



Рис. 1. Упрощенная модель пленки из линейно-цепочечного углерода на поверхности алюминия

1. Babaev V.G., Guseva M.B., Novikov N.D., Khvostov V.V., Polyynes: Synthesis, Properties, and Applications, 219-252 (2005)

## MODELING OF SURFACE SP-SYSTEMS MAKING USE THE EXTENDED DYNAMICAL MEAN-FIELD THEORY

Medvedeva D.<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic

E-mail: [medvedeva.ds@gmail.com](mailto:medvedeva.ds@gmail.com)

This work is devoted to construction of a model to describe influence of correlation and nonlocal charge interaction effects on the electronic properties of surface sp-systems on the example of Graphene adatom systems.

Adatom systems attract lot of attention of scientists because of evolving of STM technology. This kind of materials has a big potential for development of novel logical devices or atomic memory. A great example is the surface systems with s- and p- electrons. Some of them present interesting feature: despite of strong hybridization of atomic levels and smaller extension of a wave function, we can observe formation of a narrow band on the Fermi level with half-filling [1, 2]. Because of that the ARPES [3] experiment and single-electron theoretical methods [4, 5] can present conflicting results.

In this work we consider adatom graphene systems C<sub>2</sub>F and C<sub>2</sub>F. For more realistic description the electronic properties of these systems taking into account the nonlocal charge interactions were considered using the Extended Dynamical Mean-Field Theory.

As a main result we obtained the phase diagram for local and nonlocal interactions taking into account the first nearest neighbours in the model and determined the position of discussed systems in it.

*The author likes to thank Dr. Iskakov S.N. University of Michigan, Ann Arbor, U.S.A, Dr. Krien F., Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia, Prof. Mazurenko V.V. Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia and Prof. Lichtenstein A.I., University of Hamburg, Hamburg, Germany.*

1. P. Hansmann et al. PRB 110, 166401 (2013)
2. P. Hansmann et al. J. of Phys.: Cond. Mat. 25, 094005 (2013)
3. G. Li et al. Nat. Communications 4, 1620 (2013)
4. R. Cortes et al. PRL 96, 126103 (2007)
5. S. Modesti PRL 98, 126401(2007)

## КЛАСТЕРНАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ С ГЛУБОКИМИ ДЫРОЧНЫМИ ЛОВУШКАМИ

Мережников А.С.<sup>1</sup>, Никифоров С.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия  
E-mail: [merezhnikov.artiom@gmail.com](mailto:merezhnikov.artiom@gmail.com)

## THERMOLUMINESCENCE CLUSTER MODEL WITH DEEP HOLE TRAPS

Merezhnikov A.S.<sup>1</sup>, Nikiforov S.V.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this work simulation of dose dependences of thermoluminescence in cluster systems with deep hole traps was carried out. It was found that deep traps in clusters can affect the dose dependence on heating rate. Also influence of model parameters on dose dependences was studied.

Известно, что присутствие глубоких центров захвата в люминофорах влияет на характер дозовой зависимости ТЛ. Так, наличие глубоких дырочных или электронных ловушек может приводить к сверхлинейности дозовой зависимости ТЛ при высоких дозах [1]. Известны также случаи, когда наличие дырочных ловушек приводят к появлению сублинейной дозовой зависимости [2]. Механизмы формирования нелинейности дозовых зависимостей ТЛ подробно исследованы в рамках моделей с однородно распределенными дефектами. Однако также является перспективным исследование дозовых зависимостей ТЛ в рамках моделей с кластерными дефектами, состоящими из нескольких локализованных уровней [3]. Как правило, такие модели применяются для описания кинетики ТЛ в