

06

Щель в плотности состояний эпитаксиального графена, сформированного на поверхности размерно-квантованной металлической пленки

© 3.3. Алисултанов

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

Поступило в Редакцию 4 октября 2012 г.

Исследованы электронные состояния эпитаксиального графена, сформированного на поверхности размерно-квантованной пленки. Показано, что в плотности состояний эпитаксиального графена появляется запрещенная щель.

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 опто-электрических применений [5–7]. Одним из основных направлений является изучение эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металлов или полупроводников [8]. Интерес к изучению эпитаксиального графена вызван несколькими причинами. Во-первых, графеновый слой на поверхности металлов и полупроводников может быть рассмотрен в качестве эффективного контакта в приборных устройствах [9]. Во-вторых, для того чтобы в полной мере использовать свойства графеновых слоев в электронике, необходимо варьировать их структуру, химический состав, морфологию и т.д., что можно сделать с помощью соответствующей подложки. И наконец, существует известное обстоятельство, ограничивающее реальное применение изолированного графена в электронике. Это отсутствие щели в энергетическом спектре

носителей. Получение щели в спектре графена (выбором соответствующей подложки, приложением внешнего электрического поля к бислою графена, добавлением примесей и т. д.) является актуальной проблемой физики графена. Последнее обстоятельство привлекает наибольшее внимание. В данной работе показано, что в электронном спектре эпитаксиального графена, сформированного на размерно-квантованной пленке, появляется запрещенная щель. Рассмотрение будет проводиться в рамках модели, в которой лист графена, находящегося на поверхности подложки, представляется в виде адсорбированных на этой поверхности атомов углерода, выстроенных в гексагональную структуру. Такой подход к теоретическому исследованию эпитаксиального графена впервые был предложен в работах Давыдова [10], где с помощью модельных гамильтонианов Андерсона–Ньюнса [11,12] и Халдейна–Андерсона [13] были рассмотрены случаи металлической и полупроводниковой подложки. Модель Давыдова была использована при исследовании различных систем, содержащих эпитаксиальный графен в работах [14–16]. Было показано [10,14–16], что эта модель приводит к вполне адекватным результатам. Здесь также используется модель Давыдова. В модели Андерсона для плотности адатома углерода имеем [10–16]

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_c}{(\omega - \varepsilon_c - \Lambda(\omega))^2 + \Gamma_c^2}, \quad (1)$$

где ε_c — энергия электрона изолированного атома углерода,

$$\Gamma_c(\omega) = \pi |V|^2 \rho(\omega), \quad \Lambda(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-W}^W \frac{\Gamma_c(\omega') d\omega'}{\omega - \omega'}, \quad (2)$$

V — потенциал гибридизации, $\rho(\omega)$ — плотность состояний подложки, W — полуширина зоны проводимости подложки, знак „ P “ означает интегрирование в смысле главного значения, $\Gamma_c(\omega)$ — полуширина квазиуровня адатома углерода, $\Lambda(\omega)$ — функция сдвига. Мы рассматриваем энергии $\omega \ll W$, что дает $\Lambda(\omega) \approx 0$. В идеале это соответствует подложке с бесконечной шириной зоны. Далее, учет прямого взаимодействия между адатомами углерода, с плотностью состояний [1] и выстроенных в структуру графена, приводит к следующему выражению для функции Грина эпитаксиального графена [10]

$$G_0^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = \omega - \varepsilon_c - t f(\mathbf{q}) + i \Gamma_c, \quad (3)$$

где $t \approx 2.8 \text{ eV}$ — матричный элемент перехода электрона между ближайшими соседними атомами углерода в графене, а 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, q — двумерный волновой вектор электронов графена, v_b — зонный индекс: $v_b = +1$ соответствует зоне проводимости, а $v_b = -1$ — валентной зоне. Вблизи точки Дирака с координатами $\mathbf{Q} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$ для энергетического спектра получаем

$$f(\mathbf{k}) = v_b \frac{3}{2} t a |\mathbf{k}| = v_b v_F |\mathbf{k}|, \quad (4)$$

где $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}$. Далее, положим $\varepsilon_c = 0$. Используя спектр (4) в выражении (3), получим плотность состояний упорядоченного эпитаксиального графена

$$\begin{aligned} \rho_{epitax.}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{k, v_b = \pm 1} G_0(\mathbf{k}, \omega) \\ &= \frac{\Gamma_c S}{2\pi^2 v_F^2 \hbar^2} \ln \frac{(\xi^2 + \Gamma_c^2 - \omega^2)^2 + 4\Gamma_c^2 \omega^2}{(\Gamma_c^2 + \omega^2)^2} \\ &\quad + \frac{S\omega}{\pi^2 v_F^2 \hbar^2} \left(\text{arctg} \frac{\xi^2 + \Gamma_c^2 - \omega^2}{2\Gamma_c \omega} - \text{arctg} \frac{\Gamma_c^2 - \omega^2}{2\Gamma_c \omega} \right), \quad (5) \end{aligned}$$

где ξ — ширина зоны Бриллюэна графена ($\xi \sim 2.8 \text{ eV}$). Отметим, что здесь и дальше под ПС подразумевается ПС, приходящаяся на один атом графена. В связи с этим площадь S определим из естественного условия, что один атом недопированного графена содержит один электрон в $2p_z$ -состоянии, т.е. $\int_{-\xi}^{\varepsilon_F} \rho_0(\omega) d\omega = 1$, где ε_F — энергия Ферми,

равная нулю для недопированного графена. Из этого условия получаем: $S = 2\pi v_F^2 \hbar^2 / \xi^2$.

Для энергии электронов пленки, расположенной в плоскости XU , имеем: $E(p) = (2m)^{-1}(p_x^2 + p_y^2) + \varepsilon_i$, где $p = (p_x, p_y)$ — двумерный импульс электронов пленки, m — масса электронов пленки, ε_i —

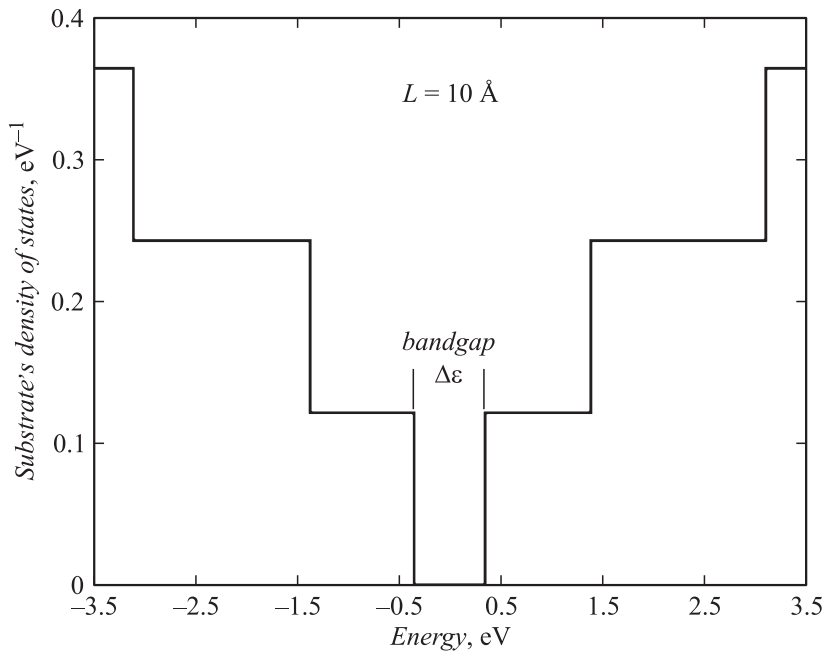


Рис. 1. Плотность состояний размерно-квантованной пленки.

энергия электронов в направлении OZ . Для спектральной функции подложки при этом имеем

$$A_i(p, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{\left(\omega - \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) - \varepsilon_i\right)^2 + \Gamma^2},$$

где Γ — затухание квазичастиц в пленке за счет внутренних столкновительных процессов. Плотность состояний подложки

$$\rho(\omega) = \frac{mS_1}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{i=1}^{n_F} \left\{ \arctg\left(\frac{\omega - \varepsilon_i}{\Gamma}\right) + \frac{\pi}{2} \right\}, \quad (6)$$

где $S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$ — площадь пленки, соответствующая одному атому графена (половина площади элементарной ячейки графена), n_F —

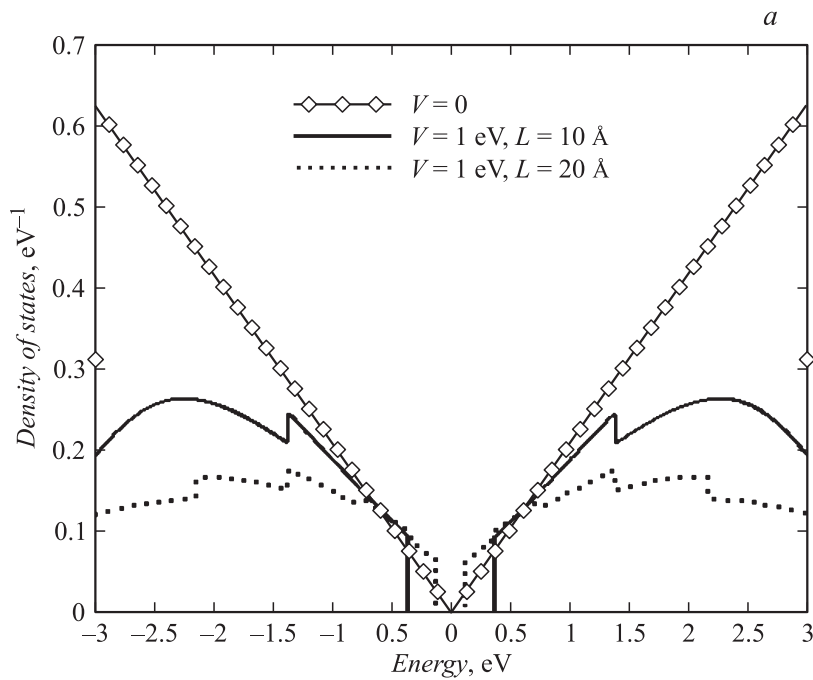


Рис. 2. Плотность состояний эпитаксиального графена, сформированного на поверхности размерно-квантованной пленки (а), увеличенное изображение плотности состояний в непосредственной окрестности точки Дирака (б).

число состояний под уровнем Ферми. Для получения аналитических выражений воспользуемся приближением, в котором $\Gamma \rightarrow 0$. Тогда для плотности состояний пленки получим

$$\rho(\omega) = \frac{mS}{\pi\hbar^2} \sum_i \Theta(\omega - \varepsilon_i). \quad (7)$$

С учетом (7) получаем

$$\Gamma_c(\omega) = \pi|V|^2 \frac{mS}{\pi\hbar^2} \sum_i \Theta(\omega - \varepsilon_i) = \Gamma_0 \sum_i \Theta(\omega - \varepsilon_i).$$

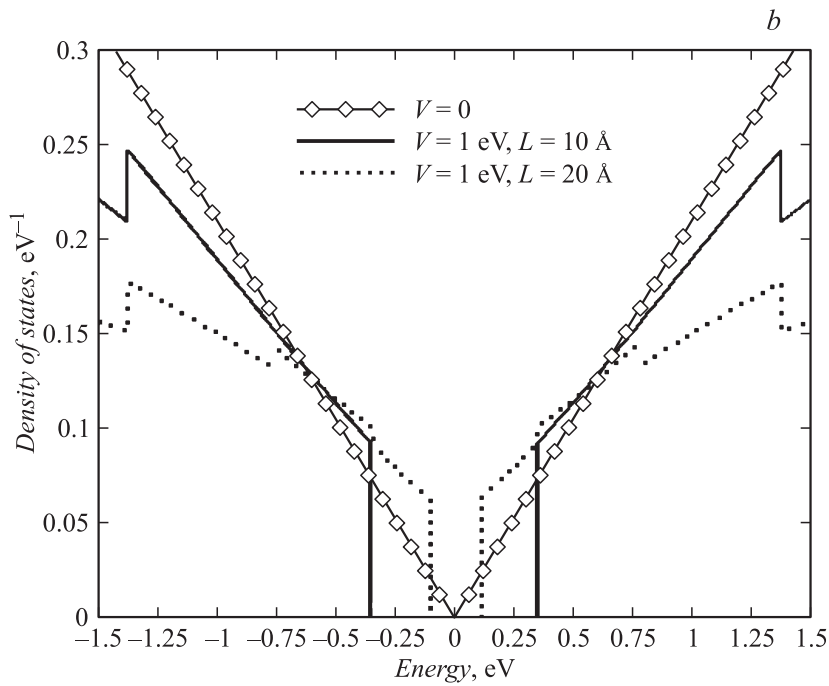


Рис. 2 (продолжение).

В нашем случае $\Gamma_0 \approx 0.38|V|^2$. Если рассматривать пленку в направлении оси OZ как прямоугольную потенциальную яму, то имеем $\varepsilon_i = \pi^2 \hbar^2 i^2 / (2mL^2)$, где L — толщина пленки, а m — эффективная масса электрона в направлении Z . На рис. 1 представлена плотность состояний пленки, а на рис. 2 — плотность состояний эпитаксиального графена, сформированного на поверхности этой пленки при различных значениях толщины пленки. Из рис. 2 можно сделать несколько важных выводов. Во-первых, вблизи точки Дирака зависимость плотности состояний от энергии остается линейной, что играет решающую роль при формировании уникальных свойств графена. Однако область энергии, где справедлив такой закон, сужается. В данном случае этот промежуток составляет около ± 1.5 eV. Во-вторых, угол наклона кривой плотности состояний относительно оси абсцисс уменьшается. Если

представить линейный участок в виде $S|\omega|/\pi\tilde{v}_F^2\hbar^2 + \rho_{epitax.}(0)$, где \tilde{v}_F — перенормированная скорость Ферми, то становится понятным, что изменение наклона плотности состояний возможно только за счет изменения скорости Ферми. В данном случае, когда угол наклона уменьшается, можно сделать вывод, что скорость Ферми увеличивается. В работе [17] рассмотрен вопрос о перенормировке скорости Ферми в примесном графене. В [17] было показано, что примеси играют большую роль в эффекте перенормировки скорости Ферми в непосредственной окрестности точки Дирака: скорость Ферми увеличивается почти в 1.5 раза. По-видимому, аналогичный эффект существует и в эпитаксиальном графене. И наконец, самый важный вывод состоит в том, что в плотности состояний эпитаксиального графена, сформированного на размерно-квантованной пленке имеется щель. Эта щель вызвана квантованием энергии носителей пленки. Ширина щели, очевидно, равна удвоенной энергии основного состояния электрона пленки: $\Delta\varepsilon = \pi^2\hbar^2/(mL^2)$. Для больших значений L размерные эффекты перестают действовать, что приводит к $\Delta\varepsilon = 0$. При построении кривых на рис. 1, 2 было принято, что $m = m_e$, где m_e — масса свободного электрона, а также положено $\varepsilon_F = \varepsilon_{nF} = 3 \text{ eV}$.

Насколько известно автору, подобный метод получения щели в энергетическом спектре графена ранее не обсуждался в литературе.

Список литературы

- [1] *Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R. et al. // Rev. Mod. Phys. 2008. V. 81. P. 109.*
- [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. Т. 133. P. 663; УФН. 2008. Т. 178. С. 923. Falkovsky L.A., Varlamov A.A. // Eur. Phys. J. B. 2007. V. 56. P. 27 005.*
- [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] *Berger C., Song Z., Li T. et al. // J. Phys. Chem. B. 2004. V. 108. P. 19 912.*
- [9] *Lu W.J., Mitchel W.C., Thornton C.A. et al. // Electrochemical Society. 2003. V. 150. P. G177.*
- [10] *Давыдов С.Ю. // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. С. 64; ФТП. 2011. Т. 45. С. 629; ФТП. 2011. Т. 45. С. 1102.*

- [11] *Anderson P.W.* // Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 41.
- [12] *Newns D.M.* // Phys. Rev. 1969. V. 178. P. 1123.
- [13] *Haldane F.D.M., Anderson P.W.* // Phys. Rev B. 1976. V. 13. P. 2553.
- [14] *Алисултанов З.З., Мейланов Р.П.* // ФГТ. 2012. Т. 54. С. 1398; ФММ. 2012. Т. 113. С. 1504; ТМФ. 2012. Т. 172. С. 455.
- [15] *Алисултанов З.З., Гарнов С.В., Мейланов Р.П.* // ФГТ. 2012. Т. 54. С. 2237.
- [16] *Алисултанов З.З., Мейланов Р.П., Нухов А.К., Мусаев Г.М., Идаяев Э.И.* // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38. В. 12. С. 1–7.
- [17] *Скрипник Ю.В., Локтев В.М.* // Письма ЖЭТФ. 2011. Т. 94. С. 605.