

## Краткие сообщения

01;05

### Электропроводность и коэффициент диффузии электронов в бислое графена

© М.Б. Белоненко,<sup>1</sup> Н.Г. Лебедев,<sup>2</sup> С.А. Судоргин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Волгоградский институт бизнеса, Лаборатория нанотехнологий, 400048 Волгоград, Россия

<sup>2</sup> Волгоградский государственный университет, 400062 Волгоград, Россия  
e-mail: sergsud@mail.ru

(Поступило в Редакцию 5 мая 2011 г. В окончательной редакции 15 сентября 2011 г.)

Проведен теоретический расчет коэффициентов диффузии электронов и удельной электропроводности двуслойного графена во внешнем электрическом поле, вектор напряженности которого направлен вдоль графенового листа. Для моделирования эволюции электронной системы использовано кинетическое уравнение Больцмана в рамках квазиклассического приближения времени релаксации. Получены аналитические выражения для коэффициента диффузии электронов и электропроводности и выявлена их нелинейная зависимость от величины напряженности электрического поля. Проанализированы зависимости данных коэффициентов от управляющего электростатического потенциала между слоями графена.

#### Введение

Создание наноструктур с заданными свойствами и контролируемыми параметрами входит в число важнейших проблем современной физики. В последние годы интерес к наноструктурам и нанокластерным системам значительно возрос с точки зрения их применения в различных областях современной электроники, материаловедения, химии и медицины [1]. Новый материал графен экспериментально получен сравнительно недавно [2], и вследствие этого возникла необходимость изучения различных свойств и характеристик данного материала. Графен интересен не только с точки зрения возможных приложений, но и с фундаментальной точки зрения — вследствие своих уникальных электронных свойств [3–5]. Вблизи уровня Ферми электроны в графене обладают линейной дисперсией, а энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости отсутствует [3–5]. Модель зонной структуры графена послужила стартовой площадкой для изучения свойств графита, но в многослойных стопках, в частности в двуслойном графене, взаимодействие между слоями существенно искажает свойства графена [3–5]. И только после 2004 г., когда отдельные слои графена были успешно изолированы, стало ясно, что на примере этой системы фактически можно изучать новый вид частиц — безмассовые заряженные квазичастицы, нигде больше не существующие в природе [3–5]. Такие свойства этих частиц, как двумерность, спинорная природа, нулевая масса и отсутствие щели в спектре, приводят к ряду электронных явлений, не имеющих аналогов ни в каких других физических системах [3–5].

Наиболее интересными с точки зрения практических применений являются транспортные свойства данного

материала, определив которые можно рассчитать параметры электронных устройств, работа которых возможна на базе данных структур. Это различные наноэлектромеханические системы, например нановесы, нанодиоды, нанотранзисторы. Одной из важнейших характеристик таких приборов является электропроводность [6].

В настоящей работе сделан акцент на изучение диффузионных и проводящих транспортных свойств бислоя графена. Предложен аналитический метод расчета коэффициентов диффузии электронов и удельной электропроводности таких структур во внешнем электрическом поле.

#### Модель и эффективные уравнения

Рассмотрим отклик двуслойного графена на внешнее электрическое поле  $\mathbf{E}(E, 0, 0)$ , приложенное по оси  $x$ , направленной вдоль поверхности графенового листа (рис. 1). Биграфен состоит из двух слоев с гексагональной структурой, упакованных по типу АВАВ. Система рассматривается в модели Хаббарда [7], учитывающей только энергию  $\pi$ -электронов в приближении ближайших соседей. Между слоями графена приложен электростатический потенциал  $U$ . Зонная структура биграфена, полученная в приближении сильной связи, позволяет записать закон дисперсии для бислоя графена в виде [8]

$$E_p^{\pm\pm}(U) = \pm \sqrt{\varepsilon_p^2 + \gamma^2/2 + U^4/4 \pm \sqrt{\gamma^4/4 + (\gamma^2 + U^2)\varepsilon_p^2}}, \quad (1)$$

где дисперсионное соотношение однослойного графена  $\varepsilon_p$  определяется формулой [9]

$$\varepsilon_p = \pm t_0 \sqrt{1 + 4 \cos(ap_x) \cos(\pi s/n) + 4 \cos^2(\pi s/n)}, \quad (2)$$

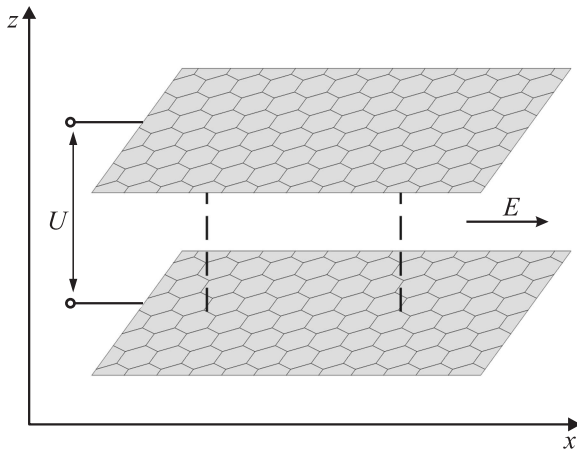


Рис. 1. Двуслойный графен во внешнем электрическом поле.

где  $t_0 \approx 2.7 \text{ eV}$  — интеграл перескока электронов между соседними узлами кристаллической решетки,  $\gamma \approx 0.4 \text{ eV}$  — интеграл перескока между слоями,  $a = 3b/2\hbar$ ,  $b = 0.142 \text{ nm}$  — расстояние между соседними атомами углерода,  $\mathbf{p} = (p_x, s)$  — квазиимпульс электронов в графене,  $p_x$  — параллельная листу графена компонента квазиимпульса,  $s = 1, 2, \dots, n$  нумерует квантование компоненты импульса по ширине графенового листа. Разные знаки в законе дисперсии относятся к зоне проводимости и валентной зоне соответственно. Из периодичности закона дисперсии следует, что его можно представить в виде ряда Фурье [10, 11]:

$$E_p^{\pm\pm}(U) = -\sum_{m,s} A_{ms} \cos\left(\frac{mp_x b}{\hbar}\right), \quad (3)$$

где  $b = 0.142 \text{ nm}$  — расстояние между соседними атомами углерода,  $A_{ms}$  — коэффициенты разложения в ряд Фурье дисперсионного соотношения электронов.

Эволюция электронной системы моделировалась в рамках приближения времени релаксации. В рамках квазиклассического приближения функция распределения электронов  $f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  находится из кинетического уравнения Больцмана [12]. Интеграл столкновений выбираем в виде, используем в  $\tau$ -приближении. Можно считать, что время релаксации  $\tau = \text{const}$ , так как экспериментально установлено, что в углеродных наноструктурах уже при температурах порядка 40 К время релаксации постоянно и не зависит от температуры.

Кинетическое уравнение Больцмана в  $\tau$ -приближении можно представить в виде [12]

$$\frac{\partial f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\partial t} + \mathbf{F} \frac{\partial f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{p}} = \frac{f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r}) - f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau}, \quad (4)$$

где  $f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  — функция распределения Ферми.

В дальнейшем используем методику, изложенную в работе [13]. Функция распределения электронов  $f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  должна удовлетворять уравнению непрерывности

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = -\text{div}(f_s v_s). \quad (5)$$

Учитывая уравнение (5), уравнение Больцмана можно записать в операторном виде

$$\hat{L}_p f_s + \text{div}(f_s v_s) = \frac{f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau}, \quad (6)$$

где введен оператор

$$\hat{L}_p = -\frac{d\mathbf{p}}{dt} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} + \frac{1}{\tau}, \quad (7)$$

где  $\mathbf{v}_s(\mathbf{p}) = \partial E_s(\mathbf{p})/\partial \mathbf{p}$  — групповая скорость электронов.

Решение уравнения (4) должно удовлетворять условию нормировки

$$\sum_{\mathbf{p},s} f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = n(\mathbf{r}), \quad (8)$$

где  $n(\mathbf{r})$  — концентрация электронов. Плотность тока вычисляется по известной формуле [12]

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = e \sum_{\mathbf{p},s} \mathbf{v}_s(\mathbf{p}) f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r}). \quad (9)$$

Так как в стационарном случае при отсутствии источника зарядов, т.е. при выполнении условия  $\text{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$ , в нулевом (стационарном) приближении решение уравнения (4) имеет общий вид

$$f_s^0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \hat{L}_p^{-1} \left( \frac{f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau} \right). \quad (10)$$

Обратный оператор определяется следующим правилом:

$$\hat{L}_{\pm p}^{-1} \psi(\mathbf{p}) = \int_0^\infty \psi(\mathbf{p} \mp \mathbf{p}(t)) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) dt, \quad (11)$$

где  $\mathbf{p}(t)$  — решение уравнения движения  $d\mathbf{p}/dt = \mathbf{F}$  с начальным условием  $\mathbf{p}(0) = 0$ ,  $\mathbf{F}$  — действующая на частицу постоянная сила, в данном случае электростатическая  $\mathbf{F} = e\mathbf{E}$ .

Чтобы не нарушить условие нормировки (8) и корректно осуществить итерационную процедуру отыскания функции распределения  $f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  в виде ряда по степеням величины  $\nabla_x n(\mathbf{r})$ , в правую часть уравнения (4) добавляем равное нулю слагаемое  $f_s^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \text{div} \mathbf{j}/en$ . Такой прием использовался в работах по исследованию неравновесных флуктуаций в электронном газе с синусоидальным и параболическим законом дисперсии [13,14]. После добавления слагаемого уравнение (4) запишется в виде

$$\hat{L}_p f_s = \frac{f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau} - \text{div}(f_s v_s) + f_s^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \text{div} \mathbf{j}/en.$$

Выражение для плотности тока в первом приближении будет иметь вид

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = & \mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) + e \sum_{\mathbf{p},s} \mathbf{v}_s(\mathbf{p}) \hat{L}_p^{-1} \\ & \times \left\{ -\text{div} \left[ \mathbf{v}_s(\mathbf{p}) \hat{L}_p^{-1} \left( \frac{f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau} \right) \right] \right\} \\ & + \frac{1}{en} \hat{L}_p^{-1} \left( \frac{f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau} \right) \\ & \times \text{div} \left[ e \sum_{\mathbf{p},s} \mathbf{v}_s(\mathbf{p}) \hat{L}_p^{-1} \left( \frac{f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau} \right) \right], \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$\mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) = e \sum_{\mathbf{p},s} \mathbf{v}_s(\mathbf{p}) f_s^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = e \sum_{\mathbf{p},s} \mathbf{v}_s(\mathbf{p}) \hat{L}_p^{-1} \left( \frac{f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau} \right)$$

— плотность тока, получающаяся из выражения (9), если принять  $f_s = f_s^{(0)}$ , где  $f_s^{(0)}$  — функция распределения в первом приближении. Используя соотношения (12), (10) и (12), находим продольную компоненту плотности тока  $j = j_x$ :

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sigma(\mathbf{E})\mathbf{E} + D(\mathbf{E}) \frac{\nabla_x n}{n}. \quad (13)$$

Для случая однородного распределения температуры  $T(\mathbf{r}) = \text{const}$  в линейном приближении по величине  $\nabla_x n$  из формулы (12) можно получить выражения для транспортных коэффициентов бислоя графена: электропроводности и коэффициента диффузии электронов.

В результате после несложных преобразований электропроводность биграфена в безразмерном виде задается следующим выражением:

$$\begin{aligned} \sigma(E) = & \sum_s \int_{-\pi}^{\pi} \sum_m A_{ms} m f_{0s}(p_x, x) \frac{E}{E^2 m^2 + 1} \\ & \times [\sin(mp_x) + Em \cos(mp_x)] dp_x. \end{aligned} \quad (14)$$

Выражение для коэффициента диффузии электронов в бислое графена имеет вид

$$\begin{aligned} D(E) = & \sum_s \int_{-\pi}^{\pi} f_{0s}(p_x, x) \sum_m A_{ms} m \\ & \times \sum_{m'} A_{m's} m' \left\{ \frac{[E^2(m^2 + m'^2) + 1][EmR + M]}{K} \right. \\ & + \left. \frac{[E^3(m'^3 - 2m^2 m') + Em'T]}{K} \right\} dp_x \\ & + \sum_s \int_{-\pi}^{\pi} f_{0s}(p_x, x) \sum_m A_{ms} m \sum_{m'} A_{m's} m' \frac{F}{P} dp_x. \end{aligned} \quad (15)$$

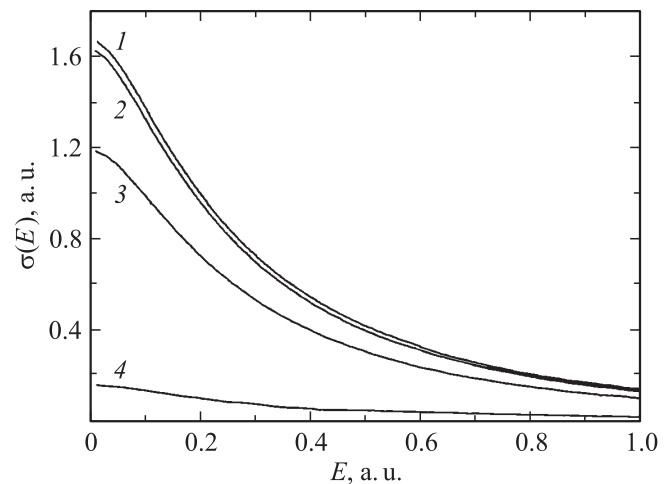
Здесь

$$\begin{aligned} K = & [E^4(m^4 + m'^4 - 2m^2 m'^2) + 2E^2(m^2 + m'^2) + 1][E^2 m^2 + 1], \\ P = & [E^2 m^2 + 1]^2 [E^2 m'^2 + 1], \\ R = & \cos(mp_x) \sin(m' p_x) + \cos(mp_x) \cos(m' p_x) \\ & - \sin(mp_x) \sin(m' p_x), \\ M = & \sin(mp_x) \sin(m' p_x) + \sin(mp_x) \cos(m' p_x) \\ & + \cos(mp_x) \sin(m' p_x), \\ T = & [\cos(mp_x) \cos(m' p_x) - Em \sin(mp_x) \cos(m' p_x)], \\ F = & [\sin(m' p_x) + Em \cos(m' p_x)][\sin(mp_x) \\ & + 2Em \cos(mp_x) - E^2 m^2 \sin(mp_x)]. \end{aligned}$$

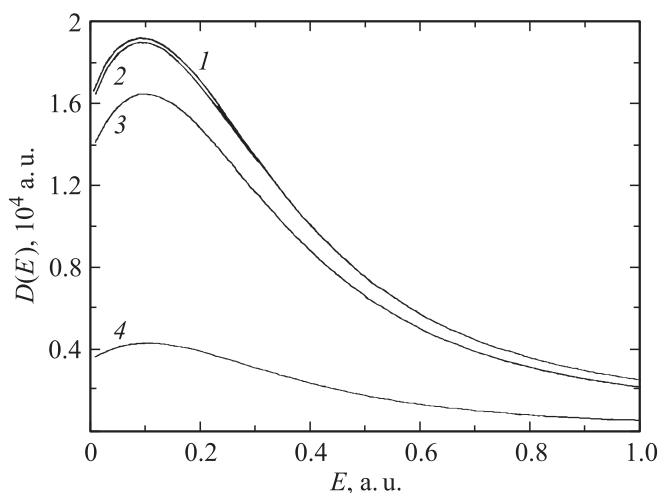
Выбраны следующие параметры системы: температура  $T \approx 300$  К, расстояние между соседними атомами углерода  $d = 0.142$  нм, время релаксации  $\tau \approx 10^{-12}$  с в соответствии с данными [15]. Для удобства визуализации и качественного анализа выбрана следующая единица измерения напряженности электрического поля:  $E_0 = \hbar/e\tau d \approx 4.64 \cdot 10^6$  В/м.

## Результаты численного анализа

Ввиду громоздкости проведен численный анализ зависимостей (14), (15). На рис. 2 представлены зависимости электропроводности  $\sigma(E)$  от амплитуды внешнего электрического поля для различных значений напряжения между слоями графена. Зависимость электропроводности от величины напряженности имеет характерный вид для полупроводников: монотонно уменьшается с увеличением напряженности и асимптотически стремится к насыщению. Это связано с увеличением заполнения



**Рис. 2.** Зависимости электропроводности  $\sigma(E)$  бислоя графена от величины напряженности  $E$  электрического поля при различных значениях электростатического потенциала между слоями графена: 1 —  $U = 0.1$ , 2 —  $0.5$  В, 3 —  $2$  В, 4 —  $5$  В.



**Рис. 3.** Зависимости коэффициента диффузии  $D(E)$  электронов бислоя графена от величины напряженности  $E$  электрического поля для различных значений электростатического потенциала между слоями графена: 1 —  $U = 0.1$ , 2 —  $0.5$ , 3 —  $2$ , 4 —  $5$  V.

электронами всех возможных состояний зоны проводимости. Данные зависимости качественно согласуются с литературными данными [3–5], характер изменения электропроводности под действием внешнего электрического поля типичен для полупроводниковых структур с периодическим и ограниченным законом дисперсии [14].

Кроме того, из рис. 2 видно, что увеличение постоянного напряжения между слоями биграфена ведет к понижению электропроводности. Это можно объяснить тем, что при увеличении поперечного напряжения происходит сдвиг уровня Ферми, приводящий к увеличению локализованных (вырожденных) состояний электронного спектра. Единица измерения проводимости  $\sigma(E)$  (1 a.u.) составляет  $\sigma_0 \approx 1.9 \cdot 10^3$  Sm/m.

На рис. 3 представлены зависимости коэффициента диффузии  $D(E)$ , электронов от амплитуды электрического поля для различных значений электростатического потенциала между слоями графена. Из рис. 3 видно, что коэффициент диффузии электронов имеет ярко выраженный нелинейный характер. Увеличение поля сначала ведет к росту коэффициента, а потом к его убыванию до асимптотического насыщения. Отметим, что это явление общее для всех систем с периодическим и ограниченным законами дисперсии электронов [14]. Единица измерения коэффициента диффузии  $D(E)$  (1 a.u.) составляет  $D_0 = 3.5 \cdot 10^2$  A/m. Коэффициент диффузии электронов можно считать постоянным при амплитудах поля  $E > 5 \cdot 10^6$  V/m. Максимальное значение коэффициента диффузии для биграфена наблюдается при напряженностях поля порядка  $E \approx 0.65 \cdot 10^6$  V/m.

При увеличении напряжения между слоями коэффициент диффузии уменьшается. Это также можно объяснить тем, что происходит сдвиг уровня Ферми, приводящий к увеличению локализованных (вырожденных)

состояний электронного спектра в силу его ограниченности.

Таким образом, проведены исследования транспортных свойств бислоя графена, и получены количественные значения зависимости коэффициента диффузии и проводимости электронов от напряженности приложенного внешнего поля и напряжения управляющего поля, приложенного между слоями. Эти результаты могут быть использованы для разработки электронных устройств (транзисторов) на основе двухслойного графена.

## Заключение

Сформулируем основные результаты проведенного исследования и выводы.

1. Предложена методика теоретического расчета электропроводности и коэффициента диффузии электронов в бислое графена в присутствии электрического поля в приближении времени релаксации.

2. Получены аналитически и проанализированы численно выражения для коэффициента диффузии электронов и нелинейной электропроводности. Обнаружен нелинейный характер зависимости данных коэффициентов от напряженности поля. Показано, что для сильных полей эти коэффициенты стремятся к насыщению.

3. Построены зависимости данных коэффициентов при различных значениях электростатического потенциала между слоями биграфена. Выяснено, что при увеличении этого потенциала и электропроводность, и коэффициент диффузии электронов уменьшаются.

Работа проведена в рамках реализации ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 г.г. (проект № НК-16(3)).

## Список литературы

- [1] Роко М.К., Уильямс Р.С., Аливисатос П. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований. М.: Мир, 2002. 292 с.
- [2] Novoselov K.S. et al. // Science. 2004. Vol. 306. P. 666–669.
- [3] Лозовик Ю.Е., Меркулова С.П., Соколик А.А. // УФН. 2008. Т. 178. № 7. С. 757–776.
- [4] Морозов С.В., Новоселов К.С., Гейм А.К. // УФН. 2008. Т. 178. № 7. С. 776–780.
- [5] Елецкий А.В., Искандарова И.М., Книжник А.А., Красиков Д.Н. // УФН. 2011. Т. 181. № 3. С. 233–268.
- [6] Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. М.: Техносфера, 2003. 336 с.
- [7] Изюмов Ю.А., Чащин И.И., Алексеев Д.С. Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала. М.–Ижевск: НИЦ „Регулярная и хаотическая динамика“, 2006. 384 с.
- [8] Ohta T., Bostwick A., Seyller T., Horn K., Rotenberg E. // Science. 2006. Vol. 313. P. 951–954.
- [9] Wallace P.R. // Phys. Rev. 1947. Vol. 71. P. 622–634.

- [10] Белоненко М.Б., Лебедев Н.Г., Демушкина Е.В. // ФТТ. 2008. Т. 50. С. 367–373.
- [11] Yanushkina N.N., Belonenko M.B., Lebedev N.G. // Phys. Scr. 2011. Vol. 83. P. 015 603.
- [12] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Физическая кинетика. М.: Физмат лит, 1979. 528 с.
- [13] Булыгин А.С., Шмелев Г.М., Маглеванный И.И. // ФТТ. 1999. Т. 41. С. 1314–1316.
- [14] Дыкман И.М., Томчук П.М. Явления переноса и флуктуации в полупроводниках. Киев: Наукова думка, 1981. 320 с.
- [15] Москалюк В.А., Тимофеев В.И. // Электроника и связь. 2010. Т. 2. С. 14–27.