

С.П. РЕПЕЦЬКИЙ,<sup>1</sup> О.В. ТРЕТЯК,<sup>2</sup> І.Г. ВИШИВАНА<sup>2</sup><sup>1</sup> Київський національний університет імені Тараса Шевченка  
(Вул. Володимирська, 64, Київ; e-mail: srepetsky@univ.kiev.ua)<sup>2</sup> Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Інститут високих технологій  
(Просп. Глушкова, 4-г, Київ)

## ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА ТА ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ ГРАФЕНУ З ДОМІШКОЮ АЗОТУ

УДК 539

На основі моделі сильного зв'язку з використанням обмінно-кореляційних потенціалів у теорії функціонала густини досліджена електронна структура та електропровідність графену з домішкою азоту. В ролі базису вибираються хвильові функції  $2s$ -,  $2p$ -станів нейтральних незв'язаних атомів вуглецю. Встановлено, що гібридизація зон призводить до розщеплення енергетичного спектра електронів в області рівня Фермі. У графені з домішкою азоту завдяки перекриттю  $2p$ -енергетичних зон задана вище щільність проявляється як квазіщільність, в області якої густина електронних станів має значно менше значення порівняно з іншою областю спектра. Встановлено, що зі збільшенням концентрації азоту електропровідність графену зменшується. Оскільки зі збільшенням концентрації азоту густина станів на рівні Фермі зростає, то зменшення електропровідності зумовлено більш різким зменшенням часу релаксації електронних станів.

*Ключові слова:* графен з домішкою азоту, енергетичний спектр електронів, модель сильного зв'язку.

Одним зі шляхів цілеспрямованої зміни властивостей графену з метою використання їх у наноелектроніці та спіновій електроніці є внесення домішок інших елементів. Наявність домішок може призводити до зміни симетрії кристалічної ґратки та утворенню додаткових енергетичних щілин, ширина яких залежить від типу домішок та їх концентрації [1–7].

У роботах [1, 2] в простій однозонній моделі Лівшица для неупорядкованого кристала аналітично досліджено утворення щілини у енергетичному спектрі електронів поблизу точки Дірака при збільшенні концентрації домішки.

У роботі [3] в рамках теорії функціонала густини з використанням методу псевдопотенціалу досліджено електронну структуру ізольованого моношару, бішару та тришарового графену, що був вирощений на ультратонких шарах гексагонального нітриду бору  $h$ -BN. Показано, що для одного шару графену на моношарі  $h$ -BN з'являється заборонена зона шириною 57 меВ.

У роботі [4] аналогічним до вказаного методом досліджено графен з домішками алюмінію, кремнію, фосфору та сірки. Показано [4], що графен з 3% домішкою фосфору має щільність шириною 0,67 еВ.

У роботі [5] в рамках теорії функціонала густини з використанням узагальненого градієнтного наближення для обмінно-кореляційного потенціалу досліджено електронну структуру графену. Використовуючи пакет програм QUANTUM-ESPRESSO, показана можливість відкриття щілини у енергетичному спектрі графену при внесенні атомів бору та азоту (ширина щілини – 0,49 еВ), а також атомів бору та адсорбованих на поверхні атомів літію (ширина щілини – 0,166 еВ).

У роботі [6, 7] запропоновано методи прямого вимірювання енергії точки Дірака та енергії Фермі графену у різних гетероструктурах. Для графену у багатошаровій  $Al_2O_3$ /графен/ $SiO_2$ /Si структурі енергія точки Дірака дорівнює 3,58 еВ, а енергія Фермі дорівнює 3,25 еВ [6].

Однак вплив домішок на електронну структуру та пов'язані з нею властивості графену досліджено недостатньо.

© С.П. РЕПЕЦЬКИЙ, О.В. ТРЕТЯК,  
І.Г. ВИШИВАНА, 2015

У нашій роботі на основі багатозонної моделі сильного зв'язку досліджено вплив домішки азоту на електронну структуру і електропровідність графену.

Дослідження енергетичного спектра та електропровідності проведені на основі розвинуеного в роботах [8–13] методу кластерного розкладу для двочасових функцій Гріна системи електронів неупорядкованого кристала. За нульове наближення у цьому методі кластерного розкладу вибрано наближення когерентного потенціалу. Показано, що внески процесів розсіяння електронів на кластерах зменшуються зі збільшенням числа вузлів у кластері за деяким малим параметром [8]. У вказаних роботах опис електрон-електронної та електрон-фононної взаємодій засновано на діаграмній техніці для температурних функцій Гріна, що є узагальненням відомої техніки для однорідного електронного газу [14]. При цьому було використано відомі співвідношення між спектральними представленнями для температурної та двочасової функцій Гріна.

У розрахунках енергетичного спектра та електропровідності графену з домішкою азоту в ролі базису вибирались дійсні хвильові функції  $2s$ -,  $2p$ -станів нейтральних незв'язаних атомів вуглецю. Хвильові функції нейтральних незв'язаних атомів знаходились з рівняння Кона-Шема в теорії функціонала густини. Обмінно-кореляційний потенціал розраховувався в метаузагальненому градієнтному наближенні [15]. Матричні елементи гамільтоніана розраховувались за методом Слетера-Костера [16]. При цьому враховувались перші три координатні сфери.

Нехтуючи внесками процесів розсіяння електронів на кластерах, що складаються з трьох та більше атомів, які є малими за вказаним вище параметром [8], для густини електронних станів отримуємо

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\nu} \sum_{i,\gamma,\sigma} P_{0i}^\lambda g_{0i\gamma\sigma}^\lambda(\varepsilon),$$

$$g_{0i\gamma\sigma}^\lambda(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \tilde{G} + \tilde{G} t_{0i}^\lambda \tilde{G} + \sum_{(nj) \neq (0i)} P_{nj0i}^{\lambda'/\lambda} \times \right. \quad (1)$$

$$\left. \times \tilde{G} \left[ t_{nj}^{\lambda'} + T^{(2)\lambda 0i, \lambda n_j} + T^{(2)\lambda' n_j, \lambda' 0i} \right] \tilde{G} \right\}^{0i\gamma\sigma, 0i\gamma\sigma},$$

де  $i$  – номер підґратки,  $\nu$  – кількість підґраток,  $\gamma$  – номер енергетичної зони,  $\sigma$  – квантове число проекції спіну електрона на вісь  $z$ .

У виразі (1)

$$T^{(2)n_1 i_1, n_2 i_2} = \left[ I - t^{n_1 i_1} \tilde{G} t^{n_2 i_2} \tilde{G} \right] \times$$

$$\times t^{n_1 i_1} \tilde{G} t^{n_2 i_2} \left[ I + \tilde{G} t^{n_1 i_1} \right],$$

$t^{n_1 i_1}$  – оператор розсіяння на одному вузлі, що визначається виразом:

$$t^{n_1 i_1} = \left[ I - (\Sigma^{n_1 i_1} - \sigma^{n_1 i_1}) \tilde{G} \right] (\Sigma^{n_1 i_1} - \sigma^{n_1 i_1}). \quad (2)$$

У формулі (1)  $P_{0i}^\lambda$ ,  $P_{nj0i}^{\lambda'/\lambda}$  – відповідно ймовірності та умовні ймовірності розміщення атомів сорту  $\lambda$ .

У виразах (1), (2)  $\tilde{G} = \tilde{G}_r$  – запізнювальна функція Гріна ефективного середовища, що описується когерентним потенціалом  $\sigma^{n_1 i_1}$ .

Використовуючи формулу Кубо та зазначену вище діаграмну техніку, в роботах [9–12], отримано вираз для електропровідності системи електронів неупорядкованого кристала. Нехтуючи внесками процесів розсіяння на кластерах з двох та більше вузлів, статичну електропровідність можна представити у вигляді [11–13]:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2 \hbar}{4\pi V_1} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_1} \sum_{s,s'=+,-} (2\delta_{ss'} - 1) \times \right.$$

$$\times \sum_{\sigma\gamma,i} \left\{ \left[ \nu_\beta \tilde{K} \left( \varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'} \right) \right] + \right.$$

$$+ \sum_{\lambda, m_{\lambda i}} P_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}} \tilde{K} \left( \varepsilon_1^{s'}, \nu_\beta, \varepsilon_1^s \right) t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}} \left( \varepsilon_1^s \right) \times$$

$$\times \tilde{K} \left( \varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'} \right) t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}} \left( \varepsilon_1^{s'} \right) + \sum_{\lambda, m_{\lambda i}} P_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}} \times$$

$$\times \sum_{\substack{l_j \neq 0i \\ \lambda', m_{\lambda' j}}} P_{lj0i}^{\lambda' m_{\lambda' j} / \lambda m_{\lambda i}} \left[ \left[ \tilde{K} \left( \varepsilon_1^{s'}, \nu_\beta, \varepsilon_1^s \right) \nu_\alpha \tilde{G} \left( \varepsilon_1^{s'} \right) \right] \times \right.$$

$$\times T^{(2)\lambda m_{\lambda i} 0i, \lambda' m_{\lambda' j} l_j} \left( \varepsilon_1^{s'} \right) +$$

$$+ \left[ \tilde{K} \left( \varepsilon_1^{s'}, \nu_\beta, \varepsilon_1^s \right) \nu_\alpha \tilde{G} \left( \varepsilon_1^{s'} \right) \right] \times$$

$$\times T^{(2)\lambda' m_{\lambda' j} l_j, \lambda m_{\lambda i} 0i} \left( \varepsilon_1^{s'} \right) +$$

$$+ \left[ \tilde{K} \left( \varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'} \right) \nu_\beta \tilde{G} \left( \varepsilon_1^s \right) \right] \times$$

$$\times T^{(2)\lambda m_{\lambda i} 0i, \lambda' m_{\lambda' j} l_j} \left( \varepsilon_1^s \right) +$$

$$\left. + \left[ \tilde{K} \left( \varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'} \right) \nu_\beta \tilde{G} \left( \varepsilon_1^s \right) \right] \times \right.$$

$$\begin{aligned}
 & \times T^{(2)\lambda' m_{\lambda' j} l_j, \lambda m_{\lambda i} 0 i}(\varepsilon_1^s) + \tilde{K}(\varepsilon_1^{s'}, \nu_\beta, \varepsilon_1^s) \times \\
 & \times \left( t_{l_j}^{\lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'}) + \right. \\
 & + t_{l_j}^{\lambda' m_{\lambda' j}}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T^{(2)\lambda m_{\lambda i} 0 i, \lambda' m_{\lambda' j} l_j}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & + T^{(2)\lambda' m_{\lambda' j} l_j, \lambda m_{\lambda i} 0 i}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) t_{0i}^{\lambda m_{\lambda i}}(\varepsilon_1^{s'}) + \\
 & + T^{(2)\lambda' m_{\lambda' j} l_j, \lambda m_{\lambda i} 0 i}(\varepsilon_1^s) \tilde{K}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) \times \\
 & \times T^{(2)\lambda m_{\lambda i} 0 i, \lambda' m_{\lambda' j} l_j}(\varepsilon_1^{s'}) + T^{(2)\lambda' m_{\lambda' j} l_j, \lambda m_{\lambda i} 0 i}(\varepsilon_1^{s'}) \times \\
 & \times \left. \tilde{K}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) T^{(2)\lambda' m_{\lambda' j} l_j, \lambda m_{\lambda i} 0 i}(\varepsilon_1^{s'}) \right) \left. \right\}^{0i\gamma\sigma, 0i\gamma\sigma} + \\
 & + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 f(\varepsilon_1) f(\varepsilon_2) \langle \Delta G_{\alpha\beta}^{II}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \rangle, \quad (3)
 \end{aligned}$$

де  $\tilde{K}(\varepsilon_1^s, \nu_\alpha, \varepsilon_1^{s'}) = \tilde{G}(\varepsilon_1^{s'}) \nu_\alpha \tilde{G}(\varepsilon_1^s)$ ,

$$\tilde{G}(\varepsilon_1^+) = \tilde{G}_r(\varepsilon_1) \tilde{G}_r(\varepsilon_1^-) = \tilde{G}_a(\varepsilon_1) = (\tilde{G}_r(\varepsilon_1))^*,$$

$f(\varepsilon)$  – функція розподілу Фермі,  $V_1$  – об'єм примітивної комірки,  $e$  – заряд електрона,  $\hbar$  – стала Планка.

У формулі (3)  $\Delta G_{\alpha\beta}^{II}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$  – складова двочастинкової функції Гріна, що виражається через вершинну функцію масового оператора електрон-електронної взаємодії [11]. Як показують числові розрахунки, внесок останнього доданка не перевищує декількох відсотків, тому у наших розрахунках цим внеском нехтувалось.

Оператор  $\alpha$ -проекції швидкості електрона  $\nu_\alpha$  – у формулі (3) дорівнює:

$$\nu_{\alpha i, i'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial h_{i, i'}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha}.$$

Розрахунки енергетичного спектра та електропровідності графену виконано для температури  $T = 0$  К.

На рис. 1 наведена залежність енергії електрона  $\varepsilon$  в чистому графені від хвильового вектора  $\mathbf{k}$ , яка отримана з умови для полюсів функції Гріна. Вектор  $\mathbf{k}$  напрямлений від центра зони Бріллюена (точка  $\Gamma$ ) до точки Дірака (точка  $K$ ).

На рис. 1  $a = \sqrt{3}a_0$ , де  $a_0 = 0,142$  нм – найменша відстань між атомами вуглецю.

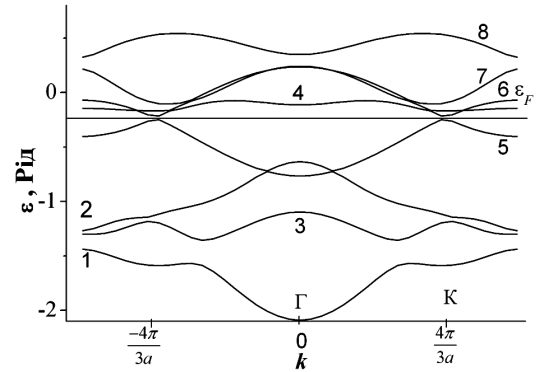


Рис. 1. Залежність енергії електрона в чистому графені від модуля хвильового вектора  $\mathbf{k}$  для енергетичних зон: 1, 2 – 2s; 3, 4 – 2p<sub>x</sub>; 5, 6 – 2p<sub>y</sub>; 7, 8 – 2p<sub>z</sub>

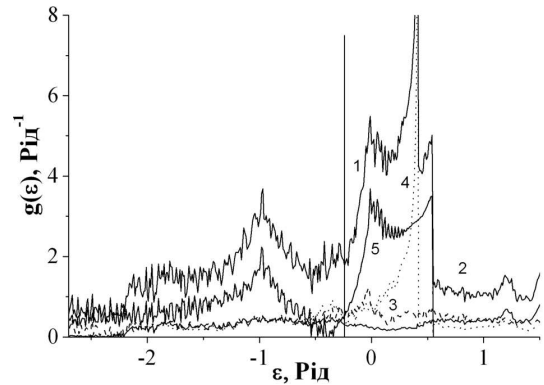


Рис. 2. Енергетична залежність густини електронних станів  $g(\varepsilon)$  графену з домішкою азоту 1%. Повна густина станів – 1, парціальні густини станів: 2 – 2s, 3 – 2p<sub>x</sub>, 4 – 2p<sub>y</sub>, 5 – 2p<sub>z</sub>

На рис. 2, 3 наведено енергетичну залежність густини електронних станів  $g(\varepsilon)$  графену з домішкою атомів азоту, яка розрахована за формулою (1). Атоми азоту заміщують атоми вуглецю у вузлах кристалічної ґратки графену.

Вертикальною лінією відображено положення рівня Фермі.

На рис. 3 наведена частина енергетичного спектра поблизу рівня Фермі.

Як видно з рис. 1–3, гібридизація зон призводить до появи щілини в 2p<sub>z</sub>-енергетичній зоні, що зумовлена (ppπ)-зв'язком [16]. Електронні стани в цій зоні описуються атомними хвильовими функціями  $z$ -симетрії. Атоми вуглецю в чистому графені знаходяться у двох нееквівалентних положеннях в елементарній комірці. Завдяки цьому одно-

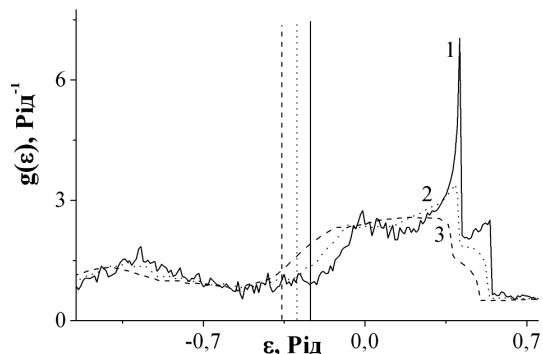


Рис. 3. Енергетична залежність густини електронних станів  $g(\varepsilon)$  графену з домішкою азоту: 1 – 1 ат.%, 2 – 5 ат.%, 3 – 10 ат.%

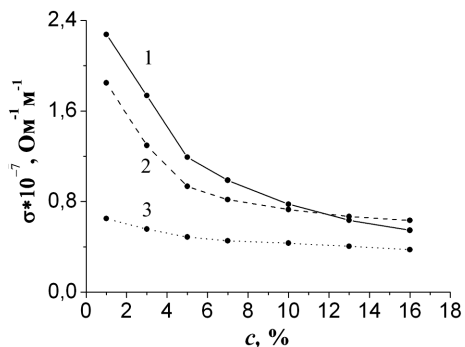


Рис. 4. Залежність компонентів тензора електропровідності від концентрації домішки азоту  $c$ : 1 –  $\sigma_{xx}$ , 2 –  $\sigma_{yy}$ , 3 –  $\sigma_{xy}$

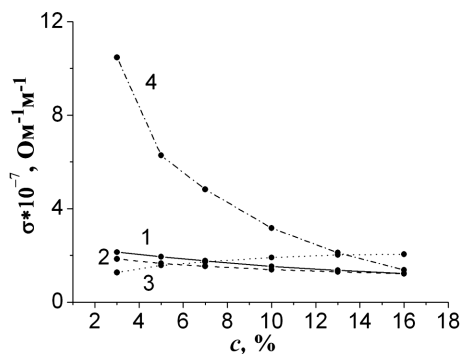


Рис. 5. Залежність  $2s, 2p$ -парціальних складових компоненти  $\sigma_{xx}$  тензора електропровідності від концентрації домішки  $c$ : 1 –  $2s$ , 2 –  $2p_x$ , 3 –  $2p_y$ , 4 –  $2p_z$

му і тому самому типу зв'язку відповідають дві енергетичні зони (рис. 1). Рівень Фермі розташований посередині щілини. Його положення відповідає положенню точки Дірака. Ширина щілини

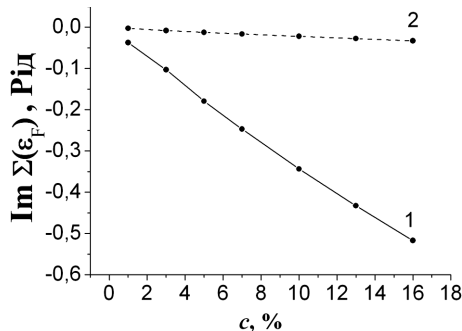


Рис. 6. Залежність повної та  $2p_z$ -парціальної складової уявної частини масового оператора функції Гріна графену від концентрації домішки азоту  $c$ : 1 – уявна частина масового оператора, 2 –  $2p_z$ -парціальна складова

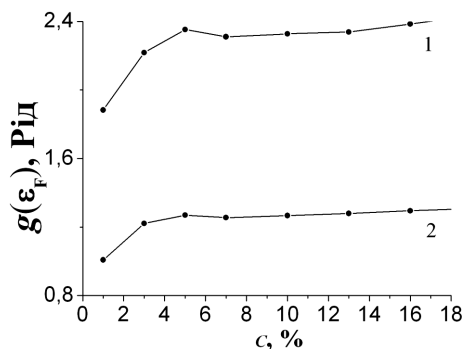


Рис. 7. Залежність повної та  $2p_z$ -парціальної складової густини електронних станів  $g(\varepsilon)$  на рівні Фермі графену від концентрації домішки азоту  $c$ : 1 – повна густина станів, 2 –  $2p_z$ -парціальна складова

дорівнює  $0,008 \text{ Рід} \approx 1 \text{ еВ}$ . Рівень Фермі дорівнює  $\varepsilon_F = -0,23 \text{ Рід} \approx -3,13 \text{ еВ}$ . У графені з домішкою азоту завдяки перекриттю  $2p$ -зон згадана вище щілина проявляється як квазіщілина в енергетичному спектрі електронів. Густина електронних станів в області даної квазіщілини набагато менша, ніж у сусідніх областях спектра (рис. 2). Положення рівня Фермі у енергетичному спектрі залежить від концентрації азоту та знаходиться в інтервалі енергій  $-0,36 \text{ Рід} \leq \varepsilon_F \leq -0,23 \text{ Рід}$ . Зі збільшенням концентрації азоту ширина квазіщілини зменшується, а рівень Фермі зсувається до лівої межі квазіщілини. Теоретичні значення рівня Фермі для чистого графену узгоджуються з експериментальними значеннями для графену у багатоваршівній  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{графен}/\text{SiO}_2/\text{Si}$  структурі [6].

На рис. 4 показано залежність компонент тензора статичної електропровідності графену  $\sigma_{\alpha\beta}$  від концентрації домішки азоту, яка розрахована за формулою (3) для температури  $T = 0$  К. Вісь  $x$  напрямлена до найближчого сусіднього атома. Електропровідність розраховано для значень концентрації азоту, зображених точками. Відповідні точки з'єднано прямими лініями.

Як видно з рис. 4, зі збільшенням концентрації азоту електропровідність графену зменшується.

Для порівняння наведемо експериментальне значення електропровідності графіту, яке для температури  $T = 300$  К, дорівнює [17]:

$$\sigma = 9,82 \cdot 10^5 \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}.$$

На рис. 5 показано концентраційну залежність  $2s$ ,  $2p$ -парціальних складових компоненти тензора статичної електропровідності  $\sigma_{xx}$ .

З рис. 5 видно, що основний внесок у електропровідність дають електронні стани, які описуються атомними хвильовими функціями  $2p_z$  [16].

Для того, щоб дослідити природу концентраційної залежності електропровідності наведемо граничний вираз для електропровідності у випадку слабого розсіяння, який впливає з загальної формули (3) у однозонному наближенні [12]:

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \frac{e^2 \hbar g(\varepsilon_F) \nu^2(\varepsilon_F)}{3\Omega_1 |\Sigma''(\varepsilon_F)|},$$

де  $\Sigma''(\varepsilon_F) = \text{Im}\Sigma(\varepsilon_F)$  – уявна частина масового оператора функції Гріна,  $\nu(\varepsilon_F)$  – швидкість електрона на рівні Фермі,  $\Omega_1$  – об'єм, що припадає на один атом. Час релаксації електронних станів  $\tau(\varepsilon_F)$  визначається співвідношенням  $|\Sigma''(\varepsilon_F)|\tau(\varepsilon_F) = \hbar$ .

На рис. 6 наведено концентраційну залежність повної та  $2p_z$ -парціальної складової уявної частини масового оператора функції Гріна.

На рис. 7 показано концентраційну залежність повної та  $2p_z$ -парціальної складової густини електронних станів на рівні Фермі.

Оскільки зі збільшенням концентрації азоту густина електронних станів на рівні Фермі зростає (рис. 7), то зменшення електропровідності (рис. 4, 5) пояснюється більш різким зменшенням часу релаксації електронних станів (рис. 6). Таким чином, встановлено, що гібридизація зон приводить до розщеплення енергетичного спектра електронів в області рівня Фермі. Ширина щілини

дорівнює  $0,008$  Рід  $\approx 1$  еВ. Рівень Фермі дорівнює  $\varepsilon_F = -0,23$  Рід  $\approx -3,13$  еВ. У графені з домішкою азоту завдяки перекриттю  $p$ -зон зазначена щілина проявляється як квазіщілина. Положення рівня Фермі у енергетичному спектрі залежить від концентрації азоту та знаходиться в інтервалі енергій  $-0,36$  Рід  $\leq \varepsilon_F \leq -0,23$  Рід. Зі збільшенням концентрації азоту ширина квазіщілини зменшується, а рівень Фермі зсувається до лівої межі квазіщілини. Зменшення електропровідності графену зі збільшенням концентрації азоту зумовлено зменшенням часу релаксації електронних станів.

1. Yu.V. Skrypnyk and V.M. Loktev, Phys. Rev. B **73**, 241402 (2006).
2. Yu.V. Skrypnyk and V.M. Loktev, Phys. Rev. B **75**, 245401 (2007).
3. C. Yelgel and G.P. Srivastava, Appl. Surf. Sci. **258**, 8338 (2012).
4. D.A. Pablo, Chem. Phys. Lett. **492**, 251 (2010).
5. D. Xiaohui, W. Yanqun, D. Jiayu, K. Dongdong, and Z. Dengyu, Phys. Lett. A **365**, 3890 (2011).
6. K. Xu, C. Zeng, Q. Zhang, R. Yan, P. Ye, K. Wang, A.C. Seabaugh, H.G. Xing, J.S. Suehle, C.A. Richter, D.J. Gundlach, and N.V. Nguyen, Nano Lett., **13**, 131 (2013).
7. S. Kim, I. Jo, D.C. Dillen, D.A. Ferrer, B. Fallahzad, Z. Yao, S.K. Banerjee, and E. Tutuc, Phys. Rev. Lett. **108**, 116404 (2012).
8. С.П. Репецкий, Т.Д. Шатний, ТМФ, **131**, 456 (2002).
9. С.П. Репецкий, И.Г. Вышиваная, Металлофиз. новейшие технол. **26**, 887 (2004).
10. S.P. Repetskii and I.G. Vyshyvanaya, Phys. Met. Metallogr. **99**, 558 (2005).
11. С.П. Репецкий, И.Г. Вышиваная, Металлофиз. новейшие технол. **29**, 587 (2007).
12. С.П. Репецкий, И.Г. Вышиваная, В.В. Шастун, А.Ф. Мельник, Металлофиз. новейшие технол. **33**, 425 (2011).
13. S.P. Repetsky, O.V. Tretyak, I.G. Vyshyvanaya, and V.V. Shastun, Ukr. J. Phys. **13**, 189 (2012).
14. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике (Физматгиз, Москва, 1962).
15. J. Sun, M. Marsman, G.I. Csonka, A. Ruzsinszky, P. Hao, Y. Kim, G. Kresse, and J.P. Perdew, Phys. Rev. B **84**, 035117 (2011).
16. J.C. Slater and G.F. Koster, Phys. Rev. **94**, 1498 (1954).
17. А.Р. Убеллоде, Ф.А. Льюис, Графит и его кристаллические соединения (Мир, Москва, 1965).

Одержано 19.09.14

*С.П. Репецкий, А.В. Третьяк, И.Г. Вышиваная*

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА  
И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ГРАФЕНА  
С ПРИМЕСЬЮ АЗОТА

Резюме

На основе модели сильной связи с использованием обменно-корреляционных потенциалов в теории функционала плотности исследована электронная структура и электропроводность графена с примесью азота. В качестве базиса выбираются волновые функции  $2s$ -,  $2p$ -состояний нейтральных не взаимодействующих атомов углерода. Установлено, что гибридизация зон приводит к расщеплению энергетического спектра электронов в области уровня Ферми. В графене с примесью азота благодаря перекрытию  $2p$  энергетических зон вышеупомянутая щель проявляется как квазищель, в области которой плотность электронных состояний имеет значительно меньшее значение по сравнению с другой областью спектра. Установлено, что с увеличением концентрации азота электропроводность графена уменьшается. Поскольку с увеличением концентрации азота плотность состояний на уровне Ферми возрастает, то уменьшение электропроводности обусловлено более резким уменьшением времени релаксации электронных состояний.

*S.P. Repetsky, O.V. Tretiak, I.G. Vyshivanaya*

ELECTRON STRUCTURE  
AND ELECTRIC CONDUCTIVITY  
OF GRAPHENE WITH A NITROGEN IMPURITY

Summary

On the basis of the tight-binding model with the use of exchange-correlation potentials, the electron structure and the electric conductivity of graphene with a nitrogen impurity have been studied in the framework of density functional theory. The wave functions of  $2s$  and  $2p$  states of neutral noninteracting carbon atoms are selected as the basis ones. Band hybridization was found to result in the splitting of the electron energy spectrum near the Fermi level. In the nitrogen-doped graphene, owing to the overlapping of  $2p$  energy bands, the mentioned gap is realized as a quasi-gap, in which the electron density of states has a much lower value in comparison with the other spectral region. It is found that an increase in the nitrogen concentration reduces the electric conductivity of graphene, although the density of states at the Fermi level grows at that. Hence, the reduction of the electric conductivity is associated with a sharper decrease in the relaxation time for electron states.