

Влияние размерного квантования на электронные спектры графеновых нанолент

И.А. Господарев, В.И. Гришаев, Е.В. Манжелей, В.А. Сиренко,
Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Науки, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: feodosiev@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 9 октября 2019 г., опубликована онлайн 27 декабря 2019 г.

Рассчитаны и проанализированы полные плотности электронных состояний в графеновых нанолентах с границами различной хиральности, а также локальные плотности электронных состояний отдельных атомов этих нанолент. Показано наличие острых резонансных пиков вблизи фермиевского уровня на полных плотностях электронных состояний графеновых нанополос с zig-zag границами, причем эти пики проявляются только на локальных плотностях атомов той подрешетки, которая непосредственно выходит на ближайшую границу (т.е. атомы которой претерпевают обрыв связей). В спектрах графеновых нанополос с границами хиральности armchair, состоящими из линий, число которых кратно трем или дает при делении на три остаток один, возникают полупроводниковые щели, ширина которых зависит только от ширины данной наноленты и одинакова для всех ее атомов. Для электронных спектров графеновых нанополос с границами хиральности armchair, состоящими из линий, число которых дает при делении на три остаток два, характерно металлическое поведение, однако в этом случае на локальных плотностях состояний атомов ряда линий таких нанополос имеются полупроводниковые щели.

Ключевые слова: графеновые наноленты (нанополосы), электронный спектр, размерное квантование, локальная плотность состояний.

Введение

Более 15 лет изучение различных физических свойств монослойного графена, сверхтонких углеродных нанопленок (биграфен и триграфен) [1,2], а также углеродных нанотрубок сохраняет высокую актуальность. За эти годы были предсказаны теоретически и обнаружены экспериментально многочисленные особенности электронных, магнитных и колебательных характеристик этих систем, которые представляются чрезвычайно интересными и важными как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Отметим, что уникальные свойства низкоразмерных материалов обусловлены квантовыми эффектами, возникающими при уменьшении хотя бы одного из трех размеров кристалла до достаточно малого размера, обычно в диапазоне от 1 до 100 нм. Естественно, при этом особую актуальность приобретает учет границ образца. Как известно, при наличии границы не только существенно меняются различные колебательные, электронные, магнитные и т.д. спектры элементарных возбуждений, но и возникают новые со-

стояния, локализованные у границы. Наиболее известными такими состояниями являются волны Рэля в колебательных [3] или таммовские уровни в электронных спектрах [4]. Среди многочисленных отличительных особенностей физических характеристик двумерных (2D) и тонких (квазидвумерных) кристаллов можно отметить, например, очень высокую плотность электронных состояний, рост энергии связи экситона и ее сильную зависимость от размеров запрещенной зоны, а также сильную зависимость от хиральности электронной зонной структуры. Детальный анализ электронных свойств графена приведен в обзоре [5].

Получение графена [6], новой двумерной системы на основе углерода, и его интенсивное исследование обнаружили уникальность электронных и механических свойств. Так, транспорт электронов в графене существенно отличается от транспорта обычных электронных двумерных систем из-за линейной дисперсии вблизи точки нейтральности заряда (точки Дирака) в структуре электронных зон [7]. Двумерная кристаллическая решетка графена, представляющая собой две треугольные

подрешетки, которые «вставлены» друг в друга таким образом, что вершины одной из них находятся в центрах тяжести другой, обуславливают специфику взаимного расположения электронных спектральных ветвей. Только вдоль одного из направлений в обратном пространстве (направления ГК, рис. 1(а)) спектральные ветви соприкасаются в точке К, а вдоль всех остальных направлений между ветвями существует щель конечной ширины. Это приводит к линейной (релятивистской) зависимости дисперсии электронов, когда квази-волновой вектор \mathbf{k} меняется вблизи К-точки первой зоны Бриллюэна (в графене $\varepsilon(\mathbf{K}) = \varepsilon_F$ — энергия Ферми), а электронная плотность состояний (DOS) вблизи фермиевского уровня имеет характерную V-образную (дираковскую) сингулярность (кривая 1 на рис. 1(б)).

В отсутствие сильных магнитных полей электронный спектр графена вполне удовлетворительно может быть описан в приближении сильной связи. Соответствующий гамильтониан имеет вид (см., например, [8,9])

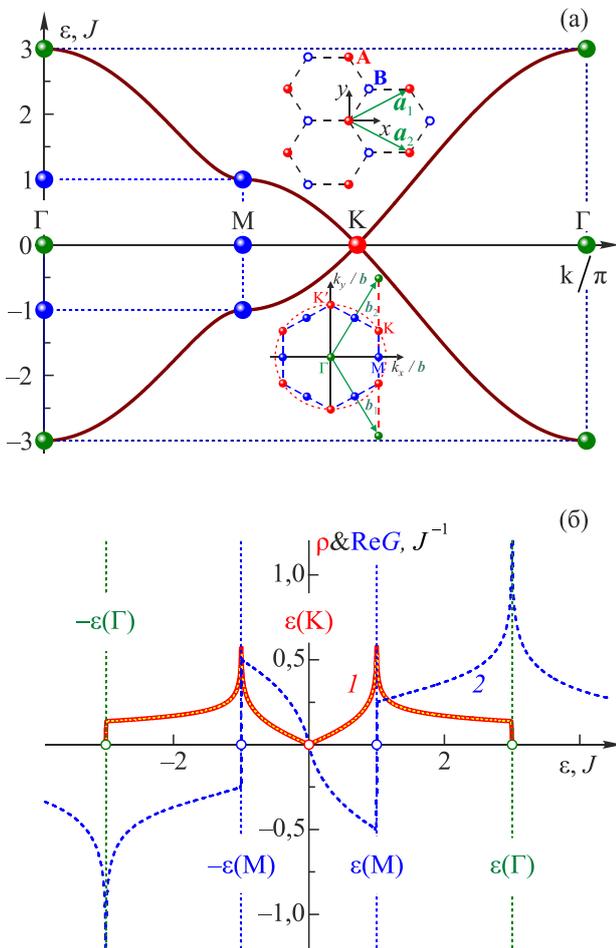


Рис. 1. (Онлайн в цвете) (а) Дисперсионные кривые графена вдоль высокосимметричных направлений. Элементарная ячейка графена и его первая зона Бриллюэна с положениями ее высокосимметричных точек. (б) DOS графена (1) и вещественная часть его функции Грина (2). Энергия отсчитывается от уровня Ферми $\varepsilon(\mathbf{K})$.

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| - \sum_{i,j} J_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (1)$$

при этом считаем, что электронные перескоки внутри слоя возможны только между ближайшими соседями $\forall J_{ji} = J \approx 2,8 \text{ эВ}$, а $\forall \varepsilon_i = \varepsilon_F = 3J$, индексы i и j нумеруют узлы.

Вытекающий из гамильтониана (1) закон дисперсии имеет вид

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \pm J \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2}{2}\right) \right]} \quad (2)$$

и для высокосимметричных направлений в \mathbf{k} -пространстве представлен на рис. 1(а) (энергия отсчитывается от уровня Ферми).

Поведение вблизи уровня Ферми ($\varepsilon(\mathbf{K}) = 0$) вещественной части функции Грина $\text{Re } G(\varepsilon)$ (кривая 2 на рис. 1(б)) свидетельствует о том, что под влиянием разного рода дефектов элементарные возбуждения с высокой вероятностью будут локализованы вблизи этого уровня [9].

Отметим, что в бездефектной решетке графена атомы различных подрешеток физически эквивалентны, т.е. их локальные функции Грина и, следовательно, локальные плотности состояний (LDOS) совпадают. Введение в одну из подрешеток графена дефектов, естественно, нарушает эту эквивалентность и приводит к существенному отличию электронных спектров атомов различных подрешеток. Например, в [10–12] показано качественное отличие в поведении LDOS атомов различных подрешеток, расположенных вблизи вакансии. В электронных спектрах атомов подрешетки, которая не содержит вакансию (т.е. той подрешетки, к которой принадлежат ее ближайшие соседи), возникают локализованные уровни с энергией вблизи фермиевской, в то время как LDOS атомов подрешетки, содержащей вакансию, при $\varepsilon = \varepsilon_F$ равна нулю (как и DOS бездефектного графена).

Графен является самым тонким, но механически самым прочным и жестким материалом. Кроме того, обуславливающая эту прочность сильная ковалентная связь между атомами графенового монослоя, приводит к огромным ($\sim 2500 \text{ К}$) значениям его дебаевской температуры. Это не только обуславливает «низкотемпературное» поведение колебательных термодинамических характеристик графена, графита и других углеродных структур на основе графена (например, нанотрубок) до температур, превышающих комнатные, но и может способствовать высоким температурам сверхпроводящего перехода в таких соединениях. Однако сверхпроводящий переход, как в графите, так и в углеродных нанотрубках и нанопленках пока еще не был достоверно об-

наружен. Причиной этого, видимо, является как малое число носителей с энергиями, близкими к фермиевской, так и малое число фононов, которые должны давать основной вклад в константу электрон-фононного взаимодействия. Поэтому для эффективной связи электронов с фононами желательно увеличить количество носителей зарядов и существенно обогатить ту часть фононного спектра, вклад которой в куперовское спаривание является определяющим из-за высоких значений константы электрон-фононного взаимодействия [13,14]. Действительно, в графите, содержащем интеркалированные слои металла, сверхпроводящий переход наблюдается, причем его температура растет не только с увеличением числа носителей, но и с ростом числа квазиизгибных фононов с частотами вблизи частоты, соответствующей К-точке первой зоны Бриллюэна [10,15,16]. В [11] показано, что аналогичное увеличение как числа носителей, так и соответствующих фононов наблюдается и в тонких графеновых нанопленках (биграфене и триграфене) с дефектом типа «ступенька на поверхности». Детальный анализ фононных спектров и колебательных характеристик графеновых наноструктур приведен в [17,18].

В [19] нами было показано, что формирование зигзагообразной границы у находящегося на некоторой диэлектрической подложке графенового монослоя приводит к существенному изменению его электронного спектра вблизи уровня Ферми, а также спектра его квазиизгибных фононов в частотном диапазоне вблизи значения частоты, которое соответствует точке К его первой зоны Бриллюэна. При этом в квазичастичных спектрах формируются волны, которые отщепились от зон квазинепрерывного спектра и распространяются вдоль границы, затухая при удалении от нее. Причем данные волны распространяются только по атомам подрешетки, к которой принадлежат те атомы, у которых при образовании границы происходит обрыв одной из связей. Отщепившиеся щелевые волны формируют на локальных плотностях состояний этих атомов острые пики, которые существенно обогащают как электронный спектр вблизи уровня Ферми, так и фононный спектр вблизи точки пересечения акустической и оптической ветвей, поляризованных перпендикулярно к плоскости графенового монослоя. На LDOS атомов другой подрешетки пики на уровне Ферми отсутствуют. Отметим, что на этих LDOS нет и характерных V-образных дираковских особенностей, то есть вблизи фермиевского уровня эффективная масса электронов отлична от нуля.

Поэтому исследования графеновых нанополос (нанолент), причем как зигзагообразного (zig-zag), так и кресельного (armchair) типа, а также структур, где оба эти типа границ имеют место, представляют немалый фундаментальный и прикладной интерес. К настоящему времени показано, что графеновая нанолента (ГНЛ) за

счет квантовых размерных эффектов, возникающих из-за ее нанометровой ширины, может иметь запрещенную зону, величина которой достаточна для использования ГНЛ в электронике. В [20–22] подробно исследованы электронная структура и магнитные свойства ГНЛ. Когда графен образует узкую ленту, а носители ограничены квазиодномерной системой, возможно открытие энергетической щели. ГНЛ могут быть успешно синтезированы с контролируемыми структурными и электронными свойствами [23]. Соотношение между шириной ленты, ориентацией и структурой ребер в графеновых нанолентах до сих пор остается невыясненным.

В настоящей работе рассчитаны и проанализированы как полные плотности электронных состояний в графеновых нанолентах с границами различной хиральности, так и локальные плотности электронных состояний отдельных атомов этих ГНЛ. Кроме того, рассмотрена структура типа «¼ плоскости», образуемая пересечением перпендикулярных друг к другу границ zig-zag и armchair хиральности.

2. Графеновые наноленты с зигзагообразными границами

Рассмотрим ГНЛ, образованную N параллельными друг другу атомными линиями, сформированными атомами одной подрешетки. Две ближайшие к границам образца соседние линии, находящиеся на расстоянии $a/2$ одна от другой и сформированные атомами разных подрешеток, образуют границу zig-zag хиральности (см. рис. 2). Будем нумеровать эти линии параметром n ($n \in [1, N]$). Только атомы линий $n = 1$ и $n = N$ имеют оборванные связи. Видно, что на границы zig-zag ГНЛ всегда выходят атомы разных подрешеток.

На рис. 3 приведены рассчитанные в рамках приближения сильной связи методом якобиевых матриц [24–27] энергетические зависимости электронных LDOS $\rho_n(\epsilon)$ атомов, расположенных на разных линиях n zig-zag ГНЛ с $N = 12$ и $N = 24$ (левая и правая части рисунка соответственно). Очевидно, что все атомы, лежащие на одной линии n , в данной структуре физически эквива-

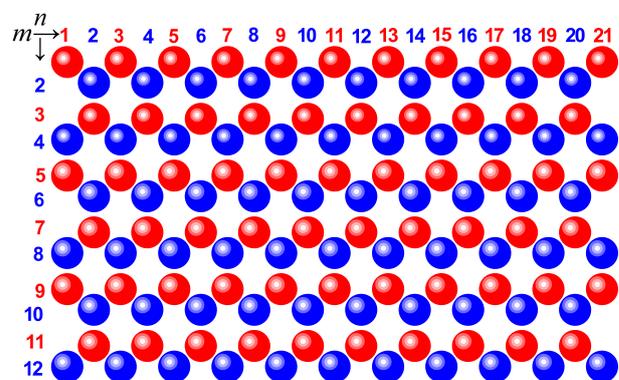


Рис. 2. Используемая в работе нумерация атомных цепочек.

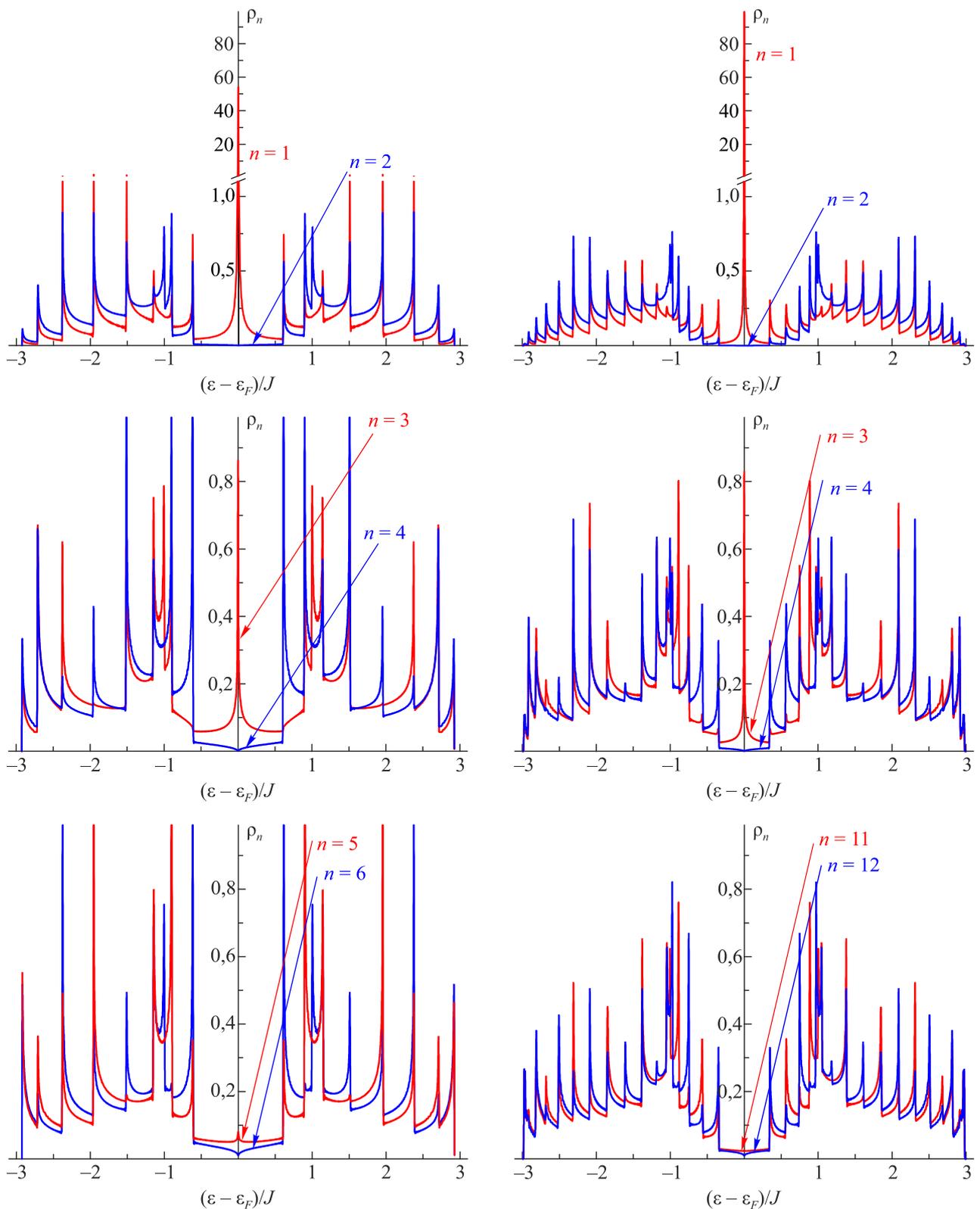


Рис. 3. (Онлайн в цвете) LDOS отдельных атомов zig-zag ГНЛ с $N = 12$ и $N = 24$ (левая и правая части рисунка соответственно).

лентны. На рис. 4 представлены энергетические зависимости DOS $g(\epsilon)$ этих ГНЛ.

Как показано в [19], в электронном спектре графеновой полуплоскости, образованной зигзагообразной границей, существует локализованный уровень с энер-

гией $\epsilon = \epsilon_F$. Причем этот уровень проявляется в виде острого пика на локальных плотностях состояний атомов только той подрешетки, атомы которой претерпевают обрыв связей при формировании границы. На LDOS атомов другой подрешетки такие пики отсутст-

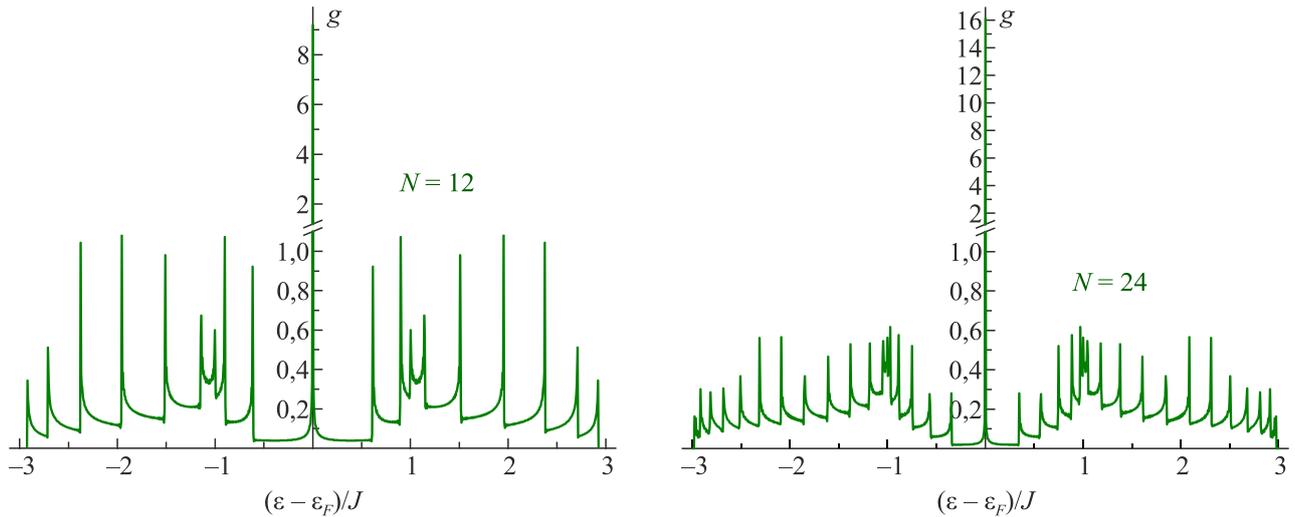


Рис. 4. DOS zig-zag ГНЛ с $N = 12$ и $N = 24$.

вуют и при $\varepsilon = \varepsilon_F$ эти LDOS, как и LDOS атомов идеального графена, обращаются в нуль. Таким образом, zig-zag граница разрушает физическую эквивалентность атомов разных подрешеток. Из симметрии задачи следует, что $\rho_n(\varepsilon) = \rho_{N+1-n}(\varepsilon)$ и принадлежащие разным подрешеткам атомы с номерами n и $N + 1 - n$ физически эквивалентны.

Как на функциях $\rho_n(\varepsilon)$ (рис. 3), так и на функциях $g(\varepsilon)$ (рис. 4) видны всплески, обусловленные размерным квантованием. На правых фрагментах ($N = 24$) их больше, чем на левых ($N = 12$).

При $\varepsilon = \varepsilon_F$ на LDOS атомов подрешеток, формирующих ближайшую границу (при $n < N/2$ — это атомы с нечетными n , а при $n > N/2$ — с четными), имеются острые пики (рис. 3). Эти пики формируют соответствующие пики и на полных DOS (рис. 4). Следует отметить, что высота данного пика при $N = 24$ (правый фрагмент) существенно выше, чем при $N = 12$ (левый фрагмент). С дальнейшим ростом N высота пика на функции $\rho_1(\varepsilon)$ будет возрастать (при $N \rightarrow \infty$, когда ГНЛ становится полуплоскостью, этот пик переходит в δ -функцию [16]).

Вместе с тем на функции $g(\varepsilon) = N^{-1} \sum_{n=1}^N \rho_n(\varepsilon)$ при

$N \rightarrow \infty$ высота пика, очевидно, должна спадать, но при небольших значениях N возможна немонокотонная зависимость высоты данного пика от ширины ГНЛ. При этом, как видно на том же рис. 3, металлические свойства у ГНЛ с $N = 12$ должны проявляться сильнее, чем у ГНЛ с $N = 24$. О проводящих свойствах ГНЛ можно судить по числу носителей на энергетическом интервале между двумя ближайшими к фермиевскому уровню всплесками, обусловленными размерным квантованием. Ширина такого интервала при $N = 12$ заметно больше, чем при $N = 24$, значительно выше у этой ленты и значение DOS на большей части этого интервала. Что касается самого острого пика, то он соответствует локализованному состоянию и его вклад в проводи-

мость несущественен. Поэтому данный результат не противоречит физическим выводам работы [22] и согласуется с результатами работы [28], где рассчитывались LDOS графеновых прямоугольников большого размера (в наших обозначениях $N = 30, M = 100$).

Как и в случае zig-zag полуплоскости, металлическое поведение электронного спектра в zig-zag ГНЛ характерно только для половины атомов — атомов той подрешетки, которая испытывает обрыв связей на границе. Как видно на рис. 3, на LDOS $\rho_2(\varepsilon)$ в энергетическом интервале между ближайшими к фермиевскому уровню всплесками, обусловленными размерным квантованием, имеется полупроводниковая щель. С ростом N ее ширина уменьшается. Эта щель характерна только для атомов линии $n = 2$ (или $n = N - 1$). Для остальных атомов такого типа (с четными n при $n < N/2$ и с нечетными при $n > N/2$) LDOS обращается в нуль только на самом фермиевском уровне. Объяснение этого факта полностью аналогично приведенному в [19].

3. Графеновые наноленты с кресельными границами

Рассмотрим ГНЛ, ограниченную границами armchair хиральности. Как видно на рис. 2, такая ГНЛ образуется M эквидистантными параллельными линиями, расстояние между которыми равно $a\sqrt{3}/2$. Каждая такая линия содержит атомы обеих подрешеток, которые, разумеется, являются физически эквивалентными. Будем нумеровать эти линии индексом m ($m \in [1, M]$). Как известно, в большинстве случаев у armchair ГНЛ в электронном спектре вблизи фермиевского уровня имеется полупроводниковая щель. Для существования такой щели в электронном спектре armchair ГНЛ необходимо, чтобы величина M была кратна трем или давала при делении на три остаток один. На левом фрагменте рис. 5 представлена DOS armchair ГНЛ с $M = 13$, а на левом фрагменте рис. 6 LDOS $\rho_m(\varepsilon)$ атомов различных линий m этой ГНЛ.

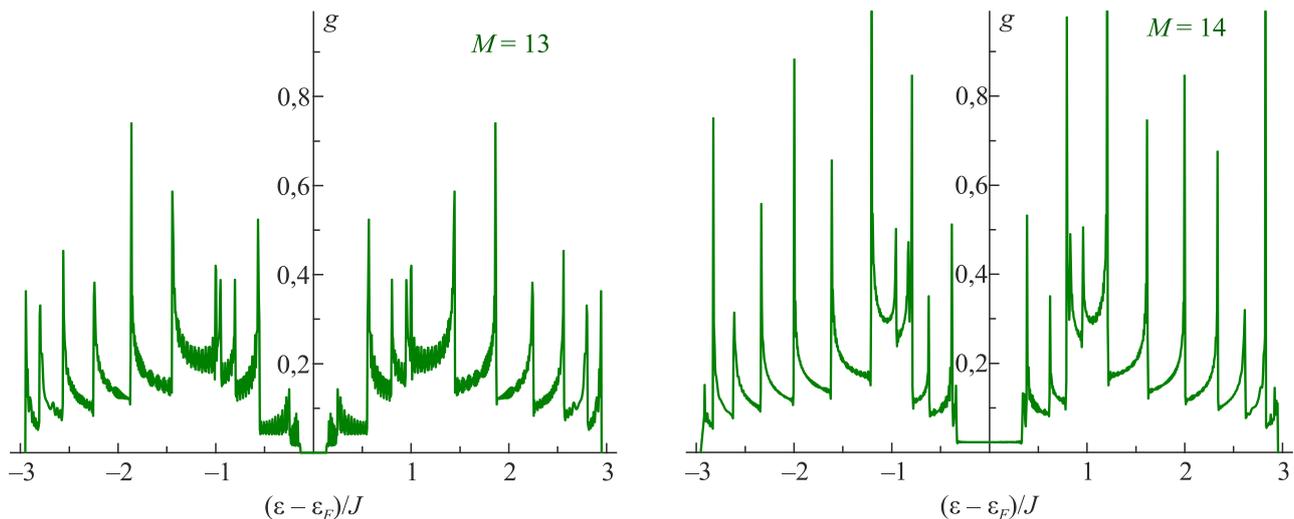


Рис. 5. Плотности состояний графеновых armchair полосок: полупроводниковой с $M=13$ и металлической с $M=14$.

На левой половине рис. 5, на которой представлены LDOS $\rho_m(\epsilon)$ для атомов различных линий m armchair ГНЛ с $M=13$, на каждой локальной плотности отчетливо видна энергетическая щель. Эта щель расположена между ближайшими к фермиевскому уровню всплесками, обусловленными размерным квантованием. Щель вблизи ϵ_F , следовательно, имеется и на полной плотности состояний. Поскольку ширина щели определяется размерным квантованием в ГНЛ, она зависит только от ширины ленты (параметра M) и при фиксированной ширине ленты от номера линии m практически не зависит. С ростом M щель будет сжиматься, и при $M \rightarrow \infty$ (это ограниченная линией armchair графеновая полуплоскость) исчезнет вовсе (см, например, [28]).

Если величина M при делении на три дает остаток два, то электронный спектр такой ГНЛ металлический (см., например, [29]). Данное условие выполняется, в частности, при $M=14$. DOS и LDOS данной armchair ГНЛ представлены на правых половинах рис. 5 и 6 соответственно. Полная плотность состояний при $\epsilon = \epsilon_F$ и вблизи фермиевского уровня существенно отлична от нуля, что обуславливает металлическую проводимость данной наноленты. Аналогичное поведение демонстрируют и большинство LDOS. Однако LDOS $\rho_4(\epsilon)$ и $\rho_6(\epsilon)$ в энергетическом интервале между двумя ближайшими к фермиевскому уровню всплесками, обусловленными размерным квантованием, имеют полупроводниковую щель. Поскольку $\rho_m(\epsilon) = \rho_{M+1-m}(\epsilon)$, то такая же щель присутствует на зависимостях $\rho_9(\epsilon)$ и $\rho_{11}(\epsilon)$. Остальные LDOS при $\epsilon = \epsilon_F$ отличны от нуля.

4. Область, ограниченная взаимно перпендикулярными зигзагообразной и кресельной границами

Поскольку формирование на графеновой плоскости границ zig-zag и armchair хиральности приводят к ка-

чественно различным изменениям электронного спектра, интересно рассмотреть поведение LDOS атомов, на которые данные границы влияют одновременно, то есть атомов, находящихся вблизи пересечения границ обоих типов.

На рис. 7 представлены LDOS таких атомов — функции $\rho_{n,m}(\epsilon)$. Их местоположение определяется из того же рисунка. На рисунке отчетливо видно, что, как и в случае графеновой полуплоскости, вблизи фермиевского уровня возникают острые резонансные пики на LDOS атомов подрешетки, которая испытывает разрыв связей при образовании zig-zag границы (при нашей нумерации — атомов с нечетными n). На LDOS атомов другой подрешетки (с четными n) такие пики не возникают. Более того, в спектрах таких атомов (особенно расположенных вблизи zig-zag границы) можно обнаружить полупроводниковую щель. Поскольку размер рассматриваемой здесь структуры неограничен, размерного квантования нет, и соответствующие всплески на плотностях состояний отсутствуют. Поэтому границы полупроводниковых щелей представляются более размытыми, чем в случае графеновых полос.

Особенности поведения LDOS вблизи фермиевского уровня определяются, как видно на рис. 7, только местоположением данного атома относительно zig-zag границы. Близость armchair границы к качественным изменениям поведения LDOS не приводит. Поэтому следует ожидать, что заселенность фермиевского уровня достаточно больших графеновых нанообразцов размером около 20 нм ($M, N \sim 100$) из-за наличия zig-zag границ будет выше, чем у безграничного графена.

Отметим, что, как было показано в [30], учет релаксации на armchair границе может привести к появлению в электронном спектре приграничных мод, отщепившихся в энергетическую щель, аналогично изученным в [19] приграничным модам на zig-zag границе.

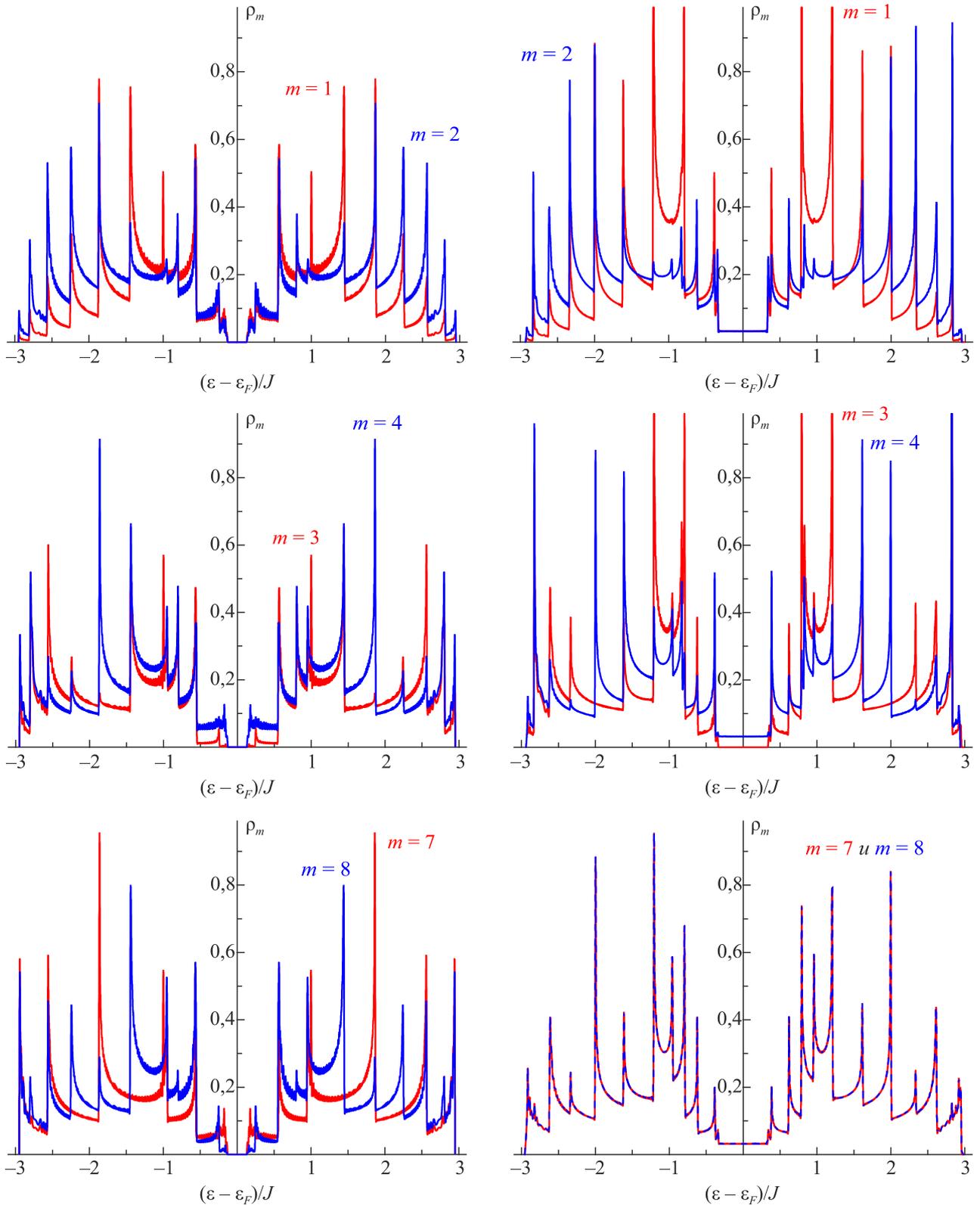


Рис. 6. (Онлайн в цвете) Локальные плотности состояний отдельных атомов графеновых armchair полосок: полупроводниковой с $M=13$ и металлической с $M=14$ (левая и правая части рисунка соответственно).

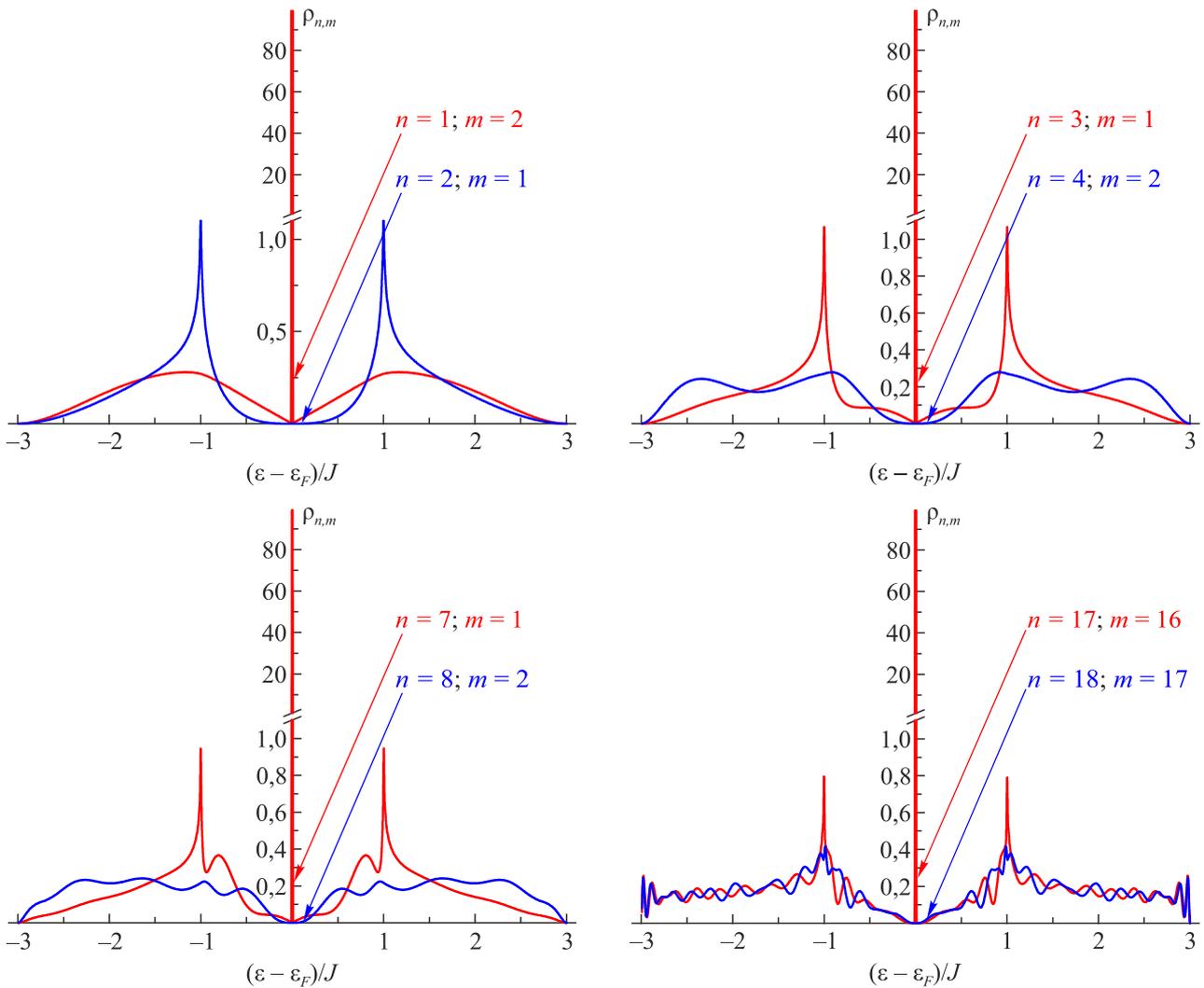


Рис. 7. (Онлайн в цвете) Локальные плотности состояний отдельных атомов $\frac{1}{4}$ графеновой плоскости, ограниченной перпендикулярными друг к другу линиями хиральности armchair и zig-zag.

Выводы

На основании проведенных в настоящей работе расчетов электронных плотностей состояний, как полных, так и локальных, соответствующих различным атомам, можно сделать следующие выводы.

1. На полных плотностях электронных состояний графеновых нанополос с zig-zag границами имеются острые резонансные пики вблизи фермиевского уровня. Эти пики проявляются только на локальных плотностях атомов той подрешетки, которая непосредственно выходит на ближайшую границу (т.е. атомы которой претерпевают обрыв связей).

2. Полупроводниковые щели возникают в спектрах графеновых нанополос с границами хиральности armchair, состоящими из линий, число которых кратно трем или дает при делении на три остаток один. Эти щели четко ограничиваются ближайшими к фермиевскому уровню всплесками на плотностях состояний, которые обусловлены размерным квантованием. Поэтому ши-

рина полупроводниковой щели зависит только от ширины наноленты и одинакова для всех ее атомов.

3. Металлическое поведение электронного спектра графеновых нанополос с границами хиральности armchair, состоящими из линий, число которых дает при делении на три остаток два, присуще спектрам не всех атомов этих нанополос. На локальных плотностях атомов ряда линий таких ГНЛ имеются полупроводниковые щели, ширина которых также определяется расстоянием между ближайшими к фермиевскому уровню всплесками, обусловленными размерным квантованием.

Авторам особенно приятно посвятить эту работу М.А. Стржемечному, с которым нас связывает давняя дружба и многолетнее сотрудничество, и пожелать Михаилу Алексеевичу крепкого здоровья, новых успехов и творческого долголетия.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке со стороны Национальной академии наук Украины (проект 0118U100347).

1. А.К. Гейм, *УФН* **181**, 1285 (2011).
2. К.С. Новоселов, *УФН* **181**, 1299 (2011).
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория упругости*, Москва, Наука (1965), 204 с.
4. И.Е. Тамм, *ЖЭТФ* **3**, 34 (1933).
5. Ю.В. Скрипник, В.М. Локтев, *ФНТ* **44**, 1417 (2018) [*Low Temp. Phys.* **44**, 1112 (2018)].
6. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
7. A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov and A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
8. Valeri N. Kotov, Bruno Uchoa, Vitor M. Pereira, F. Guinea, and A.H. Castro Neto, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1067 (2012).
9. S.P. Repetsky, I.G. Vyshyvana, S.P. Kruchinin, and S. Bellucci, *Sci. Rep.* **8**, 9123 (2018).
10. A. Feher, И.А. Господарев, В.И. Гришаев, К.В. Кравченко, Е.В. Манжелей, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **35**, 862 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 679 (2009)].
11. V.V. Eremenko, V.A. Sirenko, I.A. Gospodarev, E.S. Syrkin, S.B. Feodosyev, I.S. Bondar, S.S. Saxena, A. Feher, and K.A. Minakova, *Fiz. Nizk. Temp.* **42**, 134 (2016) [*Low Temp. Phys.* **42**, 99 (2016)].
12. V.V. Eremenko, V.A. Sirenko, I.A. Gospodarev, E.S. Syrkin, S.B. Feodosyev, I.S. Bondar, and K.A. Minakova, *J. Sci. Adv. Mater. Devices* **1**, 167 (2016).
13. Е.Г. Максимов, *УФН* **170**, 1033 (2000); *там же* **178**, 175 (2008).
14. Г.М. Элиашберг, *ЖЭТФ* **38**, 966 (1962); *там же* **39**, 1437 (1960).
15. T.E. Weller, M. Ellerby, S.S. Saxena, R.P. Smith, and N.T. Skipper, *Nat. Phys.* **1**, 39 (2005).
16. M.P.M. Dean, C.A. Howard, S.S. Saxena, and M. Ellerby, *Phys. Rev. B* **81**, 045405 (2010).
17. A. Feher, E. Syrkin, S. Feodosyev, I. Gospodarev, E. Manzhelii, A. Kotlar, and K. Kravchenko, *Electronic and Vibrational Properties of Adsorbed and Embedded Graphene and Bigrphene with Defects*, in: *New Progress on Graphene Research*, Jian Ru Gong (ed.), InTech, Croatia (2013).
18. E.S. Syrkin, V.A. Sirenko, S.B. Feodosyev, I.A. Gospodarev, and K.A. Minakova, *Peculiarities of Quasi-Particle Spectra in Graphene Nanostructures*, in: *Handbook of Graphene*, Tobias Stauer (ed.), Scrivener Publishing LLC (2019), Vol. 2, p. 315.
19. В.В. Еременко, В.А. Сиренко, И.А. Господарев, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, И.С. Бондарь, А. Феер, К.А. Минакова, *ФНТ* **43**, 1657 (2017) [*Low Temp. Phys.* **43**, 1323 (2017)].
20. K. Wakabayashi, M. Fujita, H. Ajiki, and M. Sigrist, *Phys. Rev. B* **59**, 8271 (1999).
21. M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1920 (1996).
22. K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
23. M. Yagmurcukardes, F.M. Peeters, R.T. Senger, and H. Sahin, *Appl. Phys. Rev.* **3**, 041302 (2016).
24. В.И. Пересада, Е.С. Сыркин, *ФНТ* **3**, 229 (1977) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **3**, 110 (1977)].
25. A.A. Maradudin, *Surface Waves*, in: *Modern Problems of Surface Physics*, ISCMP (1980), p. 11.
26. В.И. Пересада, В.Н. Афанасьев, В.С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **1**, 227 (1975)].
27. R. Haydock, in: *Solid State Phys.* **35**, H. Ehrenreich et al. (ed.), Academic Press, New York (1980), p. 129.
28. L. Malysheva, *Phys. Status Solidi B* **251**, 1028 (2014).
29. П.Б. Сорокин, Л.А. Чернозатонский, *УФН* **183**, 113 (2013).
30. P.A. Maksimov, A.V. Rozhkov, and A.O. Sboychakov, *Phys. Rev. B* **88**, 245421 (2013).

Вплив розмірного квантування на електронні спектри графенових нанострічок

І.О. Господарьов, В.І. Гришаєв, О.В. Манжелей,
В.А. Сиренко, Е.С. Сиркін, С.Б. Феодосьєв

Розраховано та проаналізовано повні густини електронних станів в графенових нанострічках з границями різної хіральності, а також локальні густини електронних станів окремих атомів цих нанострічок. Показано наявність гострих резонансних піків поблизу фермієвського рівня на повних густинах електронних станів графенових наносмуг з zig-zag границями, до того ж ці піки проявляються тільки на локальних густинах атомів тієї підґратки, яка безпосередньо виходить на найближчу границю (тобто, атоми якої відчувають обрив зв'язків). В спектрах графенових наносмуг з границями хіральності armchair, що містять число ліній кратне трьом, або дає при діленні на три остачу один, виникають напівпровідникові щілини, ширина яких залежить тільки від ширини даної нанострічки й однакова для всіх її атомів. Для електронних спектрів графенових наносмуг з границями хіральності armchair, що містять число ліній, яке при діленні на три дає остачу два, характерна металева поведінка, але в цьому випадку на локальних густинах станів атомів ряду ліній таких наносмуг спостерігаються напівпровідникові щілини.

Ключові слова: графенові нанострічки (наносмути), електронний спектр, розмірне квантування, локальна густина станів.

Effect of size quantization upon electron spectra of graphene nanoribbons

I.A. Gospodarev, V.I. Grishaev, E.V. Manzhelii,
V.A. Sirenko, E.S. Syrkin, and S.B. Feodosyev

The total electron state densities are calculated and analyzed for graphene nanoribbon boundaries of various chirality, as well as the local density of states for individual atoms, pertained to such nanoribbons. The presence of sharp resonances near Fermi

level in total densities of electron states is demonstrated for the graphene nanostrips with zig-zag boundaries. Noticeably, these resonances emerge only at local densities of atoms pertained to the sublattice directly outward the nearest boundary, i.e., with dangling bonds on the constituent atoms. The semiconducting gaps appear in the spectra of graphene nanobands, which contain the boundaries of armchair chirality with a number of constituent atomic lines either multiple of three or yielding residual one when divided by three. Gap-width depends on the band width only and

is the same for all the atoms in the band. Electron spectra of nanostrips with the boundaries of armchair chirality evidence a metallic behavior, if the residual of the number of atomic lines, divided by three, is equal two, though semiconducting gaps on local densities are still manifested for a number of the atoms.

Keywords: graphene nanoribbons (nanostrips), electron spectrum, dimensional quantization, local density of states.