



УДК 544.225
ББК 22.368

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ УДЕЛЬНОЙ ПРОВОДИМОСТИ БИСЛОЯ ГРАФЕНА ¹

Г.С. Иванченко, Ю.В. Невзорова

В данной работе проведено теоретическое исследование транспортных свойств двойного графенового слоя с различной структурой расположения слоев друг относительно друга. Выявлена зонная структура такой системы и закономерности изменения удельной проводимости в зависимости от различных конфигураций графеновых слоев. Исследование проводилось методом молекулярных орбиталей в π -электронном приближении. Обнаружен металлический характер проводимости, а также ее слабая зависимость от выбранного направления в кристалле. Выявлена слабая зависимость удельной проводимости от взаимного расположения слоев графена.

Ключевые слова: бислой графена, электрическое поле, проводимость, нанолента, модель Хаббарда.

Введение

Проблема создания наноструктур с заданными свойствами и контролируемыми размерами входит в число важнейших проблем XXI века. Ее решение революционизирует электронику, материаловедение, механику, химию, медицину и биологию. В последние годы интерес к наноструктурам и нанокластерным системам значительно возрос с точки зрения их применения в нано- и оптоэлектронике. В 2004 г. удалось экспериментально получить отдельные графеновые слои толщиной в один атом углерода [7–10]. Следовательно, возникла необходимость изучения различных свойств и характеристик данного материала. Графен интересен не только с точки зрения возможных приложений, но и с фундаментальной точки зрения – вследствие своих уникальных электронных свойств. Вблизи уровня Ферми электроны в графене обладают линейной дисперсией, а энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости отсутствует. Модель зонной структуры графена послужила стартовой площадкой для изучения свойств графита, но в многослойных стопках, в частности в бислое, взаимодействие между слоями существенно искажает свойства графена [ibid.]. И только после 2004 г., когда отдельные слои графена были успешно изолированы, стало ясно, что на примере этой системы фактически можно изучать новый вид частиц –

безмассовые заряженные квазичастицы, нигде больше не существующие в природе. Такие свойства этих частиц, как двумерность, спинорная природа, нулевая масса и отсутствие щели в спектре, приводят к ряду электронных явлений, не имеющих аналогов ни в каких других физических системах [8].

На основе бислоя графена возможно создание различных нанoeлектромеханических систем, например нановесы, нанодиоды, нанотранзисторы. Одной из важнейших характеристик таких приборов является электропроводность [2; 6].

1. Зонная структура и удельная проводимость

В настоящей работе рассматриваются четыре высокосимметричных случая расположения графеновых слоев друг относительно друга: без смещения (рис. 1а); со смещением в половину длины связи (б), так называемый графит Бернала; со смещением в длину связи (в) и $3/2$ длины связи (г). Для расчета зонной структуры бислоя графена необходимо знать интеграл перекрывания для волновых функций $2p_z$ -орбиталей.

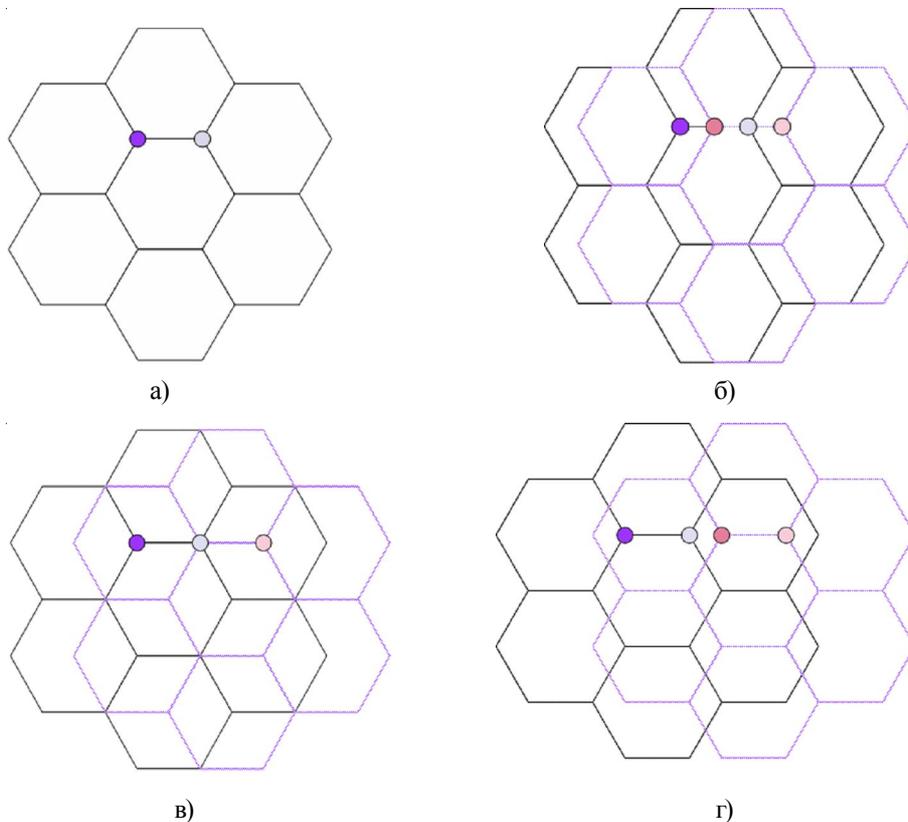


Рис. 1. Различные варианты расположения слоев друг относительно друга:
 а) смещения по оси Y нет; б) смещение по оси Y на половину длины связи; в) смещение на длину связи;
 г) смещение на $3/2$ длины связи

Общий вид волновой функции для $2p_z$ -орбитали в сферической системе координат:

$$\Psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_B}\right)^{3/2} \rho \exp\left\{-\rho/2\right\} \cos\Theta$$
, здесь Z – порядковый номер углерода; $a_B = 0.5292\text{Å}$ – первый Боровский радиус; $\rho = \frac{Zr}{a_B}$ – радиус-вектор. Зная волновую функцию, получим значения интеграла перекрывания для атомов углерода, принадлежащих разным слоям графена (см. таблицу).

Значения интеграла перекрытия, d – расстояние между слоями графена, Δ – смещение одного слоя относительно другого

$\Delta_z \backslash \Delta_y$	0	$a_0/2$	$\sqrt{3}a_0/2$	a_0
0,8*d	$7.29 \cdot 10^{-4}$	$4.59 \cdot 10^{-4}$	$1.87 \cdot 10^{-4}$	$1.22 \cdot 10^{-4}$
d	$3.55 \cdot 10^{-5}$	$2.41 \cdot 10^{-5}$	$1.14 \cdot 10^{-5}$	$7.94 \cdot 10^{-6}$
1.2*d	$1.44 \cdot 10^{-6}$	$1.05 \cdot 10^{-6}$	$5.56 \cdot 10^{-7}$	$4.06 \cdot 10^{-7}$

Для нахождения дисперсионных соотношений пользуемся методом МО ЛКАО, то есть волновую функцию записывают в виде детерминанта, построенного из одноэлектронных волновых функций. В кристаллах с трансляционной симметрией функции, зависящие только от координат электрона, называют блоховскими.

Для рассматриваемой системы базисные блоховские функции имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 \Psi_A(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l_1, l_2} \exp\{i(\bar{k}l_1\bar{c}_1 + \bar{k}l_2\bar{c}_2)\} p_A(\vec{r} - l_1\bar{c}_1 - l_2\bar{c}_2) \\
 \Psi_B(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l_1, l_2} \exp\{i(\bar{k}l_1\bar{c}_1 + \bar{k}l_2\bar{c}_2)\} p_B(\vec{r} - l_1\bar{c}_1 - l_2\bar{c}_2) \\
 \Psi_C(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l_1, l_2} \exp\{i(\bar{k}l_1\bar{c}_1 + \bar{k}l_2\bar{c}_2)\} p_C(\vec{r} - \bar{d}_1 - l_1\bar{c}_1 - l_2\bar{c}_2) \\
 \Psi_D(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l_1, l_2} \exp\{i(\bar{k}l_1\bar{c}_1 + \bar{k}l_2\bar{c}_2)\} p_D(\vec{r} - \bar{d}_2 - l_1\bar{c}_1 - l_2\bar{c}_2)
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь p_A, p_B, p_C, p_D – атомные орбитали p -типа. В таком базисе, используя приближение ближайших соседей, определяем дисперсионные уравнения четвертого порядка для законов дисперсии π -электронов в четырех высокосимметричных случаях, которые описывают электронные переходы в бислое графена. Метод получения дисперсионных соотношений наглядно описан в [2].

Переходы вдоль слоев и между ними взаимосвязаны. Зонная структура бислоя графена наглядно изображена на рисунке 2. Для расчетов использовались следующие значения параметров: химический потенциал: $\mu^a = \mu^c = 0$ эВ; кулоновская энергия: $U = 10$ эВ.

а) б)

Рис. 2. Зонная структура двойного графенового слоя:

а) по вертикальной оси отложена энергия, по горизонтальным – проекции волнового вектора k_x, k_y ;
 б) вид сверху

На рисунке 2 видны «особые» точки энергетической поверхности, в которых энергия принимает экстремальные значения и имеет линейный характер (конусы). В конусах в приближении слабых возбуждений кристалла существуют безмассовые дираковские квазичастицы [8]. Поэтому двухслойный графен является перспективным материалом для создания современных устройств электроники.

Выражение для тензора удельной проводимости, полученное методом функций Грина [1], двухслойного графена в двухзонной модели Хаббарда [4; 5] имеет следующий вид [3]:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i\pi}{kT} \frac{e^2}{V} \sum_{q,\lambda} \sum_{k,\sigma} \left[v_{\alpha}^a(q) v_{\beta}^a(k) A_a + v_{\alpha}^c(q) v_{\beta}^c(k) A_c + \right. \\ \left. + (v_{\alpha}^a(q) v_{\beta}^c(k) + v_{\alpha}^c(q) v_{\beta}^a(k)) \left(\frac{A_a + A_c}{2} + \frac{En_{ac}}{\varepsilon^{ac}} \frac{ch\left(\frac{E}{kT}\right) + 1}{sh\left(\frac{E}{kT}\right)} \right) \right], \quad (2)$$

где величины $v_{\alpha,\beta}$ – компоненты групповых скоростей электронов в зоне Бриллюэна;
 A – функции Грина операторов рождения и уничтожения электронов;
 n_{ac} – количество переходов между слоями;
 E – энергия электронов;
 ε^{ac} – полученные дисперсионные соотношения для переходов между слоями.

Температурная зависимость электропроводности, рассчитанная по формуле (2), представлена на рисунке 3.

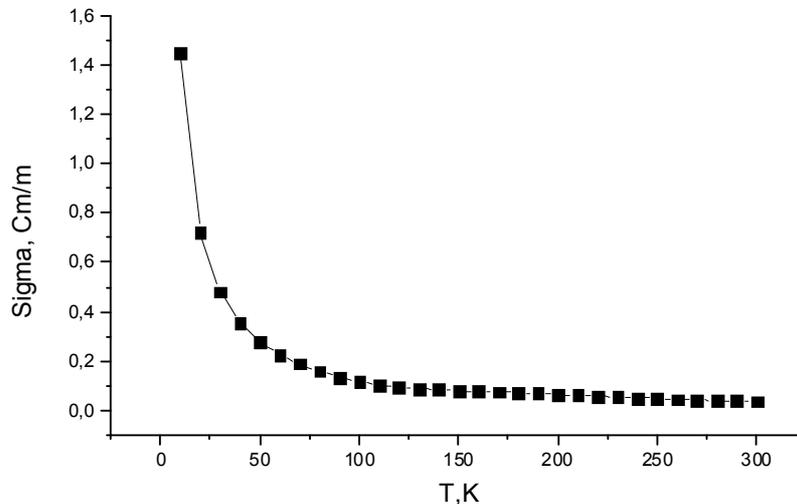


Рис. 3. Температурная зависимость электропроводности бислоя графена

Заключение

В заключении можно сделать следующие выводы:

- Удельная проводимость двухслойного графена не зависит от выбранного направления в кристалле и носит металлический характер. Так как перпендикулярная составляющая волнового вектора k_{\perp} имеет непрерывный набор значений, то при любом выделенном направлении существуют точки, при которых проводящие и валентные зоны пересекаются (рис. 2а). Но следует отметить, что в случае ограничения пространства для движения электронов, тем-

пературная зависимость проводимости может измениться и для некоторых направлений принять вид, характерный для полупроводниковых материалов.

- Предсказана слабая зависимость проводимости от взаимного расположения слоев графена. Это связано с тем, что между слоями присутствует лишь слабое Ван-дер-ваальсовое взаимодействие, что приводит к малому значению интеграла перекрывания, а следовательно, и энергии перехода между слоями. Однако включение внешних полей может существенно увеличить параметры системы, и межслоевые электронные переходы будут намного больше влиять на различные физические свойства данной системы.

ПРИМЕЧАНИЕ

¹ Работа проведена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы [проект № НК-16 (3)], а также поддержана грантом № 61-2010-а/ВолГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бонч-Бруевич, В. Л. Метод функций Грина в статистической механике / В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов. – М. : Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1961. – 312 с.
2. Дьячков, П. Н. Углеродные нанотрубки. Строение, свойства, применение / П. Н. Дьячков. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 290 с.
3. Иванченко, Г. С. Проводимость двухслойных углеродных нанотрубок в рамках модели Хаббарда / Г. С. Иванченко, Н. Г. Лебедев // Физика твердого тела. – 2007. – Т. 49. – Вып. 1. – С. 183–189.
4. Изюмов, Ю. А. Магнетизм коллективизированных электронов / Ю. А. Изюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин. – М. : Физматлит, 1994. – 368 с.
5. Изюмов, Ю. А. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем / Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин. – М. : Физматлит, 1987. – 264 с.
6. Харрис, П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века / П. Харрис. – М. : Техносфера, 2003. – 336 с.
7. Novoselov, K. S. Electric field effect in atomically thin carbon films / K. S. Novoselov [et al.] // Science. – 2004. – V. 306. – P. 666–669.
8. Novoselov, K. S. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K. S. Novoselov [et al.] // Nature. – 2005. – V. 438. – P. 197–200.
9. Stankovich, S. Graphene-based composite materials / S. Stankovich [et al.] // Nature. – 2006. – V. 442. – P. 282–286.
10. Zhang, Y. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene / Y. Zhang, J. W. Tan, H. L. Stormer & P. Kim // Nature. – 2005. – V. 438. – P. 201–204.

TEMPERATURE DEPENDENCE OF CONDUCTIVITY OF THE DOUBLE WALLED GRAPHENE

G.S. Ivanchenko, Yu.V. Nevzorova

In the paper, a theoretical study of the transport properties of double walled graphene with the different structure of the layers relative to each other has been carried out. The band structure of the system and the variation of conductivity depending on the different configurations of graphene layers have been revealed. The study was carried out with using the molecular orbitals in the framework of the π -electron approximation. The metallic conductivity and also its weak dependence on the direction in the crystal have been found. A weak dependence of the conductivity on the mutual arrangement of the graphene layers has been revealed.

Key words: *graphene bilayer, electric field, conductivity, nanoribbon, Hubbard model.*