 0 до вектора обрезания q_B . Для дальнейшего анализа введем энергию обрезания $\xi = 3t_g a q_B/2$.

Воспользовавшись результатами работы [25], можно показать, что плотности состояний возмущенного адсорбцией графена $\tilde{\rho}_{g\pm}(\omega)$ и адсорбированного монослоя $\tilde{\rho}_{a\pm}(\omega)$ равны соответственно

$$\tilde{\rho}_{g\pm}(\omega) = \frac{1}{\pi} F(\omega) \left[\arctg \frac{(\omega - \omega_1^*)(\omega - \omega_2^*)}{s(\omega - \varepsilon_a)} - \arctg \frac{(\omega - \bar{\omega}_1)(\omega - \bar{\omega}_2)}{s(\omega - \varepsilon_a)} \right],$$

$$F(\omega) = \frac{2}{\xi^2} \frac{(\omega - \omega_1^*)(\omega - \omega_2^*)}{(\omega - \varepsilon_a)}, \quad (4)$$

$$\tilde{\rho}_{a\pm}(\omega) = \tilde{\rho}_{g\pm}(\omega)A(\omega) + \delta(\omega - \varepsilon_a),$$

$$A(\omega) = \frac{V^2}{(\omega - \varepsilon_a)^2}, \quad (5)$$

где $s = 0^+$,

$$\omega_{1,2}^* = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_a + \varepsilon_c \pm \sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_c)^2 + 4V^2} \right),$$

$$\bar{\omega}_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_a + \varepsilon_c \pm \xi \pm \sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_c \mp \xi)^2 + 4V^2} \right).$$

Выражения (5) инвариантны относительно одновременного изменения знаков ω , ε_a , ε_c и ξ . Отметим, что член, описывающийся δ -функцией Дирака в выражении для $\tilde{\rho}_{a\pm}$, отвечает плотности состояний изолированного атома.

Полагая $\varepsilon_c = 0$ и $\varepsilon_a = \delta$, получим

$$\omega_{1,2}^* = \frac{1}{2} \left(\delta \pm \sqrt{\delta^2 + 4V^2} \right), \quad (6)$$

$$\bar{\omega}_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\delta \pm \xi \pm \sqrt{(\delta \mp \xi)^2 + 4V^2} \right), \quad (7)$$

где зоне π отвечает интервал энергии $(\bar{\omega}_2, \omega_2^*)$, зоне π^* — $(\omega_1^*, \bar{\omega}_1)$.

Числа заполнения вычисляются обычным образом:

$$n_g = \int_{\bar{\omega}_1}^{\varepsilon_F} |F(\omega)| d\omega,$$

$$n_a = \int_{\bar{\omega}_2}^{\varepsilon_F} [|F(\omega)A(\omega)| + \delta(\omega - \varepsilon_a)] d\omega. \quad (8)$$

При этом положение уровня Ферми ε_F определяется из условия сохранения электронов $n_g + n_a = 2$.

Легко показать, что интегралы

$$I(a, b) = \int_a^b |F(\omega)|d\omega, \quad J(a, b) = \int_a^b |F(\omega)A(\omega)|d\omega \quad (9)$$

в общем виде определяются формулами

$$I(a, b) = \frac{1}{\xi^2} \left| \Omega_{ac}^2 - \Omega_{bc}^2 + 2V^2 \ln \left| \frac{\Omega_{ba}}{\Omega_{aa}} \right| \right|, \quad (10)$$

$$J(a, b) = \frac{2V^2}{\xi^2} \left| (\varepsilon_a - \varepsilon_c) \left(\frac{1}{\Omega_{ba}} - \frac{1}{\Omega_{aa}} \right) - \frac{1}{2} V^2 \left(\frac{1}{\Omega_{ba}^2} - \frac{1}{\Omega_{aa}^2} \right) - \ln \left| \frac{\Omega_{ba}}{\Omega_{aa}} \right| \right|, \quad (11)$$

где $\Omega_{ac} = a - \varepsilon_c$, $\Omega_{bc} = b - \varepsilon_c$, $\Omega_{aa} = a - \varepsilon_a$, $\Omega_{ba} = b - \varepsilon_a$.

4. Плотности состояний и числа заполнения

Рассмотрим для начала простейший случай, положив $\delta = 0$. Легко показать, что тогда плотность состояний возмущенного адсорбцией графена есть

$$\tilde{\rho}_{g\pm}(\omega) = \begin{cases} \frac{2}{\xi^2} \frac{\omega^2 - V^2}{|\omega|}, & V < |\omega| < \bar{\xi}, \\ 0, & |\omega| < V, \end{cases} \quad (12)$$

где $\bar{\xi} = (\xi \sqrt{\xi^2 + 4V^2})/2$. Плотность состояний монослоя адатомов есть

$$\tilde{\rho}_{a\pm} = \tilde{\rho}_{g\pm}(V/\omega)^2. \quad (13)$$

Соответствующие зависимости приведены на рис. 2. Плотности состояний симметричны, и зоны разрешенных состояний сужаются с уменьшением отношения ξ/V , максимумы плотностей состояний при этом растут. Ширина щели составляет $\Delta = 2V$.

Перейдем теперь к общему случаю $\delta \neq 0$ (рис. 3). С ростом $\delta > 0$ плотность состояний $\tilde{\rho}_{g-}$ слабо уширяется с соответствующим малым понижением максимума, тогда как $\tilde{\rho}_{g+}$ сдвигается в сторону более высоких энергий, сужается, а максимум ее растет. Аналогичным образом ведет себя и плотность состояний $\tilde{\rho}_{a\pm}$, с той, однако, разницей, что максимум $\tilde{\rho}_{a-}$ понижается значительно. Можно показать, что максимумы плотностей состояний монослоя адатомов отвечают энергиям $\hat{\omega}_{1,2} = \pm \sqrt{3V^2 + \delta^2}$.

Результаты изменения ширин зон π и π^* и щели представлены на рис. 4. Здесь наиболее интересный результат — рост ширины щели Δ с увеличением δ . Следует подчеркнуть, что с изменением знака δ характер изменения ширин зон π и π^* (W_π и W_{π^*} соответственно) меняется на противоположный.

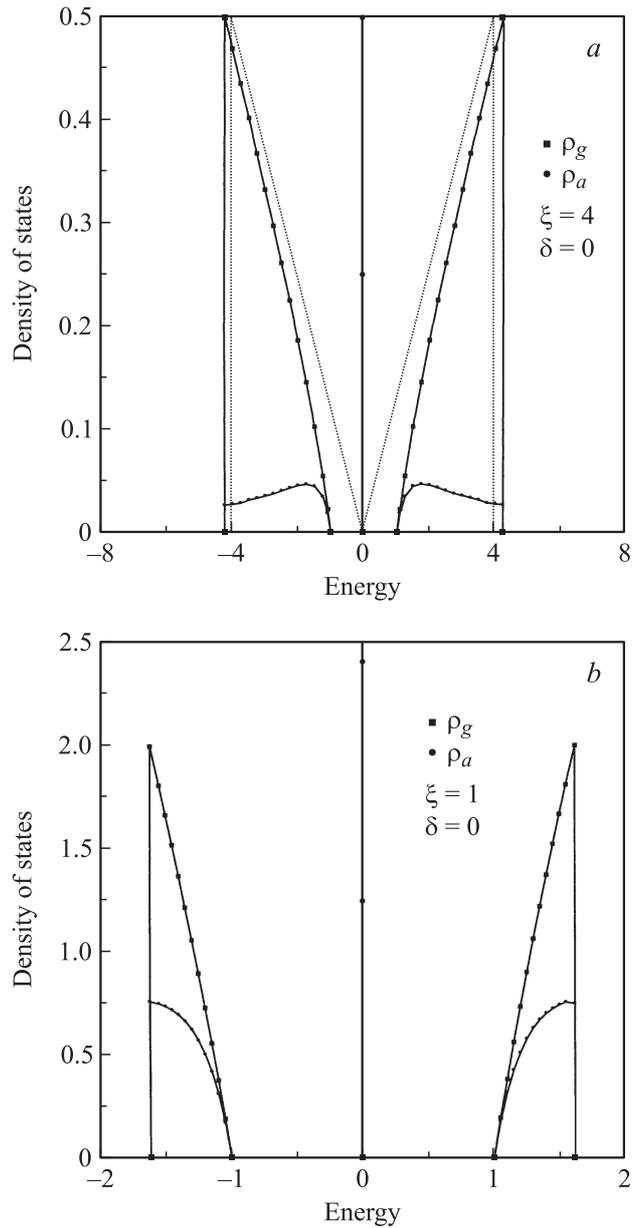


Рис. 2. Безразмерные плотности состояний возмущенного графена $\rho_g = \tilde{\rho}_g V$ и адсорбированного монослоя $\rho_a = \tilde{\rho}_a V$ как функции безразмерной энергии ω/V ($V = 1$). *a*: штриховая линия — безразмерная плотность состояний невозмущенного графена. $\delta = 0$; $\xi = 4$ (*a*), 1 (*b*).

Перейдем теперь к анализу чисел заполнения. Легко показать, что для случая $\delta = 0$

$$n_g^0 = \frac{\bar{\xi}}{\xi} + \frac{2V^2}{\xi^2} \ln \left(\frac{V}{\bar{\xi}} \right), \quad (14)$$

$$n_a^0 = 1 - \frac{2V^2}{\xi^2} \ln \left(\frac{V}{\bar{\xi}} \right) - \frac{V^2}{\xi \bar{\xi}}. \quad (15)$$

Так как $(\bar{\xi}^2 - V^2) = \xi \bar{\xi}$, получим, как и требуется, $n_g^0 + n_a^0 = 2$. При этом $\varepsilon_F = 0^+$. Для случая, изображен-

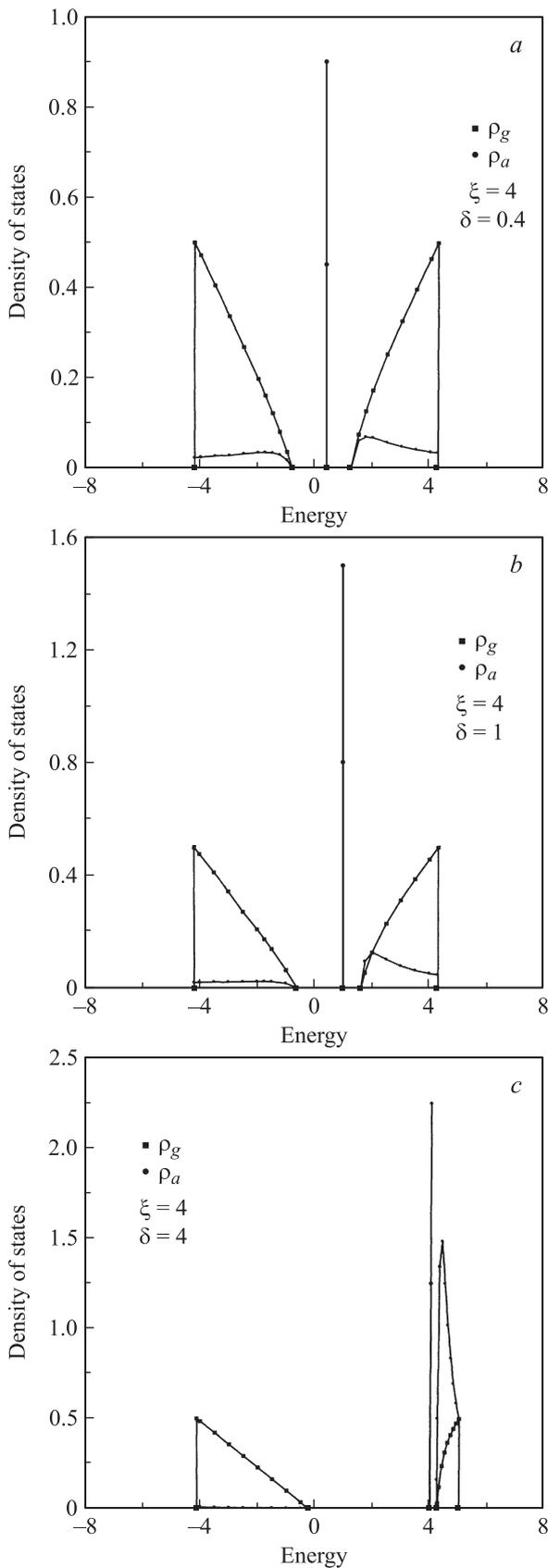


Рис. 3. Безразмерные плотности состояний возмущенного графена $\rho_g = \tilde{\rho}_g V$ и адсорбированного монослоя $\rho_a = \tilde{\rho}_a V$ как функции безразмерной энергии ω/V ($V = 1$). $\xi = 4$; $\delta = 0.4$ (a), 1 (b), 4 (c).

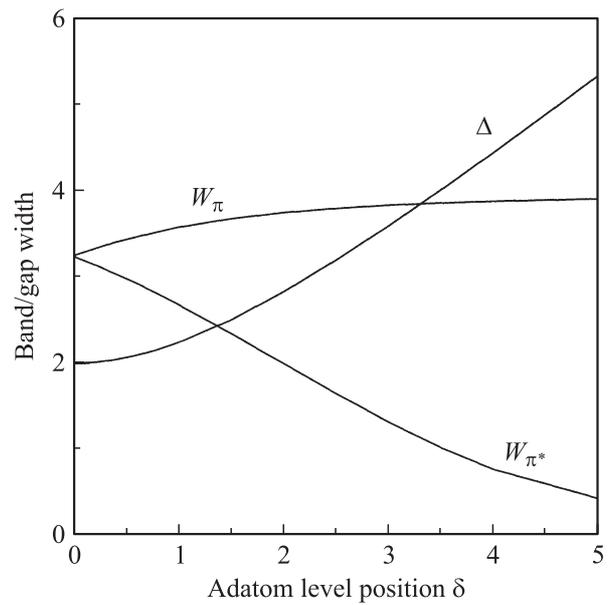


Рис. 4. Безразмерные ширины зон W_π , W_{π^*} и щели Δ как функции положения уровня адатома δ . $\xi = 4$.

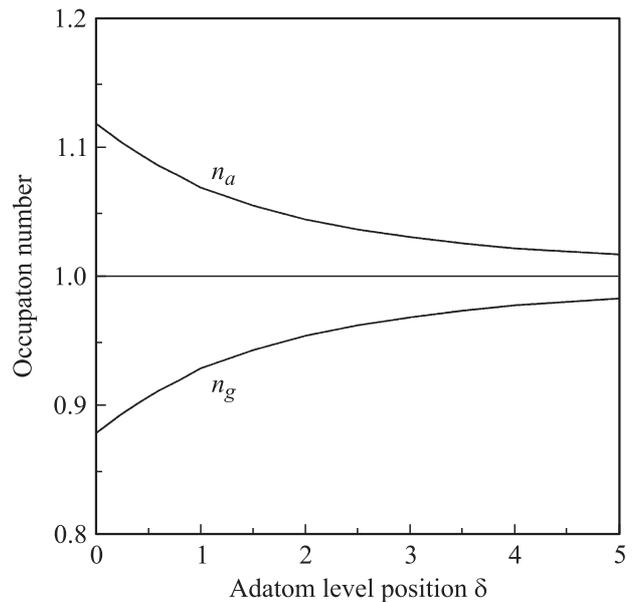


Рис. 5. Числа заполнения адатома монослоя n_a и атома графена n_g как функции положения уровня адатома δ . $\xi = 4$.

ного на рис. 2, a, имеем $n_g^0 = 0.88$, $n_a^0 = 1.12$. Результаты для случая $\delta \neq 0$ представлены на рис. 5.

Следует отметить, что условия $n_g^0 + n_a^0 = 2$ удается достичь, только полагая, что уровень Ферми лежит выше уровня изолированного атома, т.е. удовлетворяет условию $\varepsilon_F > \varepsilon_a$ (или, строже, $\varepsilon_F = \varepsilon_a + 0^+$). Как следует из выражения (5), заполнение этого состояния сразу же добавляет 1 к n_g . При этом выполняется равенство $I(\tilde{\omega}_2, \omega_2^*) + J(\tilde{\omega}_2, \omega_2^*) = 1$, что проще всего показать для случая $\delta = 0$.

Отметим одну интересную особенность полученных результатов. При адсорбции одиночного атома водорода имеет место переход электрона с адатома на графен (см., например, [23,24]). Здесь же в случае монослойного покрытия имеем обратную ситуацию: электроны переходят с графена в слой адатомов водорода. Представляет интерес найти значение поверхностной концентрации адатомов водорода, при которой имеет место инверсия направления перехода электронов.

5. Оценки для монослоя атомов водорода (графана)

Из выражения (11) следует, что плотность состояний невозмущенного графена ($V = 0$) есть

$$\rho_{g\pm}(\omega) = \begin{cases} 2|\omega|/\xi^2, & |\omega| < \xi, \\ 0, & |\omega| > \xi. \end{cases} \quad (16)$$

В работе [22] нами была предложена простая модель плотности состояний графена (М-модель), где плотности состояний (15) отвечала так называемая область „псевдощели“, расположенная в интервале энергий $|\omega| < t_g$. В интервале $t_g < |\omega| < 3t_g$ принималось, что плотность состояний $\rho_{g\pm} \propto |\omega|^{-1}$. Расчет, проведенный в [22] по методу связывающих орбиталей Харрисона, дал $t_g = 2.38$ эВ.¹ Поэтому примем $\xi = t_g$. Отметим, что обычно полагают $t_g \approx 2.7-3$ эВ [3].

Перейдем теперь к обсуждению матричного элемента V , зависимость которого от волнового вектора \mathbf{k} мы с самого начала пренебрегали (см. (1)), хотя, строго говоря, вместо V , стоящего перед знаком суммы по \mathbf{k} в (1), должен стоять матричный элемент $V_{ak} = \langle a|\hat{V}|\mathbf{k}\rangle$, где \hat{V} — оператор взаимодействия. Так как справедливо представление

$$|\mathbf{k}\rangle = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{f}} |g\rangle_{\mathbf{f}}, \quad (17)$$

где $|g\rangle_{\mathbf{f}}$ — волновая функция атома углерода графена с радиус-вектором \mathbf{f} , то

$$V_{ak} = \langle a|\hat{V}|g\rangle_0 + (N-1)^{-1/2} \sum_{\mathbf{f} \neq 0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{f}} \langle a|\hat{V}|g\rangle_{\mathbf{f}}. \quad (18)$$

Здесь, как и выше (см. (1)), мы считаем, что имеет место a -тип адсорбции (атом), когда адатом находится непосредственно над атомом подложки, расположенным в данном случае в „нулевом“ узле графена. Если можно пренебречь перекрытием волновых орбиталей адатома и трех соседних по отношению к нему атомов графена, то $V_{ak} \approx \langle a|\hat{V}|g\rangle_0 \equiv V$. Именно такую ситуацию мы и рассматривали в работах [22–24].

Теперь перейдем к ответу на вопрос: что следует понимать под функцией $|g\rangle_0 \equiv |g\rangle$? Адсорбция одиночных

¹ В работе [22] амплитуда перехода $t_g = \Delta/2$, где Δ — ширина „псевдощели“.

атомов водорода на графене рассматривалась нами в работах [23,24]. В качестве состояния $|g\rangle$ бралась волновая функция p_z , тогда как в [25] рассматривались еще и гибриды вида $|sp^l\rangle$, где $l = 1, 2, 3$. Для обычно принимаемой величины длины связи Н–С, равной $d = 1.1$ Å, величина V меняется от ~ 9 эВ для адсорбционной связи $|s\rangle-|p_z\rangle$ до ~ 12 эВ для связи $|s\rangle-|sp^l\rangle$. Если, однако, в соответствии со схемой Харрисона принять величину d равной сумме атомных радиусов водорода и углерода, то получим $d = 1.3$ Å и найдем, что значения V лежат в интервале 6–9 эВ. По данным работы [9], щель в графене в точке Дирака составляет величину ~ 16 эВ (отметим, что минимальная щель ~ 5 эВ соответствует точке Γ). Таким образом, найденные нами значения V представляются вполне разумными.

В заключение отметим, что в настоящее время нами изучены случаи адсорбции одиночного адатома [23,24] и монослоя адатомов водорода. Представляет интерес рассмотреть промежуточные покрытия $0 < \Theta \leq 1$ [28]. Для этого, строго говоря, мы должны для каждого конкретного покрытия Θ строить соответствующую решетку адатомов со своей зонной структурой. Можно, однако, поступить проще [25] и рассматривать функцию Грина усредненного бесструктурного слоя адатомов, которой соответствует усредненная интегральная плотность состояний системы. Можно показать, что при таком подходе V^2 заменяется на ΘV^2 . Тогда для графана ($\Theta = 0.5$) ширина щели в точке Дирака должна быть в $\sqrt{\Theta}$ раз меньше, чем в графене.

Работа выполнена в рамках программы президиума РАН „Квантовая физика конденсированных сред“ и ФАНИ (контракт № 02.740.11.0108 от 15.06.2009), ОФН РАН „Новые материалы“ и программы президиума РАН „Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов“, целевой программы „Развитие научного потенциала высшей школы (2009–2011)“ Министерства образования и науки РФ № 2.1.1/10269 и поддержана грантом РФФИ (проект № 11-02-0662_a).

Список литературы

- [1] С.Ю. Нечаев. УФН, **176** (6), 581 (2006).
- [2] Р.А. Андриевский. УФН, **177** (7), 721 (2007).
- [3] A.N. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. Rev. Mod. Phys., **81** (1), 109 (2009).
- [4] E.J. Duplock, M. Scheffler, P.J.D. Lindan. Phys. Rev. Lett., **92**, 225 502 (2004).
- [5] Л.А. Чернозатонский, П.Б. Сорокин, Е.Э. Белова, Й. Брюнинг, А.С. Федоров. Письма ЖЭТФ, **85** (1), 84 (2007).
- [6] J.O. Sofo, A.S. Caudhari, G.D. Barber. Phys. Rev. B, **75**, 153 401 (2007).
- [7] Y. McKay, D.J. Wales, S.J. Jenkins, J.A. Verges, P.L. de Andres. Phys. Rev. B, **81**, 075 425 (2010).
- [8] D. Soriano, F. Munoz-Rojas, J. Fernandez-Rossier, J.J. Palacios. arXiv: 1001.1263.
- [9] S. Lebegue, M. Klintonberg, O. Eriksson, M.I. Katsnelson. Phys. Rev. B, **79**, 245 117 (2009).

- [10] J. Zhou, Q. Wang, Q. Sun, X.C. Chen, Y. Kawazoe. *Nano Lett.*, **9** (11), 3867 (2009).
- [11] S. Casolo, E. Flage-Larsen, O.M. Loovik, G.F. Tantardini. arXiv: 1002.4117.
- [12] L.F. Huang, M.Y. Ni, G.R. Zhang, W.H. Zhou, Y.G. Li, X.H. Zheng, Z. Zeng. arXiv: 101.3577.
- [13] L.F. Huang, M.Y. Ni, G.R. Zhang, W.H. Zhou, Y.G. Li, X.H. Zheng, Z. Zeng. arXiv: 1011.3332.
- [14] H. Lee, J. Ihm, M.L. Cohen, S.G. Louie. *Nano Lett.*, **10** (3), 793 (2010).
- [15] Z.M. Ao, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B*, **81**, 205 406 (2010).
- [16] A. Ranjbar, M.S. Bahramy, M., Khazaei, H. Mizuski, Y. Kawazoe. *Phys. Rev. B*, **82**, 165 446 (2010).
- [17] M. Yang, A. Nurbawono, C. Zhang, Ariando, Y.P. Feng. arXiv: 1004.2111.
- [18] J.M. Garcia-Lastra. *Phys. Rev. B*, **82**, 235 418 (2010).
- [19] Z. Sljivancanin, M. Anderson, L. Hornekær, B. Hammer. arXiv: 1102.4984.
- [20] G. Fiori, S. Lebegue, A. Betti, P. Michetti, M. Klintonberg, O. Eriksson, G. Iannaccone. arXiv: 1004.0428.
- [21] В.М. Самсонов, В.В. Зубков, И.В. Гринев. *Письма ЖТФ*, **37** (7), 23 (2011).
- [22] С.Ю. Давыдов, Г.И. Сабирова. *ФТТ*, **53** (3), 608 (2011).
- [23] С.Ю. Давыдов, Г.И. Сабирова. *Письма ЖТФ*, **36** (24), 77 (2010).
- [24] С.Ю. Давыдов, Г.И. Сабирова. *Письма ЖТФ*, **37** (11), 51 (2011).
- [25] С.Ю. Давыдов. *ФММ*, **47** (3), 481 (1979).
- [26] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **42** (6), 1129 (2000).
- [27] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **20** (6), 1752 (1978).
- [28] S.Yu. Davydov. *Appl. Surf. Sci.*, **257** (1), 1506 (2010).

Редактор Л.В. Шаронова

The energy gap in the density of states of the single-layer graphene induced by absorption

S.Yu. Davydov

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract On the basis of the simple model it is shown that the monolayer of adatoms connected by the indirect exchange opens the energy gap in the density of states of the 2D substrate. Thorough analysis is given for the π and π^* bands and characteristics of the gap induced. Occupation numbers for adatoms and graphene atoms are also calculated. Numerical estimations are given for graphane.