

01.4

Термодинамика электронов в эпитаксиальном графене

© З.З. Алисултанов, Н.А. Мирзегасанова

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

Поступило в Редакцию 3 октября 2013 г.

В рамках модели Давыдова исследованы химический потенциал, теплоемкость и магнитная восприимчивость эпитаксиального графена, сформированного на полупроводниковой подложке. Рассмотрены предельные случаи высоких и низких температур.

Исследование эпитаксиального графена (ЭГ) [1] занимает одно из центральных мест в одной из актуальных областей современной физики конденсированного состояния — физике двумерных дираковских фермионов [2]. В данной работе в рамках модели Давыдова изучены основные термодинамические характеристики ЭГ. Суть модели Давыдова подробно изложена в [3,4], а также в ряде работ автора [5–10]. Согласно этой модели функция Грина ЭГ имеет вид (мы рассматриваем область энергий непосредственно в окрестности точки Дирака)

$$G_k^{-1}(\varepsilon) = \tilde{G}_0^{-1}(\varepsilon) - v_b v_F \hbar |\mathbf{k}| - i\gamma, \quad (1)$$

где γ — энергия затухания квазичастиц за счет внутренних столкновительных процессов: рассеяния на фононах, на примесных атомах, на дефектах кристаллической решетки и т.д. (остаточное рассеяние), $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}$, \mathbf{q} — двумерный волновой вектор электронов графена, $\mathbf{Q} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$ — волновой вектор, соответствующий точке Дирака, v_b — зонный индекс: $v_b = +1$ соответствует зоне проводимости, а $v_b = -1$ — валентной зоне, $v_F \approx 1 \cdot 10^8$ cm/s — скорость Ферми для электронов графена. Функция $\tilde{G}_0(\varepsilon)$ дается следующим выражением:

$$\tilde{G}_0(\varepsilon) = (\varepsilon - \Lambda(\varepsilon) - i\Gamma_c(\varepsilon))^{-1}, \quad (2)$$

где $\Gamma_c(\varepsilon)$ и $\Lambda(\varepsilon)$ есть полуширина и функция сдвига квазиуровня адатома углерода соответственно. Из (1) и (2) мы можем определить энергетический спектр квазичастиц в ЭГ

$$\varepsilon_p = v_b v_{FP} p + \Lambda(\varepsilon_p), \quad (3)$$

где $p = |\mathbf{p}|$, $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$. Выражение (3) будет основным для дальнейших выкладок.

Для определения функции $\Lambda(\varepsilon)$ нами используется модель Халдейна–Андерсона, в которой она задана следующим выражением [5–10]

$$\Lambda(\varepsilon) = |V|^2 \rho_0 \ln \left| \frac{\Delta - \varepsilon}{\Delta + \varepsilon} \right|, \quad (4)$$

где V — потенциал гибридизации, Δ — полуширина запрещенной щели полупроводника, $\rho_0 = mS_1/\pi\hbar^2$ (подробности в [10]). В данной работе рассматривается симметричный случай, когда середина запрещенной щели полупроводниковой подложки совпадает с точкой Дирака, а все энергии отсчитываются от последней. Далее, мы будем рассматривать область энергий $|\varepsilon| \ll \Delta$, чтобы расходимости в (4) вблизи $|\varepsilon| = \Delta$ не приводили к артефактным результатам.

Рассмотрим, прежде всего, температурную зависимость химического потенциала (ХП). ХП определяется из выражения [11]

$$N = 4S \int |f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)| \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2}, \quad (5)$$

где $f(\varepsilon) = (\exp(\varepsilon/T) + 1)^{-1}$ — функция распределения Ферми–Дирака, S — площадь графена. Положительный ХП соответствует электронам, а отрицательный — дыркам. В данной работе мы будем рассматривать случай электронного допирования. Чтобы перейти в (5) к интегрированию по энергии, воспользуемся выражением (3), из которого следует

$$p = v_F^{-1}(\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)). \quad (6)$$

Тогда

$$N = \frac{2S}{\pi v_F^2 \hbar^2} \int |f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)| (\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)) \left(1 - \frac{d\Lambda(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right) d\varepsilon. \quad (7)$$

Из (7) мы можем найти зависимость ХП ЭГ от концентрации носителей и температуры. При нулевой температуре и электронном допировании из (7) получим

$$n\pi v_F^2 \hbar^2 = 2 \int_0^\mu (\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)) \left(1 - \frac{d\Lambda(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right) d\varepsilon. \quad (8)$$

На рисунке, *a* приведен численный расчет зависимости ХП от температуры, а на рисунке, *b* — зависимость от концентрации носителей при нулевой температуре. При построении кривых мы положили, что $\rho_0 = 0.13 \text{ eV}^{-1}$, $\Delta = 1 \text{ eV}$, $n = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ (рисунок, *a*).

Рассмотрим теперь предельные случаи низких и высоких температур.

При низких температурах ($|\mu| \gg T$) удобно дифференцировать уравнение (5) по температуре. Учитывая, что число частиц не зависит от температуры, получим

$$0 = 4 \int \frac{d}{dT} [f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)] \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2}. \quad (9)$$

Также мы имеем

$$\frac{d}{dT} [f(\varepsilon - \mu)] = - \left(\frac{\varepsilon - \mu}{T} + \frac{d\mu}{dT} \right) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} [f(\varepsilon - \mu)]. \quad (10)$$

Функция (10) лишь в окрестности точки $\varepsilon = \mu$ заметно отлична от нуля. В связи с этим мы можем разложить (6) по степеням $\varepsilon - \mu$, т. е.

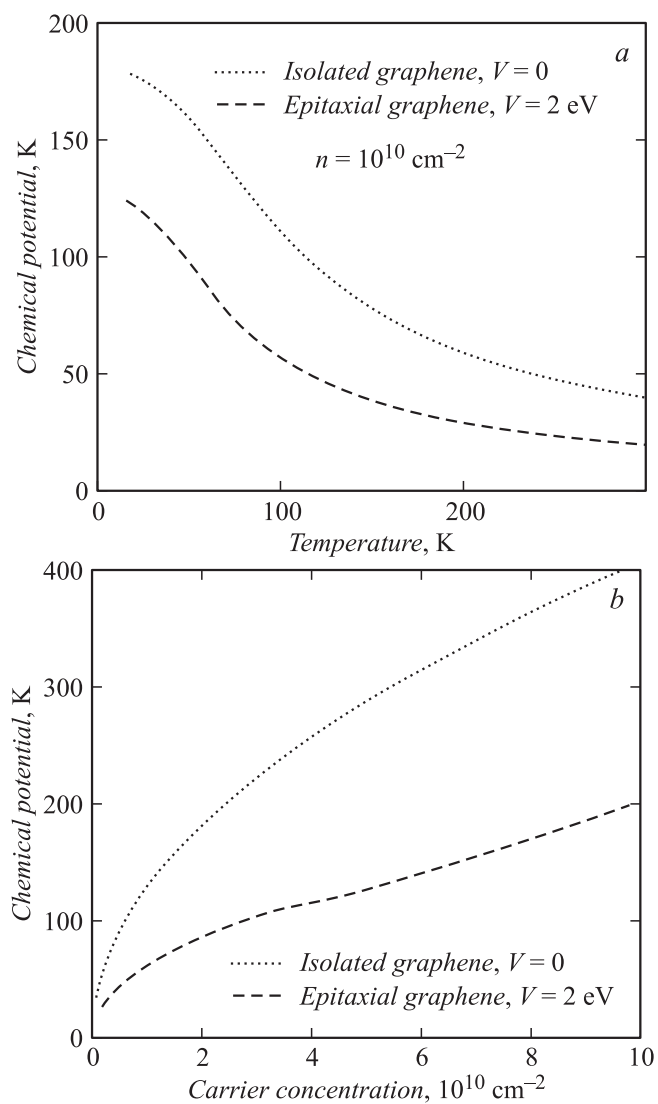
$$p \approx v_F^{-1} (\varepsilon - \Lambda(\mu) - K(\mu)(\varepsilon - \mu)). \quad (11)$$

Тогда для случая электронного допирования имеем

$$0 = \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon - \mu}{T} + \frac{d\mu}{dT} \right) \frac{\partial f(\varepsilon - \mu)}{\partial \varepsilon} (\varepsilon - \Lambda(\mu) - K(\mu)(\varepsilon - \mu)) d\varepsilon, \quad (12)$$

где $K(\mu) = d\Lambda(\varepsilon)/d\varepsilon|_{\varepsilon=\mu}$. Равенство нулю интеграла в (12) и определяет ХП, как функцию от температуры. Так как мы рассматриваем область $|\varepsilon| \ll \Delta$, то можно разложить функцию $\Lambda(\varepsilon)$ по степеням ε/Δ

$$\Lambda(\varepsilon) \approx -2|V|^2 \rho_0 \frac{\varepsilon}{\Delta}, \quad K \approx -\frac{2|V|^2 \rho_0}{\Delta}. \quad (13)$$



Зависимость химического потенциала от температуры при $n = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ и от концентрации при $T = 0$.

Тогда можно интегрировать непосредственно (9), не прибегая к (11). В результате

$$\frac{d\mu}{dT} \approx -\frac{\pi^2 T}{12\mu}, \quad (14)$$

причем ХП при нулевой температуре определяется из (8). В случае высоких температур ($|\mu| \ll T$) можно разложить (5) по степеням μ

$$n = \frac{4\mu}{\pi v_F^2 \hbar^2 T} \int_0^\infty \frac{1}{\cosh^2 \frac{\varepsilon}{T}} (\varepsilon - \Lambda(\varepsilon)) \left(1 - \frac{d\Lambda(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right) d\varepsilon \quad (15)$$

и легко получить зависимость ХП от температуры. Если использовать (13), имеем

$$\mu \approx \frac{\pi}{4 \ln 2} \frac{nv_F^2 \hbar^2}{(1-K)T}. \quad (16)$$

Рассмотрим теперь теплоемкость ЭГ при постоянной площади поверхности. Энергия носителей дается выражением

$$E = 4S \int_0^\infty \varepsilon |f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)| \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2}. \quad (17)$$

Оно с точностью до множителя ε совпадает с (5). Следовательно, мы можем использовать приближения, приведенные выше. При низких температурах имеем

$$\begin{aligned} C_S = \frac{dE}{dT} &= -\frac{2S}{\pi v_F^2 \hbar^2} (1-K)^2 \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon - \mu}{T} + \frac{d\mu}{dT} \right) \frac{\partial f(\varepsilon - \mu)}{\partial \varepsilon} \varepsilon^2 d\varepsilon \\ &= \frac{2S}{\pi v_F^2 \hbar^2} (1-K)^2 \left(2\mu^2 \frac{d\mu}{dT} + \frac{\pi^2}{3} \mu T \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Используя (14), получим окончательно

$$C_S(|\mu| \gg T) \approx \frac{S\pi}{3\pi v_F^2 \hbar^2} (1-K)^2 \mu T. \quad (19)$$

При высоких температурах из (17) имеем

$$E = \pi S \mu (1-K)^2 T^2 / 3v_F^2 \hbar^2,$$

а для теплоемкости с учетом (16) получаем

$$C_S(|\mu| \ll T) \approx \frac{\pi^2}{12 \ln 2} nS(1 - K). \quad (20)$$

Рассмотрим, наконец, магнитную восприимчивость (МВ) ЭГ. Чтобы получить выражение для МВ ЭГ, воспользуемся общим результатом, полученным в [12]

$$M(H) = \frac{2A(\varepsilon_F)ST}{\pi\hbar^2} \sum_{k \neq 0} \frac{\cos[kcA(\varepsilon_F)/e\hbar H]}{\sinh[2\pi^2 kc|m(\varepsilon_F)|T/e\hbar H]}, \quad (21)$$

где $A(\varepsilon_F)$ — площадь сечения изоэнергетической поверхности, $m(\varepsilon) = (1/2\pi)dA/d\varepsilon$ — циклотронная масса, c — скорость света в вакууме, H — напряженность магнитного поля. Формула (21) получена при использовании квазиклассического условия квантования Лифшица–Онсагера. Легко показать, что траектория электрона ЭГ в импульсном пространстве есть окружность с радиусом $v_F^{-1}(\varepsilon - \Lambda(\varepsilon))$. Тогда $A(\varepsilon_F) = \pi v_F^{-2}(\varepsilon_F - \Lambda(\varepsilon_F))^2$, что и определяет МВ ЭГ.

Из проведенного исследования видно, что при наличии подложки ХП уменьшается (см. рисунок), а теплоемкость увеличивается (19), (20). По-видимому, это можно объяснить тем, что электроны ЭГ более „инертны“ из-за наличия взаимодействия. Термодинамика электрон-дырочной жидкости в изолированном графене была исследована в недавней работе Фальковского [12]. Здесь мы в основном следовали духу этой замечательной работы. Учет межэлектронного взаимодействия увеличивает ХП [12]. Наличие же какой-либо подложки уменьшает это взаимодействие (из-за возрастания диэлектрической проницаемости среды), а следовательно, должен уменьшиться и ХП. Интересно, что этот вывод качественно совпадает с результатом нашей работы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 13-02-90746 мол_рф_нр).

Список литературы

- [1] Berger C., Song Zh., Li T. et al. // J. Phys. Chem. B. 2004. V. 108. P. 19912.
- [2] Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R. et al. // Rev. Mod. Phys. 2008. V. 81. P. 109.

- [3] Давыдов С.Ю. // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. С. 64; Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. В. 2. С. 7.
- [4] Давыдов С.Ю. // ФТП. 2011. Т. 45. С. 629; ФТП. 2011. Т. 45. С. 1102.
- [5] Алисултанов З.З. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98. В. 2. С. 121–124.
- [6] Алисултанов З.З. // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. В. 4. С. 23.
- [7] *Alisultanov Z.Z.* // Low Temperature Physics. 2013. V. 39(7). P. 767–770.
- [8] Алисултанов З.З. // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. В. 15. С. 8–16.
- [9] Алисултанов З.З. // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. В. 13. С. 32.
- [10] Алисултанов З.З., Камилов И.К. // ФТТ. 2014. Т. 56. В. 4.
- [11] Фальковский Л.А. // ЖЭТФ. 2008. Т. 133. С. 663.
- [12] *Falkovsky L.A.* // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98 (3). С. 183–186.