18

# Релаксация монослоя эпитаксиального графена, вызванная электрон-фононным взаимодействием с подложкой

#### © С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия E-mail: Sergei Davydov@mail.ru

#### (Поступила в Редакцию 4 июня 2012 г.)

В рамках простых моделей эпитаксиального графена и электрон-фононного взаимодействия рассмотрены нормальные (по отношению к подложке) колебания однослойного графена как целого. Рассмотрение проводилось как для металлического, так и для полупроводникового субстрата. Приведенные оценки показывают, что возможность появления двух конкурирующих электронных состояний адатомов графена реализуется только для больших значений константы электрон-фононного взаимодействия. Показано также, что графеновый лист может релаксировать как "внутрь", так и "наружу".

Работа выполнена в рамках программ Президиума РАН "Квантовая физика конденсированных сред" и "Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов" и поддержана грантом РФФИ (проект № 12-02-00165 а).

### 1. Введение

Электронные и фононные свойства однослойного графена в настоящее время исследуются достаточно интенсивно [1-4]. Этого, однако, нельзя сказать об электрон-фононном взаимодействии, число публикаций для которого невелико (см. работы [5-8] и ссылки, приведенные в них; отметим, что здесь мы не рассматриваем эффекты, связанные с изменением электронного спектра графена под действием статической деформации). Что же касается эпитаксиального графена [9], то роль электрон-фононного взаимодействия в формировании его электронных характеристик, насколько известно автору, вообще не изучалась.<sup>1</sup> Здесь мы рассмотрим задачу о колебаниях монослоя эпитаксиального графена как целого, совершающихся по направлению нормали к подложке. В отличие от подавляющего большинства теоретических работ по графену, выполненных в формализме функционала плотности, здесь воспользуемся модельным подходом к описанию эпитаксиального графена, предложенным в работах [10-12].

Общая задача о влиянии бозонного поля на изолированную примесь в металле была рассмотрена в работе [13]. В [14] для описания электрон-фононного взаимодействия в случае адсорбции была предложена упрощенная модель, которая в дальнейшем была обобщена в работе [15]. В рамках этой модели удалось показать, что при достаточно сильном электрон-фононном взаимодействии колеблющемуся адатому могут соответствовать два состояния, различающиеся числами заполнения и длинами адсорбционной связи, между которыми возможны переходы, вызванные каким-либо внешним воздействием [16,17]. В настоящей работе мы обобщим результаты, полученные в [14,15], на монослой адатомов графена. При этом переход между двумя электронными состояниями можно трактовать как релаксацию листа графена относительно подложки.

#### 2. Общие соотношения

Начальная постановка задачи выглядит следующим образом. Рассматривается система, состоящая из одиночного атома с уровнем энергии E и подложки, спектр электронных состояний которой есть  $\varepsilon_k$ . Взаимодействие между атомом и подложкой описывается матричным элементом V. Электронной подсистеме такой структуры можно сопоставить гамильтониан вида

$$H_{\rm el} = \sum_k \varepsilon_k c_k^+ c_k + Ea^+ a + V \sum_k \left( c_k^+ a + a^+ c_k \right), \quad (1)$$

где  $c_k^+(c_k)$  — оператор рождения (уничтожения) электрона в состоянии  $|\mathbf{k}\rangle$ ,  $a^+(a)$  — операторы рождения (уничтожения) электрона в состоянии  $|a\rangle$  на уровне энергии *E*. Пусть теперь адатом, обладая массой *M*, колеблется с частотой  $\omega_0$  в направлении *z*, перпендикулярном поверхности подложки. При этом фононную подсистему можно описать классическим гамильтонианом

$$H_{\rm ph} = \frac{1}{2}M\dot{z}^2 + \frac{1}{2}M(z - z_0)^3, \qquad (2)$$

где  $z_0$  — положение равновесия адатома с числом заполнения  $n_0$  относительно поверхности подложки z = 0. Теперь учтем электрон-фононное взаимодействие

$$H_{\rm el-ph} = w(z - z_0)a^+a,$$
 (3)

где *w* — константа электрон-фононного взаимодействия [14]. Применяя к полному гамильтониану

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Нужно подчеркнуть, что ввиду интенсивного изучения графена делать подобного рода замечания становится все более рискованным.

системы  $H = H_{\rm el} + H_{\rm ph} + H_{\rm el-ph}$  теорему  $\partial \langle H \rangle / \partial z = \langle \partial H / \partial z \rangle$  [18], получим

$$\bar{z} - z_0 = -(w/M\omega_0^2)(\bar{n} - n_0),$$
 (4)

где  $\bar{n} = \langle a^+ a \rangle$  — число заполнения изолированного адатома, скобки означают усреднение по основному состоянию,  $\bar{z}$  — положение равновесия адатома, отвечающее числу заполнения  $\bar{n}$  [14]. Из (1) и (3) следует, что энергия квазиуровня  $\varepsilon$  с учетом электрон-фононного взаимодействия есть

$$\bar{\varepsilon} \equiv \varepsilon(\bar{n}) = E - \left( w^2 / M \omega_0^2 \right) \left( \bar{n} - n_0 \right).$$
(5)

Функцию Грина одиночного адатома  $g_a(\omega)$ , где  $\omega$  — энергетическая переменная, можно представить в виде

$$g = \left(\omega - \bar{\varepsilon} - \Lambda(\omega) + i\Gamma(\omega)\right)^{-1}.$$
 (6)

Здесь функция полуширины квазиуровня адатома

$$\Gamma(\omega) = \pi V^2 \rho_{\rm sub}(\omega), \tag{7}$$

где  $\rho_{\rm sub}(\omega)$  — плотность состояний (ПС) подложки;  $\Lambda(\omega)$  — функция сдвига квазиуровня адатома (гибридизационный сдвиг), связанная с функцией  $\Gamma(\omega)$  соотношением причинности вида

$$\Lambda(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega', \qquad (8)$$

где *Р* — символ главного значения. ПС изолированного адатома, соответствующая функции Грина (6), равна

$$\bar{\rho}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(\omega)}{\bar{\Omega}^2 + \Gamma^2(\omega)},\tag{9}$$

где  $\bar{\Omega} = \omega - \bar{\varepsilon} - \Lambda(\omega)$ . При нулевой температуре число заполнения  $\bar{n}$  определяется как

$$\bar{n} = \int_{-\infty}^{E_{\rm F}} \bar{\rho}(\omega) \, d\omega, \qquad (10)$$

где  $E_{\rm F}$  — уровень Ферми субстрата. Отметим, что выражение (10) является самосогласованным уравнением, так как  $\bar{\rho}(\omega)$  содержит  $\bar{n}$ .

Представим теперь набор адатомов, выстроенных в гексагональную решетку графена.<sup>2</sup> Взаимодействие адатомов будем рассматривать как прямой обмен электронами между ближайшими соседями *i* и *j*, для чего введем оператор

$$T_{ij} = t \left( a_i^+ a_j + a_j^+ a_i \right) \quad (i \neq j), \tag{11}$$

где *t* — интеграл (амплитуда) перехода. Для нахождения соответствующих функций Грина *G<sub>ij</sub>* воспользуемся

уравнением Дайсона

$$G_{ij} = g_{ij} + g_{ip}T_{pq}G_{qj}, \qquad (12)$$

где подразумевается суммирование по повторяющимся индексам и  $g_{ij}(\omega) = \delta_{ij} g(\omega), \ \delta_{ij}$  — символ Кронекера. Тогда, как показано в [10–12], легко найти функции Грина эпитаксиального графена  $G_g(\omega, \mathbf{k}) \equiv G_{ii}$ 

$$G_{g}(k_{x}, k_{y}, \omega)_{\pm}^{-1} = \tilde{\Omega} + i\Gamma(\omega) \mp tf(k_{x}, k_{y}),$$
  
$$f^{2}(k_{x}, k_{y}) = 3 + 2\cos(k_{x}a_{0}\sqrt{3})$$
  
$$+ 4\cos(k_{x}a_{0}\sqrt{3}/2)\cos(3k_{y}a_{0}/2), \quad (13)$$

где  $a_0$  — расстояние между ближайшими соседями,  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ . Отметим, что функция fописывает закон дисперсии для графена  $\varepsilon_{\pm}(k_x, k_y) =$  $= \tilde{\varepsilon} \pm t f(k_x, k_y)$ , где знак плюс относится к верхней зоне  $\pi^*$  ( $\tilde{\Omega} = \omega - \tilde{\varepsilon} - \Lambda(\omega) > 0$ ,  $\tilde{\varepsilon} \equiv \varepsilon(\tilde{n}) =$  $= E - (w^2/M\omega_0^2)(\tilde{n} - n_0)$ ), а минус — к нижней зоне  $\pi$ ( $\tilde{\Omega} < 0$ ) [1] (здесь и далее тильдами помечаются величины, относящиеся к решетке взаимодействующих адатомов). В соответствии с общим правилом ПС эпитаксиального графена  $\rho_g(\omega, \mathbf{k}) = -\pi^{-1} \operatorname{Im} G_g(\omega, \mathbf{k})$ , т.е.

$$\rho_{g\pm}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(\omega)}{\pi [\tilde{\Omega} \mp t f(\mathbf{k})]^2 + \Gamma^2(\omega)}.$$
 (14)

Для упрощения дальнейших расчетов воспользуемся, как и в [10–12], низкоэнергетической аппроксимацией спектра графена [1], положив

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{q}) = \tilde{\varepsilon} \pm \frac{3}{2} t a_0 |\mathbf{q}|.$$
 (15)

Здесь  $\mathbf{q} = \mathbf{K} - \mathbf{k}$ , где  $\mathbf{K} = a_0^{-1}(2\pi/3\sqrt{3}, 2\pi/3)$  — волновой вектор точки Дирака. Выражение (13) справедливо для малых значений  $|\mathbf{q}|$ . Мы, однако, воспользуемся им для интегрирования ПС (12) по зоне Бриллюэна, введя вектор обрезания  $q_B \ge |\mathbf{q}|$ . Получим [10–12]

$$\rho_{g\pm} = \frac{1}{\pi\xi^2} \Biggl[ \Gamma(\omega) \ln \frac{(\tilde{\Omega} \mp \xi)^2 + \Gamma^2(\omega)}{\tilde{\Omega}^2 + \Gamma^2(\omega)} + 2\tilde{\Omega} \left( \operatorname{arctg} \frac{\tilde{\Omega}}{\Gamma(\omega)} - \operatorname{arctg} \frac{\tilde{\Omega} \mp \xi}{\Gamma(\omega)} \right) \Biggr], \quad (16)$$

где  $\xi = 3ta_0q_B/2$ . Для дальнейшего анализа необходимо конкретизировать природу подложки.

# 3. Металлический субстрат

Воспользуемся для описания металлического субстрата простейшей моделью ПС, положив  $\rho_{sub}(\omega) = \rho_m(\omega) = \text{const.}$  Это так называемое приближение бесконечно широкой зоны Андерсона [19]. При этом  $\Lambda(\omega) \to 0$ , а  $\Gamma(\omega)$  обращается в константу  $\Gamma$ .

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Здесь мы рассматриваем "гладкую" подложку, на которой все адатомы углерода, образующие графен, находятся в одном и том же электронном состоянии.

Введем следующие безразмерные величины:  $\rho_{g\pm}^* = \rho_{g\pm}\Gamma$ ,  $y = \omega/\Gamma$ ,  $\eta = \varepsilon/\Gamma$ ,  $\tilde{\Omega}^* = \tilde{\Omega}/\Gamma = y - \eta$ ,  $\eta = E^* - \xi \tilde{n}$ ,  $E^* = E/\Gamma + \xi n_0$ ,  $\xi = w^2/M\omega_0^2\Gamma$ ,  $\xi^* = \xi/\Gamma$ . Тогда для металлической подложки вместо (14) получим

$$\rho_{g\pm}^{*}(\tilde{\Omega}^{*}) = \frac{1}{\pi(\xi^{*})^{2}} \left[ \ln \frac{(\tilde{\Omega}^{*} \mp \xi^{*})^{2} + 1}{(\tilde{\Omega}^{*})^{2} + 1} + 2\tilde{\Omega}^{*} \times \left( \operatorname{arctg}(\tilde{\Omega}^{*}) - \operatorname{arctg}(\tilde{\Omega}^{*} \mp \xi^{*}) \right) \right]. \quad (17)$$

Для нахождения числа заполнения  $p_z$ -орбитали адатома углерода  $\tilde{n}$  при нулевой температуре необходимо проинтегрировать соответствующую ПС по энергии от  $-\infty$  до уровня Ферми  $E_{\rm F}$ . Тогда для случая  $\tilde{\Omega}^* = E_{\rm F}^* - E^* + \xi \tilde{n} < 0$  ( $E_{\rm F}^* = E_{\rm F}/\Gamma$ ) получим

$$\tilde{n} = \int_{-\infty}^{\Omega_{\rm F}^*} \rho_{g-}^*(\tilde{\Omega}^*) d\tilde{\Omega}^*.$$
(18)

Если  $\tilde{\Omega}_{\rm F}^* > 0$ , то вместо (18) имеем

$$\tilde{n} = \int_{-\infty}^{0} \rho_{g-}^*(\tilde{\Omega}^*) d\tilde{\Omega}^* + \int_{0}^{\tilde{\Omega}_F^*} \rho_{g+}^*(\tilde{\Omega}^*) d\tilde{\Omega}^*.$$
(19)

Выражения (18) и (19) являются самосогласованными уравнениями, так как их правые части содержат  $\tilde{n}$ . Еще раз отметим, что мы рассматриваем нормальные (по отношению к подложке) колебания эпитаксиального графена как целого. Поэтому числа заполнения  $\tilde{n}$  одинаковы для всех адатомов, составляющих эпитаксиальный графен. Несмотря на то что интегралы (18) и (19) в случае ПС (17) берутся точно, будем рассматривать упрощенные оценки, выделив предельный случай сильной (по сравнению с взаимодействием соседних атомов углерода в графене) связи адатома с подложкой, соответствующий неравенствам  $\xi \ll \Gamma$ ,  $\xi^* \ll 1$  [12].

Найдем первую поправку к числу заполнения  $\bar{n}$ , вызванную взаимодействием адатомов. Как показано в работе [12], изменение ПС при переходе от одиночного адатома углерода к графену есть

$$\delta \rho_g^* \equiv \rho_{g\pm}^* - \bar{\rho}^* \approx \frac{4}{3} \, \xi^* \frac{|\bar{\Omega}^*|}{(\bar{\Omega}^*)^2 + 1} \, \bar{\rho}^*, \qquad (20)$$

где ПС изолированного адатома (9) в безразмерном виде равна

$$\bar{\rho}^* = \frac{1}{\pi} \frac{1}{(\bar{\Omega}^*)^2 + 1}.$$
(21)

Интегрируя (20), при  $\bar{\Omega}_{\rm F}^* < 0$  получим в соответствии с (18) выражение

$$\delta n \equiv \tilde{n} - \bar{n} = \frac{2}{3\pi} \xi^* \frac{1}{(\bar{\Omega}_F^*)^2 + 1}.$$
 (22)

При  $\bar{\Omega}_{\rm F}^* > 0$ , воспользовавшись (19), найдем

$$\delta n \equiv \tilde{n} - \bar{n} = \frac{2}{3\pi} \xi^* \frac{2(\bar{\Omega}_{\rm F}^*)^2 + 1}{(\bar{\Omega}_{\rm F}^*)^2 + 1}.$$
 (23)

Как следует из выражений (22) и (23),  $\delta n > 0$ . Это означает, что заряд адатомов  $\tilde{Z} = 1 - \tilde{n}$  убывает по сравнению с зарядом изолированного адатома. Другими словами, прямой обмен ведет к деполяризации адатомов. Отметим, что этот вывод справедлив для любого вида взаимодействия адатомов [20], в том числе и с учетом корреляции [21].

Обсудим подробнее возможные значения числа заполнения *n*. В соответствии с (5) и (21) получаем уравнение

$$\operatorname{ctg}(\pi \bar{n}) = (E^* - E^*_{\mathrm{F}}) - \xi \bar{n}.$$
 (24)

Легко видеть, что при  $\xi < \pi$  имеется только одно решение (24), при  $\xi > \pi$  таких решений три, однако только два из них (с максимальным и минимальным значениями  $\bar{n}$ ) отвечают устойчивым положениям равновесия адатома (см. [14]). Условием устойчивости является выполнение неравенства  $\partial \bar{n}/\partial E < 0$  (или  $\partial \bar{n}/\partial E^* < 0$ ). Игнорируя силы изображения [15], можно показать, что при  $\xi > \pi$  и  $|E^* - E_F^* - \xi/2| > B(\xi)$  ( $B(\xi) = (\xi/\pi) \arccos(\pi/\xi)^{1/2} - [(\xi - \pi) - 1]^{1/2}$ ) имеется одно устойчивое положение равновесия адатома [14]. При  $|E^* - E_F^* - \xi/2| < B(\xi)$  таких устойчивых положений два: если  $(E^* - E_F^*) > \xi/2$ , то минимуму энергии



**Рис. 1.** Зависимость чисел заполнения адсорбированных на металлической подложке изолированного атома  $\tilde{n}$  (I, 2) и атома, встроенного в решетку графена  $\tilde{n}$  (3, 4), от относительной энергии  $(E - E_F)/\Gamma$  для значений константы электронфононного взаимодействия  $\xi = 2$  (I, 3) и 4 (2, 4) в режиме сильной связи адатома с подложкой  $(\xi^* = \xi/\Gamma = 0.1)$ .

**Рис. 2.** Зависимость чисел заполнения изолированного атома  $\bar{n}$  (светлые символы) и атома, встроенного в решетку графена  $\tilde{n}$  (темные символы), от относительной энергии  $(E - E_F)/\Gamma$  для случая адсорбции на металлической подложке в режиме сильной связи. 1 — максимальные значения чисел заполнения, 2 — промежуточные значения чисел заполнения, 3 — минимальные значения чисел заполнения;  $\xi = 4, \xi^* = 0.1$ . Вертикальной линией обозначен переход от максимального заполнения к минимальному с ростом  $(E - E_F)/\Gamma$ .

системы соответствует минимальное значение  $\bar{n}$ , при  $(E^* - E_F^*) < \xi/2$  — максимальное значение  $\bar{n}$  [14]. Отметим, что все эти условия не связаны с величиной числа заполнения.

Результаты численных расчетов представлены на рис. 1. Уменьшение значений чисел заполнения л и  $\tilde{n}$  с ростом  $(E^* - E_{\rm F}^*)/\Gamma$  объясняется смещением квазиуровня адатома вверх относительно уровня Ферми системы, ведущим к его опустошению. Отметим, что при  $\xi = 4$  и  $(E^* - E_{\rm F}^*)/\Gamma = 2$  выполняется условие  $(E^* - E_{\rm F}^*)/\Gamma = \xi/2$ . При этом получаем два значения п, равные 0.25 и 0.75, отвечающие одинаковой энергии. При  $\xi = 4$  имеем  $B(4) \approx 0.09$ , так что область существования двух устойчивых решений узка:  $1.91 < (E^* - E_F^*)/\Gamma < 2.09$ . Соответствующая зависимость чисел заполнения, полученных из решения уравнения (24), от энергии  $(E^* - E_F^*)/\Gamma$  приведена на рис. 2. Вертикальная черта отмечает скачкообразный переход чисел заполнения одиночного адатома и адатома решетки от максимального значения к минимальному с ростом  $(E^* - E_F^*)/\Gamma$ . Отметим, что такое изменение чисел заполнения будет сопровождаться скачкообразным изменением длины адсорбционной связи. Действительно, из выражения (4) следует, что при переходе чисел заполнения от 0.75 к 0.25 графеновый лист подтягивается к поверхности металлической подложки, т. е. имеет место релаксация "внутрь".

# 4. Полупроводниковый субстрат

Для описания полупроводника воспользуемся простейшей моделью ПС, предложенной Халдейном и Андерсоном [22], согласно которой  $\rho_{sub}(\omega) = \rho_{sc}(\omega)$  равно  $\rho = \text{const}$  при  $|\omega| \ge E_g/2$  и нулю при  $|\omega| < E_g/2$ , где  $E_g$  — ширина запрещенной зоны (начало отсчета энергии совпадает с серединой запрещенной зоны). При этом  $\Gamma(\omega) \equiv \Gamma = \text{const}$  при  $|\omega| \ge E_g/2$  и  $\Gamma(\omega) \equiv 0$  при  $|\omega| < E_g/2$ . Тогда функция сдвига квазиуровня принимает вид  $\Lambda(\omega) = (\Gamma/\pi) \ln |(\omega - E_g/2)/(\omega + E_g/2)|$ . Для дальнейшего анализа удобно ввести безразмерные величины:  $x = 2\omega/E_g$ ,  $\eta = \eta^* - \xi \bar{n}$ ,  $\eta^* = 2E/E_g + \xi n_0$ ,  $\xi = 2w^2/M\omega_0^2 E_g$ ,  $\xi^* = 2\xi/E_g$ ,  $e_g = E_g/2\Gamma$ ,  $\lambda(x) = \pi^{-1} \ln |(x-1)/(x+1)|$ .

Как показано в работе [12], в режиме сильной связи графена с подложкой, когда  $\xi \ll \Gamma$  или  $e_g \xi^* \ll 1$ , изменение плотности состояний при переходе от одиночного адатома углерода к графену дается выражением (20), где, однако,  $\bar{\Omega}^* = 2\bar{\Omega}/E_g = e_g(x - \eta) - \lambda(x)$ . Рассматривая невырожденный полупроводник, получим для зонного вклада в изменение числа заполнения (см. подробнее [23])

$$\delta n \equiv \tilde{n} - \bar{n} = -\frac{4}{3\pi} \xi^* \int_{-\infty}^{-1} D(x) dx, \qquad (25)$$
$$D(x) = \frac{|\bar{\Omega}^*|}{[(\bar{\Omega}^*)^2 + 1]^2},$$

где

$$\bar{n} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{-1} \frac{dx}{(\bar{\Omega}^*)^2 + 1}.$$
 (26)

Рассмотрим для простоты случай  $|\eta| < 1$ , т.е. случай, характерный именно для полупроводниковой подложки, так как при  $|\eta| \gg 1$  мы возвращаемся к случаю металлического субстрата. Полагая  $e_g \gg 1$ , но по-прежнему оставаясь в режиме сильной связи  $e_g \xi^* \ll 1(\xi^* \ll e_g^{-1})$ , в области x < -1 можно положить  $\bar{\Omega}^* \approx e_g(x - \eta)$ . Строго говоря, отбрасывание слагаемого  $\lambda(x)$  в выражении для  $\bar{\Omega}^*$  некорректно, так как при  $x \to -1$  функция  $\lambda(x) \to \infty$ . При этом, однако, данная область чрезвычайно узка. Поэтому принятая здесь аппроксимация вносит лишь малую ошибку при вычислении интегралов (25) и (26). Окончательно получаем

$$\delta n \approx -\frac{2}{3\pi} \frac{\xi^*}{e_g^3 (1+\eta)^2}.$$
 (27)

$$\bar{n} \approx \frac{1}{\pi e_g^2} \frac{1}{1+\eta}.$$
(28)

Из уравнения (28) получаем

$$\bar{n}_{1,2} \approx \frac{1+\eta^*}{2\xi} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\xi}{\pi e_g^2 (1+\eta^*)^2}} \right).$$
(29)



Необходимым условием справедливости выражения (29) является выполнение неравенства  $\xi > (1 + \eta^*)/2$ . Таким образом, как и в случае металлической подложки, константа электрон-фононного взаимодействия должна быть достаточно велика (тот же вывод делается и в работах [14,15]). Также необходимо, чтобы второй член в подкоренном выражении был меньше единицы. Отметим, что  $\delta n < 0$ , так что при переходе от  $\bar{n}_1$  к  $\bar{n}_2$  графеновый монослой будет релаксировать "наружу".

До сих пор в этом разделе мы обсуждали вклады в числа заполнения, связанные с валентной зоной полупроводниковой подложки. Теперь рассмотрим вклад локального состояния  $-1 < x_l < 1$ , определяемого по уравнению  $\bar{\Omega}^* = 0$  [23]. Раскладывая  $\lambda(x)$  в ряд с учетом  $|\eta| < 1$ , получим

$$x_l \approx \eta / [1 + (2/\pi e_g)].$$
 (30)

Число заполнения локального состояния есть  $\bar{n}_l = |1 - d\Lambda/d\omega|_{\omega_l}^{-1}$  [23] или в безразмерных величинах  $\bar{n}_l = |1 - e_g^{-1}d\lambda/dx|_{x_l}^{-1}$  при условии, что локальный уровень  $\omega_l(x_l)$  лежит ниже уровня Ферми. В противном случае  $\bar{n}_l = 0$ . Полагая, что полупроводник является собственным и  $\eta < 0$ , получим

$$\bar{n}_l = \left(1 + \frac{2}{\pi e_g} \frac{1}{1 - x_l^2}\right)^{-1}.$$
 (31)

Отсюда при  $e_g \gg 1$  и  $\xi^* \ll e_g^{-1}$  находим  $\bar{n}_l \sim 1$ . Таким образом, в рассмотренном случае локальные уровни не участвуют в создании двух электронных состояний, которые могут привести к скачкообразной перестройке слоя эпитаксиального графена.

## 5. Заключение

Итак, в настоящей работе для частных случаев показано, что в принципе электрон-фононное взаимодействие может приводить к электронным и структурным перестройкам эпитаксиального графена. Более того, установлено, что лист графена может релаксировать как "внутрь", так и "наружу". При этом только на основании сделанных оценок нельзя утверждать, что первый случай всегда реализуется только для металлической подложки, а второй — только для полупроводниковой. Таким образом, в настоящей работе проблема лишь поставлена. Поскольку, к сожалению, пока информация (как экспериментальная, так и теоретическая) о таких эффектах отсутствует, проводить более тщательное рассмотрение вызванной электрон-фононным взаимодействием релаксации слоя графена мы считаем преждевременным.

#### Список литературы

 A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. Rev. Mod. Phys. 81, *1*, 109 (2009).

- [2] V.N. Kotov, B. Uchoa, V.M. Pereira, A.H. Castro Neto, F. Guinea. arXiv: 1012.3484.
- [3] D.R. Cooper, B. D'Anjou, N. Ghattamaneni, B. Harack, M. Hilke, A. North, N. Majlis, M. Massicotte, L. Vandsburger, E. Whiteway, V.Yu. arXiv: 1110.6557.
- [4] А.В. Елецкий, И.М. Искандерова, А.А. Книжник, Д.Н. Красиков. УФН 181, 3, 233 (2011).
- [5] K.M. Borysenko, J.T. Mullen, E.A. Barry, S. Paul, Y.G. Semenov, J.M. Zavada, M.B. Nardelli, K.W. Kim. arXiv: 0912.0562.
- [6] M. Bianchi, E.D.I. Rienks, R. Balog, L. Horneker, Ph. Hofmann, S. Lizzit, A. Baraldi. arXiv: 0910.4126.
- [7] К.В. Рейх, Е.Д. Эйдельман. ФТТ 53, 8, 1618 (2011).
- [8] S.M. Budalyan, F.M. Peeters. arXiv: 1201.2723.
- [9] J. Hass, W.A. de Heer, E.H. Conrad. J. Phys.: Cond. Matter 20, 323 202 (2008).
- [10] С.Ю. Давыдов. ФТП 45, 5, 629 (2011).
- [11] С.Ю. Давыдов. Письма в ЖТФ 37, 10, 64 (2011).
- [12] С.Ю. Давыдов. ФТП 47, 1, 2013.
- [13] F.D.M. Haldane. Phys. Rev. B 15, 1, 281 (1977).
- [14] В.Е. Кравцов, А.Г. Мальшуков. ЖЭТФ **75**, *2(8)*, 691 (1978).
- [15] С.Ю. Давыдов. ФТТ 22, 11, 3358 (1980).
- [16] В.Е. Кравцов, А.Г. Мальшуков. ЖЭТФ 77, 1(7), 691 (1979).
- [17] С.Ю. Давыдов, А.Д. Чесноков. ФТТ 24, 1, 305 (1982).
- [18] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1974). 752 с.
- [19] P.W. Anderson. Phys. Rev. 124, 1, 41 (1961).
- [20] С.Ю. Давыдов. Поверхность 8, 17 (1991).
- [21] С.Ю. Давыдов. ФТТ 21, 8, 2283 (1979).
- [22] F.D.M. Haldane, P.W. Anderson. Phys. Rev. B 13, 6, 2553 (1976).
- [23] С.Ю. Давыдов, С.В. Трошин. ФТТ 49, 8, 1508 (2007).