

## Квантовая емкость эпитаксиального графена

З.З. Алисултанов<sup>1,2,3</sup>, Д.М. Рустамова<sup>3</sup>, А.М. Хабибулаева<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. И.М. Амирханова ДНЦ РАН  
ул. М. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Республика Дагестан, Россия  
E-mail: zaur0102@gmail.com

<sup>2</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, ул. Вавилова, 38, г. Москва, 119991, Россия

<sup>3</sup>Дагестанский государственный университет, ул. Гаджиева, 43А, г. Махачкала, Република Дагестан, Россия

Статья поступила в редакцию 19 марта 2015 г., после переработки 27 июля 2015 г.,  
опубликована онлайн 25 сентября 2015 г.

В рамках простой модели исследована квантовая емкость эпитаксиального графена. Емкость эпитаксиального графена скачкообразно меняется на границе между областями разрешенных и запрещенных энергий. Рассмотрен случай размерно-квантованной подложки. Получены энергетические, температурные и концентрационные зависимости. Некоторые результаты находятся в удовлетворительном согласии с имеющимися экспериментальными результатами. Обсуждается перенормировка скорости Ферми электронов графена за счет подложки.

В рамках простої моделі досліджено квантову електроємність епітаксійного графену. Електроємність епітаксійного графену стрибкоподібно змінюється на межі між областями дозволених і заборонених енергій. Розглянуто випадок розмірно-квантованої підкладки. Отримано енергетичні, температурні та концентраційні залежності. Деякі результати знаходяться в задовільній згоді з наявними експериментальними результатами. Обговорюється перенормування швидкості Фермі електронів графену за рахунок підкладки.

PACS: **68.43.-h** Химическая/физическая адсорбция: адсорбаты на поверхностях;  
72.80.Vr Электронный транспорт в графенах;  
73.20.At Поверхностные состояния, зонная структура, электронная плотность состояний.

Ключевые слова: эпитаксиальный графен, квантовая емкость, плотность состояний, функции Грина.

### 1. Введение

Исследование графена в настоящее время — актуальная проблема экспериментальной и теоретической физики конденсированного состояния [1]. Двумерность кристаллической решетки графена и дираковский спектр электронов приводят к уникальным электронным и магнитным свойствам [2]. Необычные проявления в графене таких явлений, как квантовый эффект Холла [3], оптическое поглощение [4], магнитооптические эффекты [5], клейновское туннелирование [6] и т.д. делают этот материал перспективным для современной наноэлектроники.

Плотность состояний (ПС) электронов в недопированном графене исчезает в точке Дирака, что связано непосредственно с линейностью спектра и отсутствием запрещенной щели. ПС многослойного графена также

ведет себя специальным образом. Один из экспериментальных методов изучения ПС основан на измерениях емкости, а также ее осцилляций в квантующем магнитном поле [7,8]. В [9] были исследованы квантовые осцилляции емкости многослойного графена. В работах [10,11] исследовалось влияние кулоновского взаимодействия на квантовую емкость графена.

В настоящей работе в рамках простой модели рассмотрим квантовую емкость эпитаксиального графена. Исследование эпитаксиального графена (ЭГ) занимает одно из центральных мест в физике графена [12–18]. В последнее время широко развивается модельный подход для исследования ЭГ. Эту модель впервые предложил С.Ю. Давыдов [19,20]. Она подробно описана и обсуждалась в [19,20] (см. также [21–23]). Ниже мы кратко остановимся на описании этой модели.

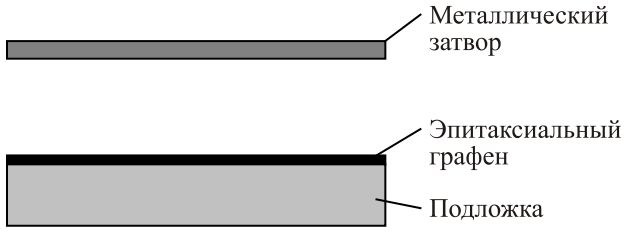


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемой системы. ЭГ на подложке: металлической, полупроводниковой или размерно-квантованной металлической пленке. С помощью напряжения на затворе концентрацией носителей в ЭГ можно управлять.

Здесь отметим лишь, что в рамках этой простой модели удалось исследовать целый ряд свойств ЭГ. Так, был подробно исследован электронный транспорт в ЭГ, сформированном на металлической и полупроводниковой подложках [24,25]. В работах [26–29] были предсказаны скачки проводимости и пики термоэдс в ЭГ, сформированном на размерно-квантованных металлической и полупроводниковой подложках. В [30] был исследован вопрос о перенормировке скорости Ферми в ЭГ, а в [31] — влияние адсорбции на статическую проводимость ЭГ. Модель, предложенная в [19,20], также была использована при исследовании проводимости и термоэдс гибридной системы из монослоя графена и перестраиваемого бислоя графена [32,33].

Рассматриваемая нами физическая система показана на рис. 1. Полная электроемкость такой системы состоит из двух частей:

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_c} + \frac{1}{C_q},$$

где  $C_c = \kappa S/d$  — классическая (геометрическая) электроемкость,  $C_q = e^2 \partial n / \partial \mu$  — квантовая электроемкость. Исследованию последней величины для ЭГ и посвящена настоящая работа.

## 2. Модель эпитаксиального графена

В модели [19,20] ЭГ представлена в виде адсорбированных на подложке атомов углерода, выстроенных в структуру графена. Далее использован подход, основанный на модельном гамильтониане Андерсона [34]. Одночастичная функция Грина электронов ЭГ в непосредственной окрестности точки Дирака записывается в виде [24,25]

$$G_k^{-1}(\varepsilon) = G_0^{-1}(\varepsilon) - v_b v_F \hbar |k|, \quad (1)$$

где  $v_b$  — зонный индекс:  $v_b = +1$  соответствует зоне проводимости, а  $v_b = -1$  — валентной зоне,  $v_F$  — скорость Ферми электронов графена ( для свободного

графена  $v_F \approx 1 \cdot 10^8$  см/с),  $k$  — двумерный волновой вектор, отсчитанный от точки Дирака.  $G_0(\varepsilon)$  есть функция Грина изолированного атома углерода, которая определена с помощью подхода, основанного на модельном гамильтониане Андерсона [34]

$$G_0 = (\varepsilon - \varepsilon_a - \Lambda(\varepsilon) - i\Gamma_c(\varepsilon))^{-1}, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_a$  — энергия квазиуровня атома,  $\Gamma_c(\varepsilon) = \pi |V|^2 \rho(\varepsilon)$  — полуширина квазиуровня атома углерода,  $\Lambda(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_c(\varepsilon') d\varepsilon' / (\varepsilon - \varepsilon')$  — функция

сдвига квазиуровня,  $\rho(\varepsilon)$  — плотность состояний подложки, знак «P» означает интегрирование в смысле главного значения. Для качественного анализа используем простейшие выражения для функций  $\Lambda(\varepsilon)$  и  $\Gamma_c(\varepsilon)$ , предполагая, что подложка двумерная. Имеем [24,25]

$$\Gamma_c^m(\varepsilon) = |V|^2 \frac{m^* S_1}{\hbar^2}, \quad \Lambda^m(\varepsilon) = -|V|^2 \frac{m^* S_1}{\pi \hbar^2} \ln \left| \frac{\varepsilon - W_m}{\varepsilon + W_m} \right|, \quad (3)$$

$$\Gamma_c^s(\varepsilon) = |V|^2 \frac{m^* S_1}{\hbar^2} \Theta(|\varepsilon| - \Delta), \quad \Lambda^s(\varepsilon) = |V|^2 \frac{m^* S_1}{\pi \hbar^2} \ln \left| \frac{\Delta - \varepsilon}{\Delta + \varepsilon} \right|, \quad (4)$$

где  $S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$  — площадь пленки, соответствующая одному атому графена,  $m^*$  — эффективная масса электрона в подложке,  $W_m$  — полуширина зоны разрешенных энергий металла. Кроме того, рассмотрим случай, когда подложкой является размерно-квантованная металлическая пленка, для которой имеем [28,29]

$$\Gamma_c^{QF}(\varepsilon) = \pi |V|^2 \rho_0 \sum_n \Theta(|\varepsilon| - \varepsilon_n), \quad (5)$$

$$\Lambda^{QF}(\varepsilon) = |V|^2 \rho_0 \sum_n \ln \left| \frac{\varepsilon_n - \varepsilon}{\varepsilon_n + \varepsilon} \right|,$$

где  $\rho_0 = m S_1 L_1 / \pi \hbar^2 L$ ,  $L$  — толщина пленки,  $L_1$  — расстояние в направлении, перпендикулярном поверхности пленки (OZ), на которое распространяется взаимодействие атома графена с подложкой (в первом приближении это есть протяженность  $2p_z$  орбитали, см. [28,29]), индексы  $m$  и  $s$  в формулах (3), (4) указывают на то, что выражения относятся к металлической и полупроводниковой подложкам соответственно, а индекс «QF» означает квантовая пленка (quantum film). Далее будем использовать для пленочного потенциала приближение бесконечно высокой потенциальной ямы, т.е.  $\varepsilon_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 2m_{\perp} L^2$ , где  $m_{\perp}$  — эффективная масса электрона в направлении OZ. Также будем предполагать, что  $L_1 \approx 2\text{Å}$ . Как показано в [28,29], случай ЭГ на раз-

мерно-квантованной пленке представляет особый интерес ввиду того, что в такой системе могут наблюдаться скачки проводимости и пики термоэдс. Причем энергетическое расположение этих скачков и пиков зависит от толщины пленки, так как они определяются квантово-размерными эффектами.

Из (1) легко получить выражение для плотности состояний ЭГ

$$\begin{aligned} \rho_{EG}(\varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{2N} \sum_{k, \nu_b = \pm 1} G_k(\varepsilon) = \\ &= \frac{\Gamma_c S}{2\pi^2 \nu_F^2 \hbar^2} \ln \frac{(\xi^2 + \Gamma_c^2 - \bar{\varepsilon}^2)^2 + 4\Gamma_c^2 \bar{\varepsilon}^2}{(\Gamma_c^2 + \bar{\varepsilon}^2)^2} + \\ &+ \frac{S \bar{\varepsilon}}{\pi^2 \nu_F^2 \hbar^2} \left( \operatorname{arctg} \frac{\xi^2 + \Gamma_c^2 - \bar{\varepsilon}^2}{2\Gamma_c \bar{\varepsilon}} - \operatorname{arctg} \frac{\Gamma_c^2 - \bar{\varepsilon}^2}{2\Gamma_c \bar{\varepsilon}} \right), \end{aligned} \quad (6)$$

где  $\bar{\varepsilon} = \varepsilon - \Lambda(\varepsilon)$ ,  $\xi$  — энергетический параметр порядка ширины зоны эпитаксиального графена ( $\xi \sim t$ , где  $t$  — матричный элемент перехода электрона на ближайшие соседние атомы; для изолированного графена  $t \approx 2,8$  эВ). Коэффициент  $1/2$  перед суммированием по  $k$  связан с увеличением в два раза количества полюсов ФГ, что есть следствие суммирования по зонному индексу. Отметим, что здесь и дальше под ПС подразумевается плотность состояний, приходящаяся на один атом углерода. В связи с этим  $S = S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$ , где  $a \approx 1,42$  Å — расстояние между ближайшими атомами углерода в графене. Величину  $\xi$  определим из естественного условия, что один атом недопированного графена содержит один электрон в  $2p_{\xi}$ -состоянии, т.е.  $\int_{-\xi}^{\xi} \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon = 1$ , где  $\rho_0(\varepsilon) = S_1 |\varepsilon| / \pi \nu_F^2 \hbar^2$  — ПС изолированного графена,  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми, равная нулю для недопированного графена. Из этого условия получаем

$$\xi = \sqrt{\pi\sqrt{3}t}. \quad (7)$$

Квантовая электроемкость определяется с помощью формулы

$$C = -e^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \rho(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (8)$$

где  $f(\varepsilon) = \{ \exp [(\varepsilon - \mu) / k_B T] + 1 \}^{-1}$  есть функция распределения Ферми–Дирака,  $\mu$  — химический потенциал. Действительно, по определению

$$C = \frac{dq}{d\varphi} = e \frac{dq}{d\mu} = e^2 \frac{d}{d\mu} \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon - \mu) \rho(\varepsilon) d\varepsilon,$$

откуда, с учетом того, что  $\partial f / \partial \mu = -\partial f / \partial \varepsilon$ , получаем формулу (8).

Таким образом, с помощью (3)–(6) можно рассчитать электроемкость ЭГ. В предельном случае низких температур, когда  $\mu \gg k_B T$ , интеграл в (6) можно рассчитать аналитически. Действительно, в этом случае по-

дынтегральное выражение в (6) существенно отличается от нуля лишь в окрестности точки  $\varepsilon = \mu$ . Следовательно, можно использовать разложение  $\rho(\varepsilon) \approx \rho(\mu) + \rho'(\mu)(\varepsilon - \mu)$ . Это дает  $C = e^2 \rho(\mu)$ , поэтому при низких температурах квантовая электроемкость определяется плотностью состояний ЭГ.

### 3. Результаты и обсуждение

На рис. 2–4 показаны зависимости электроемкости ЭГ от химического потенциала при различных значениях потенциала гибридизации для случаев металлической (рис. 2), полупроводниковой (рис. 3) и размерно-квантованной (рис. 4) подложки. На рисунках видно, что в области разрешенных энергий электроемкость ЭГ увеличивается с ростом химического потенциала. Это связано с тем, что в указанной области энергий подложка является дополнительным «резервуаром» для накопления заряда. Вблизи краев запрещенной щели (для полупроводниковой подложки) и вблизи уровней размерного квантования (в размерно-квантованной подложке) имеются скачки электроемкости. Эти скачки связаны с тем, что вблизи этих точек имеются скачки плотности состояний. Здесь уместно провести аналогию со сверхпроводящими туннельными переходами, в которых имеются особенности в плотности состояний вблизи краев псевдощели в электронном спектре.

Заметим, что до сих пор мы считали, что середина запрещенной щели  $\varepsilon_g$  совпадает с точкой Дирака  $\tilde{\varepsilon}_a$ , от которой отсчитывалась энергия. Такая модель является достаточно простой, и, в принципе, она подходит для качественных исследований. Однако есть некоторые особенности, связанные с несовпадением точки Дирака и середины запрещенной щели [25]. Поэтому приведем здесь результаты расчета электроемкости ЭГ при различных значениях  $\Delta\varepsilon = \varepsilon_g - \tilde{\varepsilon}_a$ . В общем случае

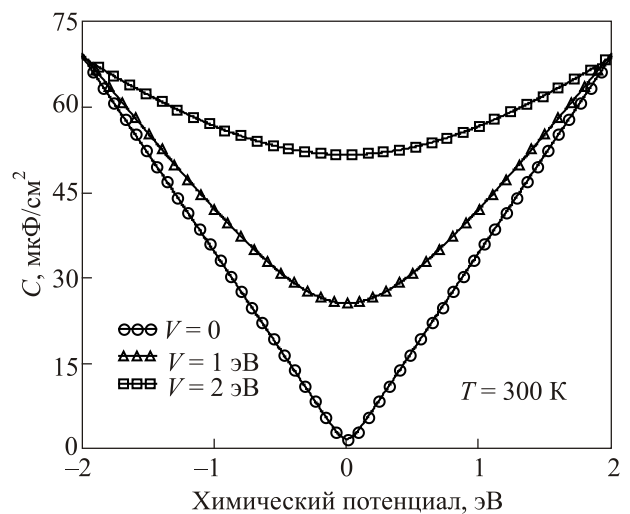


Рис. 2. Зависимость квантовой электроемкости ЭГ на металлической подложке от химического потенциала при различных значениях потенциала гибридизации.

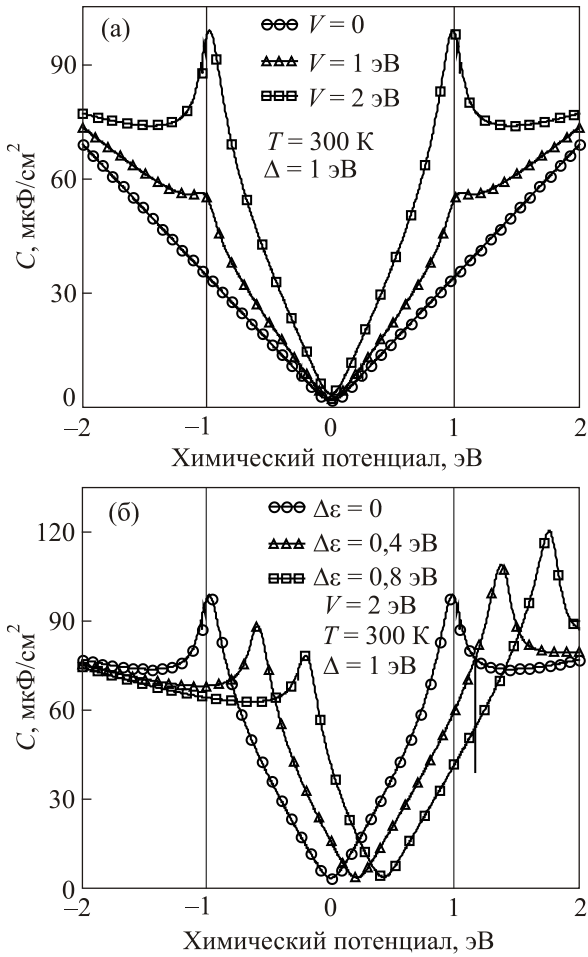


Рис. 3. Зависимость квантовой емкости ЭГ на полупроводниковой подложке от химического потенциала при различных значениях потенциала гибридизации и нулевом значении  $\Delta\epsilon$  (а) и при различных значениях величины  $\Delta\epsilon$ , но фиксированном потенциале гибридизации (б).

функция ширины квазиуровня атома углерода ЭГ определяется следующей формулой [25]:

$$\Gamma_c = |V|^2 \frac{mS_1}{\hbar^2} (\Theta(\Delta\epsilon - \Delta - \omega) + \Theta(\omega - \Delta\epsilon - \Delta)). \quad (9)$$

Для политипа 6H-SiC можно сделать следующие оценки. Полагая сродство к электрону  $\chi_{6H-SiC} = 3,45$  эВ и  $2\Delta = 3$  эВ, получаем, что центр запрещенной зоны в подложке лежит при энергии  $\epsilon_g = \chi + \Delta = -4,95$  эВ относительно вакуума. Пусть точка Дирака ЭГ, находящегося на грани 6H-SiC(0001), лежит на 0,4 эВ ниже уровня Ферми системы [35]. Так как при этом работа выхода  $A$  равна 3,75 эВ [35], получаем, что  $\Delta\epsilon = -0,8$  эВ, т.е. точка Дирака находится на 0,8 эВ выше середины запрещенной зоны. Для грани 6H-SiC(000 $\bar{1}$ ) уровень Ферми совпадает с точкой Дирака, а соответствующая работа выхода равна 5,33 эВ [35]. Следовательно, в этом случае  $\Delta\epsilon = 0,38$  эВ, т.е. точка Дирака лежит ниже середины запрещенной зоны на  $-0,38$  эВ. Для политипа 4H-SiC имеем следующее. Сродство к электрону

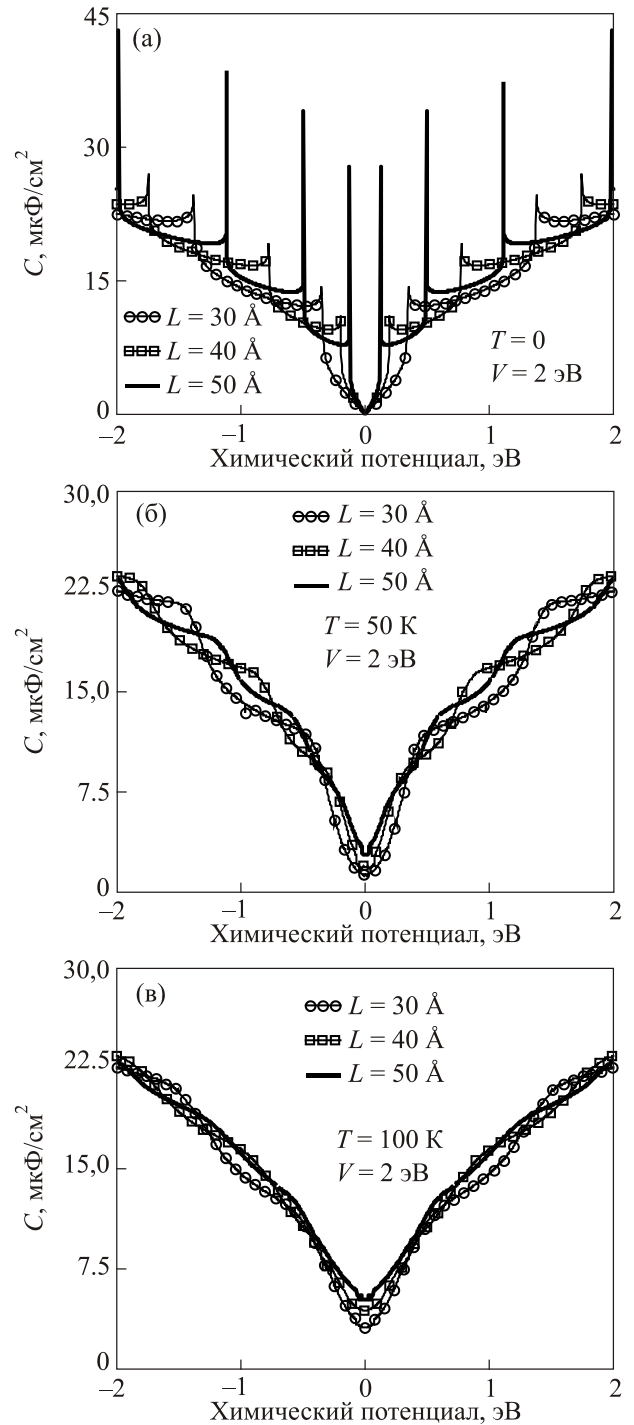


Рис. 4. Зависимость квантовой емкости ЭГ на размерно-квантованной металлической пленке от химического потенциала при различных значениях толщины пленки и температуры.

равно  $\chi_{4H-SiC} = 3,7$  эВ [36], а ширина запрещенной щели  $2\Delta = 3,2$  эВ. Тогда  $\epsilon_g = \chi + \Delta = -5,3$  эВ. Полагая, что  $A = 4,5$  эВ [36], получаем  $\Delta\epsilon = -0,3$  эВ для 4H-SiC(0001) и  $\Delta\epsilon = -0,8$  эВ для 4H-SiC(000 $\bar{1}$ ). В настоящей работе нас будут интересовать качественные эффекты, в связи с чем нас не будет интересовать количественное значение  $\Delta\epsilon$ . Плотности состояний (7) соответствует функция сдвига

$$\Lambda(\omega) = -|V|^2 \frac{mS_1}{\pi\hbar^2} \ln \left| \frac{\omega - \Delta\varepsilon + \Delta}{\omega - \Delta\varepsilon - \Delta} \right|. \quad (10)$$

На рис. 3(б) приведена зависимость квантовой электроемкости ЭГ при различных значениях параметра  $\Delta\varepsilon$ . Важно, что при имеющемся смещении точки минимума квантовой электроемкости сохраняется линейная зависимость при низких концентрациях носителей. Кроме того, в указанной зависимости появляется некоторая асимметрия.

Можно предложить такое, интересное на наш взгляд, практическое применение полученных здесь результатов. Пусть ЭГ допирован таким образом, что его химический потенциал находится в непосредственной окрестности края запрещенной щели подложки (или уровней размерного квантования в случае размерно-квантованной пленки). Тогда малейшее изменение химического потенциала приведет к скачкообразному изменению электроемкости. Причиной изменения химического потенциала может быть, например, адсорбция атомов на ЭГ. Таким образом, наблюдение резких скачков электроемкости будет означать, что на ЭГ адсорбировался атом (если, конечно, все остальные источники изменения химического потенциала отсутствуют). Тем самым ЭГ на щелевой подложке может рассматриваться в качестве чувствительного элемента в соответствующих устройствах. Этот эффект может быть использован, например, для создания на основе ЭГ высокочувствительных химических сенсоров, в которых измеряемой величиной является электроемкость.

На рис. 5 показаны зависимости электроемкости свободного графена от химического потенциала при различных значениях температуры. Видно, что для больших значений химического потенциала зависимость очень слабая. Аналогичные исследования для ЭГ показывают, что температурная зависимость электроемкости

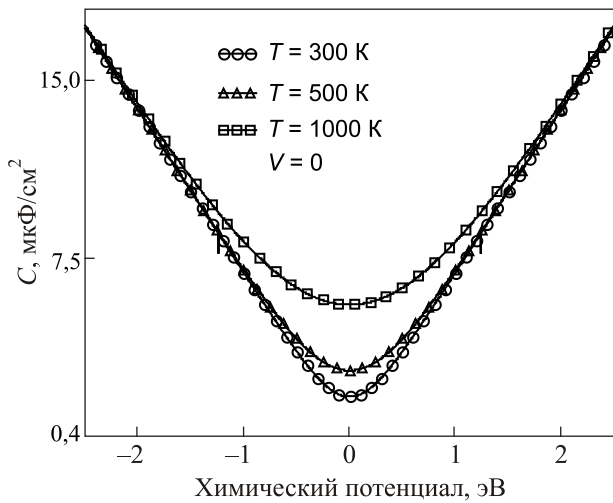


Рис. 5. Зависимость квантовой электроемкости свободного графена от химического потенциала при различных значениях температуры.

последнего еще слабее. Можно сказать, что электроемкость ЭГ практически не зависит от температуры. Наиболее существенная зависимость от температуры наблюдается при низких концентрациях. Это можно объяснить тем, что при температурах  $kT \sim \varepsilon_F$  практически все носители могут эффективно покидать свои состояния и переходить в состояния с большей энергией и с другой плотностью состояний. При высокой концентрации носителей  $kT \ll \varepsilon_F$  доля носителей, которые могут покидать свои состояния, очень мала (такие носители локализованы в малой области вблизи уровня Ферми). Соответствующий вклад также оказывается очень малым. В случае ЭГ дополнительное взаимодействие с подложкой, по-видимому, накладывает дополнительное ограничение на возможность покидания состояний носителями. Это приводит к соответствующему ослаблению температурной зависимости.

Проведем теперь некоторые сравнения с экспериментальными работами. Квантовая электроемкость графена экспериментально исследовалась в работе [37]. Было показано, что примеси приводят к повышению электроемкости при нулевом химическом потенциале. Интересно отметить, что металлическая подложка приводит к аналогичному эффекту (см. рис. 2). Электроемкость ЭГ графена на грани 6H-SiC(000 $\bar{1}$ ) исследована в [38]. Выше мы оценили, что для грани 6H-SiC(000 $\bar{1}$ )  $\Delta\varepsilon = 0,8$  эВ. Соответствующая кривая для электроемкости приведена на рис. 3(б). На этом рисунке видно, что смещение точки Дирака равно примерно 0,4 эВ, что почти совпадает с результатом, приведенным на рис. 3(а) работы [38]. Это значит, что оценки  $\Delta\varepsilon = 0,8$  эВ и  $V = 2$  эВ вполне адекватны для исследуемой системы. Сравнение результатов работ [37,38] показывает, что минимальная квантовая электроемкость ЭГ немного превышает эту величину для свободного графена. Это не следует из нашей модели. Однако эта разница может быть обусловлена рядом факторов, не связанных непосредственно с взаимодействием с подложкой, например с наличием в эксперименте [37,38] заряженных примесей.

Исследуем зависимость электроемкости от напряжения на затворе. Для качественных оценок рассмотрим случай нулевой температуры. Поскольку внутри запрещенной щели  $\Gamma_c = 0$ , то в этой области имеем

$$\rho_{EG}(\varepsilon) = \frac{\bar{\varepsilon}}{\pi\xi^2}.$$

Тогда

$$n(\varepsilon_F) = \frac{1}{\pi\xi^2} \int_0^{\varepsilon_F} \bar{\varepsilon} d\varepsilon = \frac{1}{\pi\xi^2} \int_0^{\varepsilon_F} (\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)) d\varepsilon = \frac{1}{\pi\xi^2} \left\{ \frac{\varepsilon_F^2}{2} + |V|^2 \frac{mS_1}{\pi\hbar^2} \left[ \Delta \ln \left( 1 - \frac{\varepsilon_F^2}{\Delta^2} \right) - \varepsilon_F \ln \left( \frac{\Delta - \varepsilon_F}{\Delta + \varepsilon_F} \right) \right] \right\}. \quad (11)$$

На рис. 6(а) приведена зависимость энергии Ферми от концентрации электронов. Видно, что наличие подложки приводит к ослаблению этой зависимости. Учтя, что  $n \sim U$ , где  $U$  — напряжение на затворе, приходим к выводу, что при одном и том же напряжении затвора энергия Ферми свободного графена больше, чем энергия Ферми ЭГ. Следовательно, зависимость квантовой емкости от величины  $U$  для свободного графена сильнее, чем для ЭГ. Другими словами, наклон кривой  $C(U)$  более крутой для свободного графена. Это подтверждается экспериментами [37,38], результаты которых представлены на рис. 6(б).

В работах [10,11] исследовано влияние кулоновского взаимодействия на квантовую емкость графена. Исследование проводилось в рамках приближений Хартри–Фока и приближения случайных фаз. Было показано, что межчастичное взаимодействие приводит

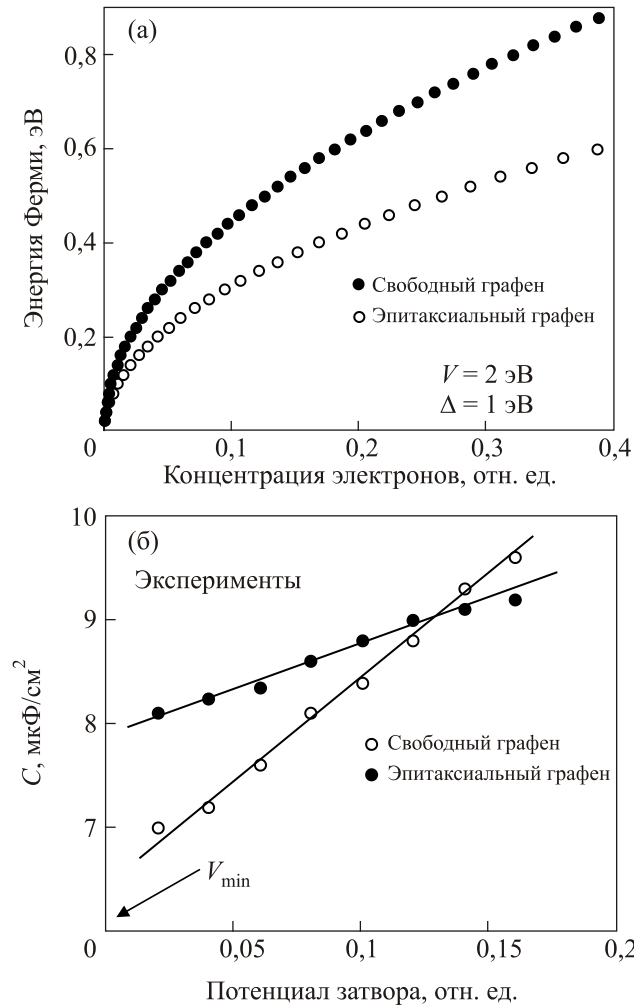


Рис. 6. Зависимость энергий Ферми свободного графена и ЭГ на полупроводниковой подложке от концентрации электронов (а); экспериментальные результаты зависимости квантовой емкости свободного [37] и ЭГ [38] (б). На рис. 6(б) нулевое значение потенциала затвора соответствует напряжению, при котором наблюдается минимум квантовой емкости.

к возрастанию скорости Ферми, что в свою очередь сказывается на квантовой электроемкости и сжимаемости. Интересно исследовать влияние подложки на скорость Ферми. Оценим изменение скорости Ферми. Перенормировка спектра определяется, как известно, массовым оператором  $\Sigma(\varepsilon)$ . Введем перенормированную энергию:

$$\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k + \text{Re} \Sigma(\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_k) \quad (12)$$

или

$$\tilde{\varepsilon}_k - \text{Re} \Sigma(\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_k) = \varepsilon_k, \quad (13)$$

где  $\varepsilon_k = v_b v_F \hbar |k|$ . Беря производную по  $k$  от выражения (3), получаем

$$\frac{d}{d\tilde{\varepsilon}_k} (\tilde{\varepsilon}_k - \text{Re} \Sigma(\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_k)) \frac{d\tilde{\varepsilon}_k}{dk} = \frac{d\varepsilon_k}{dk}, \quad (14)$$

или, учитывая, что  $d\tilde{\varepsilon}_k/dk = \hbar \tilde{v}_F$ ,  $d\varepsilon_k/dk = \hbar v_F$ , получаем

$$\frac{\tilde{v}_F}{v_F} = \left( \frac{d}{d\varepsilon} (\varepsilon - \text{Re} \Sigma(\varepsilon)) \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F} \right)^{-1}, \quad (15)$$

где  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми графена, отсчитанная от середины зоны (в случае металлической подложки) или середины запрещенной щели (в случае полупроводниковой подложки). В данном случае, как легко понять,  $\text{Re} \Sigma = \Lambda(\omega)$ ,  $\text{Im} \Sigma = \Gamma_c(\omega)$ . Тогда для случая металлической подложки имеем

$$\frac{\tilde{v}_F}{v_F} = \left( 1 - \frac{2W_m \rho_0 |V|^2}{W_m^2 - \varepsilon_F^2} \right)^{-1}, \quad (16)$$

а для полупроводниковой подложки

$$\frac{\tilde{v}_F}{v_F} = \left( 1 + \frac{2\Delta \rho_0 |V|^2}{\Delta^2 - \varepsilon_F^2} \right)^{-1}. \quad (17)$$

Следует отметить, что выражение (16) в приближении широкой зоны (модель Андерсона) дает  $\tilde{v}_F/v_F = 1$ . Далее примем, что  $W_m = 10$  эВ. Как видно из (16), скорость Ферми в ЭГ, сформированном на металле, увеличивается. Для полупроводниковой же подложки имеем обратный эффект — скорость Ферми уменьшается (см. (17)). По-видимому, здесь важную роль играет наличие или отсутствие щели в энергетическом спектре. Необходимо также отметить, что в случае вырожденного полупроводника, когда  $\varepsilon_F > \Delta$ , мы имеем металлический случай. Необходимо отметить, что здесь мы полностью пренебрегли электрон-электронными взаимодействиями и показали, что один только факт взаимодействия графена с подложкой приводит к перенормировке скорости Ферми. Это интересно не только с формальной теоретической точки зрения. В работе [39] был экспериментально исследован вопрос о перенормировке скорости Ферми в графене, интеркалирован-

ном золотыми кластерами. В [39] было показано, что скорость Ферми увеличивается более чем на 20%.

Авторы благодарят С.Ю. Давыдова за обсуждение результатов. Работа поддержана грантом РФФИ № 15-2-3311(а), грантом президента РФ МК-4471.2015.2 для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук (Конкурс — МК-2015). А.З.З. искренне благодарен фонду «Династия» за финансовую поддержку.

1. M.I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge University Press, New York (2012).
2. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
3. V.P. Gusynin and S.G. Sharapov, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005).
4. Л.А. Фальковский, *УФН* **178**, 923 (2008).
5. Л.А. Фальковский, *ЖЭТФ* **142**, 1309 (2012).
6. M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, and A.K. Geim, *Nature Phys.* **2**, 9 (2006).
7. L.A. Ponomarenko, R. Yang, R.V. Gorbachev, P. Blake, A.S. Mayorov, K.S. Novoselov, M.I. Katsnelson, and A.K. Geim, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 136801 (2010).
8. G.L. Yu, R. Jalil, B. Belle, A.S. Mayorov, P. Blake, F. Schedin, S.V. Morozov, L.A. Ponomarenko, F. Chiappini, S. Wiedmann, U. Zeitler, M.I. Katsnelson, A.K. Geim, K.S. Novoselov, and D.C. Elias, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **110**, 3281 (2013).
9. V.P. Gusynin, V.M. Loktev, I.A. Luk'yanchuk, S.G. Sharapov, and A.A. Varlamov, *Fiz. Nizk. Temp.* **40**, 355 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 270 (2014)].
10. R. Asgari, M.I. Katsnelson, and M. Polini, *Ann. Phys. (Berlin)* **526**, 359 (2014).
11. Yu.E. Lozovik, A.A. Sokolik, and A.D. Zabolotskiy, *Phys. Rev. B* **91**, 075416 (2015).
12. C. Berger, Zh. Song, T. Li, Xuebin Li, A.Y. Ogbazghi, R. Feng, Z. Dai, A.N. Marchenkov, E.H. Conrad, Ph.N. First, and W.A. de Heer, *J. Phys. Chem. B* **108**, 19912 (2004).
13. W. Lua, W.C. Mitchel, C.A. Thorntona, W.E. Collinsa, G.R. Landis, and S.R. Smith, *J. Electrochem. Soc.* **150**, G177 (2003).
14. G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, V.M. Karpan, J. van den Brink, and P.J. Kelly, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 026803 (2008).
15. P.A. Khomyakov, G. Giovannetti, P.C. Rusu, G. Brocks, J. van den Brink, and P.J. Kelly, *Phys. Rev. B* **79**, 195425 (2009).
16. P.A. Khomyakov, A.A. Starikov, G. Brocks, and P.J. Kelly, *Phys. Rev. B* **82**, 115437 (2010).
17. M. Vanin, J.J. Mortensen, A.K. Kelkkanen, J.M. Garcia-Lastra, K.S. Thygesen, and K.W. Jacobsen, *Phys. Rev. B* **81**, 081408 (2010).
18. C. Riedl, C. Coletti, and U. Starke, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**, 374009 (2010).
19. С.Ю. Давыдов, *Письма в ЖТФ* **37**, 64 (2011); *Письма в ЖТФ* **39** (2), 7 (2013).
20. С.Ю. Давыдов, *ФТП* **45**, 629 (2011); *ФТП* **45**, 1102 (2011).
21. З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов, *ФТТ* **54**, 1398 (2012); *ФММ* **113**, 1504 (2012).
22. З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов, *ТМФ* **172**, 455 (2012).
23. З.З. Алисултанов, С.В. Гарнов, Р.П. Мейланов, *ФТТ* **54**, 2237 (2012).
24. З.З. Алисултанов, И.К. Камилов, *ФТТ* **56** (4), 821 (2014).
25. З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов, *ФТП* **48** (7), 851 (2014).
26. Z.Z. Alisultanov, *Fiz. Nizk. Temp.* **39**, 763 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 596 (2013)].
27. З.З. Алисултанов, Н.А. Мирзегасанова, *ЖТФ* **84**, 145 (2014).
28. З.З. Алисултанов, Н.А. Мирзегасанова, *ФНТ* **40**, 590 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 458 (2014)].
29. Z.Z. Alisultanov, *Physica E: Low-dimen. Syst. and Nanostr.* **69**, 89 (2015).
30. З.З. Алисултанов, *Письма в ЖТФ* **39**, 32 (2013).
31. S.Yu. Davydov, *Phys. Lett. A* **378**, 1850 (2014).
32. З.З. Алисултанов, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 121 (2013).
33. Z.Z. Alisultanov, *Mod. Phys. Lett. B* **29**, 1550003 (2015).
34. С.Ю. Давыдов, *Теория адсорбции: метод модельных гамма-милтонианов*, СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ» (2013).
35. A. Mattausch and O. Pankratov, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 076802 (2007).
36. H. Na, H. Kim, K. Adachi, N. Kiritani, S. Tanimoto, H. Okushi, and K. Arai, *J. Electron. Mater.* **33**, 89 (2004).
37. J. Xia, F. Chen, J. Li, and N. Tao, *Nat. Nanotech.* **4**, 505 (2009).
38. J.L. Xia, Fang Chen, J.L. Tedesco, D.K. Gaskill, R.L. Myers-Ward, C.R. Eddy, Jr., D.K. Ferry, and N.J. Tao, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 162101 (2010).
39. M.N. Nair, M. Cranney, F. Vonau, D. Aubel, P. Le Fèvre, A. Tejada, F. Bertran, A. Taleb-Ibrahimi, and L. Simon, *Phys. Rev. B* **85**, 245 421 (2012).

## Quantum electrical capacitance of epitaxial graphene

Z.Z. Alisultanov, D.M. Rustamova,  
and A.M. Habibulaeva

In a simple model we investigated quantum electrical capacitance of epitaxial graphene. Electrical capacity of epitaxial graphene changes abruptly at the boundary between the permitted and forbidden energies. The case of size-quantized substrate. We obtain the energy, temperature and concentration dependence. Some of the results are in satisfactory agreement with the available experimental results. We discuss the renormalization of the Fermi velocity of the electrons of graphene by the substrate.

PACS: **68.43.-h** Chemisorption/physisorption: adsorbates on surfaces;  
**72.80.Vp** Electronic transport in graphene;  
**73.20.At** Surface states, band structure, electron density of states.

Keywords: epitaxial graphene, quantum electrical capacitance, density of states, Green functions.