

Аномальный рост термоЭДС в однослойном графене, сформированном на перестраиваемом бислое графена

З. З. Алисултанов¹⁾

Институт общей физики им. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

Институт физики им. Амирханова ДНЦ РАН, 367003 Махачкала, Россия

Дагестанский государственный университет, 367000 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 21 мая 2013 г.

После переработки 17 июня 2013 г.

В рамках простой модели исследованы проводимость и термоЭДС монослоя графена, сформированного на перестраиваемом бислое графена. Показано, что вблизи краев запрещенной щели перестраиваемого бислоя графена появляются изломы проводимости и пики термоЭДС монослоя графена.

DOI: 10.7868/S0370274X13140129

Графен (двумерный аллотроп углерода) обладает уникальной зонной структурой, в которой электроны описываются с помощью линейного и бесщелевого закона дисперсии [1]. Необычный энергетический спектр и геометрия кристаллической решетки приводят к уникальным транспортным, оптическим и динамическим свойствам графена [1–5], делая его новым многообещающим материалом для различных применений. Влияние примесных атомов на уникальный спектр графена изучалось в работах [6, 7]. В [8] была сформулирована теория возмущений для систем с гамильтонианом, линейно зависящим от импульса. Очень важно, что уникальный спектр графена защищен соображениями симметрии [9]. Помимо фундаментальных исследований, большой практический интерес представляют различные структуры на основе графеновых слоев. Например, в работе [10] сообщается, что структура из двух разделенных диэлектриком слоев графена может стать основой для создания бездиссипативных линий передачи. В настоящей работе в рамках простой аналитической модели исследуются проводимость и термоЭДС однослойного графена, сформированного на перестраиваемом бислое графена (ПБГ) (см. рис. 1).

Изолированный графен обладает уникальными термоэлектрическими свойствами [11]. Действительно, термоЭДС графена при комнатной температуре составляет около 100 мВ/К (для сравнения укажем, что термоЭДС металлов составляет порядка 0.01 мВ/К). Такие большие значения термоЭДС на-

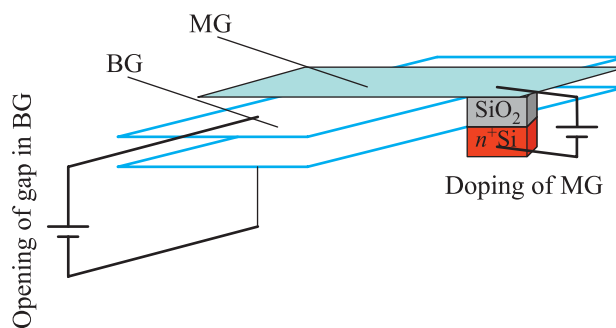


Рис. 1. Схематическое изображение рассматриваемой системы. К БГ приложено перпендикулярное поле, открывающее щель в спектре, а МГ – поле затвора для изменения химического потенциала

блюдаются в щелевом графене, когда химический потенциал приближается к краю запрещенной щели.

В теории термоэлектрического эффекта основным выражением является формула Мотта, связывающая дифференциальную термоЭДС с логарифмической производной продольной проводимости [12]:

$$S_{xx} = -\frac{\pi^2}{3e} K_B^2 T \frac{d}{d\mu} [\ln \sigma(\mu, T = 0)], \quad (1)$$

где T – температура, $\sigma(\mu, T = 0)$ – действительная часть проводимости при нулевой температуре, μ – химический потенциал, k_B – постоянная Больцмана.

Мы исследуем монослой графена (МГ), сформированный на ПБГ, в рамках простой модели. В ней графен на поверхности подложки представляется в виде адсорбированных на этой поверхности атомов углерода, выстроенных в гексагональную структуру. Такая модель впервые была предложена

¹⁾e-mail: zaur0102@gmail.com

на С.Ю. Давыдовым [13] для исследования электронных состояний эпитаксиального графена, сформированного на металле или полупроводнике. В модели Андерсона–Ньюнса для функции Грина (ФГ) одиночного адатома имеем

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

где ε_a – энергия уровня адатома углерода, $\Gamma_c(\omega) = \pi t_\perp^2 \rho_B(\omega)$ – полуширина уровня адатома, $\Lambda(\omega) = \pi^{-1} P \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_c(\omega') d\omega' / (\omega - \omega')$ – функция сдвига уровня адатома, $\rho(\omega) = \rho_B(\omega)$ – плотность состояний (ПС) подложки (в данном случае бислоя графена), “ P ” обозначает интегрирование в смысле главного значения, t_\perp – эффективная энергия перехода между графеновыми слоями (потенциал гибридизации). Далее, положим $\varepsilon_a = 0$. Между адатомами углерода, выстроенными в гексагональную структуру, возникает обмен электронами. Таким образом формируется зона Бриллюэна графена. Чтобы определить ФГ возмущенной из-за обмена электронами системы, воспользуемся уравнением Дайсона в приближении, когда учитывается лишь прямой обмен между ближайшими соседними атомами:

$$G_{ij} = G_i^0 \delta_{ij} + \sum_l G_i^0 t_{il} G_{lj}, \quad (3)$$

где $t_{il} = t$ есть энергия перескока электрона между ближайшими атомами углерода (для изолированного графена $t \approx 2.8$ эВ). Применяя к уравнению Дайсона фурье-преобразование, учитывая симметрию кристаллической решетки графена, а также учитывая, что $G_i^0 = G_0$, получим

$$G_q^{-1}(\varepsilon) = G_0^{-1}(\varepsilon) - t f(\mathbf{q}) - i\gamma, \quad (4)$$

где функция $f(\mathbf{q})$ определена как $f(\mathbf{q}) = v_b \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3} q_x a) + 4 \cos(\sqrt{3} q_x a / 2) \cos(3 q_y a / 2)}$, a – расстояние между ближайшими атомами в графене, \mathbf{q} – двумерный волновой вектор электронов графена, v_b – зонный индекс ($v_b = +1$ соответствует зоне проводимости, а $v_b = -1$ – валентной зоне), γ – затухание квазичастиц в МГ за счет внутренних столкновительных процессов (рассеяния на фононах, на примесных атомах, на дефектах кристаллической решетки и т.д.). Вблизи точки Дирака с координатами $\mathbf{Q} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$ для энергетического спектра получаем $t f(\mathbf{k}) = v_b \cdot 3ta |\mathbf{k}|/2 = v_b v_F \hbar |\mathbf{k}|$, где $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}$.

Определим параметры подложки, т.е. БГ. Для ПС ПБГ имеем (см. формулу (8) в [14])

$$\rho_B^0(U, \omega) = \frac{S}{\pi^2 \hbar^2 v_F^2} \sum_{\alpha=\pm 1} F(U, \alpha), \quad (5)$$

$$F(U, \alpha) = \left(\omega + \frac{\alpha \sqrt{t_\perp^2 + U^2}}{2} \right) \times \\ \times \left[\arctg \frac{\alpha \sqrt{t_\perp^2 + U^2} \omega + \omega^2 - U^2/2}{s(\alpha \sqrt{t_\perp^2 + U^2} + 2\omega)} - \right. \\ \left. - \arctg \frac{\alpha \sqrt{t_\perp^2 + U^2} \omega + \omega^2 - \xi_B^2 - U^2/2}{s(\alpha \sqrt{t_\perp^2 + U^2} + 2\omega)} \right],$$

где U – запрещенная щель в спектре, вызванная приложенным электрическим полем, $s = 0^+$, ξ_B – энергетический параметр порядка ширины зоны для БГ, $S = 3\sqrt{3}a^2/4$ – площадь, соответствующая одному атому графена. Далее мы положим $t_\perp = 0.5$ эВ. Для оценок величины U часто используют простую модель конденсатора, в которой она связана с приложенным напряжением следующим образом: $U = eud/\varepsilon L$, где e – заряд электрона, $d \approx 3.5$ Å – расстояние между слоями в БГ, L – ширина затвора, ε – диэлектрическая проницаемость затвора. Нас интересует качественная сторона рассматриваемого явления. Поэтому мы не будем затрагивать вопрос о конкретных значениях U . Для функции сдвига имеем (формула (16) в [14])

$$\Lambda(U, \omega) = -\frac{St_\perp^2}{\pi \hbar^2 v_F^2} \sum_{\alpha=\pm 1} D_\alpha(U, \omega), \quad (6)$$

$$D_\alpha(U, \omega) = (\omega + \alpha \sqrt{t_\perp^2 + U^2}/2) \times \\ \times \ln \left| \frac{\alpha \sqrt{t_\perp^2 + U^2} \omega + \omega^2 - U^2/2 - \xi_B^2}{\alpha \sqrt{t_\perp^2 + U^2} \omega + \omega^2 - U^2/2} \right|.$$

Величину ξ_B мы определим из условия, что на каждом атоме углерода бислоя графена в $2p_z$ -состоянии находится один электрон. Отсюда для случая $U = 0$ получаем

$$\xi_B^2 - t_\perp(\xi_B - \omega_1) + \omega_1^2 = 2\sqrt{3}\pi t^2, \quad (7)$$

где $\omega_1(1/2)(-t_\perp + \sqrt{t_\perp^2 + 4\xi_B^2})$. При $t_\perp = 0$ имеем известное выражение для МГ: $\xi_M = \sqrt{\pi\sqrt{3}t}$. При принятых численных значениях t_\perp и t находим $\xi_B \approx 6.6$ эВ. В принципе мы можем положить $\xi_B = \xi_M$, т.к. эти две величины очень мало отличаются. Далее мы не будем различать ξ_B и ξ_M , а введем единый энергетический параметр $\xi = \sqrt{\pi\sqrt{3}t}$. С учетом всего сказанного имеем $S/\hbar^2 v_F^2 = \pi/\xi^2$. Легко показать, что в ПС ПБГ имеется щель (см., например, работу [14]).

Проводимость рассматриваемой системы найдем с помощью формулы Кубо–Гринвуда [15]:

$$\sigma(\omega, T) = -\frac{v_F^2 \hbar^2 e^2}{NS\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar} [f(\varepsilon + \omega) - f(\varepsilon)] \times$$

$$\times \sum_{k, v_{b1}, v_{b2}=\pm 1} \text{Im } G(\mathbf{k}, \varepsilon) \text{Im } G(\mathbf{k}, \varepsilon + \omega), \quad (8)$$

где $f(\varepsilon) = (e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1)^{-1}$ есть распределение Ферми–Дирака, v_{b1} и v_{b2} – зонные индексы для $G(\mathbf{k}, \varepsilon)$ и $G(\mathbf{k}, \varepsilon + \omega)$ соответственно. В формуле (8) учитывается вырождение по долинам и спиновому числу. Формула Кубо–Гринвуда (8) для статической проводимости дает

$$\sigma_{G-S} = \frac{e^2}{\pi \hbar} \left\{ \left[\frac{(\tilde{\mu}^2 - \Gamma^2)F(\Gamma) - 4\tilde{\mu}^2\Gamma^2}{F^2(\Gamma) + 4\tilde{\mu}^2\Gamma^2} + 1 \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\mu}}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{\tilde{\mu}} \right) \left[\arctg \frac{F(\Gamma)}{2\tilde{\mu}\Gamma} + \arctg \frac{\tilde{\mu}^2 - \Gamma^2}{2\tilde{\mu}\Gamma} \right] \right\}, \quad (9)$$

где $F(\Gamma) = \xi^2 - \tilde{\mu}^2 + \Gamma$, $\tilde{\mu} = \mu - \Lambda(\mu)$, $\Gamma = \gamma + \Gamma_c(\mu)$. Отсюда хорошо видно, что при $\mu, \gamma, \Gamma_c \rightarrow 0$ проводимость принимает универсальное значение $2e^2/\pi\hbar$ в согласии с известными теоретическими и экспериментальными работами. Далее положим $\gamma \approx 60$ К. Зависимость статической проводимости МГ от химического потенциала приведена на рис. 2. Видно,

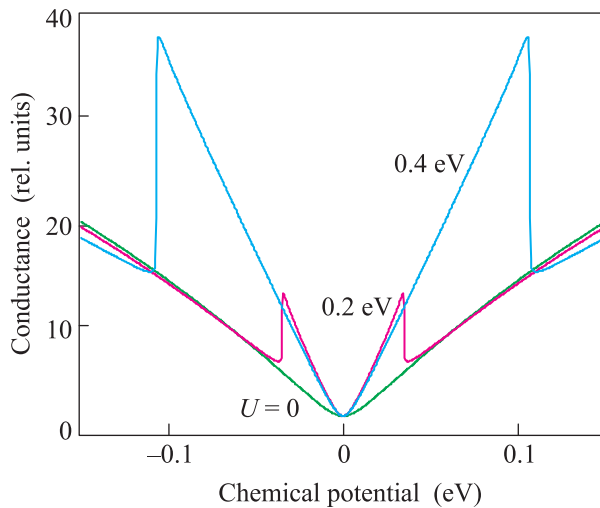


Рис. 2. Проводимость МГ, сформированного на ПБГ, при различных величинах запрещенной щели

что при значениях химического потенциала, соответствующих краям запрещенной щели БГ, проводимость меняется скачкообразно. Это, очевидно объясняется тем, что вблизи краев щели происходит резкий переход от режима не связанного с подложкой графена (внутри щели $\Gamma_c = 0$) к режиму связанного графена (вне щели $\Gamma_c \neq 0$). Понятно, что в разных режимах проводимость МГ будет различной. Это и объясняет наличие крутых изломов (кинков) в проводимости. На рис. 3 приведена термоЭДС МГ, сформированного на ПБГ. Вследствие скачкообразного

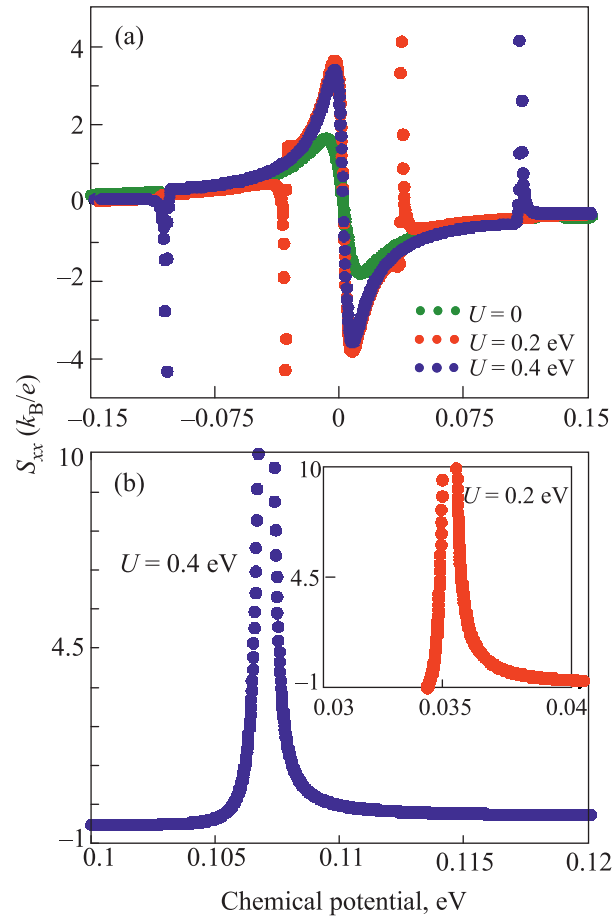


Рис. 3. ТермоЭДС МГ, сформированного на ПБГ, при различных величинах запрещенной щели (а). Увеличенное изображение одного из пиков (б). Температура $T = 300$ К

поведения проводимости вблизи краев запрещенной щели в этих точках имеются пики термоЭДС. Она возрастает почти на порядок. Кроме того, термоЭДС в несколько раз возрастает вблизи точки Дирака. Последнее связано с тем, что хотя внутри запрещенной щели $\Gamma_c = 0$, но при этом $\Lambda \neq 0$. Данный член и приводит к указанному эффекту. Представляет большой интерес и тот факт, что в данном случае имеется возможность управления не только химическим потенциалом монослоя, но и шириной щели БГ, а следовательно, расположением точек, вблизи которых имеются пики термоЭДС. Возвращаясь к обсуждению скачкообразного изменения проводимости, хотелось бы обратить внимание на следующий момент. В нашем случае величина Γ_c , очевидно, определяет время релаксации квазичастиц МГ ($\tau \sim \Gamma_c^{-1}$). Следовательно, вблизи края запрещенной щели время релаксации становится сильно зависящим от энергии. Проводя аналогию с работами [11, 16], можно сказать, что вблизи края щели появляется новый канал рассеяния

квазичастиц, причем время релаксации сильно зависит от энергии. Как и в работах [11, 16], здесь следует упомянуть об очевидной аналогии между транспортом в МГ, сформированном на ПБГ, 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. Это приводит к появлению изломов проводимости и пиков термоЭДС [17, 18].

В заключение отметим, что рассмотренная здесь система из МГ и ПБГ может оказаться перспективной твердотельной структурой с управляемыми параметрами на основе графена, интересной и для других приложений. К примеру, как очевидное продолжение настоящей работы представляет большой интерес рассмотреть термомагнитный эффект. Предварительные расчеты показывают, что в МГ, сформированном на ПБГ, вблизи краев щели должны наблюдаться гигантские осцилляции коэффициента Нернста.

Автор искренне благодарен С.Г. Шарапову за полезное обсуждение работы. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта # 13-02-90746мол_рф_нр.

1. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2008).

2. V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005); V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, and J. P. Carbotte, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 256802 (2006).
3. Л. А. Фальковский, *ЖЭТФ* **133**, 663 (2008).
4. S. Das Sarma, Sh. Adam, E. H. Hwang et al., *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407 (2011).
5. Л. А. Фальковский, *ЖЭТФ* **142**, 560 (2012); *ЖЭТФ* **142**, 1309 (2012).
6. Ю. В. Скрипник, В. М. Локтев, *Письма в ЖЭТФ* **94**, 605 (2011)
7. Ю. В. Скрипник, В. М. Локтев, *Письма в ЖЭТФ* **93**, 787 (2011).
8. Л. А. Фальковский, *Письма в ЖЭТФ* **94**, 783 (2011).
9. E. G. Mishchenko, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 216801 (2007).
10. Yu. E. Lozovik and A. A. Sokolik, *Письма в ЖЭТФ* **87**, 61 (2008).
11. S. G. Sharapov and A. A. Varlamov, *Phys. Rev. B* **86**, 035430 (2012).
12. N. F. Mott and H. Jones, *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*, 1st ed., Oxford, Clarendon Press, 1936.
13. С. Ю. Давыдов, *ФТП* **45**, 629 (2011).
14. З. З. Алисултанов, *ФТП* **47**, 954 (2013).
15. N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **73**, 125411 (2006).
16. А. А. Варламов, А. В. Кавокин, И. А. Лукьянчук, С. Г. Шарапов, *УФН* **182**, 1229 (2012).
17. А. А. Varlamov, V. S. Egorov, A. V. Pantsulaya, *Adv. Phys.* **38**, 469 (1989).
18. Ya. M. Blanter, M. I. Kaganov, A. V. Pantsulaya, and A. A. Valamov, *Phys. Rep.* **245**, 159 (1994).