

## СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА НАНОРАЗМЕРНЫХ И МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

PACS numbers: 71.15.Ap, 71.20.Tx, 71.27.+a, 71.28.+d, 72.10.-d, 75.30.-m, 75.40.-s

### Природа спин-залежного транспорту в графені з домішкою хрому

С. П. Репецький, О. В. Третяк\*, Д. К. Чешківський

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
фізичний факультет,  
вул. Володимирська, 64,  
01033 Київ, Україна*

*\*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
Інститут високих технологій,  
просп. Академіка Глушкова, 4-г,  
02033 Київ, Україна*

На основі моделі сильного зв'язку досліджено електронну структуру, вільну енергію та спин-залежний транспорт графену з домішкою атомів Cr. Виконано «геометричну оптимізацію» кристалічної структури графену з домішкою Cr шляхом мінімізації вільної енергії. Встановлено, що атоми Cr адсорбуються на поверхні графену. З'ясовано природу спин-залежного електронного транспорту графену з атомами Cr. Показано, що явище спин-залежного електронного транспорту в графені виникає внаслідок сильних електронних кореляцій, зумовлених наявністю атомів Cr. Величина спінової поляризації електронного транспорту визначається різницею парціальних густин станів електронів з протилежною проекцією спіну на рівні Фермі та різницею часів релаксації, зумовленою різницею у числах заповнення одноелектронних станів атомів вуглецю та хрому. Значення спінової поляризації електричного струму зростає із збільшенням концентрації атомів Cr.

На основе модели сильной связи исследована электронная структура, свободная энергия и спин-зависимый транспорт в графене с примесью атомов Cr. Выполнена «геометрическая оптимизация» кристаллической структуры графена с примесью Cr путём минимизации свободной энергии. Установлено, что атомы Cr адсорбируются на поверхности графена. Выяснена природа спин-зависимого электронного транспорта графена с атомами Cr. Показано, что явление спин-зависимого электронного транспорта в графене возникает в результате сильных электронных корреляций, обусловленных наличием атомов Cr. Величина спиновой поляризации

электронного транспорта определяется разностью парциальных плотностей состояний электронов с противоположной проекцией спина на уровне Ферми и разностью времён релаксации, обусловленной разным числом заполнения одноэлектронных состояний атомов углерода и хрома. Значение спиновой поляризации электрического тока вырастает при увеличении концентрации атомов Cr.

Based on the tight-binding model, the electronic structure, free energy, and spin-dependent transport of graphene doped with Cr atoms are investigated. 'Geometric optimization' of the crystal structure of graphene with Cr admixture is accomplished by means of the free-energy minimization. As determined, the Cr atoms are adsorbed on the graphene surface. The origin of the spin-dependent electron transport of graphene with Cr atoms is revealed. As shown, the phenomenon of spin-dependent electron transport in graphene arises due to the strong electron correlations caused by the presence of Cr atoms. The value of the spin polarization of the electron transport is determined by both the difference of the partial densities of states for electrons with opposite spin projections at the Fermi level and the difference in relaxation times caused by different occupation numbers of single-electron states of carbon and chromium atoms. The value of the spin polarization of the electrical current increases with the concentration of Cr atoms.

**Ключові слова:** графен з домішкою хрому, електропровідність, спінова поляризація струму, енергетичний спектр електронів і фононів, електронні кореляції, модель сильного зв'язку.

*(Отримано 16 серпня 2013 р.)*

В системах з сильними електронними кореляціями або значною спин-орбітальною взаємодією в зовнішніх електричному та магнітному полях існує, крім давно відомого явища переносу заряду, порівняно недавно відкрите явище переносу спінів електронів. У кристалоподібних вуглецевих нанотрубках, що доповані перехідними металами Cr або V, останнім часом виявлено майже 100% спінову поляризацію [1–3]. Нанорозмірні системи графен та вуглецеві нанотрубки є спорідненими за своїми властивостями. Одним із шляхів цілеспрямованої зміни властивостей графену з метою застосування їх у наноелектроніці та спиновій електроніці є внесення домішок інших елементів. Наявність домішок може призводити до зниження симетрії кристалічної ґратниці та зняття виродження в енергетичному спектрі електронів і появи додаткових енергетичних щілин, ширина яких залежить від типу домішок та їх концентрації [4, 5]. Однак вплив домішок на електронну структуру та пов'язані з нею властивості графену досліджено недостатньо.

У нашій роботі на основі моделі сильного зв'язку досліджено вплив атомного впорядкування на електронну структуру, вільну енергію та електропровідність графену з домішкою хрому.

Метод розрахунку енергетичного спектра електронів і фононів, вільної енергії та електропровідності неупорядкованого кристала описано в роботах [6–12].

Електронні кореляції в кристалах описуються в багатозонній моделі сильного зв'язку. Враховано процеси розсіяння електронів на потенціалах іонних кістяків, флуктуаціях зарядової і спінової густини та коливаннях кристалічної ґратниці.

Використовуючи формулу Кубо, діаграмну техніку для двочастинкової температурної функції Гріна та нехтуючи внесками процесів розсіяння на кластерах із трьох і більше вузлів, для тензора статичної електропровідності одержано вираз [6, 7, 11, 12]:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{\alpha\beta} = & \frac{e^2 \hbar}{4\pi\Omega_0} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_1} \sum_{s,s'=+,-} (2\delta_{ss'} - 1) \sum_{\sigma_l,i} \{ [v_\beta \tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'})]_{i0i0} + \right. \\
 & + \sum_{\lambda, m_{\lambda i}} P_{i0}^{\lambda, m_{\lambda i}} \sum_{\substack{j \neq i0 \\ \lambda', m_{\lambda' j}}} P_{j0}^{\lambda' m_{\lambda' j} / \lambda_i m_{\lambda i}} [ [\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'}, v_\beta, \varepsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'}) ]_{i0i0} T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & + [\tilde{K}(\varepsilon_1^{s'}, v_\beta, \varepsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'}) ]_{i0jl} T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda' j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & + [\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) v_\beta \tilde{G}(\varepsilon_1^s) ]_{i0i0} T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^s) + \\
 & + [\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) v_\beta \tilde{G}(\varepsilon_1^s) ]_{i0jl} T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda' j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^s) + \\
 & + \tilde{K}_{i0jl}(\varepsilon_1^{s'}, v_\beta, \varepsilon_1^s) (t_{jl}^{\lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) t_{i0}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & + t_{jl}^{\lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & + T_{(jl,i0)}^{(2d)\lambda' m_{\lambda' j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) t_{i0}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & + T_{(jl,i0)}^{(2d)\lambda' m_{\lambda' j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{jli0}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & \left. + T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda' j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}_{i0jl}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T_{(jl,i0)}^{(2n)\lambda' m_{\lambda' j} \lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'}) \right\}^{\gamma s, \gamma s} + \\
 & + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \langle \Delta G_{\alpha\beta}^{II}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \rangle,
 \end{aligned} \tag{1}$$

де

$$\begin{aligned}
 T_{(i0,jl)}^{(2n)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda' j}} & = \left[ I - t_{i0}^{\lambda m_{\lambda i}} \tilde{G}_{(i0,jl)} t_{jl}^{\lambda' m_{\lambda' j}} \tilde{G}_{(jl,i0)} \right]^{-1} t_{i0}^{\lambda m_{\lambda i}} \tilde{G}_{(i0,jl)} t_{jl}^{\lambda' m_{\lambda' j}}, \\
 T_{(i0,jl)}^{(2d)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda' j}} & = T_{(i0,jl)}^{(2n)\lambda m_{\lambda i} \lambda' m_{\lambda' j}} \tilde{G}_{i0}^{\lambda m_{\lambda i}}.
 \end{aligned}$$

У виразі (1)  $\tilde{K}(\varepsilon_1^s, v_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) = \tilde{G}(\varepsilon_1^s) v_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'})$ ,  $\tilde{G}(\varepsilon_1^+) = \tilde{G}(\varepsilon_1 + i\delta)$  та  $\tilde{G}(\varepsilon_1^-) = \tilde{G}(\varepsilon_1 - i\delta)$  ( $\delta \rightarrow +0$ ) — загаяна та випереджувальна одночастинкові функції Гріна відповідно,  $\Omega_0$  — об'єм примітивної комірки,  $e$  —

заряд електрона,  $\hbar$  — стала Планка.  $\Delta G_{\alpha\beta}^{II}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$  — складова двочастинкової функції Гріна, що виражається через вершинну функцію  $\Gamma_{n_5 n_8}^{n_6 n_7}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon_2, \varepsilon_1)$ , має вигляд:

$$\begin{aligned} \Delta G_{\alpha\beta}^{II}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) &= \frac{i}{2\pi} v_{\alpha n_4 n_2} v_{\beta n_3 n_1} \left\{ \left[ G_{r_{m_1 n_6}}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a_{n_1 n_6}}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] \times \right. & (2) \\ &\times \left[ G_{r_{n_2 n_5}}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a_{n_2 n_5}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] \left[ G_{a_{n_7 n_4}}^{aa^+}(\varepsilon_2) G_{r_{n_8 n_3}}^{aa^+}(\varepsilon_1) - \right. \\ &- G_{r_{n_7 n_4}}^{aa^+}(\varepsilon_2) G_{a_{n_8 n_3}}^{aa^+}(\varepsilon_1) \left. \right] + G_{a_{n_1 n_6}}^{aa^+}(\varepsilon_1) \left[ G_{r_{n_2 n_5}}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a_{n_2 n_5}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] \times \\ &\times G_{a_{n_7 n_4}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \left[ G_{r_{n_8 n_3}}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a_{n_8 n_3}}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] - G_{r_{m_1 n_6}}^{aa^+}(\varepsilon_1) \times \\ &\times \left[ G_{r_{n_2 n_5}}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a_{n_2 n_5}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] G_{r_{m_7 n_4}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \left[ G_{r_{n_8 n_3}}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a_{n_8 n_3}}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] + \\ &+ \left[ G_{a_{n_1 n_6}}^{aa^+}(\varepsilon_1) G_{r_{n_2 n_5}}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{r_{m_1 n_6}}^{aa^+}(\varepsilon_1) G_{a_{n_2 n_5}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] \times \\ &\times \left[ G_{r_{n_7 n_4}}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a_{n_7 n_4}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] \left[ G_{r_{n_8 n_3}}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a_{n_8 n_3}}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] + \\ &+ \left[ G_{r_{m_1 n_6}}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a_{n_1 n_6}}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] G_{r_{n_2 n_5}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \left[ G_{r_{n_7 n_4}}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a_{n_7 n_4}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] \\ &\times G_{r_{n_8 n_3}}^{aa^+}(\varepsilon_1) - \left[ G_{r_{m_1 n_6}}^{aa^+}(\varepsilon_1) - G_{a_{n_1 n_6}}^{aa^+}(\varepsilon_1) \right] G_{a_{n_2 n_5}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \times \\ &\times \left[ G_{r_{n_7 n_4}}^{aa^+}(\varepsilon_2) - G_{a_{n_7 n_4}}^{aa^+}(\varepsilon_2) \right] G_{a_{n_8 n_3}}^{aa^+}(\varepsilon_1) \left. \right\} \Gamma_{n_5 n_8}^{n_6 n_7}(\varepsilon_1, \varepsilon_2; \varepsilon_2, \varepsilon_1), \\ &(n \equiv ni\gamma\sigma). \end{aligned}$$

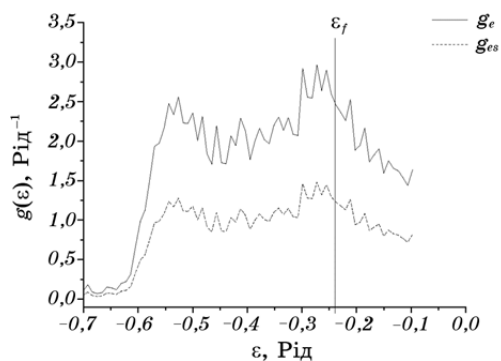
Одноцентровий оператор розсіяння у формулі (1) надається виразом:

$$t^{n_1 i_1} = \left[ I - (\Sigma^{n_1 i_1} - \sigma^{n_1 i_1}) \tilde{G} \right]^{-1} (\Sigma^{n_1 i_1} - \sigma^{n_1 i_1}). \quad (3)$$

Величина  $\Sigma_e^{n_1 i_1}(\varepsilon)$  у виразі для одноцентрового оператора розсіяння  $t^{n_1 i_1}$ , яка описує розсіяння на потенціалах іонних кістяків, статичних флуктуаціях зарядової та спінової густини, надається формулою

$$\Sigma_{e \, n_1 i_1 s, n' i' \gamma s'}^{n_1 i_1}(\varepsilon) = w_{n_1 i_1 s, n' i' \gamma s'}^{n_1 i_1} + \frac{1}{2} \sum_{\gamma_1 s_1} \tilde{v}_{n_1 i_1 \gamma_1 s_1, s_1 n' i' \gamma s'}^{(2) n_1 i_1 s, n_1 i_1 \gamma_1 s_1} (Z_{n_1 i_1 \gamma_1 s_1} - \tilde{Z}_{i_1 \gamma_1 s_1}), \quad (4)$$

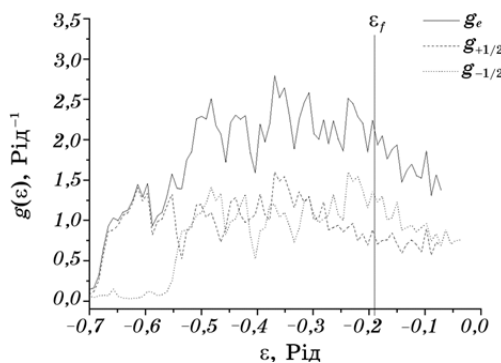
де  $Z_{n_1 i_1 s}$  набуває випадкових значень  $Z_{n_1 i_1 s}^{m_{\lambda i}}$ , а  $\tilde{Z}_{i_1 \gamma_1 s}$  одержується заміною функції Гріна  $G$  на функцію Гріна ефективного середовища  $\tilde{G}$ , яке описується когерентним потенціалом  $\sigma^{n_1 i_1}$  [6, 11, 12]. У виразі (1) величини  $P_{0i}^{Z_{\lambda i} m_{\lambda i}} = P_{0i}^{\lambda} P_{0i}^{Z_{\lambda i}} P_{0i}^{m_{\lambda i}}$ ,  $P_{ij \, 0i}^{Z_{\lambda i} m_{\lambda i} j / Z_{\lambda i} m_{\lambda i}} = P_{ij \, 0i}^{\lambda' / \lambda} P_{ij \, 0i}^{Z_{\lambda i} j / Z_{\lambda i}} P_{ij \, 0i}^{m_{\lambda i} / m_{\lambda i}}$  — імовірності знаходження атомів різного сорту з певними числами електронів і значеннями проекції локалізованого магнітного моменту у вузлах кристалічної ґратниці [11, 12].



**Рис. 1.** Густина електронних станів графену з домішкою 70% Sr за відсутності магнітного поля. Суцільною кривою зображено повну густина станів, штриховою кривою — парціальну густина станів.

Наведемо результати розрахунку енергетичного спектра електронів (рис. 1, 2), вільної енергії (рис. 3) та електропровідності (рис. 4) графену з домішками хрому. В розрахунках нехтувалось перенормуванням вершинних частин масових операторів електрон-електронної і електрон-фононої взаємодій [6, 11, 12].

Як показують числові розрахунки, внесок останнього члена у виразі (1) не перевищує декількох відсотків; тому в наших розрахунках його внеском нехтували. Як базис обираються дійсні хвильові функції  $2s$ -,  $2p$ -,  $3s$ -,  $3d$ -станів нейтральних невзаємодійних атомів вуглецю. При розрахунках недиагональних за номером вузлів ( $ni$ ) матричних елементів гамільтоніана враховувались перші три координаційні сфери. Розрахунки виконано для температури  $T = 300$  К.



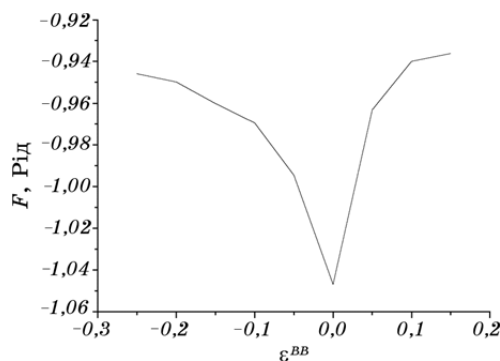
**Рис. 2.** Густина електронних станів графену з домішкою 70% Sr в магнітному полі  $H = 200$  А/м. Суцільною кривою зображено повну густина станів, штриховою кривою —  $g_{e1/2}(\epsilon)$ , пунктирною кривою —  $g_{e-1/2}(\epsilon)$ .

У роботі виконано «геометричну оптимізацію» кристалічної структури графену з домішкою Cr. Графен з домішкою Cr має структуру двовимірного кристала. Атоми в примітивній комірниці  $n$  займають 3 нееквівалентні положення  $i$ . Атоми Cr розташовані на поверхні графену напроти центру шестикутників, у вершинах яких розташовані атоми вуглецю. Відстань між атомами вуглецю складає 0,142 нм. Відстань між атомами вуглецю та Cr складає 0,22 нм. Геометрична оптимізація кристалічної структури досягалась шляхом мінімізації вільної енергії як функції концентрації атомів Cr та параметрів парних кореляцій в їх розташуванні на вузлах ґратниці (рис. 3).

Як показують результати розрахунку, мінімум вільної енергії відповідає значенню параметрів парних кореляцій в розташуванні домішок Cr на вузлах ґратниці для перших трьох координаційних сфер  $\varepsilon_{nj0i}^{BB} = 0$ . Атоми Cr випадково розташовані на поверхні графену напроти центру шестикутників, у вершинах яких розташовані атоми вуглецю. На це вказує те, що при  $\varepsilon_{nj0i}^{BB} = 0$  імовірності розташування атомів Cr  $P_{nj\ 0i}^{\lambda/\lambda} = P_{nj}^{\lambda} = c^{\lambda}$ , де  $c^{\lambda} = c^{Cr}$  — відносна частка зайнятих атомами Cr можливих положень на поверхні.

Значення локалізованого магнітного моменту атома Cr та наведеного локалізованого магнітного моменту атома C для графену з концентрацією атомів хрому  $c^{Cr} = 70\%$  дорівнюють відповідно  $m_{Cr} = 1,02\mu_B$  та  $m_C = 0,0036\mu_B$ .

На рисунку 1 показано парціальну  $g_{es}(\varepsilon) = v^{-1} \sum_{i,\gamma,\lambda,m_{\lambda i}} P_{0i}^{m_{\lambda i}} g_{0i\gamma s}^{m_{\lambda i}}(\varepsilon)$  та повну  $g_e(\varepsilon) = \sum_s g_{es}(\varepsilon)$  густини станів графену з домішкою Cr у відсутності магнітного поля [11, 12], коли  $g_{e1/2}(\varepsilon) = g_{e-1/2}(\varepsilon)$ . Вертикальною лінією зображено положення рівня Фермі  $\varepsilon_f$ .



**Рис. 3.** Залежність вільної енергії  $F$  графену з концентрацією домішки 70% Cr від параметра парних кореляцій в орієнтації локалізованих магнітних моментів на вузлах ґратниці  $\varepsilon^{BB}$ .

На рисунку 1 наведено густину станів графену для значень концентрації атомів хрому  $c^{Cr} = 70\%$  і параметрів парних кореляцій в їх розташуванні на вузлах ґратниці на перших трьох координаційних сферах  $\epsilon_{nj0i}^{BB} = 0$ , які відповідають мінімуму вільної енергії (див. рис. 3).

На рисунку 2 показано повну  $g_e(\epsilon)$  та парціальну  $g_{es}(\epsilon)$  густини електронних станів на примітивну комірку графену з домішкою Cr для двох значень проекції спіну  $s$  в зовнішньому магнітному полі  $H = 200$  А/м. Як видно з рис. 2, значення енергії електрона зі спіном  $s = 1/2$  зсунуті відносно значень енергії електрона зі спіном  $s = -1/2$ . На рисунку 2 наведено густину електронних станів графену в магнітному полі  $H = 200$  А/м для значень концентрації атомів хрому у 70%.

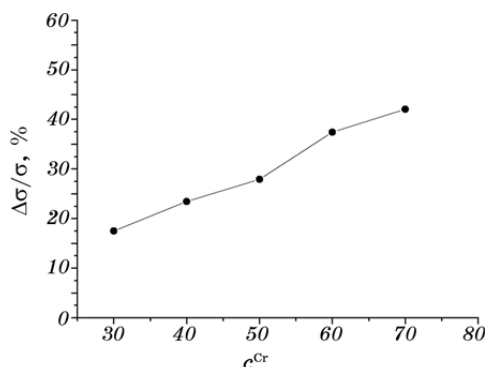
На рисунку 3 зображено залежність вільної енергії [11, 12] від параметра парних кореляцій в розташуванні домішок Cr на вузлах ґратниці  $\epsilon^{BB} = \epsilon_{ij0i}^{BB}$  для першої координаційної сфери (показано залежність  $F(\epsilon^{BB})$  в області мінімуму). Параметр далекого атомного порядку  $\eta_a = 0$ .

На рисунку 4 точками зображено залежність спінової поляризації електричного струму  $\Delta\sigma/\sigma = (\sigma_{1/2} - \sigma_{-1/2})/\sigma$  в графені від концентрації атомів Cr на вузлах ґратниці, в магнітному полі  $H = 200$  А/м.

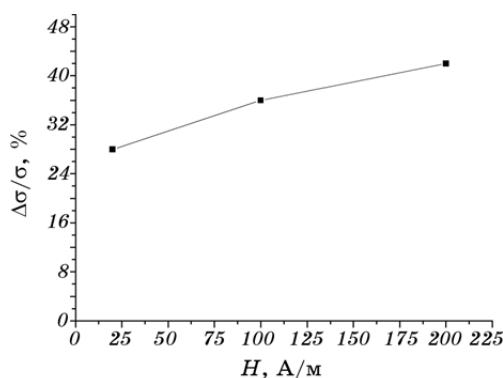
На рисунку 5 точками зображено залежність спінової поляризації електричного струму  $\Delta\sigma/\sigma = (\sigma_{1/2} - \sigma_{-1/2})/\sigma$  в графені з домішкою Cr від величини зовнішнього магнітного поля  $H$ .

На рисунку 6 точками зображено залежність густини електронних станів на рівні Фермі графену з домішкою 70% Cr від величини зовнішнього магнітного поля  $H$ .

Різниця парціальних густин станів обумовлена їх зсувом у зовнішньому магнітному полі і визначається видом енергетичного спектра електронів з певною проекцією спіну. З рисунка видно, що в дослідженій області значень зовнішнього магнітного поля парціальні гус-



**Рис. 4.** Залежність спінової поляризації електричного струму  $\Delta\sigma/\sigma = (\sigma_{1/2} - \sigma_{-1/2})/\sigma$  в графені від концентрації атомів Cr у магнітному полі  $H = 200$  А/м.



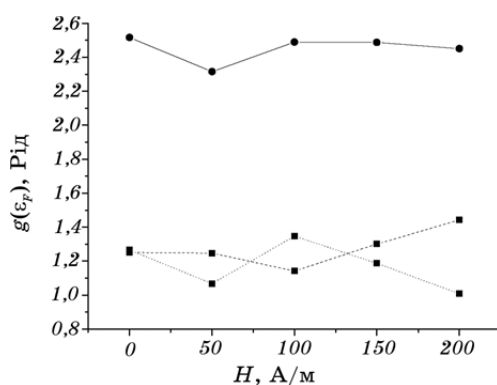
**Рис. 5.** Залежність спінової поляризації електричного струму графену з домішкою Cr від величини зовнішнього магнітного поля  $H$ .

тини електронних станів на рівні Фермі суттєво не відрізняються одна від іншої.

На рисунку 7 зображено залежність значення густини електронних станів на рівні Фермі від концентрації домішки Cr в зовнішньому магнітному полі  $H = 200 \text{ A/m}$ .

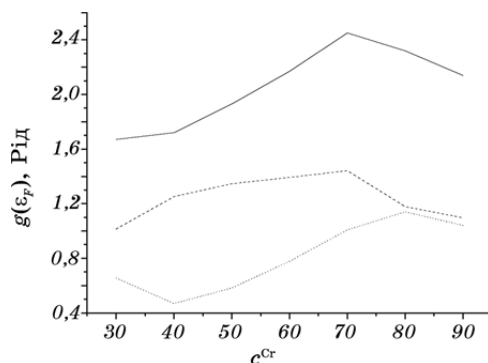
З рисунка 7 видно, що густина електронних станів на рівні Фермі має максимум для концентрації домішки Cr у 70%. Цей максимум обумовлений відповідним максимумом для парціальної густини станів електронів із спіном  $s = 1/2$ .

На рисунку 8 зображено залежність уявної частини когерентного потенціалу на рівні Фермі [11, 12] від концентрації домішки Cr для значення зовнішнього магнітного поля  $H = 200 \text{ A/m}$ .



**Рис. 6.** Залежність повної та парціальних густини електронних станів на рівні Фермі графену з домішкою 70% Cr від величини зовнішнього магнітного поля  $H$ . Суцільна крива — повна густина станів, штрихова крива —  $g_{s=1/2}(\epsilon_F)$ , пунктирна крива —  $g_{s=1/2}(\epsilon_F)$ .

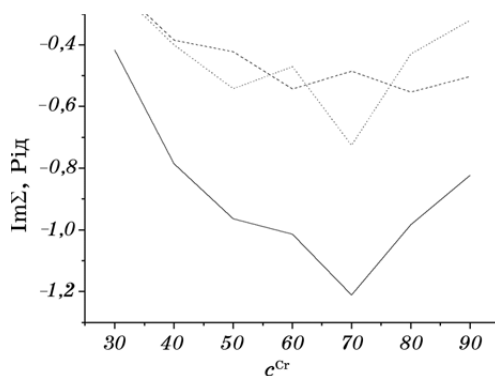




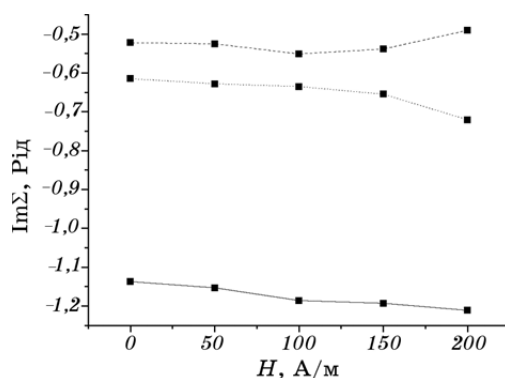
**Рис. 7.** Залежність повної та парціальних густин електронних станів на рівні Фермі від концентрації домішки Cr при  $H = 200$  А/м. Суцільна крива — повна густина станів, штрихова крива —  $g_{e1/2}(\epsilon_F)$ , пунктирна крива —  $g_{e-1/2}(\epsilon_F)$ .

На рисунку 9 зображено залежність уявної частини когерентного потенціалу на рівні Фермі від напруженості зовнішнього магнітного поля в графені з домішкою 70% Cr.

Таким чином, явище спін-залежного електронного транспорту в графені виникає внаслідок сильних електронних кореляцій, зумовлених наявністю атомів хрому. Величина спінової поляризації електронного транспорту визначається різницею парціальних густин станів (рис. 1, 2) електронів з протилежною проекцією спіну на рівні Фермі та різницею часів релаксації, зумовленою різним числом заповнення одноелектронних станів атомів вуглецю та хрому. Значення спінової



**Рис. 8.** Залежність уявної частини когерентного потенціалу на рівні Фермі від концентрації домішки Cr при  $H = 200$  А/м. Суцільна крива — уявна частина когерентного потенціалу, штрихова та пунктирна криві — парціальні складові уявної частини когерентного потенціалу для підсистеми електронів з проекціями спіну  $s = 1/2$  та  $s = -1/2$  відповідно.



**Рис. 9.** Залежність уявної частини когерентного потенціалу на рівні Фермі від напруженості зовнішнього магнітного поля. Суцільна крива — уявна частина когерентного потенціалу, штрихова та пунктирна криві — парціальні складові уявної частини когерентного потенціалу для підсистеми електронів з проекціями спіну  $s = 1/2$  та  $s = -1/2$  відповідно.

поляризації електричного струму зростає зі збільшенням концентрації атомів Cr та величини напруженості зовнішнього магнітного поля.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. C. K. Yang, J. Zhao, and J. P. Lu, *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 257203 (2003).
2. C. Yang, J. Zhao, and J. P. Lu, *Nano Lett.*, **4**: 561 (2004).
3. E. Durgun and S. Ciraci, *Phys. Rev. B*, **74**: 125404 (2006).
4. Yu. V. Skrypnuk and V. M. Loktev, *Phys. Rev. B*, **73**, 241402(R) (2006).
5. Yu. V. Skrypnuk and V. M. Loktev, *Phys. Rev. B*, **75**: 245401 (2007).
6. С. П. Репецкий, Т. Д. Шатний, *Теор. мат. физ.*, **131**: 456 (2002).
7. S. P. Repetskii and I. G. Vyshivanaya, *The Phys. Met. Metallogr.*, **99**, No. 6: 558 (2005).
8. С. П. Репецкий, И. Г. Вышиваная, *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 5: 587 (2007)
9. С. П. Репецкий, И. Г. Вишиваная, В. В. Шастун, А. Ф. Мельник, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 4: 425 (2011).
10. S. P. Repetskii, I. G. Vyshivanaya, and D. K. Cheshkovskii, *The Phys. Met. Metallogr.*, **113**: 213 (2012).
11. S. P. Repetsky, O. V. Tretyak, I. G. Vyshivanaya, and V. V. Shastun, *Uspehi Fiziki Metallov*, **13**, No. 2: 189 (2012).
12. С. П. Репецкий, И. Г. Вишивана, Д. К. Чешківський, В. А. Скотников, *Металлофиз. новейшие технол.*, **34**, № 10: 1307 (2012).