

Электронные и фононные состояния, локализованные вблизи границы графена

В.В. Еременко, В.А. Сиренко, И.А. Господарев, Е.С. Сыркин,
С.Б. Феодосьев, И.С. Бондарь

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

A. Feher

*Centre of Low Temperature Physics Faculty of Science P.J. Šafarik University & Institute of Experimental Physics SAS
9 Park Angelinum, Košice 04154, Slovakia*

К.А. Минакова

*Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт» МОН Украины,
ул. Багалия, 21, г. Харьков, 61002, Украина*

Статья поступила в редакцию 20 июня 2017 г., опубликована онлайн 25 сентября 2017 г.

Аналитически и численно проанализировано изменение электронного и фононного спектров графена при образовании границы хиральности «zigzag». Установлено, что при этом вблизи уровня Ферми возбуждается щелевая волна с релятивистской дисперсией. Эта волна распространяется вдоль границы и затухает по мере удаления от нее. Определены условия возникновения и характеристики данной волны. В частности, показано, что распространение данной волны происходит только по атомам подрешетки, которая включает в себя атомы с оборванными при формировании границы связями. На локальных плотностях состояний только атомов данной подрешетки щелевая волна формирует острые резонансные пики. Показано, что образование на графеновом слое границы данной хиральности аналогичным образом влияет на поляризованные нормально к слою фононные моды, формируя острые максимумы с частотами вблизи частоты квазиизгибных фононов при значении квазиволнового вектора в К-точке первой зоны Бриллюэна. Тем самым формирование «zigzag»-границы увеличивает как число носителей заряда, так и число фононов с высокой групповой скоростью, которые могут давать большой вклад в электрон-фононное взаимодействие.

Аналитично та чисельно проаналізовано зміну електронного та фононного спектрів графену при утворенні меж з хіральністю «zigzag». Встановлено, що при цьому поблизу рівня Фермі збуджується щільна хвиля з релятивістською дисперсією. Ця хвиля розповсюджується вздовж меж і згасає в міру віддалення від неї. Визначено умови виникнення та характеристики цієї хвилі. Зокрема, показано, що її розповсюдження відбувається тільки по атомам підґратки, що включає в себе атоми з обірваними при формуванні меж зв'язками. На локальних густинах станів тільки атомів цієї підґратки щільна хвиля формує гострі резонансні піки. Показано, що утворення на графеновому шарі меж даної хіральності аналогічним чином впливає на поляризовані нормально до шару фононні моди, формуючи гострі максимуми з частотами поблизу частоти квазізгинальних фононів при значенні квазіхвильового вектора в К-точці першої зони Бріллюэна. Тим самим формування «zigzag»- меж збільшує як число носіїв заряду, так і число фононів з високою груповою швидкістю, які можуть давати великий внесок в електрон-фононну взаємодію.

PACS: **63.22.-m** Фононы и колебательные состояния в низкоразмерных структурах и наноматериалах;
 63.22.Rc Фононы в графене;
 63.20.kp Взаимодействие фононов с дефектами
73.22.-f Электронная структура наноматериалов и смежных систем;
 73.22.Pr Электронная структура графена.

Ключевые слова: квазичастичный спектр, наноструктуры, графен, дефект, поверхностные волны.

Введение

Сильная ковалентная связь между атомами графенового монослоя приводит к огромным (~ 2500 К) значениям его дебаевской температуры. Это не только обуславливает «низкотемпературное» поведение колебательных термодинамических характеристик графена, а также 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. Действительно, к настоящему времени имеется множество убедительных доказательств того, что именно электрон-фононное взаимодействие (механизм БКШ) является основным механизмом, отвечающим за переход в сверхпроводящее состояние, в том числе и для сверхпроводников с высокой температурой сверхпроводящего перехода (см., например, [1]), а в рамках БКШ теория температура сверхпроводящего перехода пропорциональна средней фононной частоте [2].

В то же время сверхпроводящий переход в графите и в углеродных нанотрубках и нанопленках не был достоверно обнаружен. Причиной этого является как малое число носителей заряда с энергиями, близкими к фермиевской ε_F , 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 [1,2]. 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 [3–5]. В работе [6] было показано, что аналогичное увеличение числа носителей и числа соответствующих фононов имеет место и в тонких графеновых нанопленках (биграфене и триграфене) с дефектом типа «ступенька на поверхности».

В настоящей работе аналитически и численно анализируется изменение как электронного, так и фононного спектров графена, находящегося на диэлектрической подложке, при разрыве графенового слоя вдоль

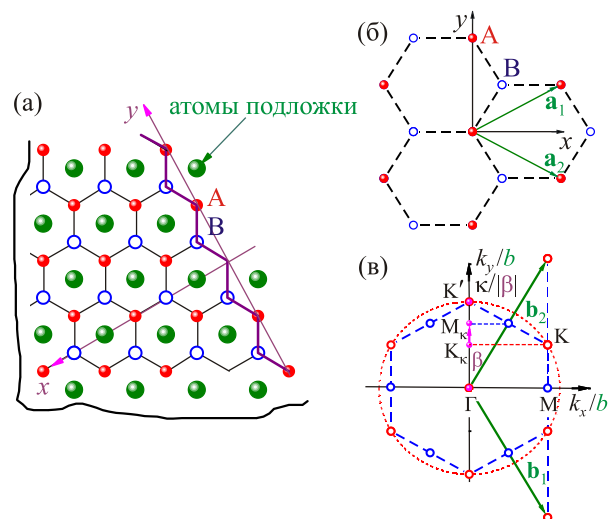


Рис. 1. (Онлайн в цвете) Геометрия задачи (фрагмент (а)), выбор элементарной ячейки (фрагмент (б)) и построение первой зоны Бриллюэна графена и 1D зоны Бриллюэна графена с «zigzag»-границей (фрагмент (в)).

линии «zigzag» (рис. 1(a)). Показано, что такой дефект приводит к существенному росту числа электронов с энергиями вблизи фермиевской и числа квазиизгибных фононов с частотами вблизи частоты, которая соответствует К-точке первой зоны Бриллюэна.

1. Электронный спектр графена, разорванного вдоль линии «zigzag»

Двумерная кристаллическая решетка графена представляет собой две треугольные подрешетки, «вставленные» друг в друга таким образом, что вершины одной из них находятся в центрах тяжести другой. С этим, в частности, связана специфика взаимного расположения электронных спектральных ветвей, когда только вдоль одного из направлений в обратном пространстве (направления ГК, см. рис. 2(a)) спектральные ветви соприкасаются (в точке К), а вдоль всех остальных направлений между ними существует щель конечной ширины. Это обуславливает линейную (релятивистскую) зависимость дисперсии электронов для значений квази-волнового вектора \mathbf{k} вблизи К-точки первой зоны Бриллюэна (напомним, что в графене величина $\varepsilon(\mathbf{K}) = \varepsilon_F$). Электронная плотность состояний (DOS) вблизи энергии $\varepsilon(\mathbf{K})$ имеет характерную V-образную (дираковскую) сингулярность (кривая 1 на рис. 2(б)).

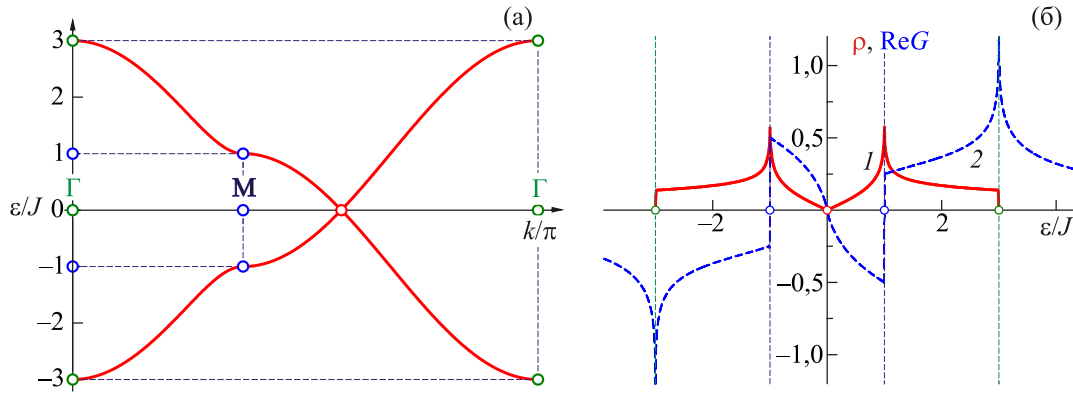


Рис. 2. (Онлайн в цвете) Дисперсионные кривые графена вдоль высокосимметричных направлений (фрагмент (а)), а также DOS графена и вещественная часть его функции Грина (фрагмент (б)) кривые 1 и 2 соответственно). Энергия отсчитывается от уровня Ферми.

В отсутствие сильных магнитных полей электронный спектр графена вполне удовлетворительно может быть описан в приближении сильной связи. Соответствующий гамильтониан имеет вид (см., например, [7–9]):

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

при этом считаем, что электронные перескоки внутри слоя возможны только между ближайшими соседями: $\forall J_{ij} = J \approx 2,8$ эВ, а $\forall \varepsilon_i = \varepsilon_F = 3J$ (см., например, [7]), индексы i и j нумеруют узлы.

Вытекающий из гамильтониана (1) закон дисперсии имеет вид

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

и для высокосимметричных направлений в \mathbf{k} -пространстве представлен на рис. 2(а) (энергия отсчитывается от уровня Ферми).

Поведение вещественной части функции Грина $\text{Re}G(\varepsilon)$ (кривая 2 на рис. 2(б)) вблизи уровня Ферми ($\varepsilon(\mathbf{K}) = 0$) свидетельствует о том, что под влиянием разного рода дефектов элементарные возбуждения с высокой вероятностью будут локализованы вблизи этого уровня [5].

Отметим, что в бездефектной решетке графена атомы различных подрешеток (А (●) и В (○) рис. 1(а) и (б)) 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 [5,6,10] 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 $\varepsilon = 0$ равна нулю (как и DOS бездефектного графена).

Другим видом дефекта, который содержит только атомы одной из подрешеток, является «zigzag»-граница. В этом случае, как хорошо видно на рис. 1(а), как и в случае вакансии, связи оборваны только у атомов одной из подрешеток (пусть это будет подрешетка А, как на рис. 1(а)), в то время как атомы другой подрешетки оборванных связей не имеют. В отличие от вакансии — точечного дефекта, который разрушает трансляционную инвариантность решетки вдоль всех направлений, вдоль направления данного протяженного дефекта трансляционная инвариантность сохраняется. В этом направлении можно ввести одномерный вектор обратной решетки $\boldsymbol{\beta} = (0, \beta)$ и квазиволновой вектор $\mathbf{k} = (0, \kappa)$.

Тогда гамильтониан (1) можно записать в виде якобиевой матрицы следующего вида [11,12]:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_F - \Lambda(\kappa) & -\alpha(\kappa) & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ -\alpha(\kappa) & \varepsilon_F & -\beta(\kappa) & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & -\beta(\kappa) & \varepsilon_F & -\alpha(\kappa) & \dots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -\alpha(\kappa) & \varepsilon_F & \dots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & -\beta(\kappa) & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $\alpha(\kappa) = 2J \cos \frac{\kappa a}{2}$; $\beta(\kappa) \equiv \beta = J$. Величина $\Lambda(\kappa)$ описывает возмущение, вносимое в гамильтониан (1) образованием границы (будем считать, что это возмущение захватывает только те атомы, у которых происходит обрыв одной связи). Построение 2D первой зоны Бриллюэна для бездефектного графена и 1D первой зоны Бриллюэна для рассматриваемой задачи приведены на рис. 1(в).

Локальную функцию Грина $G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda)$, которая соответствует линии атомов подрешетки А, лежащих на «zigzag»-границе (эту линию принимаем за начало отсчета $n = 0$), можно записать в виде бесконечной непрерывной дроби [13,14]:

$$G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda) = G_{00}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda) = (\varepsilon \hat{I} - \hat{H})_{00}^{-1} = \frac{1}{\varepsilon + \Lambda - \alpha^2(\mathbf{k}) / [\varepsilon - \beta^2 / (\varepsilon - \alpha^2(\mathbf{k}) / \dots]} = \frac{1}{\varepsilon + \Lambda - \alpha^2 K_{\infty}^{(\beta)}(\varepsilon, \mathbf{k})}, \quad (4)$$

где функция $K_{\infty}^{(\beta)}(\varepsilon, \mathbf{k})$ — непрерывная дробь, соответствующая якобиевой матрице, все диагональные элементы которой равны ε , а на недиагональных позициях чередуются величины β и $\alpha(\mathbf{k})$:

$$K_{\infty}^{(\beta)} = \begin{pmatrix} \varepsilon & \beta & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \beta & \varepsilon & \alpha(\mathbf{k}) & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & \alpha(\mathbf{k}) & \varepsilon & \beta & \dots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \beta & \varepsilon & \dots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \alpha(\mathbf{k}) & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}_{00}^{-1} = \frac{\varepsilon^2 - \beta^2 + \alpha^2(\mathbf{k}) + Z(\varepsilon) \sqrt{(\varepsilon^2 - \varepsilon_0^2)(\varepsilon^2 - \varepsilon'^2)}}{2\alpha^2(\mathbf{k})\varepsilon}, \quad (5)$$

где введены обозначения: $\varepsilon_0^2 \equiv [\alpha(\mathbf{k}) + \beta]^2$ и $\varepsilon'^2 \equiv [\alpha(\mathbf{k}) - \beta]^2$.

Поскольку $\beta = J > 0$, а в пределах 1D первой зоны Бриллюэна $\mathbf{k}a \in [-\pi, \pi]$ (т.е. $\mathbf{k} \in [-M_{\mathbf{k}}, M_{\mathbf{k}}]$), откуда $\alpha(\mathbf{k}) = 2J \cos \frac{\mathbf{k}a}{2} \geq 0$, то значение $\varepsilon_0 > 0$, а величина ε' обращается в нуль в точках $K_{\mathbf{k}}$. Зависимости $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ и $\varepsilon'(\mathbf{k})$ представлены на рис 3. Полоса квазинепрерывного спектра $D = [-\varepsilon_0(\mathbf{k}), -|\varepsilon'(\mathbf{k})|] \cup [|\varepsilon'(\mathbf{k})|, \varepsilon_0(\mathbf{k})]$ двусвязна во всех точках, кроме точки $K_{\mathbf{k}}$ ($\mathbf{k} = 2\pi/3a$), и, соответственно, щель $[-|\varepsilon'(\mathbf{k})|, |\varepsilon'(\mathbf{k})|]$ обращается в нуль только в этой точке. Входящая в соотношение (5) функция

$$Z(\varepsilon) \equiv \Theta(-\varepsilon_0 - \varepsilon) + i\Theta(\varepsilon + \varepsilon_0) \Theta(-|\varepsilon'| - \varepsilon) + \Theta(\varepsilon + |\varepsilon'|) \Theta(|\varepsilon'| - \varepsilon) + i\Theta(\varepsilon - |\varepsilon'|) \Theta(\varepsilon_0 - \varepsilon) - \Theta(\varepsilon - \varepsilon_0) \quad (6)$$

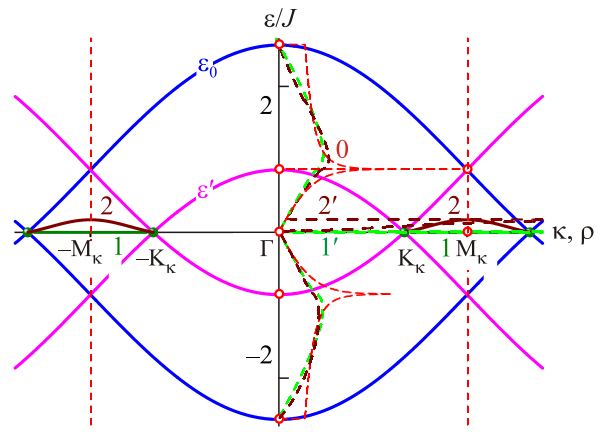


Рис. 3. (Онлайн в цвете) Дисперсионные кривые отщепившихся мод $\varepsilon_g(\mathbf{k})$ при $\Lambda = 0$ (отрезок прямой 1) и при $\Lambda = 0,1$ (кривая 2), а также спектральные плотности атомов, лежащих на границы (кривые 1' и 2' соответственно. Кривая 0 – спектральная плотность идеального графена.

определяется видом функции Грина как в полосе квазинепрерывного спектра D , так и за ее пределами. При $\varepsilon \in D$ функция $G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda)$ имеет мнимую часть и распределение по энергиям внутри полосы квазинепрерывного спектра для атомов подрешетки А, лежащим на «zigzag»-границной линии (обозначим ее как линию с номером $n = 0$), определяется как

$$\rho^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda) = \pi^{-1} \text{Im} G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda). \quad (7)$$

При каждом значении \mathbf{k} интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda) d\varepsilon = 1.$$

При $\varepsilon \notin D$ функция $G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda)$ является чисто вещественной.

Рассмотрим вначале случай $\Lambda = 0$, т.е. будем считать, что влиянием на электронный спектр всех релаксационных и реконструкционных изменений, которые происходят при образовании «zigzag»-границы, можно пренебречь. Функция $G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda)$ в этом случае примет вид

$$G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda) = K_{\infty}^{(\alpha)}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{\varepsilon^2 + (\beta^2 - \alpha^2) + Z(\varepsilon) \sqrt{(\varepsilon^2 - \varepsilon_0^2)(\varepsilon^2 - \varepsilon'^2)}}{2\beta^2 \varepsilon}. \quad (8)$$

Она имеет полюс $\varepsilon_g = 0$, который лежит в энергетической щели $[-|\varepsilon'(\mathbf{k})|, |\varepsilon'(\mathbf{k})|]$ и определяет, таким образом, бездисперсионный локализованный энергетический уровень. Интенсивность данного уровня определяется как

$$\mu_g^{(0)}(\mathbf{k}, \Lambda) = 1 - \int_D \rho^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda) d\varepsilon = \text{re}'_s \Big|_{\varepsilon=0} G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda), \quad (9)$$

где интеграл берется по всей двусвязной полосе квазинепрерывного спектра D . При $\Lambda = 0$ данный вычет отличен от нуля при $\alpha(\mathbf{k}) < \beta$, т.е. при $\mathbf{k} \in [-M_{\mathbf{k}}, -K_{\mathbf{k}}] \cup [K_{\mathbf{k}}, M_{\mathbf{k}}]$ (отрезки прямой l на рис. 3) и равен

$$\mu_g^{(0)}(\mathbf{k}, 0) = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{\beta^2} \Theta(\beta - \alpha) = |1 + 2 \cos a\mathbf{k}| \Theta(-1 - 2 \cos a\mathbf{k}). \quad (10)$$

Интенсивности дискретного уровня ε_g на линиях $n > 0$, образованных атомами, которые находятся под линией $n = 0$, как следует из [15], равны

$$\mu_g^{(n)} = \mu_g^{(0)}(\mathbf{k}, \Lambda) P_n^2(\varepsilon_g), \quad (11)$$

где $P_n(\varepsilon)$ — полиномы степени n , порожденные якобиевой матрицей (2). Они удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$H_{n,n+1} P_{n+1}(\varepsilon) = (\varepsilon - H_{n,n}) P_n(\varepsilon) - H_{n,n-1} P_{n-1}(\varepsilon)$$

при начальных условиях $P_{-1}(\varepsilon) = 0$; $P_0(\varepsilon) = 1$. Несложно показать и доказать (например, методом математической индукции), что при $\varepsilon = \varepsilon_g = 0$ данные полиномы обращаются в нуль для нечетных n (нечетные значения n соответствуют линиям атомов подрешетки В, в частности $n=1$ соответствует атому подрешетки В, лежащему на «zigzag»-границе, рис. 1(a)). Полиномы четных степеней, которые соответствуют линиям атомов подрешетки А, отличны от нуля и образуют геометрическую прогрессию

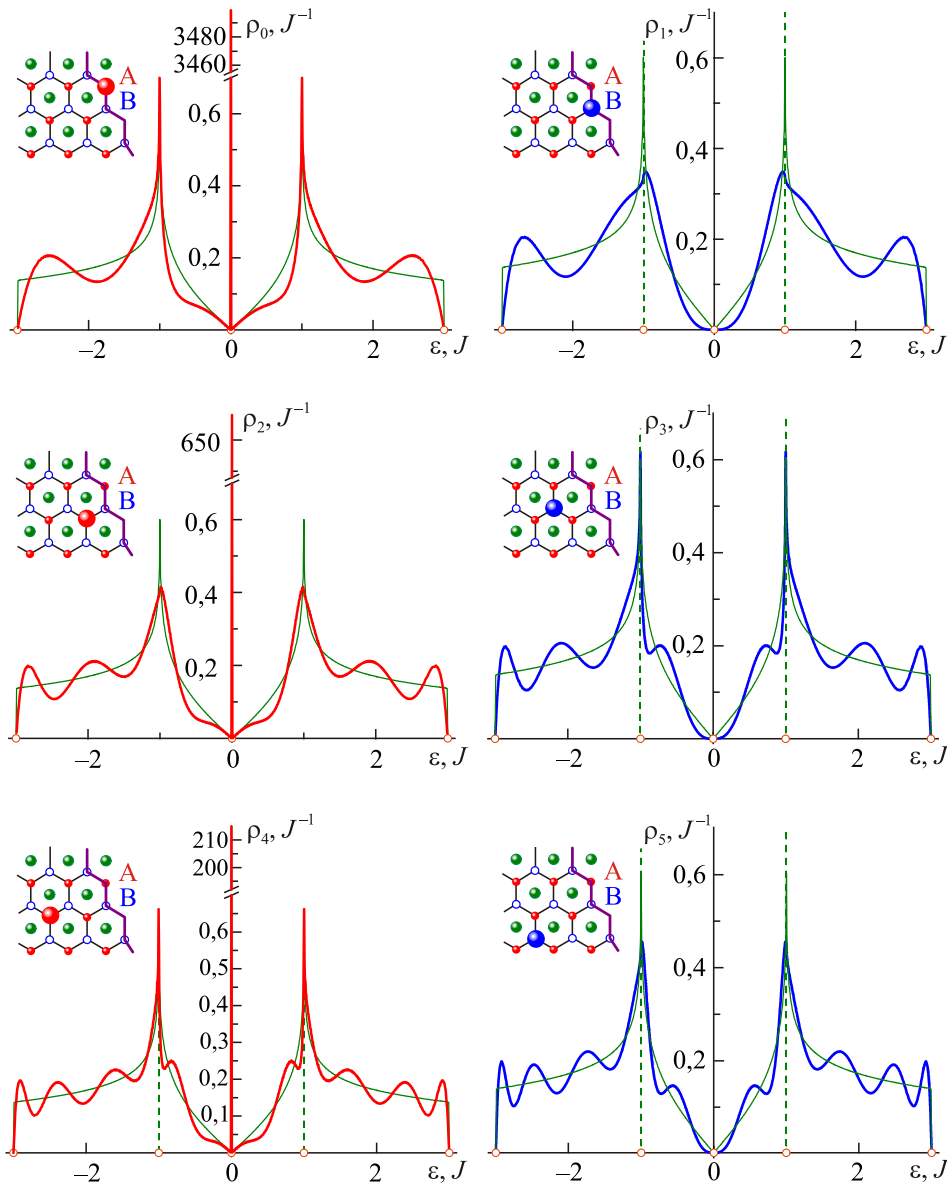


Рис. 4. (Онлайн в цвете) Эволюция электронных LDOS по мере удаления от границы (соответствующие атомы показаны на вставках каждого фрагмента) при $\Lambda = 0$, когда в системе возникает бездисперсионный щелевой уровень с энергией, равной фермиевской.

$$P_{2m-1}(0) = 0; \quad P_{2m}(0) = (-1)^m \left(\frac{\alpha}{\beta} \right)^m. \quad (12)$$

Таким образом, дискретный щелевой уровень $\varepsilon_g = 0$ имеется только в электронных спектрах атомов подрешетки А. При удалении от границы (с ростом параметра n) интенсивность дискретного уровня экспоненциально спадает (т.е. образует бесконечно убывающую геометрическую прогрессию):

$$\begin{aligned} \mu_g^{(n)}(\mathbf{k}) &= \mu_g^{(0)}(\mathbf{k})q^n; \\ q &= P_n^2(0) = \frac{\alpha^2(\mathbf{k})}{\beta^2} = 2(1 + \cos a\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (13)$$

сумма которой равна единице.

На рис. 4 представлены функции $\rho_n(\varepsilon)$ — LDOS атомов, лежащих на линиях с номерами n от 0 до 5 (соответствующий атом показан на вставке каждого из фрагментов). Эти функции рассчитаны с помощью якобиевых матриц, гамильтониана \hat{H} (1), в форме которых он представляется в базисе, полученном ортонормализацией последовательности $\{\hat{H}^p \Psi_0\}_{p=0}^{\infty}$, где в качестве порождающей функции Ψ_0 выбрано единичное возбуждение данного атома. На всех фрагментах для сравнения приведена электронная плотность бездефектного графена. На LDOS атомов подрешетки А ($n=0, 2, 4$) имеются острые (практически дельта-функциональные) пики при $\varepsilon = \varepsilon_g = 0$ (т.е. на уровне Ферми). Площадь под кривыми с ростом n возрастает, стремясь к единице при $n \rightarrow \infty$. Отметим, что вблизи фермиевского уровня каждая из данных LDOS практически совпадает с DOS бездефектного графена, т.е. сохраняет V-образную дираковскую особенность.

На LDOS атомов подрешетки В ($n=1, 3, 5$) пики на уровне Ферми отсутствуют, а площади под всеми кривыми равны единице. Отметим, что на этих LDOS нет и характерных V-образных дираковских особенностей, т.е. вблизи фермиевского уровня эффективная масса электронов отлична от нуля.

2. Учет релаксации на границе

Учтем теперь возможные релаксационные процессы на границе, т.е. будем считать величину $\Lambda(\mathbf{k})$ отличной от нуля. Тогда функция Грина (4) примет вид

$$\begin{aligned} G^{(0)}(\varepsilon, \mathbf{k}, \Lambda) &= \\ &= \frac{1}{2} \frac{\varepsilon^2 + 2\Lambda(\mathbf{k})\varepsilon + \beta^2 - \alpha^2(\mathbf{k}) + Z(\varepsilon) \sqrt{(\varepsilon^2 - \varepsilon_0^2)(\varepsilon^2 - \varepsilon'^2)}}{\Lambda(\mathbf{k})\varepsilon^2 + [\Lambda^2(\mathbf{k}) - \beta^2]\varepsilon + \Lambda(\mathbf{k})[\beta^2 - \alpha^2(\mathbf{k})]}. \end{aligned} \quad (14)$$

Поскольку мы предположили, что возмущение затрагивает только линию $n=0$ и вдоль направления

границы сохраняется трансляционная инвариантность, возмущение $\Lambda(\mathbf{k})$ можно представить в виде

$$\Lambda(\mathbf{k}) = 2\tilde{J} \cos \mathbf{k}a \quad (15)$$

и трактовать, например, как возникновение из-за образования одной свободной π -связи взаимодействия между соседними атомами, лежащими на данной линии (— соответствующий интеграл перескока). В решетке графена эти атомы являются вторыми соседями, взаимодействие между которыми на других линиях мы не учитываем.

Из двух корней знаменателя (14) выберем тот, который стремится к нулю при $\Lambda \rightarrow 0$, т.е. зависимость

$$\varepsilon_g(\mathbf{k}, \Lambda) = \frac{\sqrt{[\beta^2 - \Lambda^2(\mathbf{k})]^2 + 4\alpha^2(\mathbf{k})\Lambda^2(\mathbf{k})} - \beta^2 - \Lambda^2(\mathbf{k})}{2\Lambda(\mathbf{k})} \quad (16)$$

определяет закон дисперсии «приграничной» волны, отщепившейся от полосы квазинепрерывного спектра.

Вычет функции (14) в данном полюсе определяет интенсивность данного дискретного уровня, т.е. относительное число квазичастиц, попавших в отщепившуюся волну. Он равен

$$\begin{aligned} \mu_g^{(0)}(\mathbf{k}, \Lambda) &= -\frac{\beta^2 - \Lambda^2(\mathbf{k})}{\Lambda(\mathbf{k})} \times \\ &\times \frac{\varepsilon_g(\mathbf{k}, \Lambda)}{\sqrt{[\beta^2 - \Lambda^2(\mathbf{k})]^2 + 4\alpha^2(\mathbf{k})\Lambda^2(\mathbf{k})}} \times \\ &\times \Theta \left(-\frac{\beta^2 - \Lambda^2(\mathbf{k})}{\Lambda(\mathbf{k})} \varepsilon_g(\mathbf{k}, \Lambda) \right). \end{aligned} \quad (17)$$

Условие существования данной волны, т.е. условие положительности аргумента Θ -функции Хевисайда

$$\frac{\beta^2 - \Lambda^2(\mathbf{k})}{\Lambda(\mathbf{k})} \varepsilon_g(\mathbf{k}, \Lambda) < 0. \quad (18)$$

совпадает с условием существования бездисперсионного щелевого уровня для случая $\Lambda = 0$, т.е. $\mathbf{k} \in [-M_{\mathbf{k}}, -K_{\mathbf{k}}] \cup [K_{\mathbf{k}}, M_{\mathbf{k}}]$. Дисперсионные зависимости (16) на интервалах существования отщепившейся волны представлены кривыми 2 на рис. 3. Отщепление волны происходит от фермиевского уровня при $\mathbf{k} = \pm K_{\mathbf{k}}$. Закон дисперсии вблизи фермиевского уровня является линейным (релятивистским)

$$\varepsilon_g(K_{\mathbf{k}} + x, \Lambda) \approx \hbar v_F x, \quad (19)$$

где фермиевская скорость v_F равна групповой скорости в точке $K_{\mathbf{k}}$. Групповая скорость, соответствующая дисперсии (16), как функция квазиволнового вектора \mathbf{k} может быть записана в виде

$$v_{gr}(\mathbf{k}) = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{1}{\hbar} = -\frac{\Lambda'(\mathbf{k})}{\hbar} \mu_g^{(0)}(\mathbf{k}, \Lambda) - \frac{aJ^2 \sin a\mathbf{k}}{\hbar} \times \frac{\Lambda(\mathbf{k})}{\sqrt{[\Lambda^2(\mathbf{k}) - J^2]^2 + 16J^2 \Lambda^2(\mathbf{k}) \cos^2 \frac{\mathbf{k}a}{2}}}. \quad (20)$$

В (20) величина $\mu_g^{(0)}(\mathbf{k}, \Lambda)$ определяется соотношением (17), а штрих обозначает дифференцирование по \mathbf{k} . Тогда

$$v_F^{(g)} = v_{gr}(K_{\mathbf{k}}) = \frac{a\sqrt{3}}{\hbar} \frac{J^2 \Lambda'(K_{\mathbf{k}})}{J^2 + \Lambda^2(K_{\mathbf{k}})}, \quad (21)$$

или, с учетом (15),

$$v_F^{(g)} = \frac{a\sqrt{3}}{\hbar} \frac{J^2 \tilde{J}}{J^2 + \tilde{J}^2} = \frac{v_F^{(0)}}{\sqrt{3}} \frac{J \tilde{J}}{J^2 + \tilde{J}^2}, \quad (22)$$

где $v_F^{(0)} = 3aJ/2\hbar$ — фермиевская скорость бездефектного графена с дисперсией (2).

При выполнении (15) дисперсионному соотношению (16) соответствует плотность состояний $g_g(\varepsilon) = \frac{a}{\pi\hbar} v_{gr}^{-1}(\varepsilon)$, где $v_{gr}(\varepsilon)$ — групповая скорость, выраженная как функция энергии.

Из (15), (16) получим, что

$$\zeta \equiv \cos \mathbf{k}a = \frac{\tilde{J}(J^2 - \varepsilon^2) + \sqrt{\tilde{J}^2(J^2 - \varepsilon^2)^2 + 4\varepsilon J^2 \tilde{J}(J^2 - \varepsilon \tilde{J})}}{4\tilde{J}(J^2 - \varepsilon \tilde{J})} \quad (23)$$

(знак перед радикалом выбран так, чтобы значение $\varepsilon = 0$ соответствовало $\mathbf{k} = K_{\mathbf{k}}$). После этого зависимость $g_g(\varepsilon)$ получается с помощью (20) и (23) простыми, но громоздкими вычислениями, окончательный результат которых именно из-за громоздкости мы не выписываем.

Из выражений (15), (16) и (23) легко увидеть, что $\varepsilon_g \in [0, 2\tilde{J}]$. Зависимость $g_g(\varepsilon) \rightarrow \text{const} \sim [v_F^{(g)}]^{-1}$ при $\varepsilon \rightarrow +0$ и имеет корневую расходимость при $\varepsilon \rightarrow 2\tilde{J}$, что характерно для одномерных систем.

Поскольку щелевая волна (16) затухает по мере удаления от границы, ее вклады в LDOS различных атомов также будут различными и равными $\rho_g^{(n)}(\varepsilon) = g_g(\varepsilon) \mu_g^{(n)}(\varepsilon)$. Затухание интенсивности отщепившейся волны описывается соотношением (11). При этом

$$P_1(\varepsilon_g) = \frac{\varepsilon_g + \Lambda}{\alpha} = \frac{\sqrt{(\beta^2 - \Lambda^2)^2 + 4\alpha^2 \Lambda^2} - (\beta^2 - \Lambda^2)}{2\Lambda\alpha} \xrightarrow{\Lambda \rightarrow 0} 0; \quad (24)$$

$$P_2(\varepsilon_g) = \left[-\frac{\beta}{\Lambda} P_1(\varepsilon_g) \right] \xrightarrow{\Lambda \rightarrow 0} \left(-\frac{\alpha}{\beta} \right).$$

Методом математической индукции доказано, что

$$P_{2m+1}(\varepsilon_g) = \left(-\frac{\beta}{\Lambda} \right)^m [P_1(\varepsilon_g)]^{m+1} \xrightarrow{\Lambda \rightarrow 0} 0; \quad (25)$$

$$P_{2m}(\varepsilon_g) = \left[-\frac{\beta}{\Lambda} P_1(\varepsilon_g) \right]^m \xrightarrow{\Lambda \rightarrow 0} \left(-\frac{\alpha}{\beta} \right)^m.$$

То есть на атомах подрешетки В отщепившаяся волна имеет амплитуды, меньшие, чем на атомах подрешетки А, но отличные от нуля (и стремящиеся к нулю при $\Lambda \rightarrow 0$):

$$\mu_g^{(2m+1)} = \mu_g^{(0)} \left(-\frac{\beta}{\Lambda} \right)^{2m} [P_1(\varepsilon_g)]^{2(m+1)} \xrightarrow{\Lambda \rightarrow 0} 0; \quad (26)$$

$$\mu_g^{(2m)} = \mu_g^{(0)} \left[-\frac{\beta}{\Lambda} P_1(\varepsilon_g) \right]^{2m} \xrightarrow{\Lambda \rightarrow 0} \left(-\frac{\alpha}{\beta} \right)^{2m}.$$

Относительная доля энергии отщепившейся волны, которая локализована на атомах подрешетки В:

$$\sum_{m=0}^{\infty} \mu_g^{(2m+1)} = \frac{2\Lambda^2 \alpha^2 - (\beta^2 - \Lambda^2) \left[\sqrt{(\beta^2 - \Lambda^2)^2 + 4\alpha^2 \Lambda^2} - (\beta^2 - \Lambda^2) \right]}{4\Lambda^2 \alpha^2 - (\beta^2 - \Lambda^2) \left[\sqrt{(\beta^2 - \Lambda^2)^2 + 4\alpha^2 \Lambda^2} - (\beta^2 - \Lambda^2) \right]} \xrightarrow{\Lambda \rightarrow 0} 0, \quad (27)$$

а на атомах подрешетки А:

$$\sum_{m=0}^{\infty} \mu_g^{(2m)} = \frac{2\Lambda^2 \alpha^2}{4\Lambda^2 \alpha^2 - (\beta^2 - \Lambda^2) \left[\sqrt{(\beta^2 - \Lambda^2)^2 + 4\alpha^2 \Lambda^2} - (\beta^2 - \Lambda^2) \right]} \xrightarrow{\Lambda \rightarrow 0} 1. \quad (28)$$

Естественно, что $\sum_{m=0}^{\infty} \mu_g^{(2m+1)} + \sum_{m=0}^{\infty} \mu_g^{(2m)} = 1$.

На рис. 5 представлена эволюция LDOS тех же атомов, что и на рис. 4, при релаксационном возмущении $\Lambda(\mathbf{k})$, которое может быть описано соотношением (15) при $\tilde{J} = 0,1J$. На LDOS атомов подрешетки А вблизи уровня Ферми ($\varepsilon = 0$) в зоне проводимости возникают пики шириной $2\tilde{J}$, которые совпадают со спектральными плотностями $\rho_g^{(2m)}(\varepsilon) = g_g(\varepsilon)\mu_g^{(2m)}(\varepsilon)$, рассчитанными с помощью формул (23)–(28) для щелевой волны с законом дисперсии (16). Функции $\rho_g^{(2m)}(\varepsilon)$ представлены на фрагментах рис. 5 штриховыми линиями, которые полностью накладываются на кривые

LDOS. Отметим, что при этом LDOS сохраняет релятивистское (дираковское) поведение, соответствующее при $\varepsilon \rightarrow -0$ фермиевской скорости бездефектного графена $v_F^{(0)} = 3aJ/2\hbar$, а при $\varepsilon \rightarrow +0$ фермиевской скорости (22) в одномерной системе, т.е. угловым коэффициентом прямолинейной зависимости $\rho_g^{(2m)}(\varepsilon \rightarrow +0)$ соотносится с угловым коэффициентом аналогичной зависимости $\rho_g^{(2m)}(\varepsilon \rightarrow -0)$ как $\sim [v_F^{(0)}/v_F^{(g)}]^2$.

Для атомов подрешетки В только на LDOS атома, лежащего непосредственно на границе, заметен маленький всплеск шириной $2\tilde{J}$. Он полностью совпадает со спектральной плотностью $\rho_g^{(1)}(\varepsilon)$. С удалением от гра-

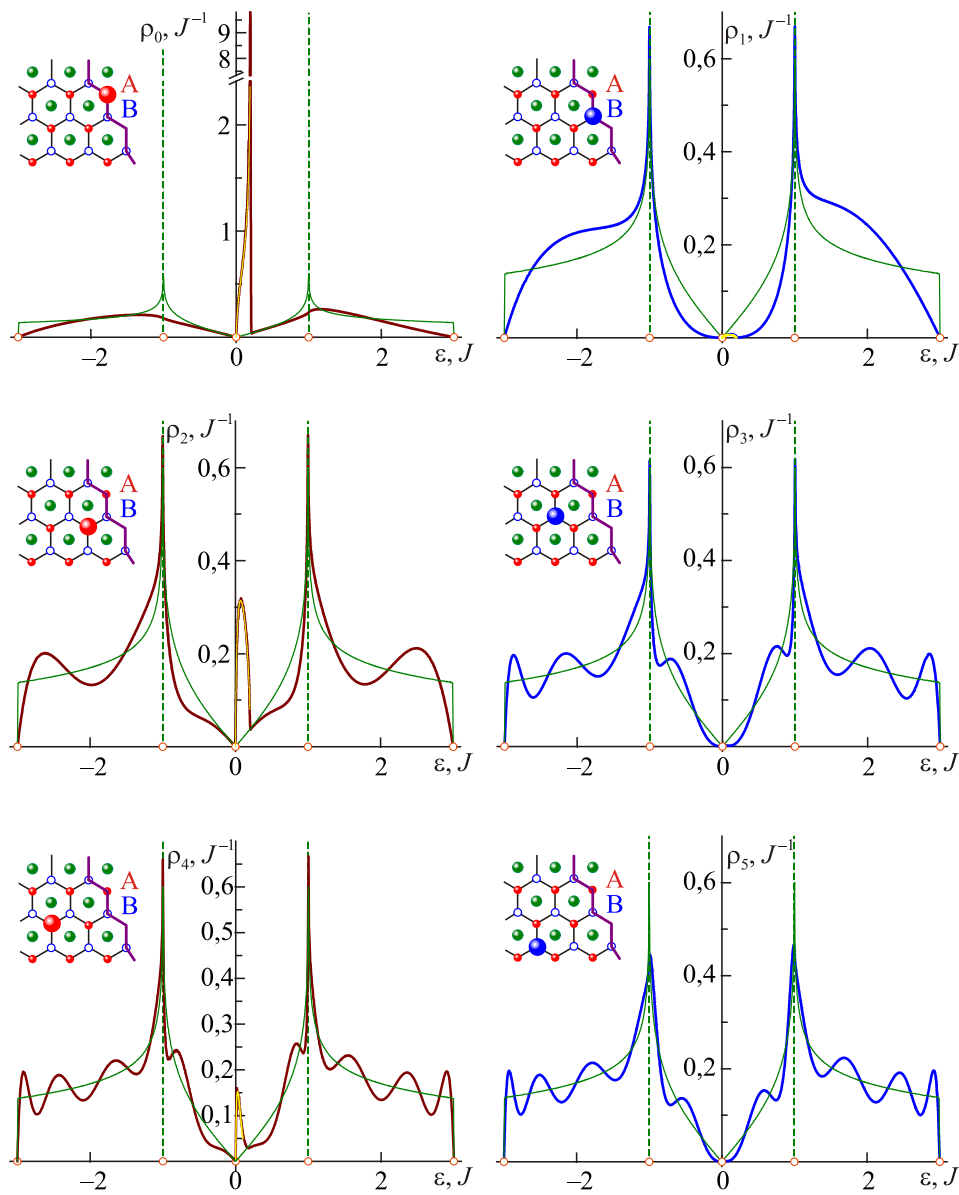


Рис. 5. (Онлайн в цвете) Эволюция по мере удаления от границы электронных LDOS при $\tilde{J} = 0,1J$, когда в системе возникает щелевая волна с дисперсией (16).

ниции такие всплески $\rho_g^{(2m+1)}(\epsilon) = v_g(\epsilon)\mu_g^{(2m+1)}(\epsilon)$ становятся практически незаметными. Вблизи фермиевского уровня поведение LDOS атомов подрешетки В, как и в случае $\Lambda = 0$, не носит релятивистский характер, а соответствует конечной массе квазичастиц.

Таким образом, формирование на графеновом монослое «zigzag»-границы приводит к обогащению его электронного спектра вблизи уровня Ферми. Отметим, что сам рост числа квазичастиц в данном энергетическом диапазоне уже отмечался в большом числе работ (см., например, [16,19]).

В отсутствие приграничной релаксации в системе возникает бездисперсионный дискретный уровень, совпадающий по энергии с фермиевским. Релаксация на данной границе может привести к возбуждению щелевой волны с энергиями, лежащими в зоне проводимости графена. Дисперсия данной волны вблизи уровня Ферми имеет линейный релятивистский характер со скоростью существенно меньшей фермиевской скорости бездефектного графена.

Такие дискретные уровни присущи только атомам одной из подрешеток графена — той, у которой при образовании границы происходит обрыв одной связи. У атомов другой подрешетки обогащение электронного спектра вблизи фермиевского уровня не происходит. При этом электронные спектры этих атомов утрачивают релятивистское поведение (приобретают конечную массу).

3. Деформация фононного спектра графена при образовании «zigzag»-границы

При расчете фононного спектра и колебательных характеристик графена следует иметь в виду, что реально графен может существовать либо в виде свободных микроскопических чешуек, причем обязательно гофрированных, либо в виде плоского монослоя, обя-

зательно нанесенного на подложку. Существование свободных графеновых монослоев невозможно [20]. Если при изучении электронного спектра можно считать подложку диэлектрической и полностью исключить ее из рассмотрения, то при расчете и анализе фононного спектра обязательно следует рассматривать как взаимодействие атомов углерода с атомами подложки, так и движение атомов самой подложки. Более того, низкотемпературные колебательные термодинамические характеристики системы «графен+подложка» будут определяться именно колебаниями атомов подложки, как из-за ее макроскопической толщины, так и из-за высокой дебаевской температуры графена. Поэтому данные характеристики, обычно являющиеся важным источником информации о фононных спектрах, в данном случае такой информации практически не несут.

В то же время на основании имеющихся к настоящему времени данных по теоретическому и экспериментальному изучению фононных спектров графита и тонких графеновых нанопленок [3–6,21–25] можно сделать однозначный вывод, что при частотах, превышающих частоту, связанную со слабым ван-дер-ваальсовским межслоевым взаимодействием, фононные спектры данных объектов совпадают с фононным спектром графенового монослоя. Поскольку связь графена с подложкой также является ван-дер-ваальсовской, то также, начиная с некоторой частоты ω^* , фононный спектр системы «графен на подложке» перестанет ощущать присутствие подложки.

На рис. 6 представлены вклады в фононную плотность состояний находящегося на некоторой подложке неограниченного образца графена от атомных смещений вдоль обоих направлений в плоскости графенового слоя $\rho_a^{(\infty)}(\omega) + \rho_a^{(\infty)}(\omega)$ (рис. 6(a), кривая 1) и в нормальном к слою направлении $\rho_c^{(\infty)}(\omega)$ (кривая 2). Символ (∞) обозначает удаленность от границы, достаточ-

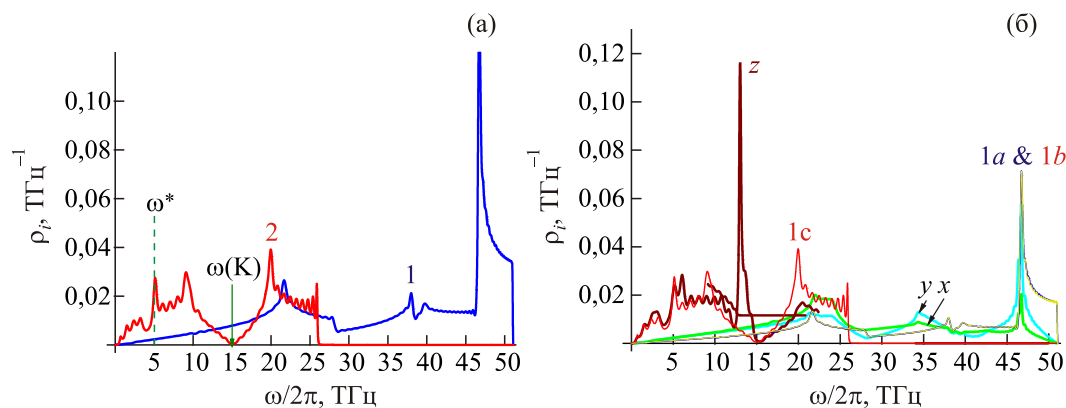


Рис. 6. (Онлайн в цвете) (а) Вклады в фононную плотность состояний графена на подложке от атомных смещений вдоль графенового слоя и нормально к нему (соответственно кривые 1 и 2). (б) Фононные спектральные плотности, соответствующие смещениям вдоль разных кристаллографических направлений атома бездефектного графена (кривые с номером 1) и атома «зубца» «zigzag»-границы (x — в плоскости слоя, нормально к границе; y — вдоль границы; z — нормально к плоскости слоя).

ную для того, чтобы полностью пренебречь ее влиянием. Кривая 1 практически не отличается от аналогичной зависимости для би- или триграфена [25], т.е. колебания в плоскости слоя практически не ощущают влияния подложки. На кривой 2 вклад подложки более заметен и сосредоточен в частотном диапазоне $\omega \leq \omega^* \sim 5$ ТГц. При $\omega > \omega^*$ функция $\rho_c^{(\infty)}(\omega)$ практически совпадает с соответствующей спектральной плотностью бездефектного и безграничного графенового монослоя. Отметим, что именно имеющий характерный 3D вид вклад подложки в колебательный спектр обеспечивает устойчивость («планарную стабильность») рассматриваемой системы.

В частотном интервале $\omega \in (10, 20)$ ТГц спектральная плотность $\rho_c^{(\infty)}(\omega)$ имеет минимум, аналогичный V-образной особенности на электронной плотности. Это обусловлено расщеплением колебательных мод, которое происходит в нашей системе при $\omega > \omega^*$ (аналогично расщеплению фоновых мод в графите при частотах, превышающих частоту особенности ван Хова, которая соответствует переходу от замкнутых изочастотных поверхностей к открытым вдоль оси c [25]). При этом моды, поляризованные вдоль оси c , могут быть описаны скалярной моделью на гексагональной сотовой решетке графена (аналогично электронам в приближении сильной связи). Как и в электронном спектре, час-

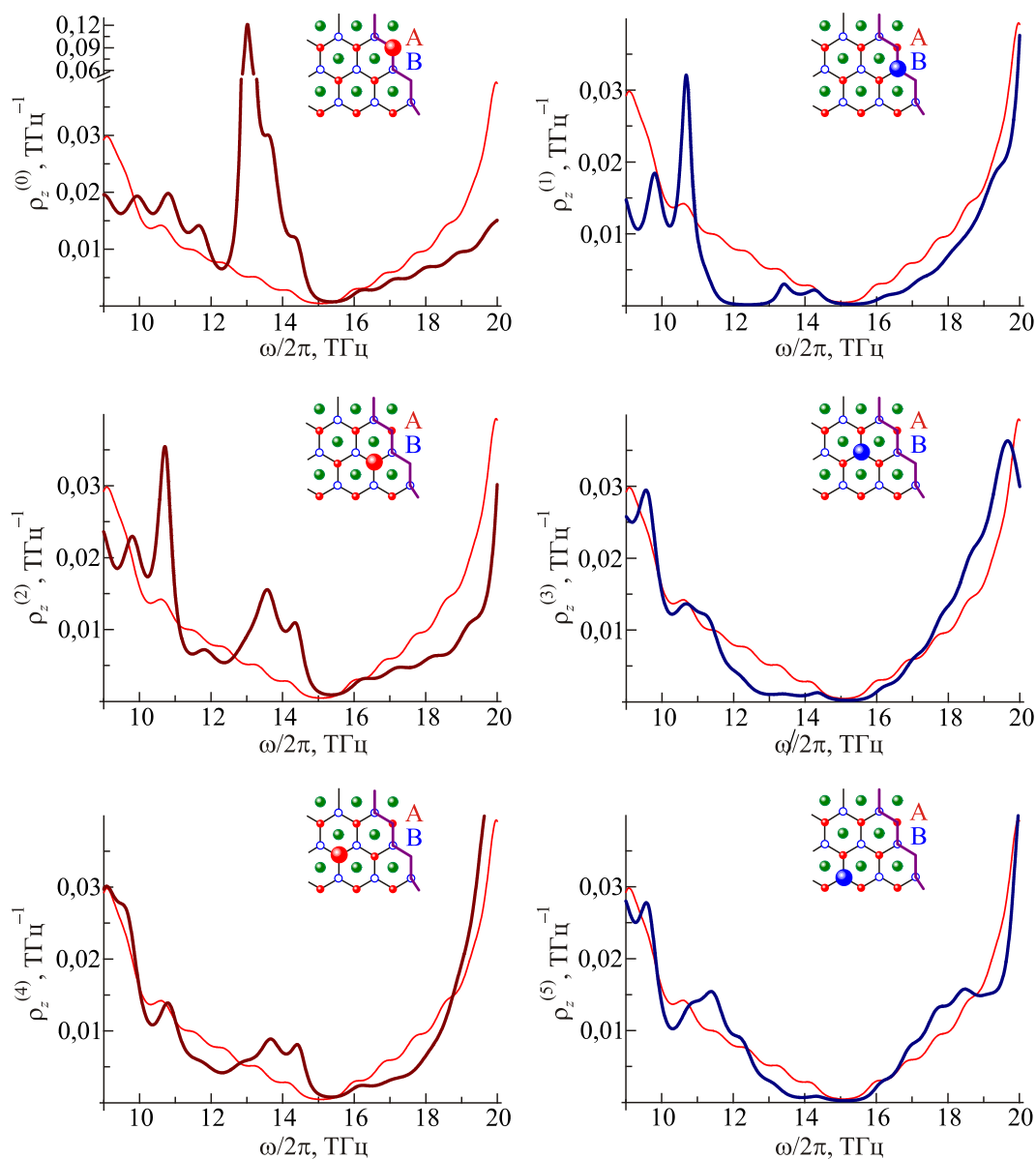


Рис. 7. (Онлайн в цвете) Эволюция по мере удаления от «zigzag»-границы фоновых спектральных плотностей, порожденных атомными смещениями, нормальными к плоскости графенового слоя.

тота этого минимума соответствует К-точке первой зоны Бриллюэна, где соприкасаются оптическая и акустическая моды, поляризованные вдоль оси c (см. [23]).

Как было показано в [5], вблизи частоты $\omega(K) \approx 15$ ТГц под влиянием разного рода дефектов могут формироваться квазилокализованные состояния, обогащающие фононный спектр в данном частотном диапазоне. На рис. 6(б) приведены фононные спектральные плотности, соответствующие смещениям находящегося на «zigzag»-границе атома «зубца» (т.е. подрешетки А) вдоль разных кристаллографических направлений. Кривые x и y соответствуют спектральным плотностям $\rho_x^{(0)}(\omega)$ и $\rho_y^{(0)}(\omega)$, порожденным смещением данного атома в плоскости графенового слоя нормально к границе и вдоль границы соответственно (см. рис. 1(а)); кривая z – спектральной плотности $\rho_z^{(0)}(\omega)$, порожденной смещением перпендикулярно к плоскости слоя. На этой спектральной плотности имеется ярко выраженный пик вблизи частоты $\omega(K)$, который аналогичен пикам на электронных LDOS, показанных на рис. 4 и 5. С большой долей уверенности можно предположить, что данный пик также обусловлен отщепившейся от квазиизгибных мод фононного спектра графена щелевой модой, аналогичной моде (16) в электронном спектре.

Данную аналогию подтверждает и характер эволюции по мере удаления от границы спектральных плотностей $\rho_z^{(n)}(\omega)$ вблизи частоты $\omega(K)$, представленный на рис. 7. Как и в случае электронного спектра, спектральные плотности атомов подрешетки А имеют вблизи $\omega(K)$ максимумы $\rho_z^{(n)}(\omega) > \rho_z^{(\infty)}(\omega)$ ($n = 0, 2, 4$), а для атомов подрешетки В при данных частотах $\rho_z^{(n)}(\omega) < \rho_z^{(\infty)}(\omega)$ ($n = 0, 2, 4$).

Таким образом, формирование «zigzag»-границы существенно обогащает фононный спектр в частотном диапазоне вблизи частоты соприкосновения акустической и оптической ветвей, поляризованных нормально к плоскости графенового слоя.

Заключение

В настоящей работе показано, что формирование границы «zigzag»-хиральности 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.

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. Дисперсия этих

волн определяется характером релаксационных процессов при образовании границы. В электронном спектре дисперсия является релятивистской, но соответствует значительно меньшим значениям групповой скорости, чем в безграничном графеновом монослое.

Отщепившиеся щелевые волны формируют на локальных плотностях состояний 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 особую роль квазиизгибных фононов в электрон-фононном взаимодействии в слоистых соединениях, в частности в графеновых структурах, указывалось, например, в [1,26]. Эти фононы в данной частотной области практически не взаимодействуют в фононами других поляризаций, а также имеют высокие групповые скорости, что может определить их определяющий вклад в электрон-фононное взаимодействие. Все вышеперечисленные обстоятельства могут способствовать формированию в таких графеновых образцах куперовских пар и переходу графена с «zigzag»-границей в сверхпроводящее состояние.

Авторы благодарны за оказанную им честь посвятить эту работу светлой памяти Анатолия Илларионовича Звягина. У многих из нас, кому посчастливилось знать Анатолия Илларионовича лично и работать вместе с ним, навсегда сохранятся самые теплые воспоминания об этом прекрасном ученом и замечательном человеке, признательность и благодарность за творческую и доброжелательную атмосферу, которую он постоянно создавал вокруг себя.

Работа поддержана ФФИ НАН Украины (грант № 4/17 –Н).

1. Е.Г. Максимов, *УФН* **170**, 1033 (2000); *УФН* **178**, 175 (2008).
2. Г.М. Элиашберг, *ЖЭТФ* **38**, 966 (1960); *ЖЭТФ* **39**, 1437 (1961).
3. T.E. Weller, M. Ellerby, S.S. Saxena, R.P. Smith, and N.T. Skipper, *Nat. Phys.* **1**, 39 (2005).
4. M.P.M. Dean, C.A. Howard, S.S. Saxena, and M. Ellerby, *Phys. Rev. B* **81**, 045405 (2010).
5. A. Feher, И.А. Господарев, В.И. Гришаев, К.В. Кравченко, Е.В. Манжелий, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **35**, 862 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 679 (2009)].
6. V.V. Eremenko, V.A. Sirenko, I.A. Gospodarev, E.S. Syркин, S.B. Feodosyev, I.S. Bondar, S.S. Saxena, A. Feher, K.A. Minakova, *Fiz. Nizk. Temp.* **42**, 134 (2016) [*Low Temp. Phys.* **42**, 99 (2016)].
7. С. Новоселов, *УФН* **181**, 1299 (2011).
8. A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
9. Shangling Wu, Lei Jing, Qunxiang Li, Q.W. Shi, Jie Chen, Xiaoping Wang, and Jinlong Yang, arXiv: 0711.1018[cond. Mat.mes-hall].

10. 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. and Devices* **1**, 167 (2016).
11. В.И. Пересада, Е.С. Сыркин, *ФНТ* **3**, 229 (1977) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **3**, 110 (1977)].
12. A.A. Maradudin, *Surface Waves*, in: *Modern Problems of Surface Physics*, ISCMP (1980).
13. В.И. Пересада, В.Н. Афанасьев, В.С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **1**, 227 (1975)].
14. R. Haydock, in: *Solid State Physics* **35**, H. Ehrenreich et al. (eds.), Academic Press, New York (1980), p. 129.
15. А.В. Котляр, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **32**, 343 (2006) [*Low Temp. Phys.* **32**, 256 (2006)].
16. V.A. Saroka, M.V. Shuba, and M.E. Portnoi, *Phys. Rev. B* **95**, 155438 (2017).
17. J.-C. Charlier¹, P.C. Eklund, J. Zhu, and A. C. Ferrari, *Topics Appl. Physics* **111**, 673 (2008).
18. E.V. Castro, N.M.R. Peres, J.M.B. Lopes dos Santos, A.H.C. Neto, and F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 026802 (2008).
19. Chandrima Chakravarty, Bikash Mandal, and Pranab Sarkar, *Phys. Lett. A* **381**, 307 (2017).
20. Л.Д. Ландау, *ЖЭТФ* **7**, 627 (1937).
21. R. Nicklow, N. Wakabayashi, and H.G. Smith, *Phys. Rev. B* **5**, 4951 (1972).
22. Н. Вакабаяси, Г. Смит, *Фононы*, в кн.: *Физические свойства твердых тел и жидкостей. Исследования методом рассеяния нейтронов*, Мир, Москва (1980).
23. J. Maultzsch., S. Reich, C. Thomsen, H. Requardt, and P. Ordejón, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 075501 (2004).
24. И.А. Господарев, К.В. Кравченко, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **35**, 751 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 589 (2009)].
25. И.А. Господарев, В.В. Еременко, К.В. Кравченко, В.А. Сиренко, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **36**, 436 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 344 (2010)].
26. H. Ochoa, E.V. Castro, M.I. Katsnelson, and F. Guinea, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures* **44**, 963 (2012).

Electron and phonon states localized near boundary of graphene

V.V. Eremenko, V.A. Sirenko, I.A. Gospodarev, E.S. Syrkin, S.B. Feodosyev, I.S. Bondar, A. Feher, and K.A. Minakova

Analytical and numerical analysis was performed for an electron and phonon spectra evolution under formation of the boundary with “zigzag”-chirality. It is found an excitation of the wave with relativistic dispersion. The wave propagates along the boundary and decays with distance from it. The conditions of the occurrence of the wave and its properties are determined. It is shown, in particular, that the wave propagates over the atoms of sublattice, which incorporates those with bonds, broken during formation of the boundary. The local densities of states of the atoms of such sublattice gain sharp resonances due to gapped wave. It is found, that a formation on graphene layer of the boundary with given chirality has a similar effect on the phonon modes, which are polarized normally to the layer, and the sharp resonances are formed at frequencies in vicinity of quasiflexural ones at quasiwave vector in the K-point of the first Brillouin zone. In this way, appearance of the “zigzag”-boundary increases both the number of charge carriers and of phonons with high group velocity, which are able to produce significant contribution to electron-phonon coupling.

PACS: **63.22.-m** Phonons or vibrational states in low-dimensional structures and nanoscale materials;
63.22.Rc Phonons in graphene;
63.20.kp Phonon-defect interactions;
73.22.-f Electronic structure of nanoscale materials and related systems;
73.22.Pr Electronic structure of graphene.

Keywords: quasiparticle spectrum, nanostructures, graphene, defect, surface waves.