

Расчет эффективности управления проводимостью графена действием электрического поля в терагерцовом диапазоне частот

О.А. Голованов¹, Г.С. Макеева², В.В. Вареница³, Р.А. Горелов¹

¹ Пензенский артиллерийский инженерный институт
440005, Российская Федерация, Пензенская обл., г. Пенза-5
ПАИИ

² Пензенский государственный университет
440026, Российская Федерация, г. Пенза
ул. Красная, 40

³ ЗАО «НПО «Эшелон»
107023, Российская Федерация, г. Москва
ул. Электrozаводская, 24, стр. 1

Проведен расчет поверхностной проводимости монослоя графена, определяемой формулой Кубо, в модели, учитывающей внутри- и межзонную проводимости и комплексной диэлектрической проницаемости графена от частоты. Исследовано влияние на проводимость графена изменения химического потенциала при приложении внешнего электрического поля в терагерцовом диапазоне частот.

Ключевые слова: монослой графена, поверхностная проводимость, формула Кубо, химический потенциал, терагерцовый диапазон.

Введение

Практическая демонстрация возможности отделения и стабильного существования графена, продемонстрированная в 2004 году [1], стала настоящим прорывом в исследовании углеродных материалов. Графен представляя собой монослой атомов углерода, объединенных в гексагональную решетку (рис. 1). Расстояние между ближайшими атомами углерода в графене составляет около 0,14 нм. Кристаллическая решетка графена представляет собой плоскость, состоящую из шестиугольных ячеек, то есть является 2D-гексагональной кристаллической решеткой [2]. В элементарной ячейке кристалла находятся два атома.

Графен является одной из форм углерода (рис. 2). Наиболее распространенные методы получения образцов графена можно разделить на четыре категории: микромеханическое отщепление от объемного пиролитического графита, химический метод с использованием коллоидных дисперсий на основе соединений, содержащих графеновые слои, эпитаксиальный рост на поверхности различных монокристаллических подложек и термическое разложение SiC, хими-

ческое разложение из газовой фазы на поликристаллических подложках (никель, медь) [1].

В качестве материала графен является совершенно новым – не только самым тонким, но и самым прочным. Как проводник электричества он идентичен меди и превосходит все другие известные материалы по теплопроводности [3]. Удельное электрическое сопротивление этого материала при комнатной температуре равно ~ 1 мкОм·см, что на 35 % меньше, чем у меди [4]. По прочности на разрыв он превосходит сталь в 200 раз, а масса слоя графена толщиной в один атом размером 60 на 120 метров составляет менее 1 г.

Графен обладает уникальными физическими, электронными и оптическими свойствами в широком диапазоне частот от радиочастот, микро-волн до оптического диапазона. Графен способен управлять излучением терагерцового (ТГц) и ближнего инфракрасного диапазонов.

Целью данной работы является расчет поверхностной проводимости монослоя графена, определяемой формулой Кубо, в модели, учитывающей внутри- и межзонную проводимости, при различных значениях химического потенциала, изменяющегося при приложении внеш-

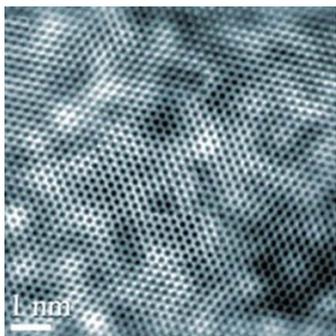


Рис. 1. Монослой графена, изображение получено с помощью электронного микроскопа высокого разрешения [2]



Рис. 2. Слои графена на кремниевой подложке (изображение с электронного микроскопа с увеличением 5000 раз) [4]

него электрического поля, в терагерцовом (ТГц) диапазоне частот.

1. Физическая модель

Уникальные свойства графена обусловлены его кристаллической и электронной структурами. Графен нельзя отнести ни к металлам, ни к полупроводникам, ни тем более к диэлектрикам. В отличие от металлов, у которых зависимость энергии квазичастиц от импульса при движении в зоне проводимости (закон дисперсии) можно считать квадратичным (энергия квазичастиц прямо пропорциональна квадрату импульса), у графена закон дисперсии существенно отличается. Графен – это полуметалл.

Кристаллическая структура графена состоит из двух эквивалентных подрешеток, что приводит к образованию двух энергетических зон и двух «конических» точек на уровне нулевого заряда носителей K и K' , в которых валентная зона и зона проводимости соприкасаются (рис. 3) [4].

Исходя из зонной структуры (рис. 3), графен – это вещество, у которого валентная зона и зона проводимости перекрываются (запрещенная зона отсутствует как в металлах), но в отличие от металлов это пересечение очень мало. Точки соприкосновения зоны проводимости и валентной зоны в графене образуют так называемые

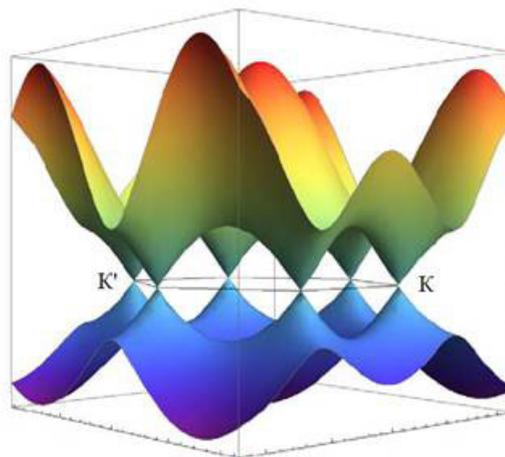


Рис. 3. Зонная структура графена с точками соприкосновения зоны проводимости и валентной зоны в точках K и K' [5]

точки Дирака. В этих точках закон дисперсии квазичастиц имеет линейный вид: энергия квазичастиц прямо пропорциональна их импульсу. Подобной зависимостью энергии от импульса обладают еще и безмассовые частицы – фотоны, т. е. электроны в графене ведут себя как фотоны, имея нулевую массу и скорость движения v_F порядка 10^6 м/с, соответствующую энергии Ферми. В графене при положительных энергиях (выше дираковской точки) токонесущие состояния подобны электронам и заряжены отрицательно [6]. При отрицательных энергиях, если валентная зона целиком не заполнена, квазичастицы ведут себя как положительно заряженные частицы (дырки) и могут рассматриваться как твердотельный аналог позитронов [7].

Нулевая масса носителей заряда графена обуславливает их исключительно высокую подвижность – параметр, характеризующий пригодность материала для применения в электронике. Согласно измерениям А. Гейма и К. Новоселова, предельное значение подвижности носителей заряда в этом материале при комнатной температуре и плотности носителей 10^{12} см⁻² составляет 20 м²/В·с (для сравнения – подвижность носителей заряда в кремнии составляет $0,15$ м²/В·с). При повышении температуры подвижность падает [4].

На подвижность электронов и дырок в графене существенное влияние оказывают примеси в диэлектрике подложки SiO_2 (рис. 2). Подложка кремния с диэлектриком, на котором находится графен, должна быть сильно легирована, чтобы ее можно было использовать в качестве обратного затвора [1], при помощи которого можно управлять концентрацией и даже изменять тип проводимости. Поскольку графен является

полуметаллом, то приложение положительного напряжения к затвору приводит к электронной проводимости графена, и напротив – если приложить отрицательное напряжение, то основными носителями станут дырки, поэтому в принципе нельзя обеднить полностью графен от носителей.

Высокая подвижность носителей заряда в графене делает его перспективным материалом для использования в различных приложениях, в частности, как будущую основу нанoeлектроники и возможную замену кремния в интегральных микросхемах, и способствует созданию электронных приборов и устройств ТГц- и ИК-диапазонов.

2. Математическая модель

Монослой графена характеризуется поверхностной проводимостью σ_s , определяемой формулой Кубо [8]:

$$\begin{aligned} \sigma_s(\omega, \mu_c) = & \frac{-ie^2 k_b T}{\pi \hbar^2 (\omega - i2\Gamma)} \times \\ & \times \left(\frac{\mu_c}{k_b T} + 2 \ln \left(\exp \left(\frac{-\mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right) \right) - \\ & - \frac{ie^2 (\omega - i2\Gamma)}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty \left[\left(\exp \left(\frac{-\xi - \mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right)^{-1} - \right. \\ & \left. - \left(\exp \left(\frac{\xi - \mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right)^{-1} \right] / \\ & / \left[(\omega - i2\Gamma)^2 - \left(\frac{2\xi}{\hbar} \right)^2 \right] d\xi, \end{aligned} \quad (1)$$

где $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд электрона; $k_b = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/Кл – постоянная Больцмана; $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка; T – температура; Γ – частота релаксации; μ – химический потенциал; $\omega = 2\pi f$ – круговая частота. Поверхностная проводимость σ_s графена является комплексной величиной с положительной действительной частью σ'_s . Мнимая часть поверхностной проводимости σ''_s содержит отрицательный вклад от внутризонной проводимости и положительный – от межзонной.

В задачах электродинамики используется эффективная диэлектрическая проницаемость графена, в уравнения Максвелла входит объемная удельная проводимость σ , которую необходимо выразить через поверхностную проводимость σ_s . Для монослоя графена вводится комплексная

диэлектрическая проницаемость [8]:

$$\varepsilon(\omega, \mu_c) = 1 + \frac{i\sigma(\omega, \mu_c)}{\varepsilon_0 \omega d}, \quad (2)$$

где d – эффективная толщина монослоя графена, а поверхностная σ_s и объемная σ проводимости связаны между собой соотношением: $\sigma = \sigma_s / d$.

3. Результаты расчета проводимости графена при различных значениях химического потенциала в терагерцевом диапазоне частот

Расчет поверхностной проводимости графена проведен по формуле (1) для комнатной температуры $T = 300$ К. Приняты следующие значения параметров: частота релаксации $\Gamma = 10^{12}$ 1/с, эффективная толщина слоя графена $d = 1 \cdot 10^{-9}$ м. Диапазон изменения химического потенциала $\mu_c = 0 - 1$ эВ.

Зависимости поверхностной проводимости σ_s графена от частоты в широком интервале частот от 1 ТГц до 1000 ТГц, который включает СВЧ-, ТГц- и ИК-диапазоны, показаны на рис. 4.

Из рис. 4 видно, что в диапазоне частот от 0,001 ТГц до 0,1 ТГц действительная часть σ'_s проводимости графена является практически постоянной величиной.

На рис. 5 показаны расчетные зависимости действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости графена от частоты в ИК-диапазоне от 200 ТГц до 1000 ТГц при различных значениях химического потенциала.

Из графиков на рис. 5 следует, что при различных значениях химического потенциала действительная часть комплексной диэлектрической проницаемости меняет знак с «-» на «+» и стремится к единице. При этом мнимая часть диэлектрической проницаемости знака не меняет. На частотах до 0,1 ТГц графен ведет себя как металл. Начиная с частоты 2 ТГц и выше мнимой частью диэлектрической проницаемости графена можно пренебречь.

Проводимость графена в ТГц-диапазоне определяется, согласно модели (1), химическим потенциалом, который можно изменять, например, приложением внешнего электрического поля [8]. При изменении химического потенциала от 0 до 1 эВ поверхностная проводимость графена σ_s увеличивается почти в 20 раз (рис. 4). Изменение химического потенциала осуществ-

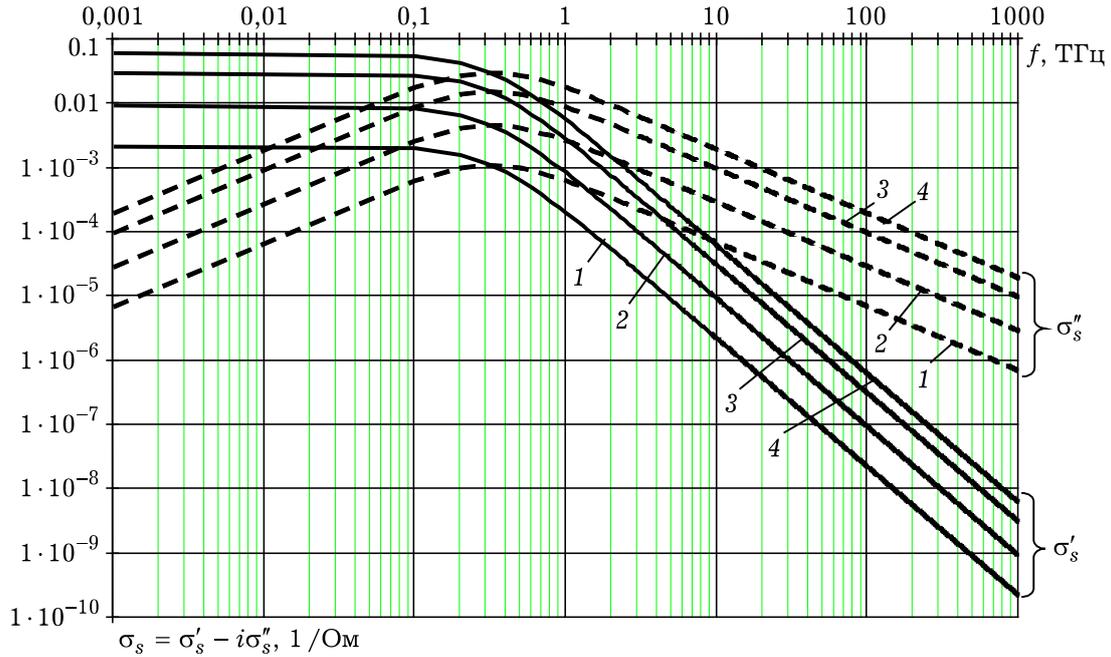


Рис. 4. Частотные зависимости действительной и мнимой частей поверхностной проводимости графена в СВЧ-, ТГц- и ИК-диапазонах при различных значениях химического потенциала: 1 - $\mu_c = 0,0$ эВ, 2 - $\mu_c = 0,15$ эВ, 3 - $\mu_c = 0,5$ эВ, 4 - $\mu_c = 1,0$ эВ

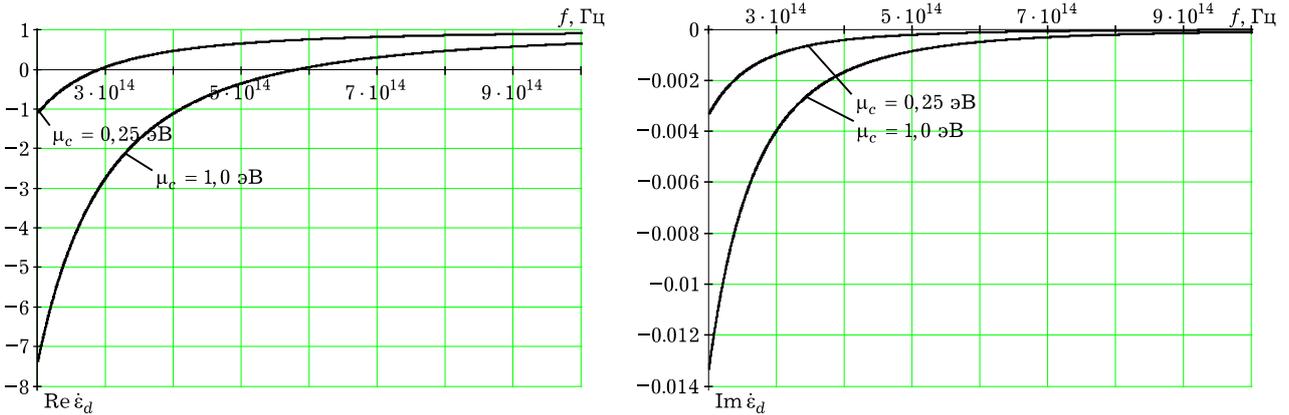


Рис. 5. Зависимости действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости графена от частоты в ИК-диапазоне при различных значениях химического потенциала

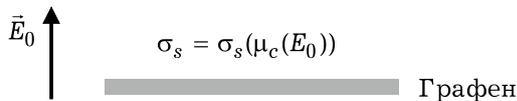


Рис. 6. Схема управления проводимостью графена при изменении химического потенциала приложенным внешним электрическим полем E_0

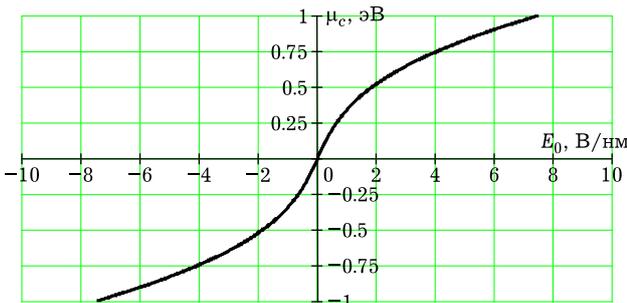


Рис. 7. Зависимость химического потенциала μ_c от напряженности внешнего постоянного электрического поля E_0

вляется составляющей вектора напряженности внешнего электрического поля E_0 , нормальной к плоскости графена [9] (см. рис. 6). Для учета влияния зависимости химического потенциала μ_c от внешнего электрического поля E_0 на поверхностную проводимость графена, нужно соответствующую зависимость $\mu_c(E_0)$ учесть в формуле (1).

Нормальная к плоскости графена составляющая вектора электрической индукции равна [10]

$$D_0 = \epsilon_b \epsilon_0 E_0 = e n_s / 2, \tag{3}$$

где ϵ_b - диэлектрическая проницаемость графена; n_s - 2D поверхностная плотность электрического заряда. Поверхностная плотность заряда n_s определяется выражением [10; 11]

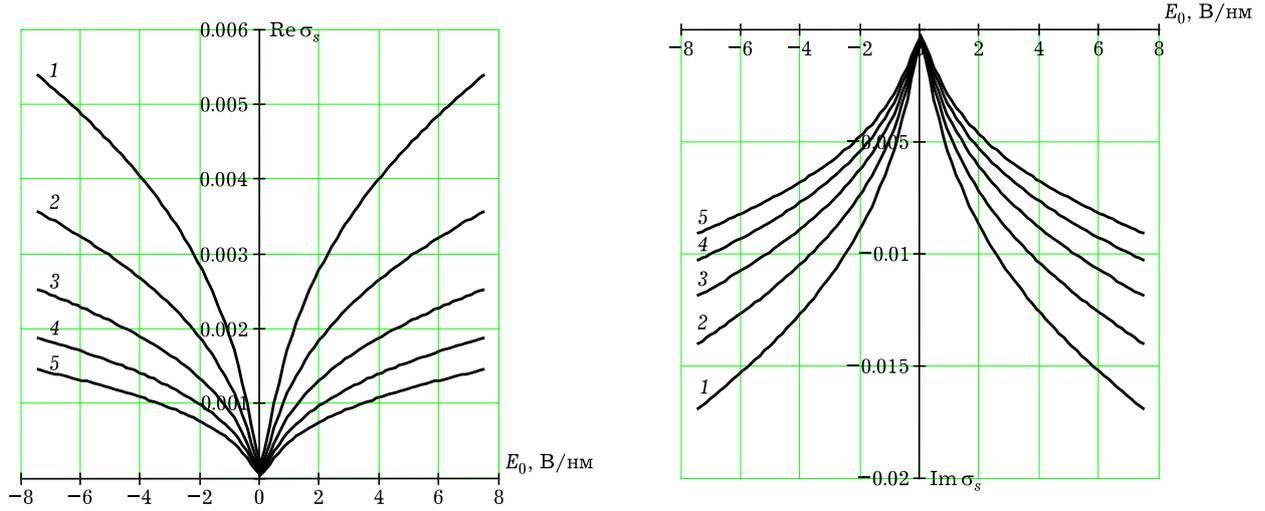


Рис. 8. Зависимость действительной и мнимой частей поверхностной проводимости графена от напряженности внешнего постоянного электрического поля E_0 : 1 – $f = 1$ ТГц, 2 – 1,25 ТГц, 3 – 1,5 ТГц, 4 – 1,75 ТГц, 5 – 2 ТГц

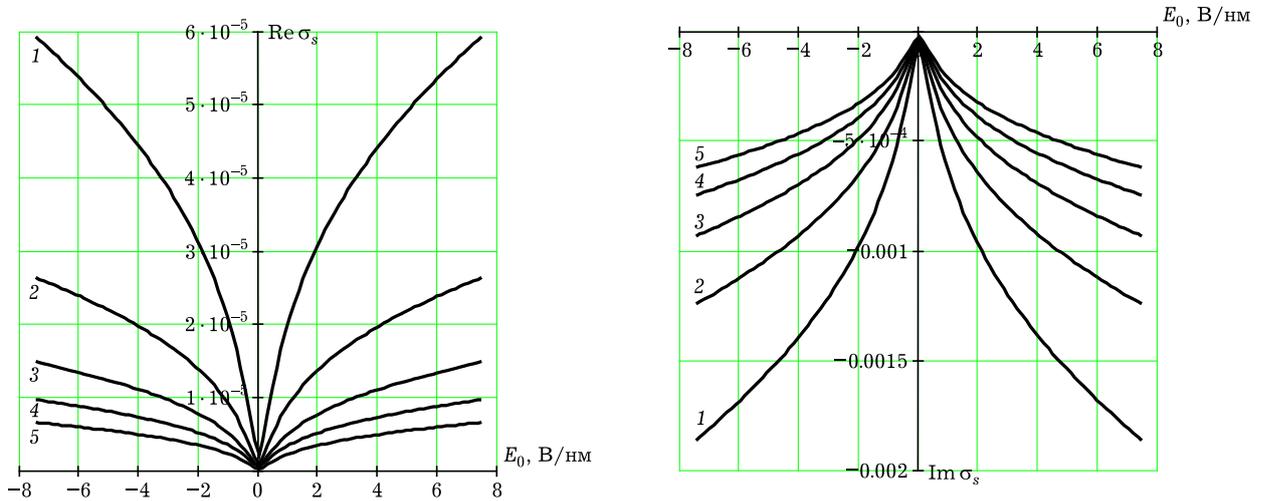


Рис. 9. Зависимость действительной и мнимой частей поверхностной проводимости графена от напряженности внешнего постоянного электрического поля E_0 : 1 – $f = 10$ ТГц, 2 – 15 ТГц, 3 – 20 ТГц, 4 – 25 ТГц, 5 – 30 ТГц

$$n_s = \frac{2}{\pi \hbar^2 v_F^2} \int_0^{\infty} \varepsilon (f_d(\varepsilon) - f_d(\varepsilon + 2\mu_c)) d\varepsilon, \quad (4)$$

где

$$f_d(\varepsilon) = \left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_c}{k_b T}\right) + 1 \right)^{-1}$$

– функция распределения Ферми-Дирака, ε – энергия электрона, $v_F = 3\gamma_0 b / 2\hbar$, где $\gamma_0 = 2.7$ эВ, расстояние между соседними атомами в структуре графена $b = 0.142$ нм. Из (3), (4) получаем выражение, связывающее между собой напряженность внешнего электрического поля E_0 и химический потенциал μ_c :

$$E_0 = \frac{e}{\pi \hbar^2 v_F^2 \varepsilon_b} \int_0^{\infty} \varepsilon (f_d(\varepsilon) - f_d(\varepsilon + 2\mu_c)) d\varepsilon. \quad (5)$$

Зависимость химического потенциала μ_c от напряженности внешнего постоянного электри-

ческого поля E_0 , рассчитанная по формуле (5), показана на рис. 7.

Зависимости поверхностной проводимости графена от напряженности внешнего постоянного электрического поля E_0 , рассчитанные по формуле (3) с учетом (5), для различных частот ТГц диапазона приведены на рис. 8, 9.

Зависимости являются симметричными и нелинейными, особенно сильно нелинейность проявляется вблизи точки $E_0 = 0$.

Заключение

По формуле Кубо проведен расчет поверхностной проводимости монослоя графена и получены зависимости от частоты в широком интервале частот от 1 ТГц до 1000 ТГц, который включает СВЧ-, ТГц- и ИК-диапазоны. Показано, что на частотах до 0,1 ТГц графен ведет себя как металл, начиная с частоты 2 ТГц и

выше мнимой частью диэлектрической проницаемости графена можно пренебречь.

Полученные в работе результаты демонстрируют, что управлять проводимостью графена можно путем изменения значений химического потенциала. При изменении химического потенциала от 0,0 эВ до 1,0 эВ поверхностная проводимость графена увеличивается примерно в 20 раз.

Управление химическим потенциалом осуществляется составляющей вектора напряженности электрического поля смещения, нормальной к плоскости графена. Показано, что зависимости поверхностной проводимости графена от напряженности внешнего постоянного электрического поля для различных частот ТГц-диапазона являются нелинейными.

Из результатов расчета следует, что графен, обладающий эффективно управляемой внешним электрическим полем проводимостью, чрезвычайно перспективен для создания широкого класса электронно-управляемых устройств ТГц- и ИК-диапазонов.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований – грант № 12-02-97025-р_поволжье_а.

Список литературы

1. Electric field effect in atomically thin carbon films / K.S. Novoselov [et al.] // *Science*. 2004. № 306 (5696). P. 666–669.
2. Fine structure constant defines transparency of grapheme / R.R. Nair [et al.] // *Science*. 2008. № 320. P. 1308–1308.
3. The Royal Swedish Academy of Sciences, The Nobel Prize in Physics, Information for the public, 2010.
4. Юдинцев В. Графен. Наноэлектроника стремительно набирает силы // *Электроника НТБ*. 2009. URL: <http://www.electronics.ru/issue/2009/6/16>
5. Graphene, Scientific Background on the Nobel Prize in Physics, 2010.
6. Морозов С.В., Новоселов К.С., Гейм А.К. Электронный транспорт в графене // *Успехи физических наук*. 2008. Т. 178. № 7. С. 776–780.
7. Москалюк В.А., Тимофеев В.И. Перспективные наноструктуры и наноконпоненты электроники // *Электроника и связь 2'* Тематический выпуск «Электроника и нанотехнологии». 2010. С. 18–19.
8. Hanson G.W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of grapheme // *J. of Appl. Phys.* 2008. V. 103. P. 064302.
9. Ultrahigh electron mobility in suspended grapheme / K.I. Bolotin [et al.] // *Solid State Commun.* 2008. Vol. 146. № 351–355.
10. Ryzhii V., Satou A., Otsuji T. Plasma waves in two-dimensional electron-hole system in gated graphene heterostructures // *J. Appl. Phys.* 2007. Vol. 101. P. 024509 (1–5).
11. Falkovsky L.A. Unusual field and temperature dependence of the Hall effect in grapheme // *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 75. P. 033409 (1–4).

Calculation of efficiency of control of graphene conductivity by the external electric field at terahertz frequency range

O.A. Golovanov, G.S. Makeeva, V.V. Varenitca, R.A. Gorelov

The calculation of surface conductivity of graphene monolayer determined from the Kubo formula taking into account in the model the intraband and interband conductivities is performed depending on the frequency. The influence of chemical potential on the surface conductivity of grapheme changed by the external electric field is researched at the terahertz frequency range.

Keywords: graphene monolayer, surface conductivity, Kubo formula, chemical potential, terahertz frequency range.
