

07:08

Статическая проводимость электронного газа в эпитаксиальном графене

© З.З. Алисултанов

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДагНЦ РАН, Махачкала
Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва
Дагестанский государственный университет, Махачкала
E-mail: zaur0102@gmail.com

Поступило в Редакцию 5 декабря 2012 г.

В рамках простой модели рассмотрена статическая проводимость эпитаксиального графена, сформированного на металлической и полупроводниковой подложках.

Графен, как монослой атомов углерода, является идеальной структурой для изучения физики двумерных систем [1]. Пониженная размерность, линейная зонная структура, устойчивая относительно кулоновского взаимодействия [2], и нулевая запрещенная зона приводят к уникальным оптическим и электронным свойствам [1,3,4], делая графен новым многообещающим материалом для различных оптоэлектрических применений [5–7]. Одно из уникальных свойств графена заключается в том, что проводимость графена по постоянному току отлична от нуля даже при нулевой концентрации носителей [1]. Объяснению минимальной проводимости посвящено много теоретических работ [3,4,8–12]. Физика данного явления заключается в том, что нулевая эффективная масса электронов в графене приводит к „поляризации вакуума“, т.е. рождению электрон-дырочных пар при любых энергиях барьера и, как следствие, преодолению таких барьеров с единичной вероятностью (клеиновское туннелирование [13]).

Одним из основных направлений является изучение эпитаксиального графена (ЭГ), сформированного на поверхности металлов или полупроводников [14]. Интерес к изучению ЭГ вызван несколькими причинами. Во-первых, графеновый слой на поверхности металлов и полупроводников может быть рассмотрен в качестве эффективного контакта в приборных устройствах [15]. Во-вторых, для того, чтобы в полной мере использовать свойства графеновых слоев в электронике,

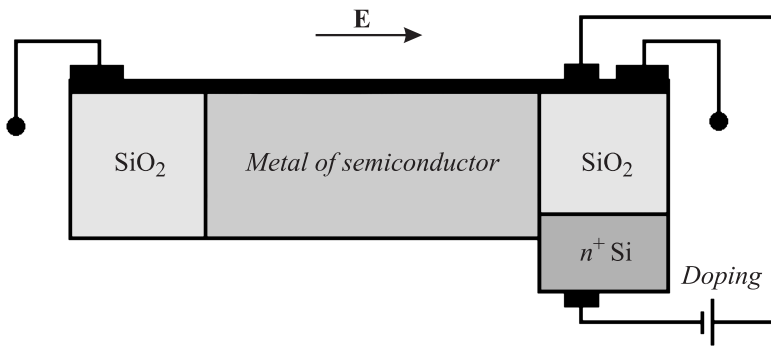


Рис. 1. Схематическое изображение ЭГ, к которому приложено продольное электрическое поле (\mathbf{E}), вызывающее ток. Кроме того, к графену приложено перпендикулярное поле, с помощью которого можно допировать графен электронами или дырками (эффект поля).

необходимо варьировать их структуру, химический состав, морфологию и т.д., что можно сделать с помощью соответствующей подложки. В свете сказанного представляет интерес рассмотреть транспортные свойства ЭГ (рис. 1). В настоящей работе в формализме Кубо–Гринвуда будет рассмотрена статическая проводимость электронного газа в ЭГ. Рассмотрение будет проводиться в рамках модели Давыдова, в которой ЭГ представляется в виде адсорбированных на подложке и выстроенных в гексагональную структуру атомов углерода [16–18]. Используя гамильтониан Андерсона, находим выражение для функции Грина (ФГ) адатома углерода $G_i^0 = (\varepsilon - \varepsilon_a - \Lambda(\varepsilon) - i\Gamma_c(\varepsilon))^{-1}$, где ε_a — энергия квазиуровня адатома, $\Gamma_c(\varepsilon) = \pi|V|^2\rho(\varepsilon)$ — полуширина квазиуровня адатома углерода, $\Lambda(\varepsilon) = \frac{1}{\pi i} P \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_c(\varepsilon') d\varepsilon' / (\varepsilon - \varepsilon')$ — функция сдвига квазиуровня, $\rho(\varepsilon)$ — плотность состояний (ПС) подложки, знак P означает интегрирование в смысле главного значения. Между адатомами углерода, выстроенными в гексагональную структуру, происходит обмен электронами и, следовательно, формируется зона Бриллюэна. Для определения возмущенной функции Грина воспользуемся уравнением Дайсона в приближении сильной связи: $G_{ij} = G_i^0 \delta_{ij} + \sum_l G_i^0 t_{il} G_{lj}$, где $t_{il=t}$ — матричный элемент перехода

электрона на ближайшие соседние атомы (для изолированного графена $t \approx 2.8 \text{ eV}$). Применяя к уравнению Дайсона фурье-преобразование, учитывая симметрию кристаллической решетки графена, а также учитывая, что $G_i^0 = G_0$, получим: $G_q^{-1}(\varepsilon) = G_0^{-1}(\varepsilon) - tf(\mathbf{q}) - i\gamma$, где функция $f(\mathbf{q})$ определена следующим образом:

$$f(\mathbf{q}) = v_b \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}q_x a) + 4 \cos(\sqrt{3}q_x a/2) \cos(3q_y a/2)};$$

a — расстояние между ближайшими атомами в графене; \mathbf{q} — двумерный волновой вектор электронов графена; v_b — зонный индекс: $v_b = +1$ соответствует зоне проводимости, а $v_b = -1$ — валентной зоне; γ — затухание квазичастиц за счет внутренних столкновительных процессов (рассеяния на фононах, на примесных атомах, на дефектах кристаллической решетки и т.д.). Вблизи точки Дирака с координатами $\mathbf{Q} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$ для энергетического спектра получаем: $tf(\mathbf{k}) = v_b 3ta|k|/2 = v_b v_F |k|$, где $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}$. Отметим, что здесь и дальше за нуль энергии принимается точка Дирака, а также считается, что эта точка совпадает с серединой щели полупроводниковой подложки. Для расчета действительной части проводимости воспользуемся формулой Кубо–Гринвуда [19]

$$\begin{aligned} \sigma(\omega, T) = & -\frac{8v_F^2 \hbar e^2}{NS\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar} [f(\varepsilon + \hbar\omega) - f(\varepsilon)] \\ & \times \sum_{k, v_{b1} v_{b2} \pm 1} \text{Im}G(\mathbf{k}, \varepsilon) \text{Im}G(\mathbf{k}, \varepsilon + \hbar\omega), \end{aligned} \quad (1)$$

где $f(\varepsilon) = (e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1)^{-1}$ — функция распределения Ферми–Дирака, v_{b1} и v_{b2} — зонные индексы, входящие в функции $G(\mathbf{k}, \varepsilon)$ и $G(\mathbf{k}, \varepsilon + \omega)$ соответственно, S — площадь графена, ω — частота внешнего поля. В выражении (1) учтены коэффициенты, появляющиеся при суммировании по спиновому, доливному и зонному индексам. В настоящей работе мы будем рассматривать случай вырожденных носителей, когда $T \ll \varepsilon_F$, где ε_F — энергия Ферми ЭГ (энергия Ферми ЭГ отлична от нуля благодаря зарядовому обмену с подложкой). Для статической

проводимости тогда, как легко видеть, формула Кубо–Гринвуда дает

$$\sigma = \frac{8e^2}{2\pi^2\hbar} \sum_{\nu_{b1}, \nu_{b2}=\pm 1} \int_0^{\xi} \varepsilon_k d\varepsilon_k \text{Im}G_{\nu_{b1}}(\varepsilon_k, \varepsilon_F) \text{Im}G_{\nu_{b2}}(\varepsilon_k, \varepsilon_F), \quad (2)$$

где $\xi = \sqrt{\pi\sqrt{3}t}$, что легко можно получить из условия нормировки плотности состояний. Для проведения конкретных расчетов необходимо знать электронный спектр подложки. Последний аппроксимируем следующим образом: $\rho(\varepsilon) = \rho_0$ — для металла, $\rho(\varepsilon) = \rho_0\Theta(|\varepsilon| - \Delta)$ — для полупроводника, где Δ — запрещенная щель в энергетическом спектре полупроводника. Тогда имеем: $\Gamma_c = \pi|V|^2\rho_0$ и $\Lambda = 0$ — для металла, $\Gamma_c(\varepsilon) = \pi|V|^2\rho_0\Theta(|\varepsilon| - \Delta)$ и $\Lambda(\varepsilon) = \pi|V|^2\rho_0 \ln \left| \frac{\Delta - \varepsilon}{\Delta + \varepsilon} \right|$ — для полупроводника. Рассмотрим сначала случай $\varepsilon_F = 0$. Такой случай может быть реализован, если ЭГ дополнительно допировать дырками (если изначально $\varepsilon_F > 0$) или электронами (если изначально $\varepsilon_F < 0$). Тогда

$$\sigma_{G-M}^0(\omega = 0, T = 0) = \frac{2e^2}{\pi^2\hbar} \left[1 - \frac{(\gamma + \Gamma_c)^2}{\xi^2 + (\gamma + \Gamma_c)^2} \right], \quad \text{для металла}, \quad (3)$$

$$\sigma_{G-S}^0(\omega = 0, T = 0) = \frac{2e^2}{\pi^2\hbar} \left[1 - \frac{\gamma^2}{\xi^2 + \gamma^2} \right], \quad \text{для полупроводника}. \quad (4)$$

Прежде всего, из последнего выражения следует, что при $\gamma, \Gamma_c \rightarrow 0$, проводимость принимает универсальное значение $2e^2/\pi^2\hbar$, что находится в согласии с результатами фундаментальных теоретических и экспериментальных работ. Из (3) видно, что наличие металлической подложки приводит к уменьшению проводимости графена. Наоборот, наличие полупроводниковой подложки, как видно из формулы (4), не влияет на минимальную проводимость графена. Очевидно, это связано с наличием щели в спектре полупроводника. Заметим, однако, что в используемой нами аппроксимации плотности состояний полупроводника щель симметрична относительно точки Дирака, что и привело к тому, что полупроводниковая подложка не влияет на минимальную проводимость (точка $\varepsilon_F = 0$ находится внутри щели). Ситуация, при которой точка $\varepsilon_F = 0$ не будет находиться внутри щели, приведет к формуле, аналогичной (3). Рассмотрим теперь случай

$\varepsilon_F \neq 0$. Для этого случая (2) дает следующие выражения:

$$\sigma_{G-M} = \frac{e^2}{\pi^2 \hbar} \left[\left(\frac{(\varepsilon_F^2 - \Gamma^2)F_1(\Gamma) - 4\varepsilon_F^2 \Gamma^2}{F_1^2(\Gamma) + 4\varepsilon_F^2 \Gamma^2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_F}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{\varepsilon_F} \right) \left(\operatorname{arctg} \frac{F_1(\Gamma)}{2\varepsilon_F \Gamma} + \operatorname{arctg} \frac{\varepsilon_F^2 - \Gamma^2}{2\varepsilon_F \Gamma} \right) \right], \quad (5)$$

$$\sigma_{G-S} = \frac{e^2}{\pi^2 \hbar} \left[\left(\frac{(\tilde{\varepsilon}_F^2 - \Gamma^2)F_2(\Gamma) - 4\tilde{\varepsilon}_F^2 \Gamma^2}{F_2^2(\Gamma) + 4\tilde{\varepsilon}_F^2 \Gamma^2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_F}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{\tilde{\varepsilon}_F} \right) \left(\operatorname{arctg} \frac{F_2(\Gamma)}{2\tilde{\varepsilon}_F \Gamma} + \operatorname{arctg} \frac{\tilde{\varepsilon}_F^2 - \Gamma^2}{2\tilde{\varepsilon}_F \Gamma} \right) \right], \quad \text{если } |\varepsilon_F| > \Delta, \quad (6)$$

$$\sigma_{G-S} = \frac{e^2}{\pi^2 \hbar} \left[\left(\frac{(\tilde{\varepsilon}_F^2 - \gamma^2)F_2(\gamma) - 4\tilde{\varepsilon}_F^2 \gamma^2}{F_2^2(\gamma) + 4\tilde{\varepsilon}_F^2 \gamma^2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_F}{\gamma} + \frac{\gamma}{\tilde{\varepsilon}_F} \right) \left(\operatorname{arctg} \frac{F_2(\gamma)}{2\tilde{\varepsilon}_F \gamma} + \operatorname{arctg} \frac{\tilde{\varepsilon}_F^2 - \gamma^2}{2\tilde{\varepsilon}_F \gamma} \right) \right], \quad \text{если } |\varepsilon_F| < \Delta, \quad (7)$$

где $F_1(x) = \xi^2 - \varepsilon_F^2 + x^2$, $F_2(\Gamma) = \xi^2 - \tilde{\varepsilon}_F^2 + \Gamma^2$, $\tilde{\varepsilon}_F = \varepsilon_F - \Lambda(\varepsilon_F)$, $\Gamma = \gamma + \Gamma_c$. Нетрудно видеть, что при $\varepsilon_F \rightarrow 0$, σ_{G-M} , $\sigma_{G-S} \rightarrow \sigma_{G-M}^0$, σ_{G-S}^0 . Для расчетов необходимо знать ρ_0 . Представляя подложку в виде двумерного электронного газа с квадратичным спектром, получим: $\rho_0 = mS_1/\pi\hbar^2$, где m — масса электрона металла, S_1 — площадь поверхности металла, соответствующего одному атому графена ($S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$). Тогда $\Gamma_c \approx 0.38|V|^2$. Кроме того, положим $\gamma = 0.1$ eV, $\Delta = 0.5$ eV. На рис. 2, 3 приведены зависимости статической проводимости ЭГ от энергии Ферми. Отметим интересный результат: при увеличении взаимодействия между графеном и подложкой проводимость в области разрешенных энергий становится постоянной величиной, не зависящей от энергии Ферми. Такое поведение, по-видимому, связано с тем, что при увеличении взаимодействия между графеном и подложкой обмен электронами между графеном и подложкой усиливается. Другими словами, электроны (или дырки), которые перешли в графен при допировании (эффект поля), легко его покидают, переходя в подложку. Можно показать, что проводимость ЭГ на металле слабо зависит также

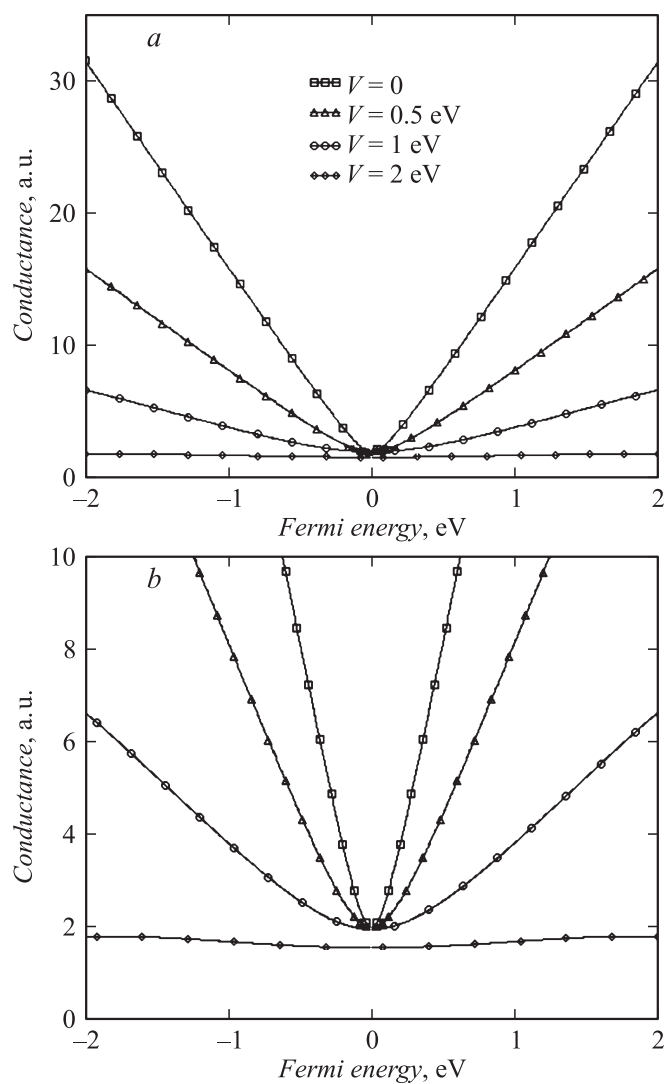


Рис. 2. Зависимость статической проводимости ЭГ, сформированного на металле, в единицах $e^2/\pi^2\hbar$ (a), то же самое в увеличенном виде (b).

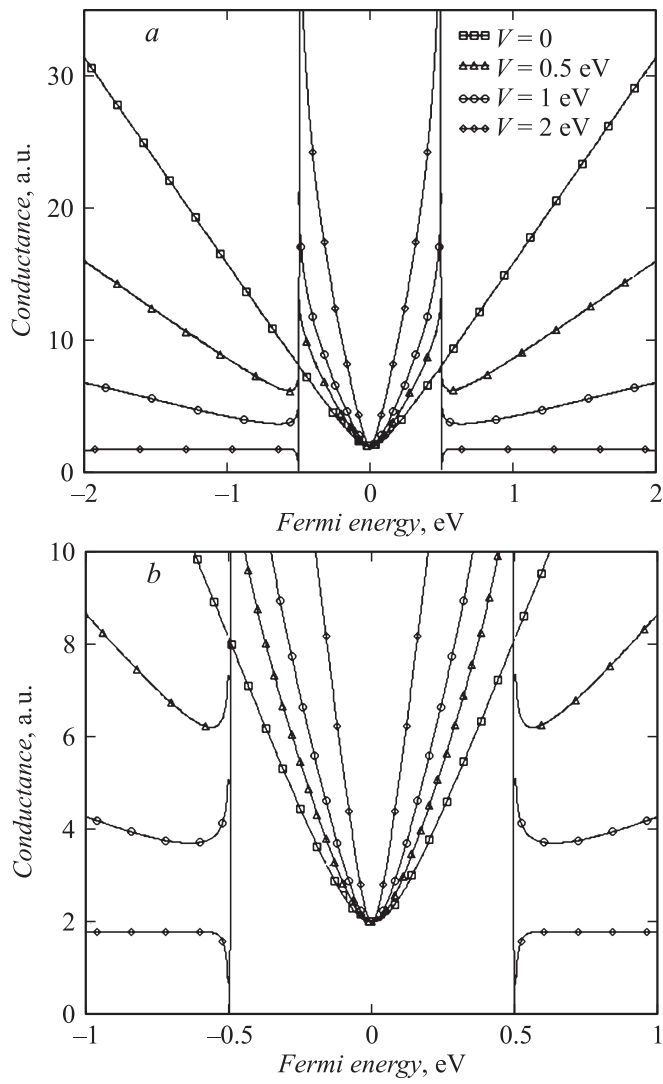


Рис. 3. Зависимость статической проводимости ЭГ, сформированного на полупроводнике, в единицах $e^2/\pi^2\hbar$ (a), то же самое в увеличенном виде (b).

и от температуры. Последнее очень важно при создании устройств, в которых зависимость проводимости от температуры нежелательна (магнеторезисторы и т.д.). Другой интересный и важный результат, следующий из рис. 3, состоит в том, что вблизи краев запрещенной щели проводимость ЭГ имеет крутые изломы (кинки). Это можно объяснить тем, что вблизи краев запрещенной щели появляется новый класс квазичастиц, время жизни которых очень сильно зависит от энергии (скачок плотности состояний). Такие скачки приводят к аномально большим значениям термоэдс [20]. Здесь следует напомнить об очевидной аналогии между транспортом в ЭГ и транспортом в металле вблизи электронного топологического перехода. Действительно, когда химический потенциал приближается к критическому значению, при котором изменяется связность ферми-поверхности, время релаксации квазичастиц становится сильно зависящим от энергии, что приводит к появлению изломов проводимости и пиков термоэдс [21].

В конце еще раз подчеркнем, что исследование ЭГ очень важно. В каком-то смысле ЭГ является более удобной системой, чем изолированный графен. Это связано с тем, что в ЭГ сглаживаются некоторые фундаментальные трудности физики графена. Так, например, можно сказать, что амплитуда неизбежных риплонов, связанных с тепловыми флуктуациями, в ЭГ будет существенно меньше, чем в изолированном. Другая трудность связана с тем, что кулоновское поле в изолированном графене не экранируется. В ЭГ же эта трудность также сглаживается, так как силовые линии кулоновского поля электронов графена частично экранируются за счет диэлектрической функции подложки. Все это позволяет более уверенно использовать существующие теории.

Работа частично выполнена в СПбГЭТУ (НОЦ „Материалы нанoeлектроники и фотоники“) по гранту ФЦП „Развитие внутрироссийской мобильности научных и научно-педагогических кадров путем выполнения научных исследований молодыми учеными и преподавателями в научно-образовательных центрах“ ГК № 14.В37.31.0238 от 23.07.2012.

Список литературы

- [1] *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Katsnelson M.I., Grigorieva I.V., Dubonos S.V., Firsov A.A. // Nature. 2005. V. 438. P. 197.*
- [2] *Mishchenko E.G. // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98. P. 216 801.*

- [3] *Das Sarma S., Adam Sh., Hwang E.H.* et al. // *Rev. Mod. Phys.* 2011. V. 83. P. 407–470.
- [4] *Фальковский Л.А.* // *ЖЭТФ.* 2008. V. 133. P. 663. УФН. 2008. Т. 178. С. 923.
- [5] *Geim A.K., Novoselov K.S.* // *Nat. Mat.* 2007. V. 6. P. 183.
- [6] *Avouris P., Chen Z., Perebeinos V.* // *Nat. Nanotechnology.* 2007. V. 2. P. 605.
- [7] *Bonaccorso F., Sun Z., Hasan T., Ferrari A.C.* // *Nat. Photon.* 2010. V. 4. P. 611.
- [8] *Fradkin E.* // *Phys. Rev. B.* 1986. V. 33. P. 3257.
- [9] *Lee P.A.* // *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 71. P. 1887.
- [10] *Gorbar E.V., Gusynin V.P., Miransky V.A., Shovkovy I.A.* // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 95. P. 146 801.
- [11] *Ziegler K.* // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97. P. 266 802.
- [12] *Katsnelson M.I.* // *Eur. Phys. J. B.* 2006. V. 51. P. 157.
- [13] *Katsnelson M.I., Novoselov K.S., Geim A.K.* // *Nature Phys.* 2006. V. 2. P. 620.
- [14] *Claire Berger, Zhimin Song, Tianbo Li* et al. // *J. Phys. Chem. B.* 2004. V. 108. P. 19912.
- [15] *Lua W., Mitchel W.C., Thorntona C.A., Collinsa W.E., Landis G.R., Smith S.R.* // *J. Electrochemical Society.* 2003. V. 150. P. G177.
- [16] *Давыдов С.Ю.* // *Письма в ЖТФ.* 2011. Т. 37. В. 10. С. 64; *ФТП.* 2011. Т. 45. С. 629.
- [17] *Давыдов С.Ю.* // *ФТП.* 2013. Т. 47 (1). С. 97–106; *Письма в ЖТФ.* 2013. Т. 39 (2). С. 7–14.
- [18] *Алисултанов З.З., Мейланов Р.П.* // *ФТТ.* 2012. Т. 54. С. 1398; *ТМФ.* 2012. Т. 172. С. 455.
- [19] *Peres N.M.R., Guinea F., Castro Neto A.H.* // *Phys. Rev. B.* 2006. V. 73. P. 125 411.
- [20] *Alisultanov Z.Z.* // *Low Temp. Phys.* 2013. V. 39. (7) (to be published).
- [21] *Varlamov A.A., Egorov V.S., Pantsulaya A.V.* // *Adv. Phys.* 1989. V. 38. P. 469.