18

Транспортные свойства эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металла

© 3.3. Алисултанов¹⁻³, И.К. Камилов¹³

¹ Институт физики им. И.М. Амирханова ДагНЦ РАН, Махачкала, Россия ² Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия ³ Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия E-mail: zaur0102@gmail.com

(Поступила в Редакцию 15 июля 2013 г. В окончательной редакции 15 октября 2013 г.)

Рассмотрены транспортные свойства эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металлической подложки. Используется подход, основанный на модельном гамильтониане Андерсона–Ньюнса. Получено аналитическое выражение для плотности состояний эпитаксиального графена, исследована перенормировка скорости Ферми в примесном эпитаксиальном графене. Исследована вещественная часть динамической проводимости эпитаксиального графена, рассмотрены предельные значения проводимости. Когда взаимодействие между графеном и подложкой равно нулю, статическая проводимость эпитаксиального графена принимает универсальное значение $2e^2/\pi^2\hbar$. Рассмотренные фундаментальные вопросы имеют решающее значение при исследовании оптических, магнетооптических, термоэлектрических и термомагнитных свойств эпитаксиального графена. Полученные результаты представляют большой интерес при рассмотрении эпитаксиального графена как перспективного материала для CBЧ-техники.

1. Введение

Исследование электронных свойств графена в последнее время вызывает значительный интерес. Графен как монослой атомов углерода является идеальной структурой для изучения физики двумерных систем [1] в том смысле, что этот материал является истинно двумерным. Пониженная размерность, линейная зонная структура, устойчивая относительно кулоновского взаимодействия [2], и нулевая запрещенная зона приводят к уникальным оптическим, электрон-фононным и термоэлектрическим свойствам [1,3-8], делая графен новым многообещающим материалом для различных приложений. Кроме того, графен является основой всех других аллотропов углерода (фуллеренов, нанотрубок и т.д.), что существенно усиливает интерес к нему. Линейный бесщелевой электронный спектр графена, абсолютно одинаковый для валентной зоны и зоны проводимости, связан с симметрией кристаллической решетки. А тот факт, что уровень Ферми электронов графена проходит через точку Дирака (точка пересечения валентной зоны и зоны проводимости), связан с валентностью атома углерода (атом углерода в 2*p*_z-состоянии содержит один электрон, в то время как в этом состоянии, согласно принципу Паули, могут находиться два электрона).

Одним из основных направлений является изучение эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металлов или полупроводников [9]. Интерес к изучению эпитаксиального графена вызван несколькими причинами. Во-первых, при выращивании кристаллов на карбиде кремния различными методами (например, методом молекулярно-лучевой эпитаксии) может произойти рост графена, что сильно влияет на свойства кристаллов. Существуют специальные методы подавления роста графена. Во-вторых, графеновый слой на поверхности металлов и полупроводников может быть рассмотрен в качестве эффективного контакта в приборных устройствах. Для подложки из карбида кремния такие исследования были проведены в работе [10]. В-третьих, 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. Кроме того, 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. Существует достаточное количество экспериментальных работ, посвященных исследованию электронных свойств эпитаксиального графена (см., например, [9,11-15], а также многочисленные работы группы профессора де Хира [16]).

В настоящей работе проведено теоретическое рассмотрение транспортных свойств эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металлической подложки. Исследование проводится в рамках модели эпитаксиального графена, ранее предложенной Давыдовым. Далее подробно описывается используемая модель.

Модель для описания электронных состояний эпитаксиального графена (модель Давыдова)

Большинство теоретических расчетов в этом направлении проводится численными методами в рамках формализма функционала плотности. Наряду с этим для исследования системы графен-металлическая подложка можно применить подход, основанный на модельном гамильтониане типа Андерсона-Ньюнса [17,18]. Такой подход к теоретическому исследованию эпитаксиального графена впервые был предложен в работах Давыдова [19-21], где были рассмотрены случаи металлической и полупроводниковой подложек. Модель Давыдова заключается в том, что лист графена, находящегося на поверхности подложки, можно представить как адсорбированные на этой поверхности атомы углерода, выстроенные в структуре графена (рис. 1). В работах [19–21] было показано, что эта модель приводит к результатам, которые вполне адекватно согласуются с экспериментом. В [22-26] в рамках этой модели были исследованы электронные состояния системы эпитаксиальный графен-размерно-квантованная пленка, а в [27,28] эта модель использовалась для исследования электронных состояний системы квантовая точка-графен-подложка $SiO_2 + n^+Si$. Суть подхода состоит в следующем. Квазиуровень одного адатома углерода смещен и уширен из-за гибридизации с подложкой. В модели Андерсона-Ньюнса гамильтониан системы адатом-подложка может быть записан следующим образом:

$$H = \sum_{p,\sigma} \varepsilon(\mathbf{p}) c^{+}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + E_a \sum_{\sigma} a^{+}_{i\sigma} a_{i\sigma} + \vartheta a^{+}_{i\uparrow} a_{i\uparrow} a^{+}_{i\downarrow} a_{i\downarrow} + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p},\sigma} (c^{+}_{\mathbf{p}\sigma} a_{i\sigma} + \mathbf{h. c.}), \quad (1)$$

где E_a — энергия атомного электрона в состоянии $|a\sigma\rangle$, ϑ — внутриатомное кулоновское отталкивание электронов с противоположными спинами, $c_{k\sigma}^+$ ($c_{k\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электронов подложки, находящихся в состоянии $|\mathbf{p}\sigma\rangle$, $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона в подложки, находящихся в состоянии $|\mathbf{p}\sigma\rangle$, $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона адатома, V — потенциал гибридизации (в настоящей работе мы следуем приближению, в котором эта величина не зависит от $|\mathbf{p}\sigma\rangle$), N — число поверхностных атомов подложки, σ — спиновое число. Далее ограничимся одним спиновым состоянием. С помощью гамильтониана (1) получаем выражение для функции Грина ($\Phi\Gamma$) адатома углерода

$$G_i^0 = (\omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega) - i\Gamma_c(\omega))^{-1}, \qquad (2)$$

где
$$\varepsilon_a = E_a + \vartheta \langle a_\sigma^+ a_\sigma \rangle$$
 и

$$\Gamma_c(\omega) = \pi |V|^2 \rho(\omega), \qquad (3)$$

$$\Lambda(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_c(\omega') d\omega' / (\omega - \omega')$$
(4)

— полуширина и функция сдвига квазиуровня соответственно, $\rho(\omega)$ — плотность состояний (ПС) подложки, символ P означает интегрирование в смысле главного значения. Между адатомами углерода, выстроенными в гексагональную структуру (кристаллическая структура графена показана на рис. 1), происходит обмен электронами, за счет чего формируется зона Бриллюэна эпитаксиального графена. Для определения возмущенной $\Phi\Gamma$ воспользуемся уравнением Дайсона в приближении сильной связи, когда учитываются только прямые переходы между ближайшими соседними атомами:

$$G_{ij} = G_i^0 \delta_{ij} + \sum_l G_i^0 t_{il} G_{lj}, \qquad (5)$$

где $t_{il} = t$ — матричный элемент перехода электрона на ближайшие соседние атомы (для изолированного графена $t \approx 2.8 \,\text{eV}$). Применяя Фурье-преобразование к (5) и учитывая, что $G_i^0 = G_0$, получим

$$G_{\mathbf{q}}^{-1}(\omega) = G_{\mathbf{0}}^{-1}(\omega) - tf(\mathbf{q}), \qquad (6)$$

где 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. В более общем виде $\Phi\Gamma$ эпитаксиального графена следует записать следующим образом:

$$G_{\mathbf{q}}^{-1}(\omega) = G_{\mathbf{0}}^{-1}(\omega) - tf(\mathbf{q}) - i\gamma, \qquad (7)$$

где γ — энергия затухания (остаточное рассеяние) квазичастиц за счет внутренних столкновительных процессов (рассеяния на фононах, примесных атомах, дефектах



Рис. 1. Структура графена. Центральный атом расположен в начале координат. *А*, *В* — подрешетки графена, *t'* — энергия перескока электронов на вторые ближайшие соседние атомы углерода.

кристаллической решетки и т.д.). Случай наличия в решетке эпитаксиального графена неупорядоченности конкретного типа является темой отдельной работы. Здесь же нас не будет интересовать явный вид величины у (за исключением раздела 4, в котором рассматривается примесный эпитаксиальный графен в модели Т-матрицы рассеяния). Вблизи точки Дирака с координатами $\mathbf{Q} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$ для энергетического спектра получаем $tf(\mathbf{k}) = v_b 3ta |\mathbf{k}|/2 = v_b v_F \hbar |\mathbf{k}|$, где $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}$, $v_{\rm F} = 3ta/2\hbar$ — скорость Ферми для электронов графена (для изолированного графена $v_{\rm F} \approx 1 \cdot 10^8 \, {\rm cm/s}$). В настоящей работе предполагается, что в случае эпитаксиального графена величина t остается такой же, как и для изолированного графена. Кроме того, предполагается справедливость приближения сильной связи для эпитаксиального графена. Следует отметить, что указанные допущения требуют более строгого обоснования, что представляет самостоятельный интерес и выходит за рамки настоящей работы.

Таким образом, в модели Давыдова решаются две задачи: адсорбция одиночного атома углерода на поверхности подложки и учет прямого электронного обмена между адатомами углерода. Насколько это последовательно и корректно, покажут дальнейшие исследования в данном направлении. Попытка учета косвенного обмена адатомов углерода через электронный газ подложки в рамках модели Давыдова была предпринята в работе [25].

Плотность состояний эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металлической подложки

Рассмотрим вопрос о ПС эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металлической подложки. Используя выражения (2)–(4), (6), получим ПС эпитаксиального графена

$$\begin{split} \rho_{\text{epitax}}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{2N} \sum_{k, \nu_b = \pm 1} G_{\mathbf{k}}(\omega) \\ &= \frac{\Gamma_c S}{2\pi^2 v_{\text{F}}^2 \hbar^2} \ln \frac{(\xi^2 + \Gamma_c^2 - \omega^2)^2 + 4\Gamma_c^2 \omega^2}{(\Gamma_c^2 + \omega^2)^2} \\ &+ \frac{S\omega}{\pi^2 v_{\text{F}}^2 \hbar^2} \left(\operatorname{arctg} \frac{\xi^2 + \Gamma_c^2 - \omega^2}{2\Gamma_c \omega} - \operatorname{arctg} \frac{\Gamma_c^2 - \omega^2}{2\Gamma_c \omega} \right), \end{split}$$

где ξ — энергетический параметр порядка ширины зоны эпитаксиального графена ($\xi \sim t$). Коэффициент 1/2 перед суммированием по **k** связан с увеличением в 2 раза количества полюсов ФГ, что является следствием суммирования по зонному индексу. Отметим, что здесь и далее 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. $\int\limits_{-\xi}^{\varepsilon_{\rm F}}
ho_0(\omega) d\omega = 1$, где $\varepsilon_{\rm F}$ — энергия

Ферми, равная нулю для недопированного графена. Из этого условия получаем $S = 2\pi v_F^2 \hbar^2 / \xi^2$. ПС подложки в используемой модели аппроксимируется следующим образом [17,18]:

$$\rho(\omega) = \begin{cases} \rho_0, & -W < \omega < W, \\ 0, & |\omega| > W, \end{cases}$$
(9)

где *W* — полуширина зоны разрешенных состояний металла.

Формула (9) соответствует двумерному электронному газу с квадратичным спектром, поэтому

$$\rho_0 = \frac{mS_1}{\pi\hbar^2},$$

m — эффективная масса электрона в металле, *S*₁ — площадь поверхности металла, соответствующего одно-



Рис. 2. Плотность состояний эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металла. *а* — при различных значениях потенциала гибридизации и фиксированном значении ширины зоны, *b* — при различных значениях ширины зоны и фиксированном значении потенциала гибридизации.

му атому графена ($S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$). Для атома углерода, адсорбированного на такой подложке, имеем

$$\Gamma_c = \pi |V|^2 \rho_0, \tag{10}$$

$$\Lambda(\omega) = -|V|^2 \rho_0 \ln \left| \frac{\omega - W}{\omega + W} \right|.$$
(11)

Здесь и далее мы рассматриваем энергии $\omega \ll W$, что дает $\Lambda(\omega) \approx 0$. В идеале это соответствует подложке с бесконечной шириной зоны, что часто используется для металлов.

На рис. 2 представлена плотность состояний эпитаксиального графена. Исходя 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 энергий, где справедлив такой закон, несколько сужается. Во-вторых, угол наклона кривой плотности состояний относительно оси абсцисс уменьшается. Если представить линейный участок в виде $S|\omega|/\pi \tilde{v}_{\rm F}\hbar^2 + \rho_{\rm epitax}(0)$, где $\tilde{v}_{\rm F}$ — 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. Далее более подробно рассматривается явление резонанса скорости Ферми в слабонеидеальном эпитаксиальном графене.

Резонанс скорости Ферми в неупорядоченном эпитаксиальном графене, сформированном на металле

Подобно тому как электроны, не обладающие линейным спектром, характеризуются эффективной массой, безмассовые частицы описываются другим важным параметром — эффективной скоростью. Для электронов графена этим параметром является скорость Ферми. Исследование влияния различных возмущений на эту величину представляет большой интерес. В работе [29] было показано, что скорость Ферми в примесном графене в непосредственной окрестности точки Дирака резонансным образом увеличивается почти в 1.5 раза. С другой стороны, в недавней экспериментальной работе [30] показано, что в непосредственной окрестности точки Дирака действительно имеет место перенормировка скорости Ферми. В настоящей работе в рамках приближения Т-матрицы рассеяния рассмотрим вопрос о перенормировке скорости Ферми в примесном эпитаксиальном графене. Это исследование на данном этапе имеет чисто теоретический интерес, так как экспериментальных работ, подобных [30], нам пока неизвестно. Естественно, имеется много факторов, приводящих к перенормировке скорости Ферми: электрон-электронные взаимодействия, электрон-фононное взаимодействие и т.д. Здесь

мы остановимся лишь на эффекте, который вносится примесными атомами.

Наличие примесей необходимо учитывать в рамках самосогласованного приближения матрицы рассеяния, в котором собственно-энергетическая часть (*T*-матрица), обусловленная примесями, записывается следующим образом:

$$T(\omega) = nU \left[1 - UG(\omega - T(\omega)) \right]^{-1}, \qquad (12)$$

где U — изменение величины потенциала на узле, занятом примесью, n — концентрация примесей, $G(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}(\omega) - \Phi\Gamma$ упорядоченного эпитаксиального графена. Уравнение (12) относительно $T(\omega)$ можно решить только численно. В связи с этим мы прибегнем к приближению, в котором самосогласованность учтем частично, а именно

$$T(\omega) = nU \left[1 - UG(\omega - T_1(\omega))\right]^{-1}, \qquad (13)$$

где $T_1(\omega) = nU [1 - UG(\omega)]^{-1}$ — матрица рассеяния в нулевом приближении. Для $\Phi\Gamma$ примесного эпитаксиального графена, согласно уравнению Дайсона, имеем

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}}(\omega) = \left[G_{\mathbf{k}}^{-1}(\omega) - T(\omega)\right]^{-1}$$

Оценим изменение скорости Ферми. Перенормировка спектра определяется, как известно, действительной частью массового оператора $\Sigma(\varepsilon)$. Введем перенормированную энергию

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}})$$
 (14)

или

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}) = \varepsilon_{\mathbf{k}},$$
 (15)

где $\varepsilon_{\mathbf{k}} = v_b v_F \hbar |\mathbf{k}|$. Возьмем производную по **k** от обеих частей выражения (15), тогда получим

$$\frac{d}{d\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}} \left(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}) \right) \frac{d\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}}{d\mathbf{k}} = \frac{d\varepsilon_{\mathbf{k}}}{d\mathbf{k}}, \quad (16)$$

или, учитывая, что $d\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}/d\mathbf{k} = \hbar \tilde{v}_{\mathrm{F}}, d\varepsilon_{\mathbf{k}}/d\mathbf{k} = \hbar v_{\mathrm{F}},$

$$\frac{\tilde{v}_{\rm F}}{v_{\rm F}} = \left(\frac{d}{d\varepsilon} \Big(\varepsilon - \operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon) \Big) \Big|_{\varepsilon = \varepsilon_{\rm F}} \right)^{-1}, \qquad (17)$$

где $\varepsilon_{\rm F}$ — энергия Ферми графена. В данном случае $\Sigma(\omega) = T(\omega)$. Для ФГ, фигурирующей в формуле (13), имеем

$$ImG(\Omega) = \frac{\tilde{\Gamma}}{2\xi^2} \ln \frac{(\xi^2 + \tilde{\Gamma}^2 - \Omega^2) + 4\tilde{\Gamma}^2 \Omega^2}{(\Gamma^2 + \Omega^2)^2} + \frac{\Omega}{\xi^2} \left(\arctan \frac{\xi^2 + \tilde{\Gamma}^2 - \Omega^2}{2\tilde{\Gamma}\Omega} - \arctan \frac{\tilde{\Gamma}^2 - \Omega^2}{2\tilde{\Gamma}\Omega} \right),$$
(18)



Рис. 3. Резонанс скорости Ферми вблизи точки Дирака в изолированном (V = 0) и эпитаксиальном (V = 0.3 и 1 eV) графене. U — изменение величины потенциала на узле, занятом примесью, n — концентрация примесей.

$$\operatorname{Re}G(\Omega) = \frac{\pi\tilde{\Gamma}}{\xi^{2}} \left(\operatorname{arctg} \frac{\xi^{2} + \tilde{\Gamma}^{2} - \Omega^{2}}{2\tilde{\Gamma}\Omega} - \operatorname{arctg} \frac{\tilde{\Gamma}^{2} - \Omega^{2}}{2\tilde{\Gamma}\Omega} \right) - \frac{\pi\Omega}{2\xi^{2}} \ln \frac{(\xi^{2} + \tilde{\Gamma}^{2} - \Omega^{2})^{2} + 4\tilde{\Gamma}^{2}\Omega^{2}}{(\tilde{\Gamma}^{2} + \Omega^{2})^{2}}, \quad (19)$$

где $\Omega = \omega - \text{Re}T_1(\omega)$, $\tilde{\Gamma} = \Gamma + \text{Im}T_1(\omega)$. С помощью формул (13), (17)–(19) на рис. 3 построена зависимость скорости Ферми от энергии Ферми в непосредственной окрестности точки Дирака. Из рис. 3 видно, что в эпитаксиальном графене влияние примесей сильно подавлено. Скорость Ферми эпитаксиального графена для разумных значений концентрации примесей практически не испытывает изменений. Здесь мы исследовали влияние примесей на скорость Ферми в эпитаксиальном графене. Однако необходимо отметить, что даже в чистом эпитаксиальном графене скорость Ферми перенормирована. Это так называемый эффект подложки. Влияние металлической и полупроводниковой подложек на скорость Ферми беспримесного эпитаксиального графена подробно исследовано в работе [31].

Проводимость эпитаксиального графена, сформированного на металле

Интерес к графену вызван в основном его уникальными транспортными свойствами. Так, в работе [32] было продемонстрировано необычное проявление целочисленного квантового эффекта Холла в графене, а в [33] исследовался необычный СВЧ отклик электронов графена. В [34–37] исследовался электронный транспорт неупорядоченного графена. Исследование электронного транспорта в графене представляет большой интерес. Одно из уникальных свойств графена заключается в том, что проводимость графена по постоянному току отлична от нуля даже при нулевой концентрации носителей [1]. Объяснению минимальной проводимости посвящено много теоретических работ [3,4,35–40]. Физика данного явления связана с тем, что нулевая эффективная масса электронов в графене приводит к "поляризации вакуума", т. е. рождению электрон-дырочных пар при любых энергиях барьера, и, как следствие, к преодолению таких барьеров с единичной вероятностью (клейновское туннелирование [41]). Здесь мы рассмотрим электронный транспорт в эпитаксиальном графене, сформированном на металле.

Пусть вдоль оси *х* приложено электрическое поле (рис. 4). Тогда вдоль этой оси потечет электрический ток. Для расчета действительной части проводимости воспользуемся формулой Кубо–Гринвуда [34]

$$\sigma(\omega, T) = -\frac{4v_{\rm F}^2\hbar^2 e^2}{NS\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar} [f(\varepsilon + \omega) - f(\varepsilon)] \\ \times \sum_{k, \nu_{b1}, \nu_{b2} = \pm 1} {\rm Im}G(\mathbf{k}, \varepsilon) {\rm Im}G(\mathbf{k}, \varepsilon + \omega), \quad (20)$$

где $f(\varepsilon) = (e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1)^{-1}$ — функция распределения Ферми–Дирака, v_{b1} и v_{b2} — зонные индексы, входящие в функции $G(\mathbf{k}, \varepsilon)$ и $G(\mathbf{k}, \varepsilon + \omega)$ соответственно, μ химический потенциал, T — температура, ω — энергия приложенного поля (постоянная Планка, умноженная на частоту поля). В выражении (20) учтены коэффициенты, появляющиеся при суммировании по спиновому, долинному и зонному индексам. Проводя интегрирование по \mathbf{k} в (20), окончательно получим

$$\sigma(\omega, T) = -\frac{e^2}{2\pi^2 \hbar \omega} \times \sum_{\nu_{b1}, \nu_{b2}=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[f(\varepsilon + \omega) - f(\varepsilon) \right] K(\omega, \varepsilon), \quad (21)$$

где $K(\omega, \varepsilon) = \Gamma^2 \Theta(\omega, \varepsilon)$. Получение выражения для $\Theta(\omega, \varepsilon)$ обсуждается в Приложении. Рассмотрим снача-



Рис. 4. Схематическое изображение эпитаксиального графена, к которому приложено продольное электрическое поле, вызывающее ток. К графену также приложено перпендикулярное поле, с помощью которого можно допировать графен электронами или дырками (эффект поля).

ла статический предел ($\omega \to 0$) для случая $T \approx \mu$, когда электронный газ эпитаксиального графена вырожден. Затем приступим к исследованию динамической проводимости.

5.1. Статическая проводимость эпитаксиального графена с вырожденными носителями. В случае $\omega \to 0$ имеем

$$f(\varepsilon + \omega) - f(\varepsilon) = \omega \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}.$$
 (22)

С учетом этого выражение (21) можно переписать в виде

$$\sigma(\omega=0,T) = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \, \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}, K(\omega=0,\varepsilon).$$
(23)

Для вырожденных носителей $f(\varepsilon) = \Theta(\mu - \varepsilon)$, а следовательно,

$$\sigma(\omega=0,T) = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} K(\omega=0,\mu).$$
(24)

5.1.1. Эпитаксиальный графен с $\mu = 0$. Такой случай может быть реализован, если эпитаксиальный графен дополнительно допировать (рис. 4) дырками (если изначально $\mu > 0$) или электронами (если изначально $\mu < 0$). Естественно, для того чтобы носители были вырожденными, необходимо положить T = 0. В этом случае выражение (22) приводит к следующему:

$$\sigma_{G-M}^{0}(\omega=0,T=0) = \frac{2e^{2}}{\pi^{2}\hbar} \left[1 - \frac{(\gamma+\Gamma_{c})^{2}}{\xi^{2} + (\gamma+\Gamma_{c})^{2}} \right].$$
(25)

Прежде всего из последнего выражения следует, что при γ , $\Gamma_c \rightarrow 0$ проводимость принимает универсальное значение $2e^2/\pi^2\hbar$, что находится в согласии с результатами фундаментальных теоретических [39,40] и экспериментальных [42] работ. Из (25) видно, что наличие металлической подложки приводит к уменьшению минимальной проводимости графена.

5.1.2. Эпитаксиальный графен с $\mu \neq 0$. В этом случае формула (20) дает

$$\sigma_{G-M} = \frac{e^2}{\pi^2 \hbar} \left[\left(\frac{(\mu^2 - \Gamma^2) F_1(\Gamma) - 4\mu^2 \Gamma^2}{F_1^2(\Gamma) + 4\mu^2 \Gamma^2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\mu}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{\mu} \right) \left(\operatorname{arctg} \frac{F_1(\Gamma)}{2\mu\Gamma} + \operatorname{arctg} \frac{\mu^2 - \Gamma^2}{2\mu\Gamma} \right) \right], \quad (26)$$

где $F_1(x) = \xi^2 - \mu^2 + x^2$, $\Gamma = \gamma + \Gamma_c$. Нетрудно видеть, что при $\mu \to 0$ $\sigma_{G-M} \to \sigma_{G-M}^0$. Будем полагать, что $\gamma = 0.1$ eV. На рис. 5 приведены зависимости статической проводимости эпитаксиального графена от химического потенциала при различных значениях потенциала гибридизации. Отметим интересный результат: при увеличении взаимодействия между графеном и подложкой проводимость становится постоянной величиной,



Рис. 5. Зависимость от энергии Ферми статической проводимости эпитаксиального графена, сформированного на металле, в единицах $e^2/\pi^2\hbar$ (*a*), и та же зависимость в увеличенном виде (*b*).

не зависящей от энергии Ферми. Такое поведение, повидимому, связано с тем, что при увеличении взаимодействия между графеном и подложкой обмен электронами между ними усиливается. Другими словами, электроны (или дырки), которые перешли в графен при допировании (эффект поля), легко его покидают, переходя в подложку.

Если приложить поле затвора ΔU , то можно допировать графен, меняя тем самым величину μ . Можно показать, что при нулевой температуре изменение химического потенциала (энергии Ферми) за счет эффекта поля связано с приложенным напряжением соотношением $\Delta F_{\rm F} = \pm v_{\rm F} \hbar \sqrt{\pi \kappa |\Delta U|/ed}$, где d — толщина затвора, e — заряд электрона, κ — диэлектрическая проницаемость. Знак "плюс" соответствует допированию электронами, а "минус" — допированию дырками. Обычно используют диэлектрическую подложку из SiO₂, как и на рис. 4. Допирование эпитаксиального графена, изображенного



Рис. 6. Зависимость статической проводимости эпитаксиального графена от величины $\Delta E_{\rm F}$ при различных значениях величины допирования (эффект поля).

на рис. 4, можно осуществить, если приложить к одному из краев (где подложка диэлектрическая) перпендикулярное поле, предварительно подложив с другой стороны этого края (со стороны SiO₂) источник носителей (обычно используют легированный кремний n⁺-Si, как показано на рис. 4). Принято, что $\kappa \approx 4.5$. Кроме того, положим d = 300 nm. С учетом этих значений на рис. 6 приведена зависимость статической проводимости от величины $\Delta E_{\rm F}$. Такую схему можно предложить для экспериментального измерения величины переходящего заряда. Действительно, химическому потенциалу недопированного эпитаксиального графена, обусловленному зарядовым обменом между графеном и подложкой, будет соответствовать точка минимума на кривой (рис. 6), которая в свою очередь определяется величиной приложенного поля.

5.2. Статическая проводимость эпитаксиального графена с невырожденными носителями. Рассмотрим теперь случай невырожденных носителей. Для этого случая имеем

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{T} \frac{e^{(\varepsilon-\mu)/T}}{(e^{(\varepsilon-\mu)/T}+1)^2}.$$
(27)

Связь между химическим потенциалом и концентрацией носителей устанавливается с помощью соотношения

$$n = \frac{2}{\pi (\hbar v_{\rm F})^2} \int_0^\infty \varepsilon [f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)] d\varepsilon.$$
(28)

Если n_0 — концентрация носителей, самопроизвольно перешедших между графеном и металлом, то в общем случае наличия перпендикулярного поля

$$n_0 + \frac{\kappa U}{ed} = \frac{2}{\pi (\hbar v_{\rm F})^2} \int_0^\infty \varepsilon [f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)] d\varepsilon.$$
(29)



Рис. 7. Зависимость минимальной статической проводимости изолированного (V = 0) и эпитаксиального (V = 1) графена от температуры (a) и зависимости статической проводимости эпитаксиального графена от химического потенциала при различных значениях потенциала гибридизации и температуры (b, c).

Физика твердого тела, 2014, том 56, вып. 4

При $T \gg \mu$ из (29) получаем

$$\mu \approx \frac{\pi (\hbar v_{\rm F})^2 n}{2.8T},\tag{30}$$

(32)

где мы воспользовались численным расчетом: $\sum_{i=1}^{\infty} (-1)^i / i = -0.693.$

5.2.1. Эпитаксиальный графен с $\mu = 0$. Для статической проводимости получаем

$$\begin{split} \sigma(\omega=0,T) &= -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar T} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \, \frac{e^{\varepsilon/T}}{(e^{\varepsilon/T}+1)^2} K(\omega=0,\varepsilon), \end{split} \tag{31} \\ K(\omega=0,\varepsilon) &= \left(\frac{(\varepsilon^2-\Gamma^2)(\xi^2+\varepsilon^2+\Gamma)^2-4\varepsilon^2\Gamma^2}{(\xi^2+\varepsilon^2+\Gamma^2)^2+4\varepsilon^2\Gamma^2}\right) \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{\Gamma}+\frac{\Gamma}{\varepsilon}\right) \left(\operatorname{arctg} \frac{\xi^2+\varepsilon^2+\Gamma^2}{2\varepsilon\Gamma} + \operatorname{arctg} \frac{\varepsilon^2-\Gamma^2}{2\varepsilon\Gamma} \right). \end{split}$$

На рис. 7, *а* представлена зависимость минимальной статической проводимости от температуры при различных значениях потенциала гибридизации. Из рис. 7, *а* видно, что даже для небольших значений потенциала гибридизации проводимость равна минимальной проводимости графена и практически не зависит от температуры. Этот эффект можно использовать в устройствах, где такая зависимость нежелательна (магнеторезисторы и т.д.). Конечно, следует отметить, что этот результат есть предсказание нашей модели. К сожалению, авторам неизвестны экспериментальные работы по измерению статической проводимости эпитаксиального графена, сформированного на металле.

5.2.2. Эпитаксиальный графен с $\mu \neq 0$. Для этого случая, очевидно, имеем

$$\sigma(\omega=0,T) = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar T} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{e^{(\varepsilon-\mu)/T}}{(e^{(\varepsilon-\mu)/T}+1)^2} K(\omega=0,\varepsilon),$$
(33)

На рис. 7, *b*, *c* представлена зависимость проводимости от химического потенциала при различных значениях температуры. Видно, что наиболее существенная зависимость от температуры имеется в окрестности нулевого химического потенциала.

5.3. Динамическая проводимость эпитаксиального графена. В этом случае имеем

$$f(\varepsilon + \omega) - f(\varepsilon) = -\frac{\operatorname{sh} \frac{\omega}{2T}}{2\operatorname{ch} \frac{\varepsilon + \omega - \mu}{2T} \operatorname{ch} \frac{\varepsilon - \mu}{2T}}.$$
 (34)

Тогда

$$\sigma(\omega, T) = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar \omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon - \frac{\operatorname{sh} \frac{\omega}{2T} K(\omega, \varepsilon)}{2 \operatorname{ch} \frac{\varepsilon + \omega - \mu}{2T} \operatorname{ch} \frac{\varepsilon - \mu}{2T}}.$$
 (35)



Рис. 8. Зависимость проводимости от частоты внешнего поля при различных значениях потенциала гибридизации.



Рис. 9. Зависимость проводимости эпитаксиального графена от частоты внешнего поля при различных значениях химического потенциала (*a*) и температуры (*b*). На вставках приведены аналогичные зависимости для изолированного графена.

На рис. 8 представлена зависимость проводимости от частоты внешнего поля при различных значениях потенциала гибридизации, а на рис. 9 показана та же зависимость, но при различных значениях химического потенциала и температуры. На вставках к рис. 9, а и b приведены аналогичные зависимости для изолированного графена. Одним из уникальных свойств недопированного изолированного графена является независимость динамической проводимости от частоты в оптическом диапазоне. Это обстоятельство связано с тем, что валентная зона и зона проводимости конусообразны и имеют абсолютно одинаковую зонную симметрию. Поэтому процессы "переброса" электрона из валентной зоны в зону проводимости, происходящие с сохранением импульса (прямые переходы), как легко представить, не зависят от частоты. При допировании графена, как видно из вставки к рис. 9, а, проводимость начинает сильно зависеть от частоты, что связано с нарушением указанных выше условий (кроме того, в этом случае существенную роль начинают играть внутризонные процессы). В эпитаксиальном графене также имеют место аналогичные процессы, за тем исключением, что зависимость от частоты значительно ослабляется. Это можно объяснить, по-видимому, появлением некоторой дополнительной "инерционности" электронов эпитаксиального графена, связанной с рассеянием последних на подложке.

6. Заключение

В настоящей работе в рамках модельного подхода получен ряд интересных результатов. Кратко можно их сформулировать следующим образом.

1. Зависимость статической проводимости эпитаксиального графена, сформированного на металле, от химического потенциала значительно ослабляется по сравнению со случаем изолированного графена.

2. Зависимость минимальной статической проводимости эпитаксиального графена, сформированного на металле, от температуры значительно ослабляется по сравнению со случаем изолированного графена.

3. Динамическая проводимость эпитаксиального графена в отличие от изолированного графена очень слабо зависит от частоты внешнего поля, а также от химического потенциала и температуры.

4. В слабонеидеальном эпитаксиальном графене подавлено резонансное возрастание скорости Ферми вблизи точки Дирака.

Исследование электронного транспорта эпитаксиального графена играет решающую роль при изучении оптических свойств. Так, например, знание динамической проводимости позволяет рассчитать коэффициент отражения от эпитаксиального графена, исследовать магнетооптический эффект Керра и т.д. Кроме того, динамическая проводимость позволяет изучать поглощательные свойства эпитаксиального графена. Здесь следует упомянуть работу [43], в которой исследовался графен, модифицированный квантовыми точками. За счет такой модификации оптическое поглощение увеличивается во много раз, что делает гибридную систему из графена и квантовых точек фототранзистором со сверхвысоким коэффициентом усиления [43]. Полученные выражения для статической проводимости эпитаксиального графена можно применить при исследовании термоэлектрических и термомагнитных свойств (коэффициент Зеебека, коэффициент Пелтье, эффект Нернста и т.д.) [44]. Все эти вопросы чрезвычайно интересны и требуют отдельного рассмотрения.

Авторы благодарят С.Ю. Давыдова за интересное обсуждение работы. Один из авторов (З.З.А.) искренне благодарен Федеральной лезгинской национальнокультурной автономии за оказанную поддержку.

Приложение

Необходимо рассчитать интеграл

$$\Theta(\omega,\varepsilon) = \int_{0}^{\xi} x dx \operatorname{Im} G(x,\varepsilon) \operatorname{Im} G(x,\varepsilon+\omega).$$
(II1)

Для этого удобно преобразовать подынтегральное выражение так, чтобы оно содержало функции *G* только в первой степени. Из общего вида функции Грина

$$G_{\alpha}^{-1}(x,\varepsilon) = \varepsilon - \alpha x - i\Gamma \tag{\Pi2}$$

следуют свойства

$$\operatorname{Im} G_{\alpha}(x,\varepsilon) = \frac{i}{2} \left(G_{\alpha}^{*}(x,\varepsilon) - G_{\alpha}(x,\varepsilon) \right), \qquad (\Pi 3)$$

$$\operatorname{Re}G_{\alpha}(x,\varepsilon) = \frac{1}{2} \left(G_{\alpha}^{*}(x,\varepsilon) + G_{\alpha}(x,\varepsilon) \right). \tag{II4}$$

$$G_{\alpha}(x,\varepsilon)G_{\beta}(x,\varepsilon+\omega) = T\Big(-\alpha\beta G_{\alpha}(x,\varepsilon) + G_{\beta}(x,\varepsilon+\omega)\Big), \quad (\Pi 5)$$

$$G^*_{\alpha}(x,\varepsilon)G^*_{\beta}(x,\varepsilon+\omega) = T^*\Big(-lphaeta G^*_{\alpha}(x,\varepsilon)\Big)$$

$$+G^*_{\beta(x,\varepsilon+\omega)}\Big),$$
 (П6)

$$G_{\alpha}^{*}(x,\varepsilon)G_{\beta}(x,\varepsilon+\omega) = T_{1}\Big(-\alpha\beta G_{\alpha}^{*}(x,\varepsilon)\Big)$$

$$+G_{\beta(x,\varepsilon+\omega)}\Big),$$
 (II7)

$$G_{\alpha}(x,\varepsilon)G^{*}_{\beta}(x,\varepsilon+\omega) = T_{1}^{*}\Big(-lphaeta G_{\alpha}(x,\varepsilon)\Big)$$

$$+ G^*_{\beta(x,\varepsilon+\omega)} \Big),$$
 (II8)

$$T = \frac{1}{\varepsilon - i\Gamma - \alpha\beta(\varepsilon + \omega - i\Gamma)},\tag{\Pi9}$$

$$T_1 = \frac{1}{\varepsilon + i\Gamma - \alpha\beta(\varepsilon + \omega - i\Gamma)}.$$
 (II10)

$$\begin{split} \Theta(\omega,\varepsilon) &= \Gamma G \left(D\Gamma + \frac{F\varepsilon}{\Gamma^2} \right) \left(\operatorname{arctg} \frac{\varepsilon}{\Gamma} - \operatorname{arctg} \frac{\varepsilon - \alpha_1 \xi}{\Gamma} \right) \\ &+ \Gamma H \left(\frac{FA}{\Gamma^2} - D\Gamma \right) \left(\operatorname{arctg} \frac{A}{\Gamma} - \operatorname{arctg} \frac{A - \alpha_2 \xi}{\Gamma} \right) \\ &+ \frac{G(F - \Gamma D\varepsilon)}{2} \ln \frac{(\varepsilon - \alpha_1 \xi)^2 + \Gamma^2}{\varepsilon^2 + \Gamma^2} \\ &+ \frac{H(F + \Gamma DA)}{2} \ln \frac{(A - \alpha_2 \xi)^2 + \Gamma^2}{A^2 + \Gamma^2}, \quad (\Pi 11) \end{split}$$

где

$$C = (\varepsilon - \alpha_1 \alpha_2 A)^2 + 2\Gamma^2, \quad A = \varepsilon + \omega,$$
 (II12)

$$D = 2(\alpha_1 \alpha_2 \varepsilon - A), \quad F = \Gamma(C - 2\Gamma^2), \tag{\Pi13}$$

$$G = \frac{2\alpha_1 \alpha - 2\Gamma}{C^2 - 4\Gamma^4}, \quad H = \frac{2\Gamma}{C^2 - 4\Gamma^4}.$$
 (II14)

В заключение обратим внимание на то, что формула (П11) отличается от аналогичной формулы, полученной в работе [34] для примесного графена (формула A1). Мы считаем, что в [34] при получении выражения для динамической проводимости допущена опечатка. Это видно в первую очередь из того факта, что при $\omega \to 0$ из формулы работы [34] следует не совсем правильное выражение для статической проводимости. Формула (П11) такими недостатками не обладает.

Список литературы

- A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).
- [2] E.G. Mishchenko. Phys. Rev. Lett. 98, 216 801 (2007).
- [3] L.A. Falkovsky, A.A. Varlamov. Eur. Phys. J. B **56** 27 005 (2007).
- [4] Л.А. Фальковский. УФН 178, 923 (2008).
- [5] S. Das Sarma, Sh. Adam, E.H. Hwang, E. Rossi. Rev. Mod. Phys. 83, 407 (2011).
- [6] А.В. Елецкий, И.М. Искандарова, А.А. Книжник, Д.Н. Красиков. УФН 181, 233 (2011).
- [7] Л.А. Фальковский. ЖЭТФ 142, 560; 1309 (2012).
- [8] А.А. Варламов, А.В. Кавокин, И.А. Лукьянчук, С.Г. Шарапов. УФН 182, 1229 (2012).
- [9] C. Berger, Zh. Song, T. Li, X. Li, A.Y. Ogbazghi, R. Feng, Z. Dai, A.N. Marchenkov, E.H. Conrad, Ph.N. First, W.A. de Heer. J. Phys. Chem. B 108, 19 912 (2004).
- [10] W. Lua, W.C. Mitchel, C.A. Thorntona, W.E. Collinsa, G.R. Landis, S.R. Smith. J. Electrochem. Soc. 150, G177 (2003).
- [11] G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, V.M. Karpan, J. van den Brink, P.J. Kelly. Phys. Rev. Lett. 101, 026 803 (2008).
- [12] P.A. Khomyakov, G. Giovannetti, P.C. Rusu, G. Brocks, J. van den Brink, P.J. Kelly. Phys. Rev. B 79, 195 425 (2009).
- [13] P.A. Khomyakov, A.A. Starikov, G. Brocks, P.J. Kelly. Phys. Rev. B 82, 115 437 (2010).

- [14] M. Vanin, J.J. Mortensen, A.K. Kelkkanen, J.M. Garcia-Lastra, K.S. Thygesen, K.W. Jacobsen. Phys. Rev. B 81, 081 408 (2010).
- [15] C. Riedl, C. Coletti, U. Starke. J. Phys. D 43, 374009 (2010).
- [16] http://www.graphene.gatech,edu
- [17] P.W. Anderson. Phys. Rev. 124, 41 (1961).
- [18] D.M. Newns. Phys. Rev. 178, 1123 (1969).
- [19] С.Ю. Давыдов. Письма в ЖТФ 37, 10, 64 (2011); 39, 2, 7 (2013).
- [20] С.Ю. Давыдов. ФТП 45, 629; 1102 (2011).
- [21] С.Ю. Давыдов. ФТП 47, 1, 97 (2013).
- [22] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов. ФТТ 54, 1398 (2012).
- [23] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов. ФММ 113, 1504 (2012).
- [24] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов. ТМФ 172, 455 (2012).
- [25] З.З. Алисултанов, С.В. Гарнов, Р.П. Мейланов. ФТТ 54, 2237 (2012).
- [26] З.З. Алисултанов. Письма в ЖТФ 39, 4, 23 (2013).
- [27] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов, А.К. Нухов, Г.М. Мусаев, Э.И. Идаятов. Письма в ЖТФ **38**, *12*, 1 (2012).
- [28] З.З. Алисултанов. ФТП 47, 6, 805 (2013); Прикл. физика 6, 23 (2012).
- [29] Ю.В. Скрипник, В.М. Локтев. Письма в ЖЭТФ 94, 605 (2011).
- [30] D.C. Elias, R.V. Gorbachev, A.S. Mayorov, S.V. Morozov, A.A. Zhukov, P. Blake, L.A. Ponomarenko, I.V. Grigorieva, K.S. Novoselov, F. Guinea, A.K. Geim. Nature Phys. 7, 701 (2011).
- [31] З.З. Алисултанов. Письма в ЖТФ 39, 13, 32 (2013).
- [32] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov. Phys. Rev. Lett. 95, 146 801 (2005).
- [33] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, J.P. Carbotte. Phys. Rev. Lett. 96, 256 802 (2006).
- [34] N.M.R. Peres, F. Guinea, A.H. Castro Neto. Phys. Rev. B 73, 125 411 (2006).
- [35] Yu.V. Skrypnyk, V.M. Loktev. Phys. Rev. B 73, 241402 R (2006).
- [36] Yu.V. Skrypnyk, V.M. Loktev. Phys. Rev. B 75, 245 401 (2007).
- [37] V.M. Pereira, J.M.B. Lopes dos Santos, A.H. Castro Neto. Phys. Rev. B 77, 115 109 (2008).
- [38] P.A. Lee. Phys. Rev. Lett. 71, 1887 (1993).
- [39] N.H. Shon, T. Ando. J. Phys. Soc. Jpn. 67, 2421 (1998).
- [40] K. Ziegler. Phys. Rev. Lett. 97, 266 802 (2006).
- [41] M.I. Katsnelson. Eur. Phys. J. B 51, 157 (2006).
- [42] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov. Nature 438, 197 (2005).
- [43] G. Konstantatos, M. Badioli, L. Gaudreau, J. Osmond, M. Bernechea, F. Pelayo Garcia de Arquer, F. Gatti, F.H.L. Koppens. Nature Nanotechnol. 7, 363 (2012).
- [44] Z.Z. Alisultanov. Low Temp. Phys. 39, 7, 592 (2013).