

## Аномальный рост термоэдс в эпитаксиальном графене

© 3.3. Алисултанов,<sup>1,2,3</sup> Н.А. Мирзегасанова<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Институт физики им. И.М. Амирханова ДНЦ РАН, 367003 Махачкала, Россия

<sup>2</sup> Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

<sup>3</sup> Дагестанский государственный университет, 367000 Махачкала, Россия  
e-mail: zaur0102@gmail.com

(Поступило в Редакцию 21 февраля 2014 г.)

В рамках модели Давыдова рассмотрен термоэлектрический эффект в эпитаксиальном графене, сформированном на поверхности полупроводника. Используется подход, основанный на формуле Кубо для проводимости и дифференциальной термоэдс. Показано, что вблизи краев запрещенной щели полупроводника термоэдс эпитаксиального графена возрастает более чем в 4 раза по сравнению с термоэдс вблизи точки Дирака. Приводится возможное объяснение этого эффекта.

Симметрия кристаллической решетки графена и валентность атома углерода приводят к уникальному спектру для электронных возбуждений [1]. Действительно, исследование зонной структуры графена показывает, что графен является полуметаллом с линейным энергетическим спектром [2]. Этот спектр приводит к уникальным электронным и оптическим свойствам [2–5]. Для реального применения графена в электронике большой интерес представляют различные структуры на основе графеновых слоев. Например, авторы работы [6] сообщают, что структура из двух разделенных диэлектриком слоев графена может стать основой для создания бездиссипативных линий передачи. В [7] был предложен сверхбыстрый терагерцовый детектор на основе графена, работающий при комнатной температуре. В [8] продемонстрировано, что гибридная система из графена и сегнетоэлектрика может стать многозначной системой памяти. В настоящей работе в рамках модели Давыдова исследуются проводимость и термоэдс эпитаксиального графена (ЭГ), сформированного на полупроводнике. Изолированный графен обладает уникальными термоэлектрическими свойствами [9,10]. Действительно, термоэдс графена при комнатной температуре составляет около  $30 \mu\text{VK}^{-1}$  [9] (для сравнения, термоэдс металлов порядка  $0.01 \mu\text{VK}^{-1}$ ). Большие значения термоэдс наблюдаются в щелевом графене, когда химический потенциал приближается к краю щели [10].

Электрическое поле  $E$  и градиент температуры  $\nabla T$  приводят к возникновению электрического  $j$  и теплового  $g$  потоков. Эти величины связаны друг с другом посредством следующего соотношения:

$$\begin{aligned} E &= \rho j + S \nabla T, \\ g &= P j - \kappa \nabla T, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\rho$  — удельное сопротивление,  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности,  $S$  — коэффициент Зеебека,  $P$  — коэффициент Пелтье. Коэффициент Зеебека (дифференци-

альная термоэдс) и коэффициент Пелтье удовлетворяют следующим формулам:

$$S = -\beta/\sigma, \quad P = ST, \quad (2)$$

где  $\sigma$  — действительная часть продольной проводимости. Термоэлектрический коэффициент обычно определяется с помощью формулы Мота [11]. Однако эта формула не годится, когда время релаксации квазичастиц сильно зависит от энергии [10]. К тому же эта формула имеет известное условие применимости  $|\mu| \gg T$  ( $\mu$  — химический потенциал). В общем случае необходимо пользоваться выражением [10]

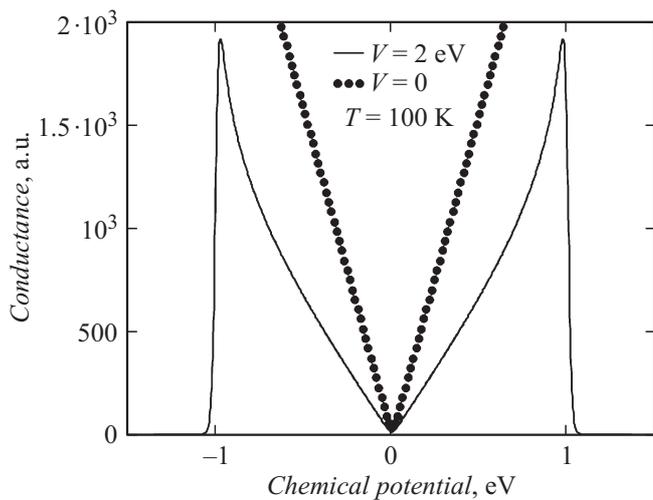
$$\beta = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\varepsilon}{eT} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} A(\varepsilon + \mu), \quad (3)$$

где  $f(\varepsilon) = (\exp(\varepsilon/k_B T) + 1)^{-1}$  есть распределение Ферми–Дирака, а проводимость  $\sigma$  и функция  $A(\varepsilon)$  определяются с помощью формулы Кубо–Гринвуда [12]

$$\sigma(\mu, T) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} A(\varepsilon + \mu),$$

$$A(\varepsilon) = -\frac{2v_F^2 \hbar e^2}{\pi N S} \sum_{k, v_{b1}, v_{b2}=\pm 1} \text{Im} G_{v_{b1}}(k, \varepsilon) \text{Im} G_{v_{b2}}(k, \varepsilon), \quad (4)$$

где  $v_F \approx 10^8 \text{ cm/s}$  — скорость Ферми электронов графена,  $S$  — площадь графена,  $G_{v_b}(k, \varepsilon)$  — функция Грина электронов графена,  $v_b$  — зонный индекс,  $v_b = +1$  соответствует зоне проводимости, а  $v_b = -1$  — валентной зоне,  $v_{b1}$  и  $v_{b2}$  — зонные индексы, входящие в функции  $G(k, \varepsilon)$  и  $G(k, \varepsilon + \omega)$  соответственно. В последней формуле учтены множители, появляющиеся при учете суммирования по зонам и вырождения по спину. Суть модели Давыдова подробно изложена в [13], а также ряде



**Рис. 1.** Проводимость эпитаксиального графена. Для сравнения приведена также и проводимость изолированного графена.

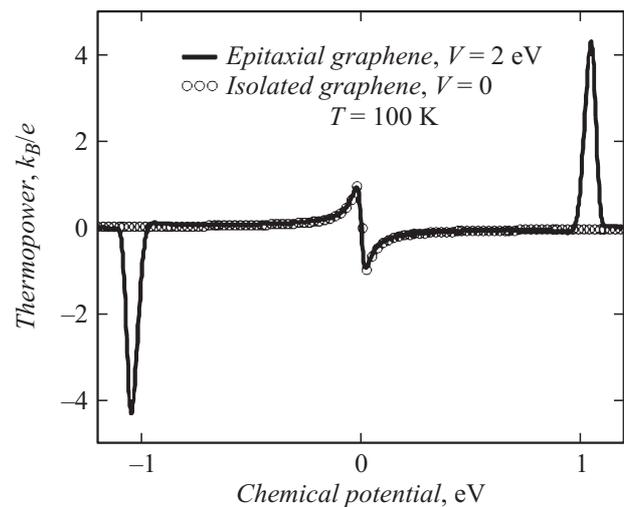
работ одного из авторов [14–16]. В [15] была исследована статическая проводимость ЭГ. Следуя этой работе, для величины  $A(\varepsilon)$  получим

$$A(\varepsilon) = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \left[ \left( \frac{(\tilde{\varepsilon}^2 - \Gamma^2)F(\Gamma) - 4\tilde{\varepsilon}^2\Gamma^2}{F^2(\Gamma) + 4\tilde{\varepsilon}^2\Gamma^2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\tilde{\varepsilon}}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{\tilde{\varepsilon}} \right) \left( \arctg \frac{F(\Gamma)}{2\tilde{\varepsilon}\Gamma} + \arctg \frac{\tilde{\varepsilon}^2 - \Gamma^2}{2\tilde{\varepsilon}\Gamma} \right) \right], \quad (5)$$

где  $F(\Gamma) = \xi^2 - \tilde{\varepsilon}^2 + \Gamma^2$ ,  $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon - \Lambda(\varepsilon)$ ,  $\Gamma = \gamma + \Gamma_c(\varepsilon)$  (подробности см. в [15]). Для определения функций  $\Gamma_c(\varepsilon)$  и  $\Lambda(\varepsilon)$  нами используется модель Хайлдейна–Андерсона, в которой они заданы следующими выражениями [15,16] (фактически, эта аппроксимация соответствует двумерному полупроводнику):

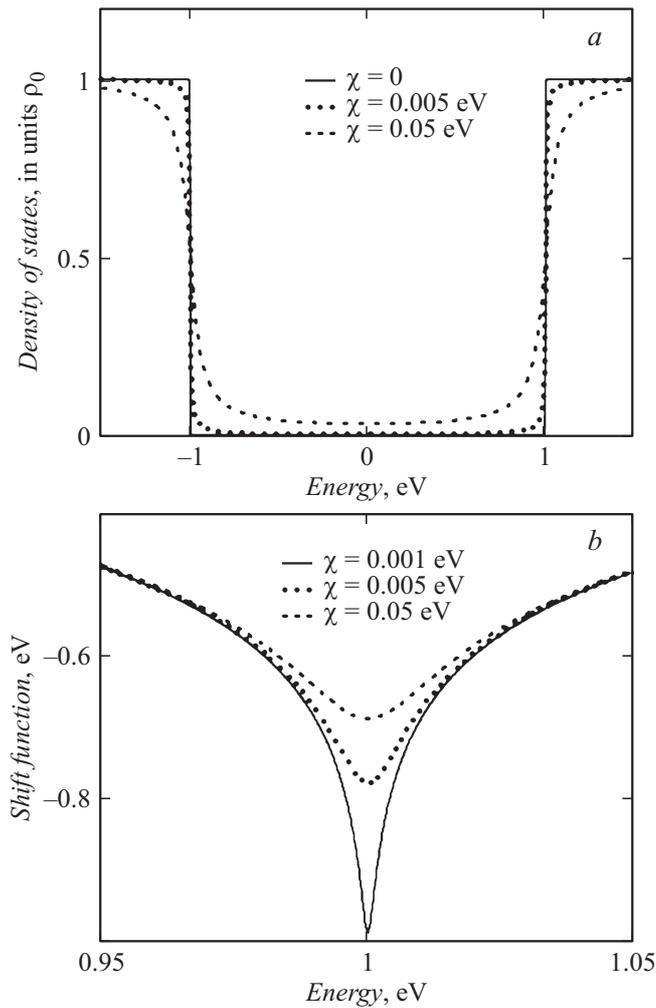
$$\Gamma_c(\varepsilon) = \pi|V|^2\rho_0\Theta(|\varepsilon| - \Delta), \quad \Lambda(\varepsilon) = |V|^2\rho_0 \ln \left| \frac{\Delta - \varepsilon}{\Delta + \varepsilon} \right|, \quad (6)$$

где  $V$  — потенциал гибридизации,  $\Delta$  — полуширина запрещенной щели полупроводника,  $\rho_0 = mS_1/\pi\hbar$  (подробности в [15]). Далее положим  $\gamma \approx 0.001$  eV. Зависимость статической проводимости ЭГ от химического потенциала приведена на рис. 1. Основной анализ проводимости был проведен в работе [15]. Здесь же еще раз отметим, что при значениях химического потенциала, соответствующих краям запрещенной щели, проводимость меняется скачкообразно. Очевидно, это связано с тем, что вблизи краев щели происходит резкий переход от режима несвязанного с подложкой графена (внутри щели  $\Gamma_c = 0$ ) к режиму связанного графена (вне щели  $\Gamma_c \neq 0$ ). Понятно, что в разных режимах проводимость будет различной. Это и объясняет наличие крутых изломов (кинков) в проводимости.



**Рис. 2.** Термоэдс эпитаксиального графена. Для сравнения приведена также и термоэдс изолированного графена.

На рис. 2 приведена термоэдс ЭГ. Вследствие скачкообразного поведения проводимости вблизи краев запрещенной щели в этих точках имеются пики термоэдс. Это связано с тем, что термоэдс чувствительна к производной от проводимости по химическому потенциалу. Термоэдс возрастает более чем на порядок по сравнению с и так большим значением термоэдс изолированного графена [9] (рис. 2). Возвращаясь к обсуждению скачкообразного изменения проводимости, хотелось бы обратить внимание на следующий момент. В нашем случае величина  $\Gamma_c$ , очевидно, определяет время релаксации квазичастиц в ЭГ ( $\tau \sim \Gamma_c^{-1}$ ). Рассеяние квазичастиц в данном случае вызвано взаимодействием графена с подложкой. Другими словами, взаимодействие с подложкой приводит к уширению и сдвигу уровней отдельных атомов графена, что и приводит к конечному времени жизни электронов. Для полупроводниковой подложки электроны с энергиями, совпадающими с областью запрещенной щели полупроводника, не могут рассеиваться на подложке ( $\Gamma = 0$ ), т.е. не могут в нее перейти — это запрещено. Наоборот, вне области щели имеется обмен электронами ( $\Gamma \neq 0$ ), т.е. есть рассеяние на подложке. Таким образом, вблизи края щели имеется резкий переход между двумя режимами: режимом несвязанного с подложкой графена (внутри щели  $\Gamma = 0$ ) и режимом связанного графена (вне щели  $\Gamma \neq 0$ ). Другими словами, есть переход между режимом с бесконечным временем релаксации квазичастиц и режимом с конечным временем релаксации. А вблизи края запрещенной щели время релаксации становится сильно зависящим от энергии. Проводя аналогию с работами [10,17], можно сказать, что вблизи края щели появляется новый канал рассеяния квазичастиц, причем время релаксации сильно зависит от энергии. Как и в работах [10,17], здесь следует упомянуть об очевидной аналогии между транспортом в ЭГ и транспортом в



**Рис. 3.** Плотность состояний подложки и функция сдвига. Отклонение от ступенчатой аппроксимации плотности состояний.

металле вблизи электронного топологического перехода. Действительно, когда химический потенциал приближается к критическому значению, при котором изменяется связность ферми-поверхности, время релаксации квази-частиц становится сильно зависящим от энергии, что приводит к появлению изломов проводимости и пиков термоэдс [18,19].

В реальности в подложке всегда имеется некоторое остаточное рассеяние  $\chi$ . Поэтому, строго говоря, плотность состояний (ПС) подложки не имеет ступенчатой формы. Интересно рассмотреть, как влияет на результаты настоящей работы отклонение от ступенчатой аппроксимации. Для этого воспользуемся выражением для ПС подложки, предложенной в работе [15]

$$\rho(\varepsilon) = \pi^{-1} \rho_0 \left[ \pi + \arctg \frac{\varepsilon - \Delta}{\chi} - \arctg \frac{\varepsilon + \Delta}{\chi} \right]. \quad (7)$$

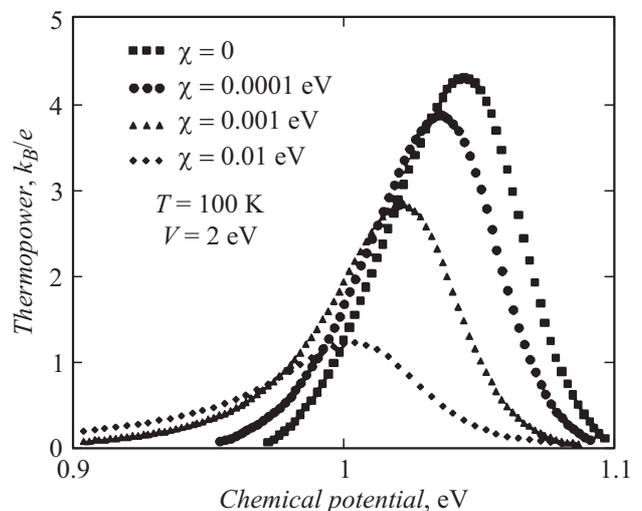
Используя соображения из [15], легко получить также и функцию сдвига

$$\Lambda(\varepsilon) = \frac{|V|^2 \rho_0}{2} \ln \left| \frac{(\varepsilon - \Delta)^2 + \chi^2}{(\varepsilon + \Delta)^2 + \chi^2} \right|. \quad (8)$$

На рис. 3 показана ПС, а также функция сдвига (для наглядности изображена функция сдвига вблизи одного из краев запрещенной щели). Как видно из рисунка, при использовании (7) и (8) исчезают крутые скачки ПС и особенности функции сдвига. На рис. 4 изображена термоэдс ЭГ при  $\chi \neq 0$  вблизи одного из краев запрещенной щели. Из рисунка видно, что отклонение от ступенчатой аппроксимации ПС существенно влияет на термоэдс.

Рост термоэдс ЭГ вблизи краев запрещенной щели полупроводника был впервые обнаружен в работе [16]. Однако в [16] использовался подход, основанный на формуле Мотта. В [16] было продемонстрировано, что вблизи краев запрещенной щели термоэдс ЭГ возрастает почти на порядок. Более строгое рассмотрение, проведенное в настоящей работе, показывает, что аномальное поведение термоэдс в ЭГ имеется, но высота пиков почти в 2 раза меньше, чем та, которая предсказывается формулой Мотта. Отметим, что высота этих пиков (около  $400 \mu\text{VK}^{-1}$ , рис. 2) более чем на порядок больше термоэдс изолированного графена, экспериментально измеренного в работе [9] (согласно [9], термоэдс графена составляет около  $30 \mu\text{VK}^{-1}$ ).

В конце необходимо отметить, что авторы здесь не рассматривали фононный, диффузионный и другие вклады в термоэдс. Для рассматриваемых здесь параметров (температуры, химического потенциала и др.) диффузионный вклад очень мал. С другой стороны, фононный вклад (увлечение электронов фононами), как показано в работе [20], для графена является достаточно большим. Однако учет этого вклада не влияет на сущность предсказанных в настоящей работе эффектов, так как знак „фононного“ коэффициента Зеебека совпадает со знаком коэффициента Зеебека, рассмотренного здесь [20]. То есть учет фононного увлечения лишь увеличивает термоэдс во всем диапазоне энергий, причем никаких „отрицательных“ аномалий вблизи краев запрещенной щели нет. Так что нет никаких оснований думать,



**Рис. 4.** Термоэдс эпитаксиального графена при отклонении от ступенчатой аппроксимации плотности состояний подложки.

что учет фононного увлечения будет как-то уменьшать эффект возрастания термоэдс эпитаксиального графена.

## 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. Vol. 438. P. 197–200.
- [2] Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R., Novoselov K.S., Geim A.K. // *Rev. Mod. Phys.* 2008. Vol. 81. P. 109–162.
- [3] Фальковский Л.А. // *ЖЭТФ*. 2008. Т. 133. Вып. 3. С. 663–669.
- [4] Das Sarma S., Adam Sh., Hwang E.H., Rossi E. // *Rev. Mod. Phys.* 2011. Vol. 83. P. 407–470.
- [5] Falkovsky L.A. // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 83. P. 081107(R).
- [6] Berman O.L., Lozovik Y.E., Gumbs G. // *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 155433.
- [7] Mittendorff M., Winnerl S., Kamann J., Eroms J., Weiss D., Schneider H., Helm M. // *Appl. Phys. Lett.* 2013. Vol. 103. P. 021113.
- [8] Jandhyala S., Mordi G., Mao D., Ha M.-W., Quevedo-Lopez M.A., Gnade B.E., Kim J. // *Appl. Phys. Lett.* 2013. Vol. 103. P. 022903.
- [9] Dragoman D., Dragoman M. // *Appl. Phys. Lett.* 2007. Vol. 91. P. 203116.
- [10] Sharapov S.G., Varlamov A.A. // *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 86. P. 035430.
- [11] Mott N.F., Jones H. *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*. Oxford: Clarendon Press, 1936. 326 p.
- [12] Peres N.M.R., Guinea F., Castro Neto A.H. // *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 73. P. 125411.
- [13] Давыдов С.Ю. // *ФТП*. 2011. Т. 45. Вып. 5. С. 629–633.
- [14] Алисултанов З.З. // *Письма в ЖЭТФ*. 2013. Т. 98. Вып. 2. С. 121–124.
- [15] Алисултанов З.З. // *Письма в ЖТФ*. 2013. Т. 39. Вып. 15. С. 8–16.
- [16] Alisultanov Z.Z. // *Low Temp. Phys.* 2013. Vol. 39. N 7. P. 767–770.
- [17] Варламов А.А., Кавокин А.В., Лукьянчук И.А., Шаронов С.Г. // *УФН*. 2012. Т. 55. С. 1146.
- [18] Varlamov A.A., Egorov V.S., Pantsulaya A.V. // *Adv. Phys.* 1989. Vol. 38. P. 469.
- [19] Blanter Y.M., Kaganov M.I., Pantsulaya A.V., Varlamov A.A. // *Phys. Rep.* 1994. Vol. 245. P. 159.
- [20] Koniakhin S.V., Eidelman E.D. // *Euro Phys. Lett.* 2013. Vol. 103. С. 37006.