

Транспортные свойства эпитаксиального графена, сформированного на поверхности полупроводника

© З.З. Алисултанов*+•, Р.П. Мейланов♦†

* Институт физики им. И.М. Амирханова Дагестанского Научного центра Российской академии наук, 367003 Махачкала, Россия

† Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, 119991 Москва, Россия

• Дагестанский государственный университет, 367000 Махачкала, Россия

♦ Институт проблем геотермии Дагестанского Научного центра Российской академии наук, 367030 Махачкала, Россия

(Получена 24 сентября 2013 г. Принята к печати 15 октября 2013 г.)

Рассмотрены транспортные свойства эпитаксиального графена, сформированного на поверхности полупроводниковой подложки. Используется подход, основанный на модельном гамильтониане Андерсона в приближении Халдейна–Андерсона. Получено аналитическое выражение для плотности состояний эпитаксиального графена. Исследовано поведение плотности состояний эпитаксиального графена при различных значениях параметров задачи. Исследована вещественная часть динамической проводимости эпитаксиального графена, рассмотрены предельные значения проводимости, а также зависимости последней от химического потенциала и температуры. Показано, что вблизи краев щели полупроводника проводимость эпитаксиального графена меняется скачкообразно. Когда взаимодействие между графеном и подложкой равно нулю, статическая проводимость эпитаксиального графена принимает универсальное значение $2e^2/\pi\hbar$. Исследована термоэдс эпитаксиального графена и показано, что вблизи краев запрещенной щели полупроводника термоэдс аномально растет, что связано по аналогии с электронным топологическим переходом в металлах с появлением нового класса квазичастиц с сильно зависящим от энергии временем жизни (новый канал рассеяния). Рассмотренные фундаментальные вопросы имеют решающее значение при исследовании оптических, магнито-оптических, термоэлектрических и термомагнитных свойств эпитаксиального графена. Полученные результаты представляют большой интерес при рассмотрении эпитаксиального графена, как перспективного материала для сверхвысокочастотной техники.

1. Введение

Недавно полученный и экспериментально исследованный двумерный аллотроп углерода — графен [1] безусловно является перспективным материалом для самых различных областей [2–4]. С каждым днем увеличивается количество публикаций, в которых графен исследуется для весьма широкого диапазона практических интересов, начиная с оптоэлектрических [2–7] и термоэлектрических [8] применений и заканчивая улучшением за счет графена добычи природного газа [9] и опреснения воды [10]. Все это связано со своеобразной геометрией графена (истинно двумерная система) и необычным дираковским спектром носителей [1], устойчивым относительно кулоновского взаимодействия [11]. Необычный электронный спектр графена есть следствие симметрии кристаллической решетки (гексагональная структура — пчелиные соты). Графен относят к полуметаллам или к бесщелевым полупроводникам, так как валентная зона графена полностью заполнена, а зона проводимости полностью пустая. 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 $2p_z$ -состоянии содержит один электрон, в то время

как в этом состоянии, согласно принципу Паули, могут находиться два электрона).

Одним из основных направлений физики графена является изучение эпитаксиального графена (ЭГ), сформированного на поверхности металлов или полупроводников [12–18]. Интерес к изучению ЭГ 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. Этот вопрос для подложки из карбида кремния был рассмотрен в работе [13]. 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

† E-mail: zaur0102@gmail.com

ся актуальной проблемой физики графена. Существует достаточное количество экспериментальных работ по исследованию электронных свойств ЭГ (см., например, работы [12,14–18], а также многочисленные работы группы профессора Уолта де Хира (W. de Heer)).

В данной работе проведено теоретическое рассмотрение транспортных свойств ЭГ, сформированного на поверхности полупроводниковой подложки. Исследование проводится в рамках модели ЭГ, ранее предложенной Давыдовым. Далее подробно описывается используемая модель.

2. Модель Давыдова для описания электронных состояний эпитаксиального графена

Большинство теоретических расчетов в этом направлении делаются численными методами в рамках формализма функционала плотности. Наряду с этим для исследования системы „графен–полупроводниковая подложка“ есть и аналитический подход. Такой подход основан на модельном гамильтониане Халдейна–Андерсона [19] и впервые предложен в работах Давыдова [20–22], 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. В работах [20–22] было показано, что эта модель приводит к вполне адекватным результатам. В работах [23–27] в рамках этой модели были исследованы электронные состояния системы „ЭГ–размерно-квантованная пленка“, а в работах [28,29] эта модель использовалась для исследования электронных состояний системы „квантовая точка–графен– SiO_2 – n^+ – Si^+ “. В работах [30–32] обсуждаются некоторые вопросы электронного и термоэлектронного транспорта, а также перенормировка скорости Ферми в ЭГ. Суть подхода подробно изложена в работах Давыдова [20–22], а также ряде работ авторов [27,30–32]. В наиболее общем виде выражение для функции Грина (ФГ) ЭГ можно записать следующим образом [27,30–32]:

$$G_q^{-1}(\omega) = \tilde{G}_0^{-1}(\omega) - t f(\mathbf{q}) - i\gamma, \quad (1)$$

где γ — энергия затухания квазичастиц за счет внутренних столкновительных процессов: рассеяния на фононах, на примесных атомах, на дефектах кристаллической решетки и т.д. (остаточное рассеяние), t — матричный элемент перехода электрона на ближайшие соседние атомы (для изолированного графена $t \approx 2.8$ эВ). Функция $f(\mathbf{q})$ определена следующим образом:

$$f(\mathbf{q}) = v_b \times \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}q_x a) + 4 \cos(\sqrt{3}q_x a/2) \cos(3q_y a/2)},$$

a — расстояние между ближайшими атомами в графене, \mathbf{q} — двумерный волновой вектор электро-

нов графена, v_b — зонный индекс: $v_b = +1$ соответствует зоне проводимости, а $v_b = -1$ — валентной зоне. Случай наличия в решетке ЭГ неупорядоченности конкретного типа является темой отдельной работы. А здесь нас не будет интересовать явный вид величины γ . Вблизи точки Дирака с координатами $\mathbf{Q} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$ для энергетического спектра получаем: $t f = (\mathbf{k}) = v_b 3ta |\mathbf{k}|/2\hbar = v_b v_F \hbar |\mathbf{k}|$, где $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}$, v_F — скорость Ферми для электронов графена (для изолированного графена $v_F \approx 1 \cdot 10^8$ см/с). В данной 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 ЭГ. Вообще говоря, указанные допущения требуют более строгого обоснования, что представляет самостоятельный интерес и выходит за рамки данной статьи. $\tilde{G}_0(\omega)$ есть ФГ изолированного адатома углерода

$$\tilde{G}_0(\omega) = (\omega - \tilde{\epsilon}_a - \Lambda(\omega) - i\Gamma_c(\omega))^{-1}, \quad (2)$$

где

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

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

есть полуширина и функция сдвига квазиуровня соответственно, $\rho(\omega)$ — плотность состояний (ПС) подложки, знак „ P “ означает интегрирование в смысле главного значения, V — потенциал гибридизации, $\tilde{\epsilon}_a$ — квазиуровень адатома углерода, перенормированный за счет кристаллического потенциала. Величина $\tilde{\epsilon}_a$ есть аналог точки Дирака в ЭГ. При $V \rightarrow 0$ $\tilde{\epsilon}_a \rightarrow \epsilon_D$, где ϵ_D — точка Дирака изолированного графена. При исследовании ЭГ мы не можем, вообще говоря, положить $\epsilon_D = 0$, как в случае изолированного графена. Это связано с тем, что мы имеем дело с двумя системами (графен и подложка), которые характеризуются разными характерными энергиями (точка Дирака, края зоны разрешенных энергий в полупроводнике).

3. Плотность состояний эпитаксиального графена. Аппроксимация Халдейна–Андерсона для плотности состояний полупроводниковой подложки

Рассмотрим вопрос о ПС ЭГ, сформированного на поверхности полупроводника. Используя выраже-

ния (1)–(4), получим

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

где $\bar{\omega} = \Lambda(\omega)$. Коэффициент $1/2$ перед суммированием по k связан с увеличением в 2 раза количества полюсов ФГ, что есть следствие суммирования по зонному индексу. Отметим, что здесь и дальше под ПС подразумевается ПС, приходящаяся на один атом графена. В связи с этим $S = S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$. Величину ξ определим из естественного условия, что один атом недопированного графена содержит один электрон в $2p_z$ -состоянии, т.е. $\int_{-\xi}^{\xi} \rho_0(\omega) d\omega = 1$, где $\rho_0(\omega) = S_1 |\omega| / \pi v_F^2 \hbar^2$ — ПС изолированного графена, ε_F — энергия Ферми, равная нулю для недопированного графена. Из этого условия получаем $\xi = \sqrt{\pi\sqrt{3}t}$. С учетом этого обстоятельства, получим

$$\begin{aligned} \rho_{\text{epitax.}}(\omega) &= \frac{\Gamma_c}{2\pi\xi^2} \ln \frac{(\xi^2 + \Gamma_c^2 - \bar{\omega}^2)^2 + 4\Gamma_c^2 \bar{\omega}^2}{(\Gamma_c^2 + \bar{\omega}^2)^2} \\ &\quad + \frac{\bar{\omega}}{\pi\xi^2} \left(\text{arctg} \frac{\xi^2 + \Gamma_c^2 - \bar{\omega}^2}{2\Gamma_c \bar{\omega}} - \text{arctg} \frac{\Gamma_c^2 - \bar{\omega}^2}{2\Gamma_c \bar{\omega}} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Плотность состояний подложки в используемой модели аппроксимируется следующим образом (модель Халдейна–Андерсона) [19]

$$\rho(\omega) = \rho_0 \Theta(\varepsilon_g - \Delta - \omega) + \rho_0 \Theta(\omega - \varepsilon_g - \Delta), \quad (7)$$

где Δ — полуширина запрещенной щели, ε_g — энергия, соответствующая середине запрещенной щели. В настоящей работе мы будем отсчитывать энергию от точки Дирака ЭГ. Поэтому далее будем пользоваться переменной $\omega \rightarrow \omega - \tilde{\varepsilon}_a$. Кроме того, учтем несимметричность зон полупроводника. Другими словами, примем во внимание тот факт, что эффективные массы электронов и дырок в полупроводнике различны. Тогда ПС (7) окончательно запишется в виде

$$\rho(\omega) = \rho_{0v} \Theta(\Delta\varepsilon - \Delta - \omega) + \rho_{0c} \Theta(\omega - \Delta\varepsilon - \Delta), \quad (8)$$

где $\Delta\varepsilon = \varepsilon_g - \tilde{\varepsilon}_a$. Для политипа 6H-SiC можно сделать следующие оценки. Полагая средство к электрону $\chi_{6\text{H-SiC}} = 3.45$ эВ [33] и $2\Delta = 3$ эВ, получим, что центр запрещенной зоны в подложке лежит при энергии $\varepsilon_g = \chi + \Delta = -4.95$ эВ относительно вакуума. Пусть точка Дирака ЭГ, находящегося на грани 6H-SiC(0001), лежит на 0.4 эВ ниже уровня Ферми системы [34]. Так как при этом работа выхода равна $A = 3.75$ эВ [34],

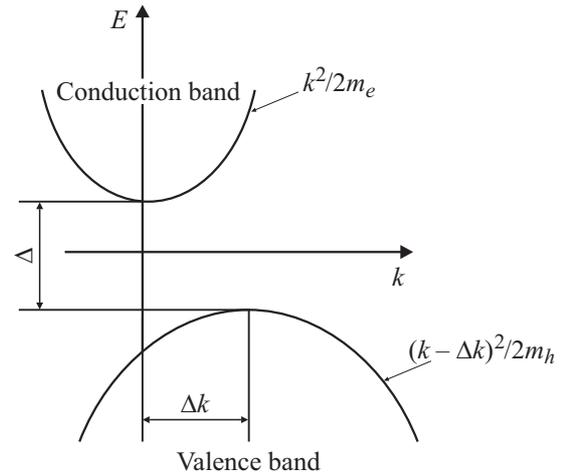


Рис. 1. Качественная картина электронного спектра непрямого полупроводника в случае параболических зон.

получаем, что $\Delta\varepsilon = -0.8$ эВ, т.е. точка Дирака находится на 0.8 эВ выше середины запрещенной зоны. Для грани 6H-SiC(000 $\bar{1}$) уровень Ферми совпадает с точкой Дирака, а соответствующая работа выхода есть 5.33 эВ [34]. Следовательно, в этом случае $\Delta\varepsilon = 0.38$ эВ, т.е. точка Дирака лежит ниже середины запрещенной зоны на -0.38 эВ. Для политипа 4H-SiC имеем следующее. Средство к электрону равно $\chi_{4\text{H-SiC}} = 3.7$ эВ [35], а ширина запрещенной щели $2\Delta = 3.2$ эВ. Тогда $\varepsilon_g = \chi + \Delta = -5.34$ эВ. Полагая, что $A = 4.5$ эВ [35], получим $\Delta\varepsilon = -0.3$ эВ для 4H-SiC(0001) и $\Delta\varepsilon = -0.8$ эВ для 4H-SiC(000 $\bar{1}$). В настоящей работе нас будут интересовать качественные эффекты, в связи с чем нас не будет интересовать количественное значение $\Delta\varepsilon$. Кроме указанных особенностей подложки, будем также учитывать свойство полупроводников быть прямозонными или непрямозонными. Для непрямозонных полупроводников характерно, как известно, несовпадение экстремальных точек зоны проводимости и валентной зоны спектра (т.е. волновые числа, соответствующие дну зоны проводимости и потолку валентной зоны, смещены друг относительно друга на некоторое значение) (рис. 1). В прямозонных полупроводниках эти точки совпадают. Величина Δk , равная расстоянию между экстремальными точками (рис. 1), является еще одним параметром, характеризующим подложку. Легко показать, что учет непрямозонности приводит к следующему выражению для ПС:

$$\begin{aligned} \rho(\omega) &= \rho_{0v} \left(1 + \sqrt{\frac{\Delta\Omega}{\omega - \Delta\varepsilon}} \right) \Theta(\Delta\varepsilon - \Delta - \omega) \\ &\quad + \rho_{0c} \Theta(\omega - \Delta\varepsilon - \Delta), \end{aligned} \quad (9)$$

где $\Delta\Omega = \hbar^2 \Delta k^2 / 2m$. Назовем (9) обобщенной аппроксимацией Халдейна–Андерсона для ПС полупроводниковой подложки.

ПС (8), вообще говоря, соответствует двумерному электронному газу со щелью в квадратичном энерге-

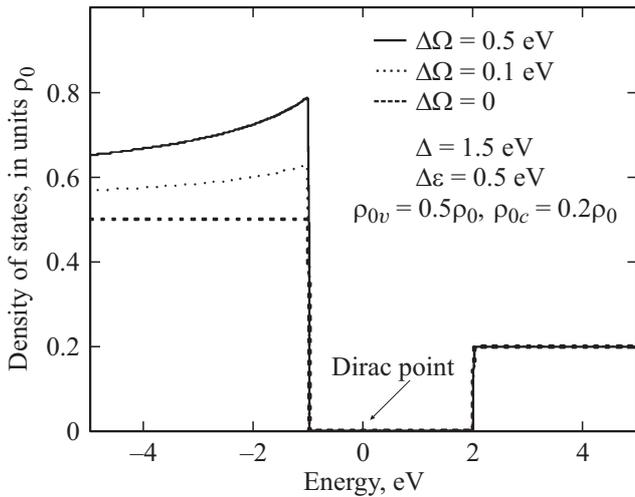


Рис. 2. Плотность состояний полупроводниковой подложки при различных значениях параметров (обобщенная аппроксимация Халдейна–Андерсона).

тическом спектре (используя это соображение, легко получить выражение (9)). В этом случае, как известно, имеем

$$\rho_{0c} = \frac{m_e S_1}{\pi \hbar^2}, \quad \rho_{0v} = \frac{m_h S_1}{\pi \hbar^2},$$

где m_e (m_h) — эффективная масса электронов (дырок) в подложке, S_1 — площадь поверхности подложки, соответствующая одному атому графена ($S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$). Эффективные массы электронов и дырок в полупроводнике составляют некоторые доли от массы свободного электрона m_0 . Таким образом, в нашем распоряжении имеются следующие реальные параметры подложки: ширина запрещенной щели, эффективные массы электронов и дырок, расположение середины запрещенной щели, а также параметры, характеризующие прямозонность или непрямозонность полупроводника. На рис. 2. показана плотность состояний полупроводника при различных значениях параметров электронного спектра. Далее в данной статье мы будем рассматривать только прямозонные полупроводники.

Кроме указанных параметров, от особенностей подложки зависит также и потенциал гибридизации. Эта величина определяется относительной ориентацией атомных орбиталей адатома и поверхностных атомов подложки, а также пространственной структурой последних.

Используя все упомянутые параметры, мы вполне можем делать оценочные расчеты для различных конкретных подложек по крайней мере на качественном уровне.

Для атома углерода, адсорбированного на такой подложке, имеем

$$\Gamma_c = \pi |V|^2 (\rho_{0v} \Theta(\Delta\epsilon - \Delta - \omega) + \rho_{0c} \Theta(\omega - \Delta\epsilon - \Delta)), \quad (10)$$

$$\Lambda(\omega) = -|V|^2 \left(\rho_{0v} \ln \frac{|\omega - \Delta\epsilon + \Delta|}{|\omega - \Delta\epsilon + W|} + \rho_{0c} \ln \frac{|\omega - \Delta\epsilon + W|}{|\omega - \Delta\epsilon - \Delta|} \right), \quad (11)$$

где W — полуширина зоны разрешенных энергий полупроводника, отсчитанная от середины запрещенной щели. Эту величину мы найдем из условия нормировки: $W = N/(\rho_{0v} + \rho_{0c}) + \Delta$, где N — число электронов (приходящееся на участок, площадью S_1), участвующих в формировании зоны полупроводника. Величина N есть еще один параметр, характеризующий подложку. Для качественного анализа нам достаточно положить $N = 1$. В случае абсолютно симметричных ($\rho_{0v} = \rho_{0c}$) и бесконечно широких ($W \rightarrow \infty$) зон имеем простое выражение: $\Lambda(\omega) = -|V|^2 \rho_{0v} \ln \frac{|\omega - \Delta\epsilon + \Delta|}{|\omega - \Delta\epsilon - \Delta|}$ хорошо известное из теории адсорбции атомов на полупроводнике.

Перейдем теперь к исследованию ПС ЭГ. На рис. 3 представлена ПС ЭГ (8), сформированного на поверхности полупроводника. При построении кривой мы положили $\Delta = 1.5$ эВ, $\rho_{0c} = 0.2\rho_0$, $\rho_{0v} = 0.5\rho_0$, где $\rho_0 = m_0 S_1 / \pi \hbar^2 \approx 0.13$ эВ⁻¹.

Из рис. 3 можно сделать несколько важных выводов. Во-первых, вблизи точки Дирака (внутри запрещенной щели) зависимость ПС от энергии остается линейной, что играет решающую роль при формировании уникальных свойств графена. Однако область энергии, где справедлив такой закон, несколько сужается. Во-вторых, угол наклона кривой ПС относительно оси абсцисс увеличивается. Если представить линейный участок в виде $S|\omega|/\pi\tilde{v}_F^2\hbar^2$, где \tilde{v}_F — перенормированная скорость Ферми, то становится понятным, что изменение наклона ПС возможно только за счет изменения скорости Ферми. В данном случае, когда угол наклона увеличивается, можно сделать вывод, что скорость Ферми уменьшается. Действительно, микроскопическое исследование этого

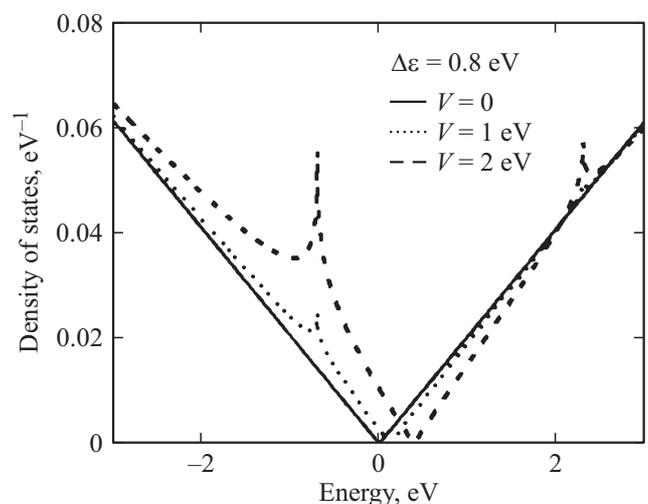


Рис. 3. Плотность состояний эпитаксиального графена, сформированного на поверхности полупроводника при различных значениях потенциала гибридизации.

вопроса подтверждает последний вывод. И наконец, вблизи краев щели возникают особенности, напоминающие хорошо известные особенности Ван-Хова. Не исключено, что вблизи этих особенностей в ЭГ будет наблюдаться электронный топологический переход, как в металлах. Эти скачки имеют решающее значение для некоторых важных явлений, которые будут обсуждены далее (про электронный топологический переход еще будет упомянуто в данной статье в связи с одним эффектом, очень близким по своей природе к такому переходу). На рис. 4 показана ПС ЭГ при различных значениях параметров задачи. Из рис. 4, *a* видно, что положение точки Дирака несильно зависит от значения $\Delta\varepsilon$. Из рис. 4, *b* видно, что положение точки Дирака и ПС вблизи краев запрещенной щели зависят от симметрии между валентной зоной и зоной проводимости.

Коротко обсудим вопрос об определении потенциала гибридизации. На наш взгляд, для этого лучше всего использовать соображения, лежащие в основе прибли-

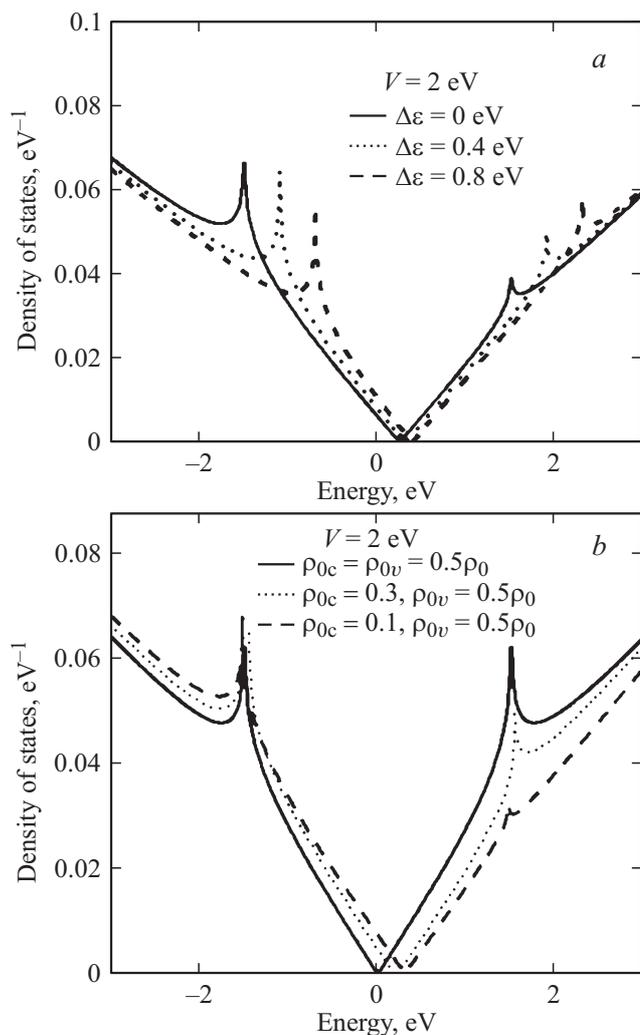


Рис. 4. Плотность состояний эпитаксиального графена, сформированного на поверхности полупроводника при различных значениях параметров подложки.

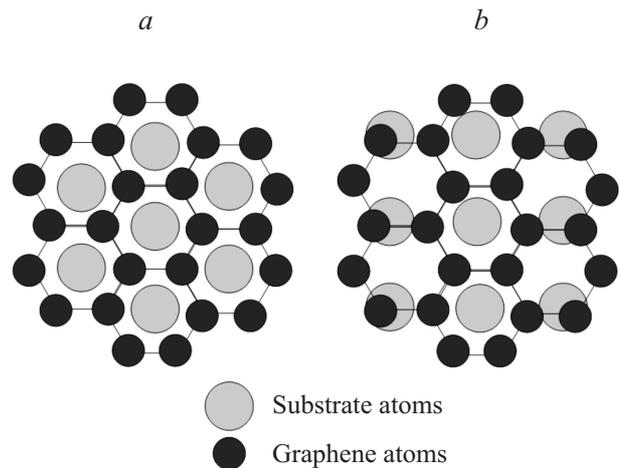


Рис. 5. Графен, сформированный на подложках с различной ориентацией поверхностных атомов: тригональная решетка (*a*), квадратная решетка (*b*).

жения поверхностной молекулы, т.е. учесть взаимодействие адатома с ближайшими поверхностными атомами подложки. При этом, естественно, для различных атомов ЭГ количество ближайших атомов подложки и их пространственная ориентация будут разными, так как кристаллические решетки графена и подложки разные. Сказанное поясняется на рис. 5 с помощью элементарных случаев. В целом, имеется комплекс атомов ЭГ, которые окружены различным количеством ближайших атомов подложки. Остальные же атомы ЭГ характеризуются количеством ближайших атомов подложки из этого комплекса. Потенциал гибридизации можно определить как среднее в этом комплексе. Чтобы определить локальные потенциалы гибридизации между отдельными атомами графена и подложки можно использовать метод связывающих орбиталей Харрисона [36].

4. Транспортные свойства

Интерес к графену вызван в основном из-за его уникальных транспортных свойств. Так, в работе [37] было продемонстрировано необычное проявление целочисленного квантового эффекта Холла в графене, а в [38] исследовался необычный СВЧ отклик электронов графена. В работах [39–42] 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 [3,4,43–45]. 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,

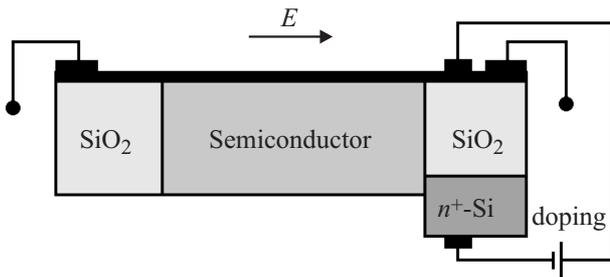


Рис. 6. Схематическое изображение эпитаксиального графена, к которому приложено продольное электрическое поле, вызывающее ток. Кроме того, к графену приложено перпендикулярное поле, с помощью которого можно допировать графен электронами или дырками (эффект поля).

преодолению таких барьеров с единичной вероятностью (клеиновское туннелирование [45]). Здесь мы рассмотрим электронный транспорт в эпитаксиальном графене, сформированном на металле.

Пусть вдоль оси x приложено электрическое поле (см. рис. 6). Тогда вдоль этой оси потечет электрический ток. Для расчета действительной части проводимости воспользуемся формулой Кубо–Гринвуда [39]

$$\sigma(\omega, T) = -\frac{v_F^2 \hbar^2 e^2}{NS\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar} [f(\varepsilon + \omega) - f(\varepsilon)] \times \sum_{k, v_{b1}, v_{b2}=\pm 1} \text{Im} G(\mathbf{k}, \varepsilon) G(\mathbf{k}, \varepsilon + \omega), \quad (12)$$

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 эпитаксиального графена. В выражении (12) учтены коэффициенты, появляющиеся при суммировании по спиновому, доливному и зонному индексам. Проводя интегрирование по \mathbf{k} в (12), окончательно получим

$$\sigma(\omega, T) = -\frac{e^2}{2\pi^2 \hbar \omega} \times \sum_{v_{b1}, v_{b2}=\pm 1} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [f(\varepsilon + \omega) - f(\varepsilon)] K(\omega, \varepsilon), \quad (13)$$

где $K(\omega, \varepsilon) = \Gamma_c^2(\omega) \Theta(\omega, \varepsilon)$. Получение выражения для $\Theta(\omega, \varepsilon)$ обсуждается в *Приложении*. Здесь мы рассмотрим только статический предел ($\omega \rightarrow 0$).

4.1. Статическая проводимость эпитаксиального графена с вырожденными носителями

В случае $\omega \rightarrow 0$ имеем

$$f(\varepsilon + \omega) - f(\varepsilon) = \omega \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}. \quad (14)$$

С учетом этого, выражение (13) можно переписать в виде

$$\sigma(\omega = 0, T) = -\frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} K(\omega = 0, \varepsilon). \quad (15)$$

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

$$\sigma(\omega = 0, T) = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} K(\omega = 0, \mu). \quad (16)$$

4.1.1. Эпитаксиальный графен с $\mu=0$. Такой случай может быть реализован, если ЭГ дополнительно легировать (см. рис. 6) 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 (12) приводит к следующему:

$$\sigma_{G-S}^0 = \frac{e^2}{\pi \hbar} \left[\left(\frac{(\Lambda^2(0) - \Gamma^2)F(\Gamma) - 4\Lambda^2(0)\Gamma^2}{F^2(\Gamma) + 4\Lambda^2(0)\Gamma^2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda(0)}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{\Lambda(0)} \right) \left(\text{arctg} \frac{F(\Gamma)}{2\Lambda(0)\Gamma} + \text{arctg} \frac{\Lambda^2(0) - \Gamma^2}{2\Lambda(0)\Gamma} \right) \right], \quad (17)$$

где $F(\Gamma) = \xi^2 - \Lambda^2(0) + \Gamma^2$, $\Gamma = \gamma + \Gamma_c(0)$. Прежде всего, из последнего выражения следует, что при $\gamma, V \rightarrow 0$, проводимость принимает универсальное значение $2e^2/\pi\hbar$, что находится в согласии с результатами фундаментальных теоретических работ. Интересно отметить, что выражение (17) содержит величину $\Lambda(0)$ только благодаря несимметрии зон полупроводника. Действительно, в случае абсолютно симметричных зон, когда $\rho_{0v} = \rho_{0c}$, имеем $\Lambda(0) = 0$. В этом случае для минимальной проводимости ЭГ получаем простое выражение

$$\sigma_{G-S}^0(\omega = 0, T = 0) = \frac{2e^2}{\pi \hbar} \left[1 - \frac{\Gamma^2}{\xi^2 + \Gamma^2} \right]. \quad (18)$$

Из (18), в частности, видно, что, когда точка Дирака входит в область запрещенной щели полупроводника, последний вообще не влияет на минимальную проводимость ЭГ, так как в этом случае $\Gamma_c(0) = 0$. Следует упомянуть, что непрямозонность полупроводника также будет влиять на минимальную проводимость ЭГ.

4.1.2. Эпитаксиальный графен с $\mu \neq 0$. Если приложить поле затвора U , то можно допировать графен, меняя тем самым величину μ . Можно показать, что изменение энергии Ферми за счет эффекта поля связано с приложенным напряжением соотношением $\Delta E_F = \pm v_F \hbar \sqrt{\pi \kappa} |U| / ed$, где d — толщина затвора, e — заряд электрона, κ — диэлектрическая проницаемость. Знак „плюс“ соответствует допированию электронами, а „минус“ — легированию дырками. Обычно используют диэлектрическую подложку из SiO_2 , как и на рис. 6. Легирование ЭГ, изображенного на рис. 6, 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. 6). Принято, что $\kappa \approx 4.5$. Кроме того, положим $d \approx 300$ нм.

В случае допированного ЭГ формула (12) дает

$$\sigma_{G-S} = \frac{e^2}{\pi\hbar} \left[\left(\frac{(\tilde{\mu}^2 - \Gamma^2)F(\Gamma) - 4\tilde{\mu}^2\Gamma^2}{F^2(\Gamma) + 4\tilde{\mu}^2\Gamma^2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\mu}}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{\tilde{\mu}} \right) \left(\operatorname{arctg} \frac{F(\Gamma)}{2\tilde{\mu}\Gamma} + \operatorname{arctg} \frac{\tilde{\mu}^2 - \Gamma^2}{2\tilde{\mu}\Gamma} \right) \right], \quad (19)$$

где $F(\Gamma) = \xi^2 - \tilde{\mu}^2 + \Gamma^2$, $\tilde{\mu}^2 = \mu - \Lambda(\mu)$, $\Gamma = \gamma + \Gamma_c(\mu)$. Нетрудно видеть, что при $\mu \rightarrow 0$, $\sigma_{G-M} \rightarrow \sigma_{G-M}^0$. Будем полагать, что $\gamma = 60$ К. На рис. 7 приведены зависимости статической проводимости ЭГ от химического потенциала при различных значениях параметров подложки. Из рис. 7 можно сделать ряд важных выводов. Во-первых, проводимость ЭГ достаточно существенно зависит от всех параметров подложки, рассматриваемых в настоящей работе. Наличие подложки в значительной мере влияет на проводимость графена. Во-вторых, из рис. 7 видно, что наиболее сильно проводимость меняется вне области запрещенной щели, а внутри щели проводимость почти такая же, как у изолированного графена. Это связано с тем, что внутри щели константа взаимодействия графена с подложкой равна нулю. Кроме того, в несколько раз возрастает проводимость вблизи точки Дирака. Это связано с тем, что хотя внутри запрещенной щели $\Gamma_c = 0$, но $\Lambda \neq 0$. Этот член и приводит к указанному эффекту. И наконец, самый важный эффект состоит в том, что вблизи краев запрещенной щели полупроводника появляются резкие изломы проводимости. 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 ЭГ будет различной. Это и объясняет наличие крутых изломов (кинков) в проводимости. Здесь следует вспомнить об особенностях Ван Хова в плотности состояний ЭГ, про которые было упомянуто в пункте 3 настоящей работы. Проводя аналогию с работами [8,47], можно сказать, что вблизи края щели появляется новый канал рассеяния квазичастиц, причем время релаксации сильно зависит от энергии.

4.2. Статическая проводимость эпитаксиального графена с невырожденными носителями

Рассмотрим теперь случай невырожденных носителей. Для этого случая имеем

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{T} \frac{e^{(\varepsilon-\mu)/T}}{(e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1)^2}. \quad (20)$$

Связь между химическим потенциалом и концентрацией носителей устанавливается с помощью соотношения

$$n = \frac{2}{\pi(\hbar v_F)^2} \int_0^\infty \varepsilon [f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)] d\varepsilon. \quad (21)$$

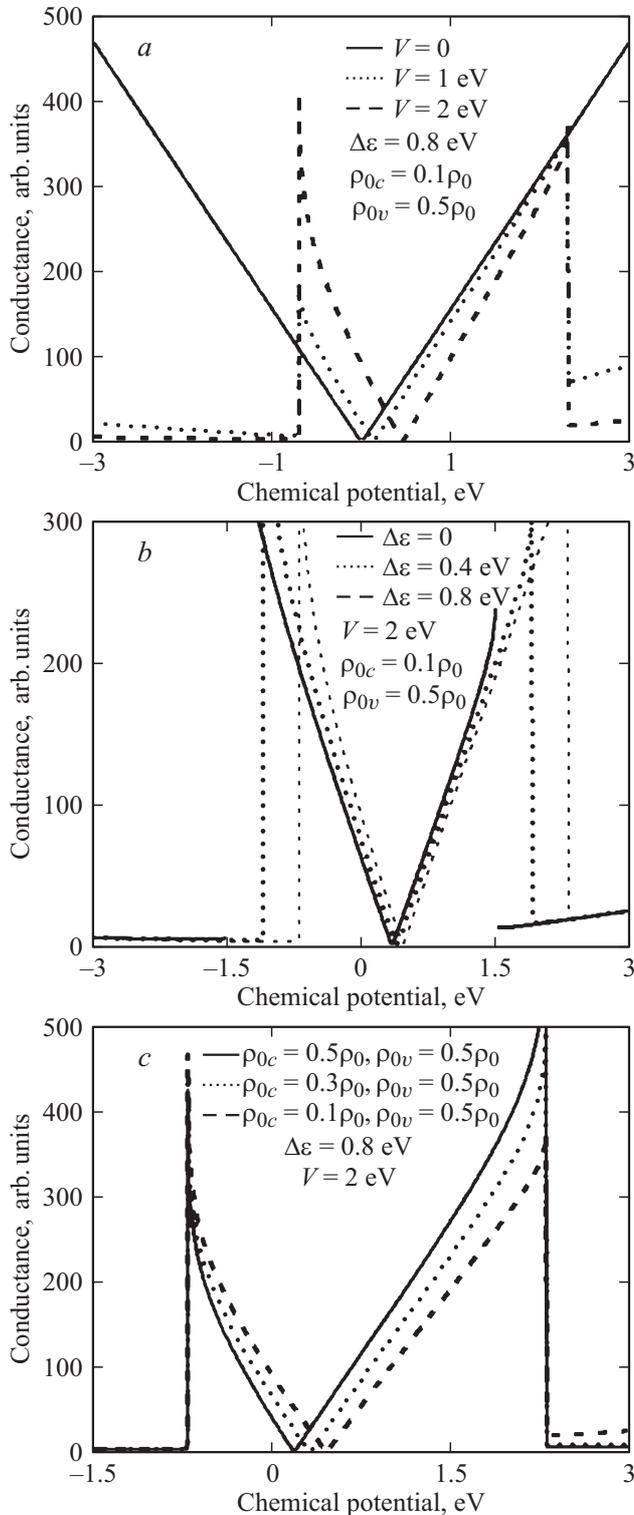


Рис. 7. Статическая проводимость ЭГ при различных значениях параметров задачи: при различных значениях потенциала гибридизации (а), при различных значениях величины $\Delta\varepsilon$ (b), при различных значениях эффективных масс носителей (с).

Если n_0 — концентрация носителей, перешедших между графеном и подложкой, то в общем случае наличия перпендикулярного поля формула (21) принимает вид

$$n_0 + \frac{\kappa U}{ed} = \frac{2}{\pi(\hbar v_F)^2} \int_0^{\infty} \varepsilon [f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)] d\varepsilon. \quad (22)$$

Величину переходящего заряда n_0 можно найти с помощью формулы

$$n_0 = N_0 \Delta q = N_0 \int_0^{\Delta\mu} \rho_{\text{эпитакс.}}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (23)$$

где $N_0 = 4/3\sqrt{3}a^2$ — концентрация атомов графена, $\Delta\mu$ — смещение химического потенциала за счет зарядового обмена с подложкой (эта величина определяется из эксперимента).

При $T \approx \mu$ из (22) получаем

$$\mu \approx \frac{\pi(\hbar v_F)^2 n}{2.8T}, \quad (24)$$

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

4.2.1. Эпитаксиальный графен с $\mu=0$. В этом случае, как легко догадаться, $n_0 = \kappa U / ed$. Для статической проводимости получим

$$\sigma(\omega = 0, T) = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar T} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{e^{\varepsilon/T}}{(e^{\varepsilon/T} + 1)^2} K(\varepsilon), \quad (25)$$

$$K(\varepsilon) = \left(\frac{(\tilde{\varepsilon}^2 - \Gamma^2)(\xi^2 + \tilde{\varepsilon}^2 + \Gamma^2)^2 - 4\tilde{\varepsilon}^2 \Gamma^2}{(\xi^2 + \tilde{\varepsilon}^2 + \Gamma^2)^2 + 4\tilde{\varepsilon}^2 \Gamma^2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{\tilde{\varepsilon}} \right) \left(\text{arctg} \frac{\xi^2 + \tilde{\varepsilon}^2 + \Gamma^2}{2\tilde{\varepsilon}\Gamma} + \text{arctg} \frac{\tilde{\varepsilon}^2 - \Gamma^2}{2\tilde{\varepsilon}\Gamma} \right), \quad (26)$$

где $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon - \Lambda(\varepsilon)$. На рис. 8 представлена зависимость минимальной статической проводимости от температуры при различных значениях параметров. Из рис. 8, *a* видно, что увеличение энергии взаимодействия не приводит к существенным изменениям температурной зависимости минимальной проводимости. Это связано, очевидно, с тем, что химический потенциал в данном случае находится внутри запрещенной щели полупроводника, а следовательно, величина $\Gamma = \gamma$, как для изолированного графена. С другой стороны, при $\mu = 0$ и $\Delta\varepsilon = 0$ величина Λ мало отличается от нуля. Все это приводит к тому, что температурная зависимость минимальной проводимости ЭГ мало отличается от таковой зависимости у изолированного графена. Из рис. 8, *b* видно, что температурная зависимость минимальной проводимости сильно зависит от параметра $\Delta\varepsilon$. Последнее, по-видимому, связано с тем, что при отличном от нуля параметре $\Delta\varepsilon$ величина Λ вносит заметный вклад. Легко заметить, что для

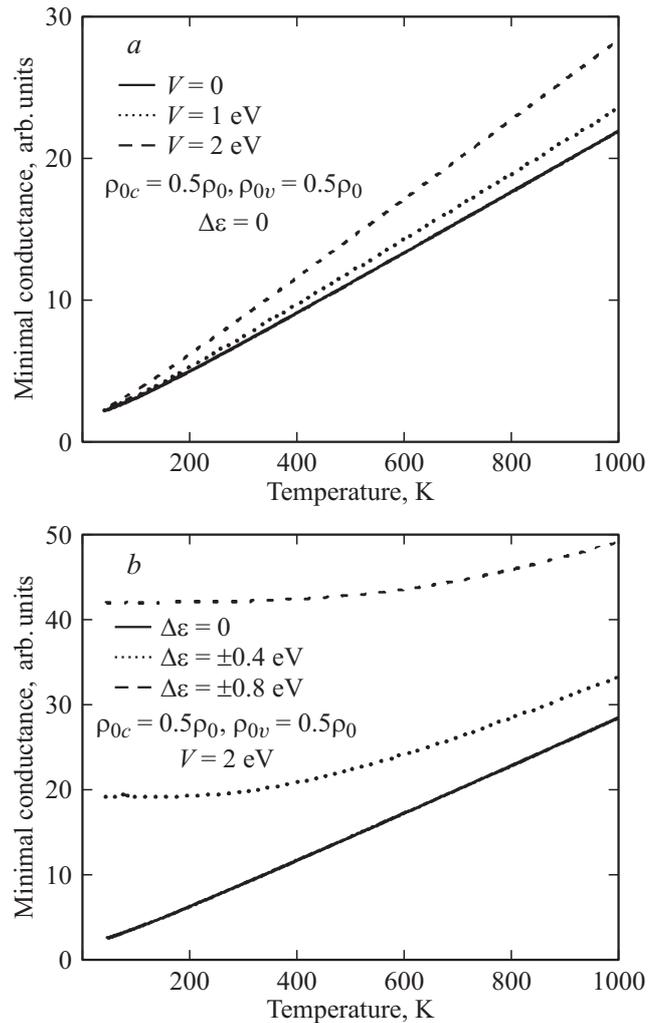


Рис. 8. Температурная зависимость минимальной проводимости ЭГ при различных значениях потенциала гибридизации (*a*) и величины $\Delta\varepsilon$ (*b*).

рассмотренных на рис. 8, *b* значений $\Delta\varepsilon$ величина Γ еще равна γ ($|\Delta\varepsilon| = 0.4, 0.8 \text{ эВ} < \Delta$).

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

$$\sigma(\omega = 0, T) = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar T} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{e^{(\varepsilon - \mu)/T}}{(e^{(\varepsilon - \mu)/T} + 1)^2} K(\varepsilon). \quad (27)$$

На рис. 9 представлена зависимость проводимости от температуры при различных значениях химического потенциала. Из рис. 9 видно, что увеличение химического потенциала сначала приводит к возрастанию проводимости ($\mu = 0.2, 0.5 \text{ эВ}$), а при больших значениях химического потенциала ($\mu = 2 \text{ эВ}$) проводимость резко падает. Как легко догадаться, это связано с тем, что в первом случае химический потенциал все еще не превосходит запрещенную щель, а следовательно, ЭГ в основном ведет себя как изолированный. При дальнейшем увеличении химического потенциала мы переходим через край

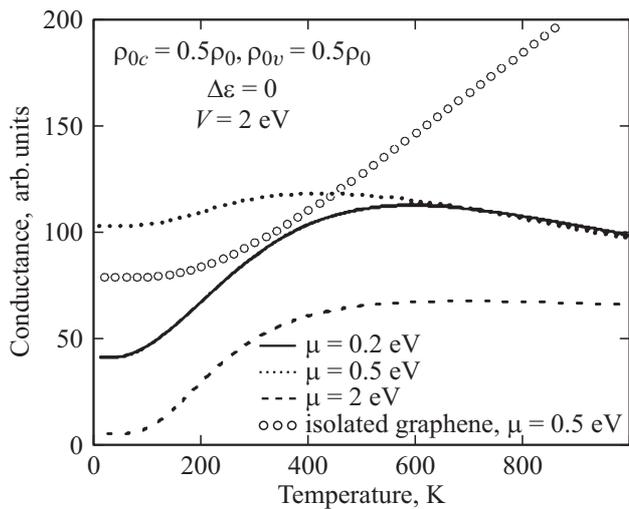


Рис. 9. Температурная зависимость проводимости ЭГ при различных значениях химического потенциала.

запрещенной щели и взаимодействие с подложкой становится существенным. Интересно отметить, что температурная зависимость проводимости ЭГ достаточно резко отличается от таковой у изолированного графена (см. рис. 9). В частности, с увеличением температуры проводимость изолированного графена возрастает, а для ЭГ наблюдается насыщение. По-видимому, это связано с тем, что электроны ЭГ более „инертны“, чем электроны изолированного графена.

4.3. Термоэлектрический эффект в эпитаксиальном графене

Изучение термоэлектронных свойств дает дополнительную информацию об электронной структуре конденсированной среды. В теории термоэлектрического эффекта основным выражением является формула Мотта [48]. Эта формула связывает дифференциальную термоэдс с логарифмической производной продольной проводимости

$$S_{xx} = -\frac{\pi^2}{3e} k_B^2 T \frac{d}{d\mu} [\ln \sigma(\mu, T = 0)], \quad (28)$$

где T — температура, $\sigma(\mu, T = 0)$ — проводимость при нулевой температуре, μ — химический потенциал, k_B — постоянная Больцмана.

Изолированный графен обладает уникальными термоэлектрическими свойствами [8]. Действительно, термоэдс графена при комнатной температуре составляет около 100 мВ/К (для сравнения термоэдс металлов порядка 0.01 мВ/К). Такие большие значения термоэдс наблюдаются в щелевом графене, когда химический потенциал приближается к краю запрещенной щели.

На рис. 10 приведена термоэдс ЭГ, сформированного на полупроводнике. Вследствие скачкообразного поведения проводимости вблизи краев запрещенной щели, в

этих точках имеются пики термоэдс. Термоэдс возрастает почти на порядок (рис. 10, b). Кроме того, несколько возрастает термоэдс вблизи точки Дирака. Это связано с тем, что хотя внутри запрещенной щели $\Gamma_c = 0$, но

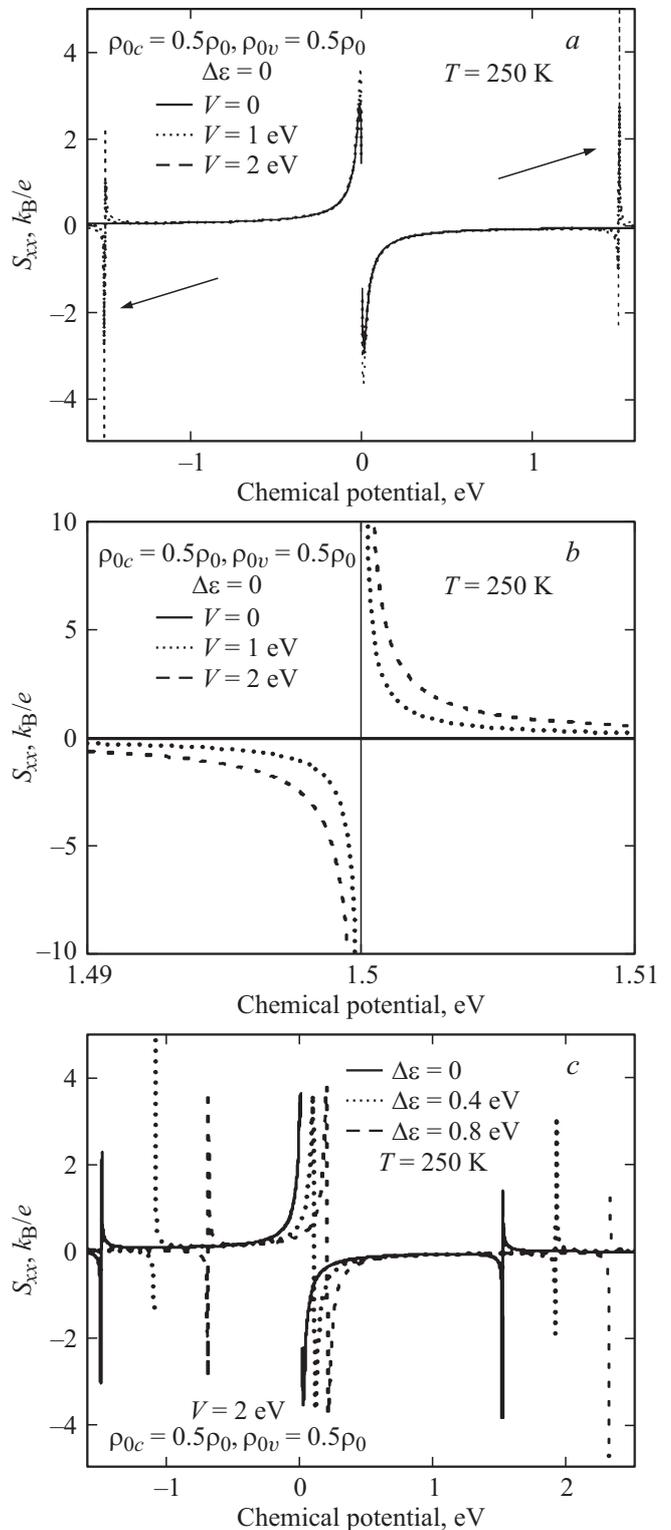


Рис. 10. Зависимость термоэдс ЭГ от химического потенциала при различных значениях потенциала гибридизации (a, b) и величины $\Delta\epsilon$ (c).

$\Lambda \neq 0$. Этот член и приводит к указанному эффекту. Возвращаясь к обсуждению скачкообразного изменения проводимости, хотелось бы обратить внимание на следующий момент. В нашем случае величина Γ_c , очевидно, определяет время релаксации квазичастиц графена ($\tau \propto \Gamma_c^{-1}$). Следовательно, вблизи края запрещенной щели время релаксации становится сильно зависящим от энергии. Проводя аналогию с работами [8,47], можно сказать, что вблизи края щели появляется новый канал рассеяния квазичастиц, причем время релаксации сильно зависит от энергии. Как и в работах [8,47], здесь следует упомянуть об очевидной аналогии между транспортом в ЭГ, сформированном на полупроводнике, и транспортом в металле вблизи электронного топологического перехода. Действительно, когда химический потенциал приближается к критическому значению, при котором изменяется связность ферми-поверхности, время релаксации квазичастиц становится сильно зависящим от энергии, что приводит к появлению изломов проводимости и пиков термоэдс [49,50].

Расходимость термоэдс на краях запрещенной щели связана с выбранной аппроксимацией плотности состояний в виде ступенчатой функции. Ступенчатая аппроксимация плотности состояний соответствует, очевидно, случаю отсутствия в подложке затухания квазичастиц. Плотность состояний субстрата с учетом затухания квазичастиц мы определим в приближении эффективной массы с помощью спектральной функции

$$A(\omega, p) = \frac{\Gamma}{(\omega - p^2/2m)^2 + \Gamma^2}, \quad (29)$$

где Γ — энергия затухания квазичастиц, p — импульс квазичастиц подложки. Чтобы получить плотность состояний для зоны проводимости полупроводника, необходимо проинтегрировать выражение (8) по двумерному фазовому пространству. При этом необходимо поступить следующим образом: с помощью формулы $\varepsilon = p^2/2m$ перейти от импульсного представления к энергетическому, а затем проинтегрировать от Δ до ∞ . Для валентной зоны необходимо перейти к переменной $\omega \rightarrow -\omega$. Таким образом, плотность состояний определится следующим образом

$$\rho(\omega) = \pi^{-1} \rho_0 \int_{\Delta}^{\infty} [A(\omega, \varepsilon) + A(-\omega, \varepsilon)] d\varepsilon. \quad (30)$$

Проводя интегрирование, окончательно имеем

$$\rho(\omega) = \pi^{-1} \rho_0 \left[\pi + \arctg \frac{\omega - \Delta}{\Gamma} - \arctg \frac{\omega + \Delta}{\Gamma} \right]. \quad (31)$$

Нетрудно показать, что использование выражения (31) снимает расходимость термоэдс.

5. Заключение и обсуждение

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

1. В модель Халдейна–Андерсона для аппроксимации плотности состояний включены такие параметры, как эффективные массы электронов и дырок, а также параметр, определяющий непрямозонность полупроводника.

2. В рамках модели Давыдова исследована ПС ЭГ при различных значениях параметров задачи.

3. В рамках модели Давыдова исследована статическая проводимость ЭГ, зависимость последней от химического потенциала и температуры.

4. Показано, что такие характеристики полупроводниковой подложки, как несимметричность зон и непрямозонность, вносят вклад в проводимость ЭГ.

5. Получено аналитическое выражение для динамической проводимости ЭГ.

6. Исследована термоэдс ЭГ, сформированного на полупроводнике, и показано, что вблизи краев запрещенной щели полупроводника термоэдс аномально растет.

Нам представляется, что естественным продолжением данной работы является рассмотрение таких явлений, как перенормировка скорости Ферми в слабонеидеальном ЭГ, а также подробное исследование динамической проводимости и термомагнитного эффекта. Эти вопросы очень интересны и будут рассмотрены в последующих работах.

Приложение

Необходимо рассчитать интеграл

$$\Theta(x, \omega) = \sum_{\alpha, \beta} \int_0^{\xi} x dx \operatorname{Im} G(\varepsilon, x) \operatorname{Im} G(\varepsilon, x + \omega). \quad (\text{П.1})$$

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

$$G_{\alpha}^{-1}(\varepsilon, x) = \varepsilon - \alpha x - \operatorname{Re} \Sigma(\varepsilon) - i \operatorname{Im} \Sigma(\varepsilon) \quad (\text{П.2})$$

следуют свойства

$$\operatorname{Im} G_{\alpha}(x) = \frac{i}{2} (G_{\alpha}^{*}(x) - G_{\alpha}(x)), \quad (\text{П.3})$$

$$\operatorname{Re} G_{\alpha}(x) = \frac{1}{2} (G_{\alpha}^{*}(x) + G_{\alpha}(x)), \quad (\text{П.4})$$

$$G_{\alpha}(x) G_{\beta}(x + \omega) = T (-\alpha \beta G_{\alpha}(x) + G_{\beta}(x + \omega)),$$

$$G_{\alpha}^{*}(x) G_{\beta}^{*}(x + \omega) = T^{*} (-\alpha \beta G_{\alpha}^{*}(x) + G_{\beta}^{*}(x + \omega)),$$

$$G_{\alpha}^{*}(x) G_{\beta}(x + \omega) = T_1 (-\alpha \beta G_{\alpha}^{*}(x) + G_{\beta}(x + \omega)),$$

$$G_{\alpha}(x) G_{\beta}^{*}(x + \omega) = T_1^{*} (-\alpha \beta G_{\alpha}(x) + G_{\beta}^{*}(x + \omega)), \quad (\text{П.5})$$

$$T = \frac{1}{x - \Sigma(x) - \alpha \beta (x + \omega - \Sigma(x + \omega))},$$

$$T_1 = \frac{1}{x - \Sigma^{*}(x) - \alpha \beta (x + \omega - \Sigma(x + \omega))}. \quad (\text{П.6})$$

Используя (П.2)–(П.5), получим

$$\Theta(x, \omega) = \sum_{\alpha, \beta} \left[bG \left(Da + \frac{FA}{ab} \right) \left(\operatorname{arctg} \frac{A}{a} - \operatorname{arctg} \frac{A - \alpha\xi}{a} \right) + aH \left(\frac{FB}{ab} - Db \right) \left(\operatorname{arctg} \frac{B}{b} - \operatorname{arctg} \frac{B - \beta\xi}{b} \right) + \frac{G(F - bDA)}{2} \ln \frac{(A - \alpha\xi)^2 + a^2}{A^2 + a^2} + \frac{H(F + aDB)}{2} \ln \frac{(B - \beta\xi)^2 + b^2}{B^2 + b^2} \right]; \quad (\text{П.7})$$

$$A = \varepsilon - \operatorname{Re} \Sigma(\varepsilon), \quad B = \varepsilon + \omega - \operatorname{Re} \Sigma(\varepsilon + \omega), \\ a = \operatorname{Im} \Sigma(\varepsilon), \quad b = \operatorname{Im} \Sigma(\varepsilon + \omega). \quad (\text{П.8})$$

$$C = ((A - \alpha\beta B)^2 + a^2 + b^2), \quad (\text{П.9})$$

$$D = 2(\alpha\beta A - B), \quad F = a(C - 2b^2), \quad (\text{П.10})$$

$$G = \frac{2\alpha\beta a}{C^2 - 4a^2b^2}, \quad H = \frac{2b}{C^2 - 4a^2b^2}. \quad (\text{П.11})$$

Понятно, что в нашей модели $\operatorname{Re} \Sigma \equiv \Lambda$, $\operatorname{Im} \Sigma \equiv \Gamma_c$. В конце обратим внимание на то, что формула (П.11) отличается от аналогичной формулы, полученной в работе [39] для примесного графена (формула А.1 с. 21). Мы считаем, что в работе [39] при получении выражения для динамической проводимости допущена опечатка. Это видно в первую очередь из того факта, что при $\omega \rightarrow 0$ из формулы работы [39] следует не совсем правильное выражение для статической проводимости. Формула (П.11) такими недостатками не обладает.

Список литературы

- [1] 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)
- [2] A.K. Geim, K.S. Novoselov. *Nature Materials*, **6**, 183 (2007).
- [3] P. Avouris, Z. Chen, V. Perebeinos. *Nature Nanotech.*, **2**, 605 (2007).
- [4] F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan, A.C. Ferrari, *Nature Photon.*, **4**, 611 (2010).
- [5] Л.А. Фальковский. *УФН*, **178**, 923 (2008); *ЖЭТФ*, **142**, 1309 (2012).
- [6] Yu.Yu. Kiselev, L.E. Golub. *Phys. Rev. B*, **84**, 235 440 (2011).
- [7] G. Konstantatos, M. Badioli, L. Gaudreau, J. Osmond, M. Bennechea, F.P. Garcia de Arquer, F. Gatti, F.H.L. Koppens. *Nature Nanotech.*, **7**, 363 (2012).
- [8] А.А. Варламов, А.В. Кавокин, И.А. Лукьянчук, С.Г. Шарпов. *УФН*, **182**, 1229 (2012).
- [9] S.P. Koenig, L. Wang, J. Pellegrino, J.S. Bunch. *Nature Nanotech.*, **7**, 728 (2012).
- [10] D. Cohen-Tanugi, J.C. Grossman. *Nano Lett.*, **12**(7), 3602 (2012).
- [11] E.G. Mishchenko. *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 216 801 (2007).
- [12] C. Berger, Zh. Song, T. Li, Xuebin 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**, 19912 (2004).
- [13] W. Lua, W.C. Mitchel, C.A. Thorntona, W.E. Collinsa, G.R. Landis, S.R. Smith. *J. Electrochem. Soc.*, **150**, G177 (2003).
- [14] G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, V.M. Karpan, J. van den Brink, P.J. Kelly. *Phys. Rev. Lett.*, **101**, 026 803 (2008).
- [15] P.A. Khomyakov, G. Giovannetti, P.C. Rusu, G. Brocks, J. van den Brink, P.J. Kelly. *Phys. Rev. B*, **79**, 195 425 (2009).
- [16] P.A. Khomyakov, A.A. Starikov, G. Brocks, P.J. Kelly. *Phys. Rev. B*, **82**, 115 437 (2010).
- [17] 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).
- [18] C. Riedl, C. Coletti, U. Starke. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **43**, 374 009 (2010).
- [19] F.D.M. Haldane, P.W. Anderson. *Phys. Rev. B*, **13**, 2553 (1976).
- [20] С.Ю. Давыдов. *Письма в ЖТФ*, **37**, 64 (2011); *Письма ЖТФ*, **39**(2), 7 (2013).
- [21] С.Ю. Давыдов. *ФТП*, **45**, 629 (2011); *ФТП*, **45**, 1102 (2011).
- [22] С.Ю. Давыдов. *ФТП*, **47**(1), 97 (2013).
- [23] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов. *ФТТ*, **54**, 1398 (2012).
- [24] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов. *ФММ*, **113**, 1504 (2012).
- [25] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов. *ТМФ*, **172**, 455 (2012).
- [26] З.З. Алисултанов, С.В. Гарнов, Р.П. Мейланов. *ФТТ*, **54**, 2237 (2012).
- [27] З.З. Алисултанов. *Письма ЖТФ*, **39**(4), 23 (2013).
- [28] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов, А.К. Нухов, Г.М. Мусеев, Э.И. Идаятов. *Письма ЖТФ*, **38**(12), 1 (2012).
- [29] З.З. Алисултанов. *ФТП*, **47**(6), 805 (2013); *Прикл. физика*, **6**, 23 (2012).
- [30] Z.Z. Alisultanov. *Low Temperature Phys.*, **39**(7), 767 (2013).
- [31] З.З. Алисултанов. *Письма ЖТФ*, **39**(15), 8 (2013).
- [32] З.З. Алисултанов. *Письма ЖТФ*, **39**(13), 32 (2013).
- [33] С.Ю. Давыдов. *ФТП*, **41**(6), 718 (2007).
- [34] A. Mattausch, O. Pankratov. *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 076 802 (2007).
- [35] H. Na, H. Kim, K. Adachi, N. Kiritani, S. Tanimoto, H. Okushi, K. Arai. *J. Electron. Mater.*, **33**, 89 (2004).
- [36] 18. У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел* (М., Мир, 1983) т. 1.
- [37] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov. *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 146 801 (2005).
- [38] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, J.P. Carbotte. *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 256 802 (2006).
- [39] N.M.R. Peres, F. Guinea, A.H. Castro Neto. *Phys. Rev. B*, **73**, 125 411 (2006).
- [40] Yu.V. Skrypnik, V.M. Loktev. *Phys. Rev. B*, **73**, 241 402 R (2006).
- [41] Yu.V. Skrypnik, V.M. Loktev. *Phys. Rev. B*, **75**, 245 401 (2007).
- [42] V.M. Pereira, J.M.B. Lopes dos Santos, A.H. Castro Neto. *Phys. Rev. B*, **77**, 115 109 (2008).
- [43] P.A. Lee. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 1887 (1993).
- [44] N.H. Shon, T. Ando. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **67**, 2421 (1998).
- [45] K. Ziegler. *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 266 802 (2006).
- [46] M.I. Katsnelson. *Eur. Phys. J. B*, **51**, 157 (2006).
- [47] S.G. Sharapov, A.A. Varlamov. *Phys. Rev. B*, **86**, 035 430 (2012).
- [48] N.F. Mott, H. Jones. *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*. 1st edn. (Oxford: Clarendon Press, 1936).

- [49] A.A. Varlamov, V.S. Egorov, A.V. Pantsulaya. *Adv. Phys.*, **38**, 469 (1989).
[50] Ya.M. Blanter, M.I. Kaganov, A.V. Pantsulaya, A.A. Valamov. *Phys. Rep.*, **245**, 159 (1994).

Редактор Т.А. Полянская

The transport properties of epitaxial graphene formed on semiconductor surface

Z.Z. Alisultanov*+•, R.P. Meilanov♦♦

* Amirkhanov Physics Institute,
Russian Academy of Sciences,
Dagestan Science Centre,
367003 Makhachkala, Russia

+ Prokhorov General Physics Institute,
Russian Academy of Sciences,
119991 Moscow, Russia

• Dagestan States University,
367000 Makhachkala, Russia

♦♦ Institute of Geothermal Problems,
Dagestan Scientific Center,
Academy of Sciences,
367030 Makhachkala, Russia

Abstract In this paper, the transport properties of epitaxial graphene formed on semiconductor surface are considered. We use the approach based on Anderson Hamiltonian in Haldane–Anderson approximation. We obtain the analytic observation for density of states of epitaxial graphene. We investigate the behavior of density of states of epitaxial graphene for different values of system parameters. We study a real part of dynamical conductance of epitaxial graphene, also temperature and chemical potential dependence of conductance. We showed that near edge of semiconductor band gap the dependence conductance on chemical potential has a resonant character. Minimal static conductance has an universal value $2e^2/\pi\hbar$, when energy of interaction between graphene and substrate is equal to zero. We investigate thermoelectric effect in epitaxial graphene and we show that near the edges of the band gap, thermopower is anomalous high. Considered fundamental issues play a crucial role in the study of the optical, magneto-optical, thermoelectric and thermomagnetic properties of epitaxial graphene. The results obtained are of great interest when considering the epitaxial graphene as a promising material for microwave technology.