08,12,18

Рассеяние электронов дефектами малого радиуса и сопротивление графена

© *Н.Е. Фирсова*[1,2], *С.А. Ктиторов*[1,3,¶]

[1] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[2] Санкт-Петербургский политехнический университет им. Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
[3] Санкт-Петербургский электротехнический университет им. В.И. Ульянова (Ленина),
Санкт-Петербург, Россия

[¶] E-mail: ktitorov@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 26 ноября 2018 г.
В окончательной редакции 26 ноября 2018 г.
Принята к публикации 28 ноября 2018 г.)

Рассмотрено рассеяние электронов короткодействующими дефектами в плоском монослойном графене. Использована аппроксимация этого взаимодействия дельтаобразным потенциалом, сосредоточенным на окружности малого радиуса, что обеспечивает подавление нефизических коротковолновых мод. Проанализирован вклад этого рассеяния в сопротивление графена. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментом на подвешенном отожженном монослойном графене. Это дает возможность определения параметров аппроксимирующего потенциала на основе экспериментальных данных о сопротивлении графена, что важно для приложений.

DOI: 10.21883/FTT.2019.04.47421.328

1. Введение

Уникальные свойства графена привлекают внимание исследователей с момента открытия благодаря специфическим особенностям его электронной и фононной подсистем и перспективным приложениям. Бесщелевой квазирелятивистский электронный спектр позволил построить теорию проводимости, основанную на релятивистской теории рассеяния [1].

В настоящей работе мы анализируем влияние короткодействующих дефектов на сопротивление (здесь и далее: удельное сопротивление) плоского монослойного графена. Мы используем теорию рассеяния для двумерного уравнения Дирака, развитую Новиковым [2] и борновское приближение. Короткодействующие дефекты моделируются предложенным в [3,4] потенциалом типа „дельта функция на окружности", что обеспечивает подавление нефизических коротковолновых возбуждений. Цель данной работы состоит в теоретическом исследовании сопротивления плоского монослойного графена благодаря рассеянию электронов точечными дефектами. Вблизи дираковской точки мы используем полученную в [5] методом парциальных волн формулу для проводимости. Кроме того производится вычисление сопротивления и проводимости в широком диапазоне энергий в борновском приближении. Мы сравниваем наши теоретические результаты с известными экспериментальными данными, полученными на свободно подвешенном монослойном графене [6].

Уравнение Дирака, описывающее электронные состояния в графене, имеют вид [1]:

$$\hat{H}\psi(x,y) \equiv \left[-i\hbar v_F \sum_{\mu=1}^{2} \hat{\sigma}_\mu \delta_{x_\mu} + \hat{V}\right]\psi(x,y) = E\psi(x,y), \tag{1}$$

где v_F — скорость Ферми, σ_μ — матрицы Паули, $\psi(r)$ — двухкомпонентный спинор. Мы используем потенциал типа „дельта-функция на окружности", что обеспечивает подавление нефизических коротковолновых возбуждений [3,4]

$$V(r) = -V_0\delta(r - r_0).$$

Предполагается, что возмущение локально сдвигает точку Дирака по оси энергий. Введем безразмерные переменные

$$\hat{H} = \frac{\hat{H}}{\hbar v_F/r_0},\ E = \frac{E}{\hbar v_F/r_0},\ V_0 = \frac{V_0}{\hbar v_F},$$

$$x = x/r_0,\ y = y/r_0,\ r = r/r_0,\ k = kr_0. \tag{2}$$

Безразмерный потенциал принимает вид

$$V(r) = -V_0\delta(r - 1). \tag{3}$$

Уравнение (1) можно переписать

$$\hat{H}\psi(x,y) \equiv \left[-i \sum_{\mu=1}^{2} \hat{\sigma}_\mu \delta_{x_\mu} + \hat{V}\right]\psi(x,y) = E\psi(x,y). \tag{4}$$

2. Матрица рассеяния: представление парциальных волн

Вычислив отношение амплитуд сходящихся и расходящихся волн, мы получаем компоненты S-матрицы в представлении парциальных волн [4]

$$S_j(k) = -\frac{F_j^{(2)}(k)}{F_j^{(1)}(k)}, \ \ j = \pm 1/2, \pm 3/2, k = E, \qquad (5)$$

где

$$F_j^{(\alpha)} = \left[I_{j-1/2}(k)H_{j+1/2}^{(\alpha)}(k) - I_{j+1/2}(k)H_{j-1/2}^{(\alpha)}(k)\right].$$

$$\tan V_0\left[I_{j+1/2}(k)H_{j+1/2}^{(\alpha)}(k) + I_{j-1/2}(k)H_{j-1/2}^{(\alpha)}(k)\right], \qquad (6)$$

$$\alpha = 1, 2.$$

В результате получаем асимптотически точное в пределе $k \to 0$ выражение для транспортного времени релаксации [5]

$$\tau_{tr}^{-1}(k) = \pi^2 k v_F N_i \tan^2 V_0, \qquad (7)$$

где $N_i = r_0^2 N_i$, N_i — концентрация дефектов. Предположив справедливость уравнения Больцмана, мы получаем следующую формулу для проводимости при низкой температуре $k_B T \ll E_F$:

$$\sigma(E_F) = \sigma_0 \frac{E_F \tau_{tr}(E_F)}{\hbar}, \ \ \tilde{\sigma} = \sigma/\sigma_0, \qquad (8)$$

где $\sigma_0 = \frac{4e^2}{h}$; множитель 4 учитывает спиновое и орбитальное вырождение, $h = 2\pi\hbar$ — постоянная Планка. Транспортное время релаксации $\tau_{tr}(E_F)$ и проводимость $\sigma(E_F)$ были вычислены в [5]. асимптотически точно в пределе низкой энергии Ферми. Следовательно, больцмановское сопротивление ρ имеет вид [5]

$$\rho = \sigma^{-1} = \sigma_0^{-1}\pi^2 N_i \cdot \tan^2 V_0,$$

$$\tilde{\rho} = \rho/\rho_0, \quad \rho_0 = \sigma_0^{-1}, \qquad (9)$$

где $\tilde{\rho}$ — безразмерное сопротивление. Мы представляем формулу для сопротивления, справедливую в пределе длинных волн и произвольной величине возмущения в пределах действия уравнения Больцмана

$$E_F \tau_{tr}/\hbar > 1. \qquad (10)$$

Далее мы вычислим сопротивление в широком диапазоне дебройлевских длин волн волн, но в пределе малой величины потенциала дефекта. Для этого мы применим борновское приближение [2].

3. Борновское приближение

Уравнение Дирака (1) может быть переписано в интегральной форме [2]

$$\psi_{scat} = -\int dx'dy' G(x - x', y - y')$$

$$\times \left[i\hat{\sigma}_\mu \delta_{x_\mu} + E\right]\hat{V}(x', y')u_p e^{ipr'}, \qquad (11)$$

где функция Грина имеет вид

$$G(\mathbf{r}) = \int \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \frac{e^{i(k_x x + k_y y)}}{k^2 - (E + i0\mathrm{sgn}E)^2}$$

$$= \frac{i\pi}{4\pi}\,\mathrm{sgn}E\, H_0^{(1)}(kr),$$

$$H_m^{(1,2)} = J_m(x) \pm iN_m(x), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

Уравнение (11) представлено в первом борновском приближении. Решение можно записать в следующем виде:

$$\psi = u_{kx}e^{ikx} + \frac{f(\theta)}{\sqrt{-ir}}\,u_{p\theta}e^{ikr}, \qquad (12)$$

где амплитуда рассеяния имеет вид

$$f^{\mathrm{Born}}(k, \theta) = -\sqrt{k/8\pi}V_q(1 + e^{i\theta}), \qquad (13)$$

причем

$$\theta = \angle(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad q = 2\kappa \sin(\theta/2).$$

Преобразование Фурье имеет вид

$$V_q = \int dxdy e^{-i(q_x x + q_y y)} V(r). \qquad (14)$$

Введем обозначение: $\tilde{\Sigma}_{tr} = \Sigma_{tr}/r_0$, где Σ_{tr} — транспортное сечение. Подставив (14) в (13) и используя известную формулу для транспортного сечения [2]

$$\tilde{\Sigma}_{tr} = \int d\theta(1 - \cos\theta)|f(\theta)|^2,$$

мы получаем безразмерное транспортное сечение для нашей задачи в следующем виде:

$$\tilde{\Sigma}_{tr}^{\mathrm{Born}}(k) = \pi k V_0^2 I(k). \qquad (15)$$

Здесь функция $I(k)$ определена формулой

$$I(k) = \int_0^{2\pi} d\theta \sin^2(\theta) J_0^2[2k\sin(\theta/2)]. \qquad (16)$$

Этот интеграл может быть выражен через гипергеометрическую функцию [7]

$$I(k) = \frac{1}{2}\,\Gamma\begin{bmatrix}3/2,\, 1/2\\ 1, 1, 2\end{bmatrix}$$

$$\times\, {}_4F_5(3/2, 1/2, 1/2, 1; 1, 1, 1, 3/2; -k^2). \qquad (17)$$

Здесь

$$\Gamma\begin{bmatrix}\alpha_1, \alpha_2\\ \beta_1, \beta_2, \beta_3\end{bmatrix} = \frac{\Gamma(\alpha_1)\Gamma(\alpha_2)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)\Gamma(\beta_3)}, \tag{18}$$

$\Gamma(\alpha)$ — гамма функция, ${}_4F_5$ — обобщенная гипергеометрическая функция

$$ {}_4F_5(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4; \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_5; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1)_n(\alpha_2)_n(\alpha_3)_n(\alpha_4)_n}{(\beta_1)_n(\beta_2)_n(\beta_3)_n(\beta_4)_n(\beta_5)_n} \frac{z^n}{n!},$$

где $(\alpha_1)_n = \frac{\Gamma(\alpha+n)}{\Gamma(n)}$ — повышающий символ Похгаммера.

Используя (15) мы находим время релаксации

$$\frac{1}{\tau_{tr}^{\text{Born}}} = \Sigma_{tr}^{\text{Born}} N_i v_F = \tilde{\Sigma}_{tr}^{\text{Born}} r_0 N_i v_F = \pi k_i V_0^2 r_0 N_i v_F I(k) = \pi N_i V_0^2 k_F v_F I(k). \tag{19}$$

Подставив (19) в (8), (9), получаем формулу для безразмерного сопротивления

$$\tilde{\rho}^{\text{Born}} = \pi N_i V_0^2 I(k). \tag{20}$$

4. Соотношение между данными рассеяния электронов и сопротивлением

Нетрудно убедиться, что $I(k) \to \pi$ в пределе $k \to 0$. Таким образом, выражения (9) и (20) для безразмерного сопротивления асимптотически идентичны в пределе $V_0 \to 0$, $k \to 0$, т.е. в окрестности максимума сопротивления. Численное вычисление функций (9) и (20) для сопротивления позволяет сравнить теоретическую кривую (рис. 1, 2) и измеренную в эксперименте на свободно подвешенном графене [6] (рис. 3, 4) кривую сопротивления в окрестности дираковской точки. Сравнение показывает близкое подобие этих кривых при малых энергиях Ферми, что указывает на возможность установления полезных соотношений между данными рассеяния и сопротивлением. Имеются два диапазона энергий Ферми, где сравнение с экспериментальными данными может быть эффективно проведено: (a) — в

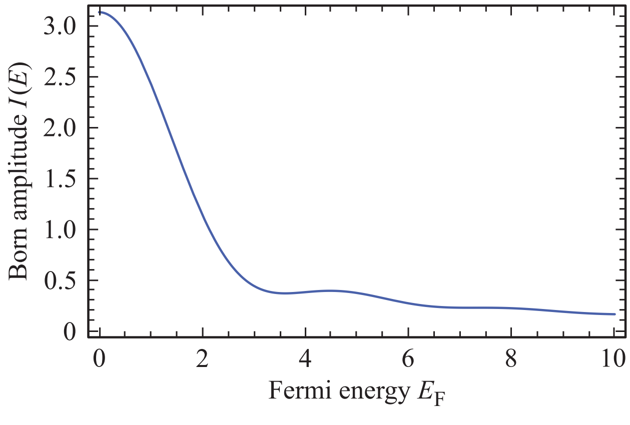

Рис. 1. Борновская амплитуда рассеяния как функция энергии Ферми (безразмерные переменные).

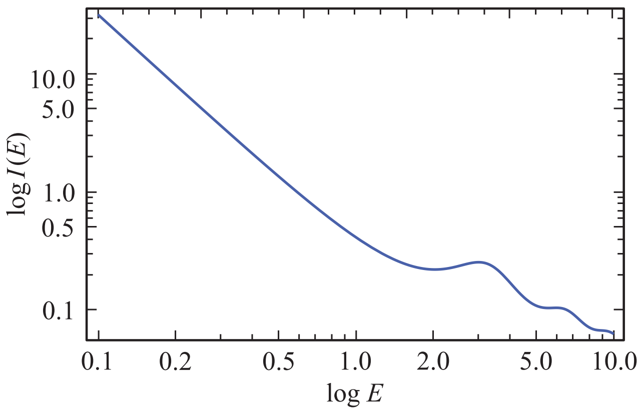

Рис. 2. Лог — лог график для борновской амплитуды рассеяния как функции энергии Ферми.

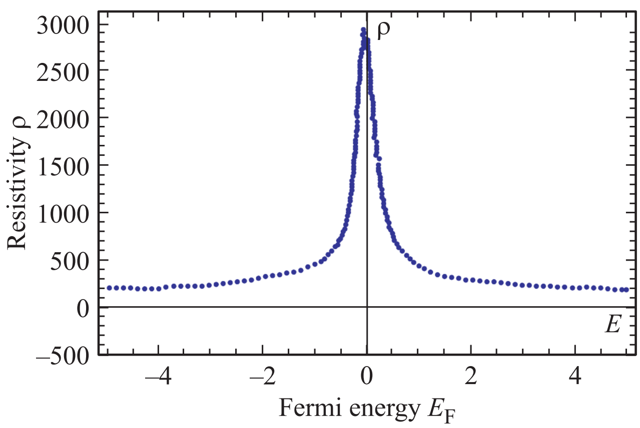

Рис. 3. Измеренное сопротивление как функция энергии Ферми.

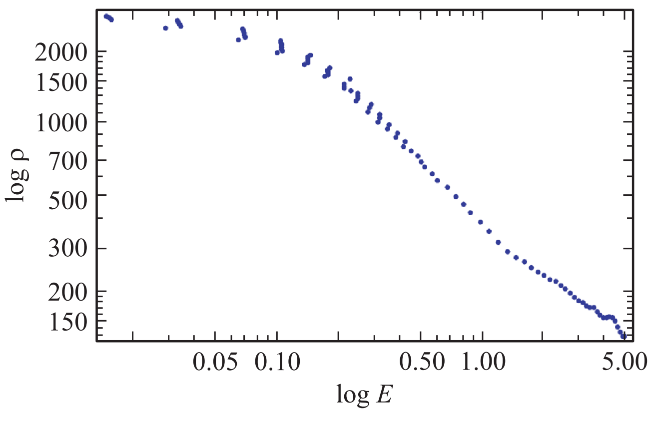

Рис. 4. Лог — лог график для измеренного сопротивления как функции энергии Ферми.

окрестноси максимума сопротивления и (b) — на склоне контура сопротивления. Так как наша теория учитывает только рассеяние на нейтральных примесях, мы сравниваем ее результаты с экпериментом на отожженном подвешенном графене, содержащем минимальное количество заряженных дефектов [6]. Форма кривой $\rho(E_F)$, полученная в [6] хорошо описывается функцией $I(E_F)$ (см. рис. 1). Степенное поведение $\rho(E_F)$ на боковом склоне универсально и следует из короткодействующего характера взаимодествия электронов с дефектами. Лог — лог график этой фунеции, представленный на рис. 2, дает с хорошей точностью показатель степени, равный -1. Заметим, что экспериментальная кривая (рис. 3, 4) начинает отклоняться от закона $1/E_F$ при меньшей величине E_F, что можно объяснить присутствием иных дефектов. Напротив, поведение сопротивения в окрестности максимума не универсально и может меняться от образца к образцу. Одной из причин является дираковская сингулярность. Различные подходы дают разные величины максимально теоретически возможного сопротивления [8,9]. Например в [8] результат не зависит от данных рассеяния, поскольку сопротивление имеет дифракционную природу. Максимально возможное сопротивление равно в этом случае

$$\frac{h}{4e^2}\,\eta^{-1}, \tag{21}$$

где η — численный множитель, его величина определяется порядком предельных переходов $\omega \to 0$, $E_F \to 0$, $T \to 0$. Согласно [8], хорошее согласие с экспериментом достигается при $\eta = \pi/4$. Тогда максимальное значение сопротивления $\rho^{(1)}_{trans}$ (обозначение Циглера [8]) принимает вид:

$$\rho^{(1)}_{\max} = \frac{h}{\pi e^2} = \frac{24}{\pi}\,\mathrm{k\Omega} \approx 7.64\,\mathrm{k\Omega}. \tag{22}$$

Минимальная оптическая проводимость получена в [9] на основе решения уравнения фон Неймана для матрицы плотности. Показано в [9], что $\rho^{opt}_{\max} = \frac{h}{\pi^2 e^2}$.

В отличие от работ [8,9], наша формула основана на данных рассеяния. Мы оцениваем минимальную проводимость из условия справедливсти уравнения Больцмана. Мы вводим квазиклассически определенную величину $\rho^{qc}_{\max}$ для максимально возможного сопротивления основываясь на аргументации Нэвила Мотта, согласно которой длина пробега не может быть меньше, чем длина волны электрона. Следовательно $\rho^{qc}_{\max}$ определено условием

$$E_f \tau_{tr} \hbar = k_F l > 1, \tag{23}$$

где l — длина пробега. Получаем следующую оценку для $\rho^{qc}_{\max}$:

$$\rho^{qc}_{\max} = h/4e^2 \approx 6\,\mathrm{k\Omega}. \tag{24}$$

Сравнивая с результатом измерений на подвешенном графене, проведенных в работе [6], получаем $\rho^{\exp}_{\max} \approx 2.4\,\mathrm{k\Omega}$, т.е. в 2.5 раза меньше. Это указывает на важность квантовых эффектов вблизи максимума сопротивления.

Введем меру интенсивности рассеяния P

$$P = N_i r_0^2 \tan^2 \frac{V_0}{\hbar v_F} = N_i \tan^2 \mathcal{V}_0. \tag{25}$$

В случае слабого рассеяния $\mathcal{V}_0 = \frac{V_0}{\hbar v_F} \ll 1$ мы имеем

$$P = N_i^2 r_0^2 \left(\frac{V_0}{\hbar v_F}\right)^2 = N_i \mathcal{V}_0^2. \tag{26}$$

Формулы (9), (20) при $V_0 \ll \hbar v_F$ принимают вид

$$P = \tilde{\rho}_{\max}/\pi^2. \tag{27}$$

Полученная формула для $\tilde{\rho}_{\max}$ может быть переписана в размерном виде

$$\rho_{\max} = \frac{h}{4e^2}\,\pi^2 P = \frac{h}{4e^2}\,N_i r_0^2 \tan^2 \frac{V_0}{\hbar v_F} \tag{28}$$

или для $V_0 \ll \hbar v_F$:

$$\rho_{\max} \approx \frac{h}{4e^2}\,N_i r_0^2 \left(\frac{V_0}{\hbar v_F}\right)^2. \tag{29}$$

Формулы (28), (29) дают возможность получения информации о параметрах дефектов (например, о параметре интенсивности рассеяния P) основываясь на таких экспериментальных данных как сопротивление при малой энергии Ферми.

5. Заключение

В настоящей работе мы исследовали рассеяние электронов в монослойном графене на короткодействующих дефектах и его влияние на сопротивление. Рассмотрение проводилось в рамках плоской модели графена с потенциалом типа дельта — функция на окружности малого радиуса, аппроксимирующим короткодействующие дефекты. Эта модель короткодействующего дефекта обеспечивает регуляризацию задачи рассеяния подавляя нефизические коротковолновые возбуждения. В низкоэнергетическом пределе мы используем зависимость проводимости от энергии Ферми, полученную в [5] методом парциальных волн. Для этого в [5] было решено соответствующее $2+1$ — мерное уравнение Дирака и асимптотический анализ полученной S — матрицы позволил получить используемую нами формулу для проводимости.

Случай относительно высоких энергий мы рассматриваем используя борновское приближение. Численные вычисления были проведены в широком диапазоне электронных энергий E. Показано, что сопротивление имеет максимум при $E = 0$ и убывает как $1/E$ вплоть до не слишком больших энергий, при которых уравнение Дирака с модельным потенциалом перестает работать (см. рис. 1, 2).

Мы сравнили наши теоретические кривые (рис. 1, 2) и измерения на отожженном подвешенном монослойном графене, выполненные в [6] (рис. 3, 4). Из этого сравнения сделан вывод, что использованный нами модельный потенциал удовлетворительно описывает сопротивление подвешенного графена благодаря минимизации концентрации заряженных примесей в результате отжига. Результаты нашей теории находятся в хорошем согласии с экспериментом на подвешенном монослойном графене вплоть до умеренно низких энергий Ферми.

Сравнивая наши теоретические результаты (рис. 1, 2) с экспериментальными данными (рис. 3, 4) приходим к выводу, что экспериментальная кривая может быть аппроксимирована функцией $1/E$ при меньших энергиях, чем это предсказывает наша теория в результате действия неучтенных механизмов рассеяния.

Наша теория, примененная к анализу экспериментальных данных, полученных на подвешенном монослойном графене дает инструмент для оценки интенсивности рассеяния по измеренному сопротивлению при малых энергиях Ферми.

Полученные результаты важны для приложений. Одно из важнейших — создание полевого транзистора на графене. Колоссальная электронная подвижность монослойного графена делает его перспективным материалом для высокочастотных приборов.

Список литературы

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, A.A.Firsov. Nature **438**, 197 (2005).
[2] D.S. Novikov. Phys. Rev. B **76**, 245 (2007).
[3] N.E. Firsova, S.A. Ktitorov, P. Pogorelov. Phys. Lett. A **373**, 525 (2009).
[4] N.E. Firsova, S.A. Ktitorov. Phys. Lett. A **374**, 1270 (2010).
[5] N.E. Firsova. Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics **4**, 538 (2013).
[6] K.I. Bolotin, K.I. Sikesh, Z. Jiang, M. Klimac, G. Fudenberga, J. Honec, P. Kima, H.L. Storme. Solid State Commun. **146**, 351 (2008).
[7] M. Abramowitz, I. Stegun. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables. National Bureau of Standards (1972).
[8] K. Ziegler. Phys. Rev. B **75**, 233407 (2007).
[9] N.E. Firsova. Photonics and Nanostructure — Fundamentals and Applications **26**, 8 (2017).

Редактор Т.Н. Василевская