

ПРОВОДИМОСТЬ ГРАФЕНА В ТЕРАГЕРЦОВОМ И ИНФРАКРАСНОМ ДИАПАЗОНАХ ЧАСТОТ¹

О. А. Голованов, Г. С. Макеева, В. В. Вареница

Введение

Теоретическое исследование графена началось задолго до получения реальных образцов материала. Двумерную форму углерода, описанную теоретически более 60 лет назад, долго не удавалось получить практически, поскольку считалось, что двумерные кристаллы не могут существовать из-за своей нестабильности. В 2004 г. совместными усилиями ученых Манчестерского университета (Великобритания) под руководством А. Гейма и Российского Института проблем технологии микроэлектроники и особо чистых металлов в Черноголовке под руководством К. Новоселова удалось получить и воспроизвести структуру графена. За открытие графена и опыты с 2D-материалом А. К. Гейму и К. С. Новоселову присуждена Нобелевская премия по физике за 2010 г. [1].

Графен обладает уникальными электронными и оптическими свойствами для применений в широком диапазоне рабочих частот, перекрывающих спектр от радиочастот, микроволн до оптического диапазона.

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 внешнего электрического поля, в терагерцовом (ТГц) и инфракрасном (ИК) диапазонах частот.

1. Физическая модель

Графен (англ. *graphene*) – слой атомов углерода, соединенных посредством *sp*-связей в гексагональную 2D кристаллическую решетку с расстоянием между двумя соседними атомами углерода в 0,142 нм (рис. 1) [2].

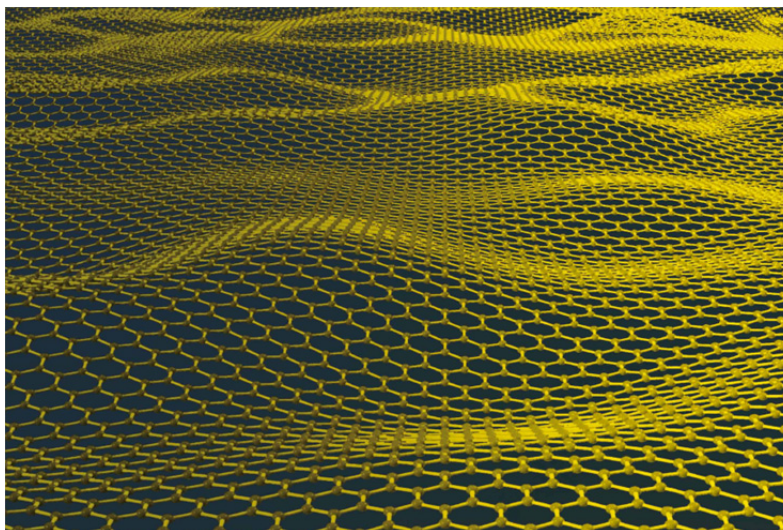


Рис. 1. Графен – слой атомов углерода, соединенных посредством *sp*-связей в гексагональную 2D кристаллическую решетку [2]

¹ Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований грант № 12-02-97025-р_поволжье_а.

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. 2) [1].

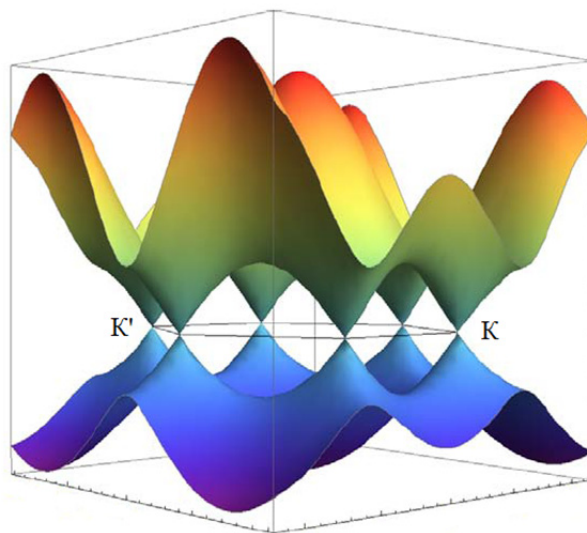


Рис. 2. Зонная структура графена с точками соприкосновения зоны проводимости и валентной зоны в точках K и K' [3]

Исходя из зонной структуры (см. рис. 2), 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 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) токонесящие состояния подобны электронам и заряжены отрицательно [4]. При отрицательных энергиях, если валентная зона целиком не заполнена, квазичастицы ведут себя как положительно заряженные частицы (дырки) и могут рассматриваться как твердотельный аналог позитронов [5].

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 м 2 /В·с (для сравнения – подвижность носителей заряда в кремнии составляет 0,15 м 2 /В·с). При повышении температуры подвижность падает [1].

На подвижность электронов и дырок в графене существенное влияние оказывают примеси в диэлектрике подложки SiO $_2$. Подложка кремния с диэлектриком, на котором находится графен, должна быть сильно легирована, чтобы ее можно было использовать в качестве обратного затвора [6], с помощью 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 [7]:

$$\sigma_s(\omega, \mu_c) = \frac{-ie^2 k_b T}{\pi \hbar^2 (\omega - i2\Gamma)} \left(\frac{\mu_c}{k_b T} + 2 \ln \left(\exp \left(\frac{-\mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right) \right) - \frac{ie^2 (\omega - i2\Gamma)}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty \frac{\left(\exp \left(\frac{-\xi - \mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right)^{-1} - \left(\exp \left(\frac{\xi - \mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right)^{-1}}{(\omega - i2\Gamma)^2 - \left(\frac{2\xi}{\hbar} \right)^2} d\xi, \quad (1)$$

где $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ К – заряд электрона; $k_b = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – 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 [7]:

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

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 терагерцовом и инфракрасном диапазонах 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 ГГц до 1000 ТГц, который включает СВЧ, ТГц и ИК диапазоны, показаны на рис. 3.

Из рис. 3 видно, что в диапазоне частот от 0,001 до 0,1 ТГц действительная часть σ'_s проводимости графена является практически постоянной величиной.

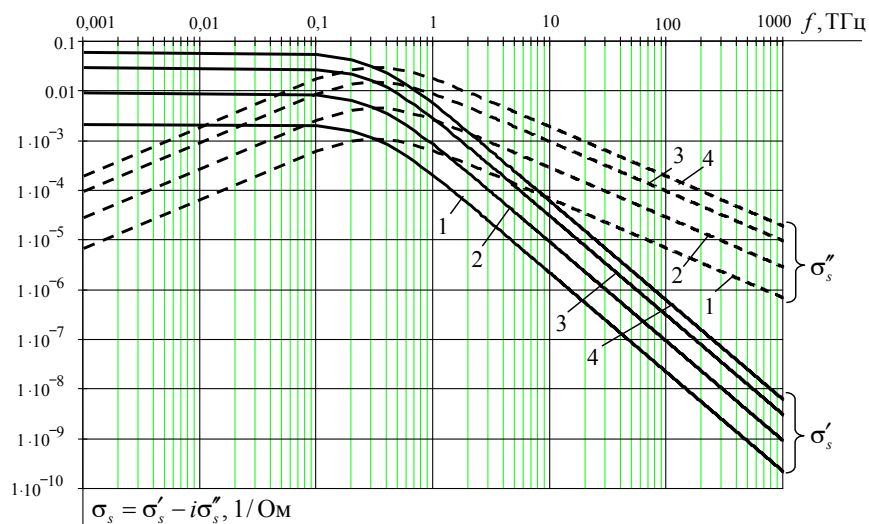


Рис. 3. Частотные зависимости действительной и мнимой частей поверхностной проводимости графена в СВЧ, ТГц и ИК диапазонах при различных значениях химического потенциала:

1 – $\mu_c = 0,0 \text{ эВ}$; 2 – $\mu_c = 0,15 \text{ эВ}$; 3 – $\mu_c = 0,5 \text{ эВ}$; 4 – $\mu_c = 1,0 \text{ эВ}$

На рис. 4 показаны расчетные зависимости действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости графена от частоты в ИК диапазоне от 200 до 1000 ТГц при различных значениях химического потенциала.

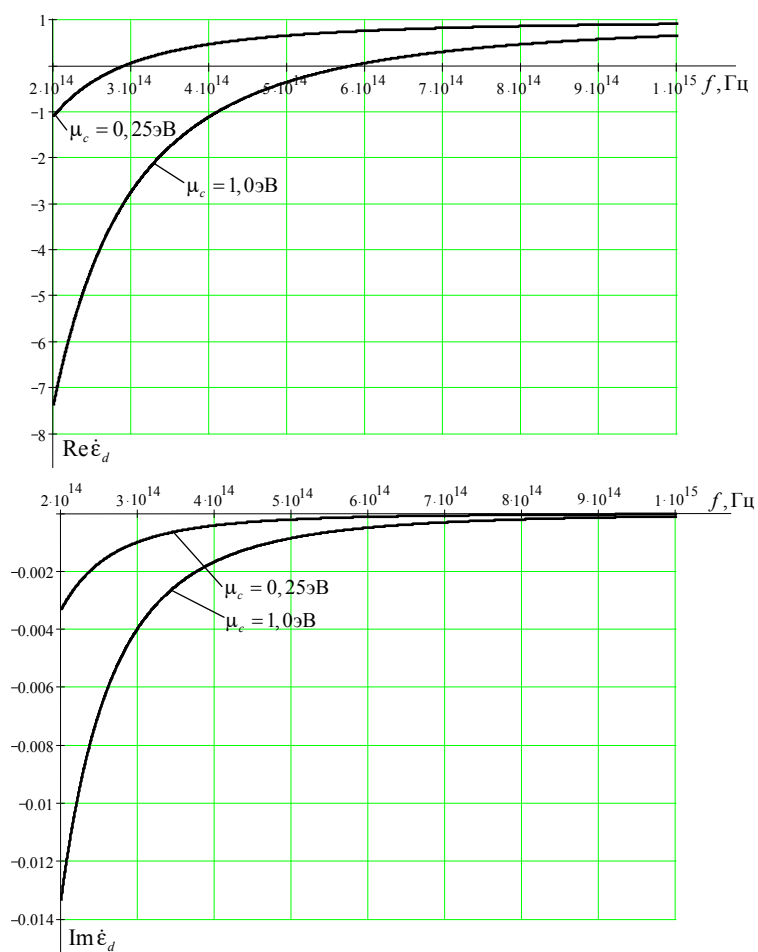


Рис. 4. Зависимости действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости графена от частоты в ИК диапазоне при различных значениях химического потенциала

Из графиков на рис. 4 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 [7]. При изменении химического потенциала от 0 до 1 эВ поверхностная проводимость графена σ_s увеличивается почти в 20 раз (см. рис. 4). Изменение химического потенциала осуществляется составляющей вектора напряженности внешнего электрического поля E_0 , нормальной к плоскости графена [8] (рис. 5). 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).

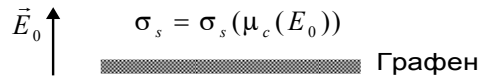


Рис. 5. Схема управления проводимостью графена при изменении химического потенциала приложенным внешним электрическим полем E_0

Нормальная к плоскости графена составляющая вектора электрической индукции равна [9]:

$$D_0 = \epsilon_b \epsilon_0 E_0 = e n_s / 2, \quad (3)$$

где $\epsilon_0 \epsilon_b$ – диэлектрическая проницаемость графена; n_s – 2D поверхностная плотность электрического заряда. Поверхностная плотность заряда n_s определяется выражением [9–11]:

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

где $f_d(\epsilon) = \left(\exp\left(\frac{\epsilon - \mu_c}{k_b T}\right) + 1 \right)^{-1}$ – функция распределения Ферми–Дирака; ϵ – энергия электрона,

$v_F = \frac{3\gamma_0 b}{2\hbar}$, 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 :

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

Зависимость химического потенциала μ_c от напряженности внешнего постоянного электрического поля E_0 , рассчитанная по формуле (5), показана на рис. 6.

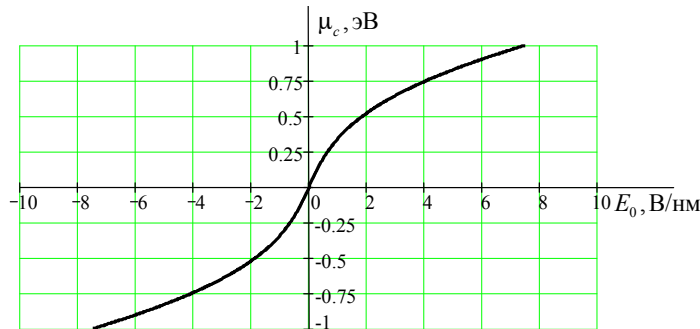


Рис. 6. Зависимость химического потенциала μ_c от напряженности внешнего постоянного электрического поля E_0

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. 7, 8.

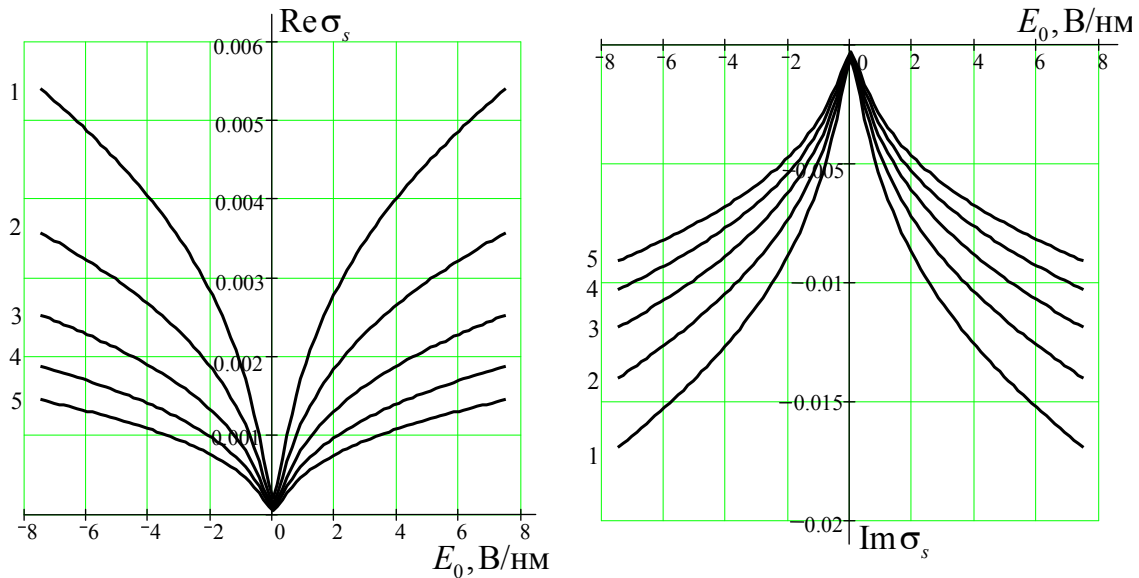


Рис. 7. Зависимость действительной и мнимой частей поверхностной проводимости графена от напряженности внешнего постоянного электрического поля E_0 :
кривая 1 – $f = 1$ ТГц ; 2 – 1,25 ТГц ; 3 – 1,5 ТГц ; 4 – 1,75 ТГц ; 5 – 2 ТГц

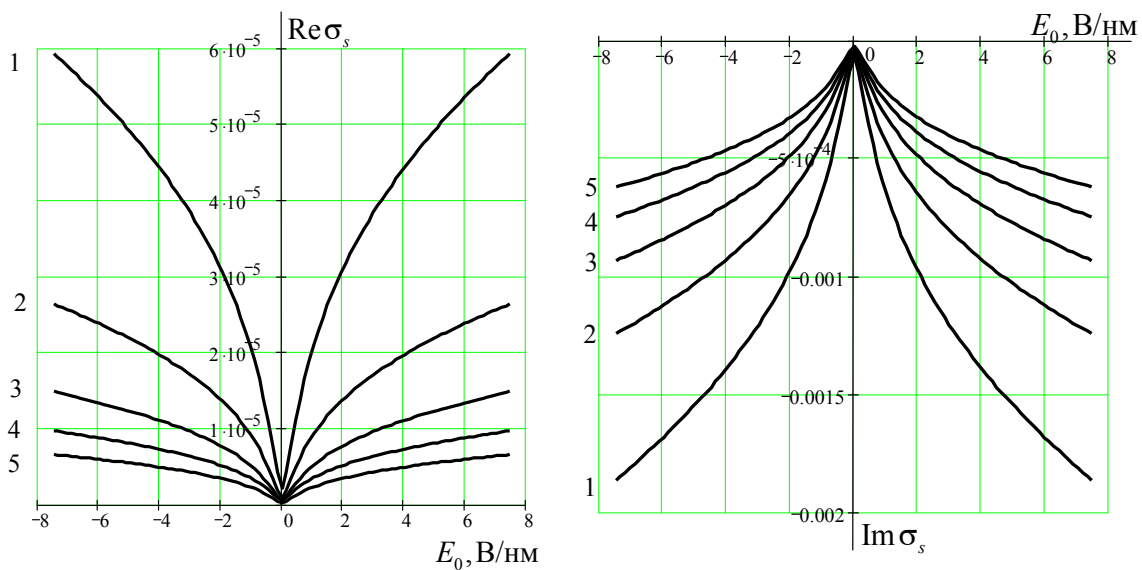


Рис. 8. Зависимость действительной и мнимой частей поверхностной проводимости графена от напряженности внешнего постоянного электрического поля E_0 :
кривая 1 – $f = 10$ ТГц ; 2 – 15 ТГц ; 3 – 20 ТГц ; 4 – 25 ТГц ; 5 – 30 ТГц

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 вклю-

чает 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 до 1,0 эВ поверхностная проводимость графена увеличивается примерно в 20 раз.

Список литературы

1. Юдинцев, В. Графен. Нанoeлектроника стремительно набирает силы / В. Юдинцев // Электроника НТБ. – 2009. – URL: <http://www.electronics.ru/issue/2009/6/16>
2. Чиркина, М. А. Математическое моделирование устройств сверхвысоких частот на магнитных наноконструкциях / М. А. Чиркина, Н. К. Юрков, А. Н. Якимов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Технические науки. – 2011. – № 1. – С. 167–173.
3. Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2010 : Graphene / The Royal Swedish Academy of Sciences. – Stockholm, Sweden, 2010. – URL: <http://kva.se>
4. Морозов, С. В. Электронный транспорт в графене / С. В. Морозов, К. С. Новоселов, А. К. Гейм // Успехи физических наук. – 2008. – Т. 178, № 7. – С. 776–780.
5. Москалюк, В. А. Перспективные наноструктуры и наноконпоненты электроники / В. А. Москалюк, В. И. Тимофеев // Электроника и связь. – 2000. – № 2(55). – С. 14–27. – (Электроника и нанотехнологии).
6. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films / K. S. Novoselov et al. // Science. – 2004. – P. 306–310.
7. Hanson, G. W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene / G. W. Hanson // J. of Appl. Phys. – 2008. – V. 103. – P. 064302.
8. Ultrahigh electron mobility in suspended graphene / K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, H. L. Stormer // Solid State Commun. – 2008. – V. 146. – P. 351–355.
9. Ryzhii, V. Plasma waves in two-dimensional electron-hole system in gated graphene heterostructures / V. Ryzhii, A. Satou, T. Otsuji // J. Appl. Phys. – 2007. – V. 101. – P. 024509 (1-5).
10. Falkovsky, L. A. Unusual field and temperature dependence of the Hall effect in graphene / L. A. Falkovsky // Phys. Rev. B. – 2007. – V. 75. – P. 033409 (1-4).
11. Электродинамический расчет порогов нелинейности анизотропных наноструктурных материалов по точкам бифуркации нелинейного оператора Максвелла / Г. С. Макеева, О. А. Голованов, Д. Н. Ширшиков, Г. Г. Горлов // Надежность и качество сложных систем. – 2014. – № 1 (5). – С. 58–64.
12. Excitation of Plasmonic Waves in Graphene by Guided-Mode Resonances / W. Gao, J. Shu, C. Qiu, Q. Xu // ACS Nano. – 2012. – № 6 (9). – P. 7806–7813.

Голованов Олег Александрович

доктор физико-математических наук, профессор,
кафедра общеобразовательных дисциплин,
Пензенский филиал Военной академии
материально-технического обеспечения
(440005, Россия, Пензенская обл., г. Пенза-5)
E-mail: golovanovol@mail.ru

Макеева Галина Степановна

доктор технических наук, профессор,
кафедра радиотехники и радиоэлектронных систем,
Пензенский государственный университет
(440026, Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)
E-mail: radiotech@pnzgu.ru

Вареница Виталий Викторович

директор департамента аудита кода и сертификации,
ЗАО «НПО «Эшелон»
(107023, Россия, г. Москва, ул. Электрозаводская, д. 24)
8-(495)-223-23-92
E-mail: v.varenitsa@cnpo.ru

Аннотация. Проведен расчет поверхностной проводимости монослоя графена, определяемой форму-

Golovanov Oleg Aleksandrovich

doctor of physical and mathematical sciences, professor,
sub-department of general subjects,
Penza branch of Military academy of logistics
(440005, Penza, Russia)

Makeeva Galina Stepanovna

doctor of technical sciences, professor,
sub-department of radio-engineering
and electronic systems,
Penza State University,
(440026, 40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Varenitca Vitalyi Viktorjvich

manager of department of enterprise «Eshelon»
(107023, 24 Elektrozavodskaj street, Moscow, Russia)

Abstract. The calculation of surface conductivity of graphene monolayer determined from the Kubo formula

лой 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 и инфракрасном диапазонах частот; при этом его поверхностная проводимость увеличивается в десятки раз.

Ключевые слова: поверхностная проводимость, комплексная диэлектрическая проницаемость, монослой графена, формула Кубо, терагерцовый, инфракрасный диапазон.

taking into account in the model the intraband and interband conductivities is performed depending on the frequency. The influence on the conductivity of the Graphene changes the chemical potential upon the application of an external electric field in terahertz and infrared frequencies; the surface conductivity increases tenfold.

Key words: surface conductivity, complex permeability, graphene monolayer, Kubo formula, terahertz, infrared frequency range.

УДК 537.874.6

Голованов, О. А.

Проводимость графена в терагерцовом и инфракрасном диапазонах частот / О. А. Голованов, Г. С. Макеева, В. В. Вареница // Надежность и качество сложных систем. – 2014. – № 4 (8). – С. 26–33.