

Локальная плотность электронных состояний аморфного графена

Кардашев Д.Л.¹, доцент; Артеменко Е.С.¹, доцент;

²Кардашев К.Д., ассистент

¹Одесская национальная морская академия, г. Одесса

²Одесская национальная академия связи им. А.С. Попова, г. Одесса

В настоящее время электронная структура идеального графена изучена достаточно хорошо благодаря применению разнообразных стандартных программных продуктов, использующих различные приближения и формализмы физики твердого тела. Компьютерное моделирование квантово-механических систем является по своей сути численным экспериментом, требующим контроля адекватности расчетных характеристик экспериментальным. При отклонении структуры графена от идеальной вследствие разброса значений длин связей и величин валентного угла возникают проблемы как вычислительного, так и принципиального характера.

Модельные подходы для описания аморфного состояния материалов, как правило, связывают с определенной степенью разупорядоченности структуры. В качестве модели аморфного графена нами была использована решетка Бете – бесконечная древовидная структура без колец из связей, в которой сохранялся только ближний порядок расположения атомов. Для определения локальной плотности электронных состояний использовался формализм функций Грина с полуэмпирическим одноэлектронным гамильтонианом сильной связи. Матричные элементы гамильтониана задавались в базисе одной s - и двух p_x , p_y - атомных орбиталей.

Данный подход позволил получить аналитические выражения для диагональных элементов функции Грина, мнимые части которых дают парциальные локальные плотности, а их сумма определяет полную локальную плотность электронных состояний.

Сохранение только ближнего порядка в расположении атомов ведет к появлению "псевдощели" в плотности состояний без V -образной особенности, характерной для идеального графена. Нули действительной части функции Грина определяют резонансные уровни нейтральной вакансии. Энергии, обусловленные изолированными примесями замещения, определялись из уравнения Лифшица.