



УДК 544.225.22  
ББК 22.37

## ПРОВОДИМОСТЬ ДВУХСЛОЙНОЙ ГРАФЕНОВОЙ НАНОЛЕНТЫ С УЧЕТОМ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ <sup>1</sup>

*Г.С. Иванченко, Ю.В. Невзорова*

Методом функций Грина в рамках модели Хюккеля – Хаббарда получено выражение удельной проводимости для бислоя графена. Построена температурная зависимость удельной электропроводности двухслойных графеновых нанолент zig-zag-типа. Показано, что учет нормальной компоненты электрического поля приводит к резкому падению электропроводности в области низких температур. Влияние тангенциальной компоненты электрического поля в приближении времени релаксации приводит к периодическому изменению проводимости.

*Ключевые слова:* графен, электрическое поле, зонная структура, проводимость, нанолента.

### Введение

Электрические свойства графитов и графитизированного углерода могут сильно изменяться в зависимости от степени кристаллического упорядочения. В случае высококачественного монокристалла графита сопротивление быстро падает с падением температуры. Такое падение происходит главным образом из-за уменьшения фононного рассеяния на низких температурах. С другой стороны, более разупорядоченные углероды могут проявлять подъем сопротивления, когда температура падает. Это является следствием уменьшения плотности носителей при низких температурах, которая доминирует в определяющем сопротивлении таких углеродов.

Что касается углеродных волокон, то экспериментальные исследования показывают, что они также весьма различны по своим электронным свойствам [7]. Так, высокосовершенные волокна имеют кривые сопротивления, приближающиеся к кривой монокристаллического графита, тогда как менее совершенные проявляют поведение, подобное для разупорядоченных углеродов.

Кроме этого, на транспортные свойства углеродных наноструктур сильное влияние могут оказывать различные внешние электрические и магнитные поля.

### 1. Проводимость бислоя графена во внешнем электрическом поле

Для моделирования электронной структуры бислоя графена целесообразно использовать модель Хюккеля – Хаббарда в рамках метода вторичного квантования, которая учитывает энергию переноса электрона между соседними узлами кристаллической решетки, кулоновское отталкивание двух электронов с противоположными спинами, находящиеся на одном узле решетки, межслоевое взаимодействие, а также взаимодействие электронов с внешним электрическим полем [3; 4]. Модель хорошо соответствует представлению об электронах в проводниках, как о Ферми-жидкости.

Внешнее электрическое поле относительно плоскости графена может быть представлено в виде суммы его нормальной ( $E_n$ ) и тангенциальной ( $E_t$ ) компонент (см. рис. 1).

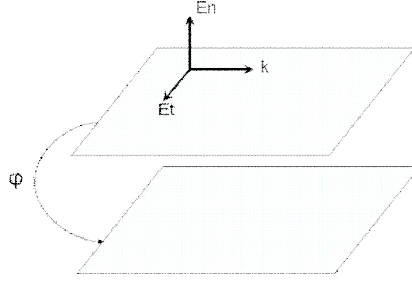


Рис. 1. Схема приложенного электрического поля

Нормальная компонента поля приводит к дополнительному слагаемому в гамильтониане (1):

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & - \sum_{j\Delta\sigma} t_{\Delta}^a (a_{j\sigma}^+ a_{j+\Delta\sigma} + a_{j+\Delta\sigma}^+ a_{j\sigma}) - \mu^a \sum_{j\Delta\sigma} a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_j a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{j-\sigma}^+ a_{j-\sigma} \\
 & - \sum_{j\Delta\sigma} t_{\Delta}^c (c_{j\sigma}^+ c_{j+\Delta\sigma} + c_{j+\Delta\sigma}^+ c_{j\sigma}) - \mu^c \sum_{j\Delta\sigma} c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_j c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} c_{j-\sigma}^+ c_{j-\sigma} - \\
 & - \sum_{j\xi\sigma} t_{\xi}^{ac} (a_{j\sigma}^+ c_{j+\xi\sigma} + c_{j+\xi\sigma}^+ a_{j\sigma}) - e\varphi \sum_{j\Delta\sigma} c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} = \\
 & - \sum_{j\Delta\sigma} t_{\Delta}^a (a_{j\sigma}^+ a_{j+\Delta\sigma} + a_{j+\Delta\sigma}^+ a_{j\sigma}) - \mu^a \sum_{j\Delta\sigma} a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_j a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{j-\sigma}^+ a_{j-\sigma} - \\
 & - \sum_{j\Delta\sigma} t_{\Delta}^c (c_{j\sigma}^+ c_{j+\Delta\sigma} + c_{j+\Delta\sigma}^+ c_{j\sigma}) - (\mu^c + e\varphi) \sum_{j\Delta\sigma} c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_j c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} c_{j-\sigma}^+ c_{j-\sigma} - \\
 & - \sum_{j\xi\sigma} t_{\xi}^{ac} (a_{j\sigma}^+ c_{j+\xi\sigma} + c_{j+\xi\sigma}^+ a_{j\sigma})
 \end{aligned} \tag{1}$$

что, в свою очередь, приводит к изменению химического потенциала одного из слоев биграфена на величину  $e\varphi$ , где  $\varphi$  – приложенная между слоями разность потенциалов;  $t_{\Delta}$  – интеграл перескока электрона;  $\mu$  – химический потенциал;  $U$  – энергия кулоновского взаимодействия электронов на одном узле,  $a_{j\sigma}^+, a_{j\sigma}, c_{j\sigma}^+, c_{j\sigma}$  – Ферми-операторы рождения и уничтожения электрона со спином  $\sigma$  в зонах  $A$  и  $C$  импульсного пространства соответственно.

Влияние тангенциальной компоненты поля на проводимость образца учитывается через изменение зонной структуры объекта.

Для расчетов использовались следующие значения параметров:  $U = 10$  эВ [6];  $E_n = 0 \div 0,3$  В/мкм;  $E_{\tau} = 0 \div 100$  В/мкм.

Из курса статистической физики тензор удельной проводимости в терминах функций Грина [3; 4] определяется формулой Кубо и имеет вид [1; 5]:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i\pi V}{k_B T} \langle\langle j_{\alpha} | j_{\beta} \rangle\rangle \tag{2}$$

где  $\langle\langle j_{\alpha} | j_{\beta} \rangle\rangle$  – запаздывающая функция Грина для плотностей токов.

Выражая плотности токов через операторы рождения и уничтожения электронов, записывая и решая уравнения движения на двухчастичные функции Грина в представлении Гейзинберга, получаем выражение для удельной проводимости двухслойной наноленты [2]:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{\alpha\beta} = & \frac{i\pi}{kT} \frac{e^2}{V} \sum_{q,\lambda} \sum_{k,\sigma} [v_{\alpha}^a(q) v_{\beta}^a(k) F_1 + v_{\alpha}^c(q) v_{\beta}^c(k) F_2 + \\
 & + (v_{\alpha}^a(q) v_{\beta}^c(k) + v_{\alpha}^c(q) v_{\beta}^a(k)) \left( \frac{F_1 + F_2}{2} + \frac{E_1 n_{ac}}{\varepsilon(k)^{ac}} \frac{ch\left(\frac{E_1}{kT}\right) + 1}{sh\left(\frac{E_1}{kT}\right)} \right) ],
 \end{aligned} \tag{3}$$

где  $k$  – константа Больцмана;  $T$  – температура;  $V$  – объем системы;  $n_{ac}$  – населенности на разных слоях графена:

$$n_{ac} = n_{ca} = -\frac{\delta_{\sigma_2} \varepsilon^{ac}}{\sqrt{E_0^2 + 4\varepsilon^{ac^2}}} \left[ \frac{1}{\exp\left(\frac{E_1}{kT}\right) + 1} - \frac{1}{\exp\left(\frac{E_2}{kT}\right) + 1} \right]. \quad (4)$$

Фурье-образы функций Грина, входящие в формулу (3), определяются следующими выражениями:

$$F_1 = 2 \left( \frac{1}{e^{\frac{\tilde{E}_1^a}{kT} + 1}} - \frac{1}{e^{\frac{\tilde{E}_2^a}{kT} + 1}} \right) \frac{ch\left(\frac{2\varepsilon(k)^a}{kT}\right) + 1}{sh\left(\frac{2|\varepsilon(k)^a|}{kT}\right)}, \quad (5)$$

$$F_2 = 2 \left( \frac{1}{e^{\frac{\tilde{E}_1^c}{kT} + 1}} - \frac{1}{e^{\frac{\tilde{E}_2^c}{kT} + 1}} \right) \frac{ch\left(\frac{2\varepsilon(k)^c}{kT}\right) + 1}{sh\left(\frac{2|\varepsilon(k)^c|}{kT}\right)}, \quad (6)$$

$$E_{1,2} = \pm \sqrt{E_0^2 + 4\varepsilon(k)^{ac^2}}, \quad (7)$$

где  $\varepsilon(k)^a$ ,  $\varepsilon(k)^c$  – дисперсионное соотношение для переходов вдоль слоев, а  $\varepsilon(k)^{ac}$  – дисперсионные соотношения для переходов между слоями.

Из рисунка 2 видно, что включение перпендикулярного поля приводит к резкому падению проводимости в области низких температур. Дополнительное приложение тангенциальной компоненты поля приводит к небольшому росту проводимости во всем температурном диапазоне. Однако рисунок 2, б показывает, что в области низких температур (менее 50 К) этот рост более значителен, что приводит к локальному минимуму в температурной зависимости. Дальнейшее увеличение тангенциальной компоненты поля возвращает систему в исходное состояние.

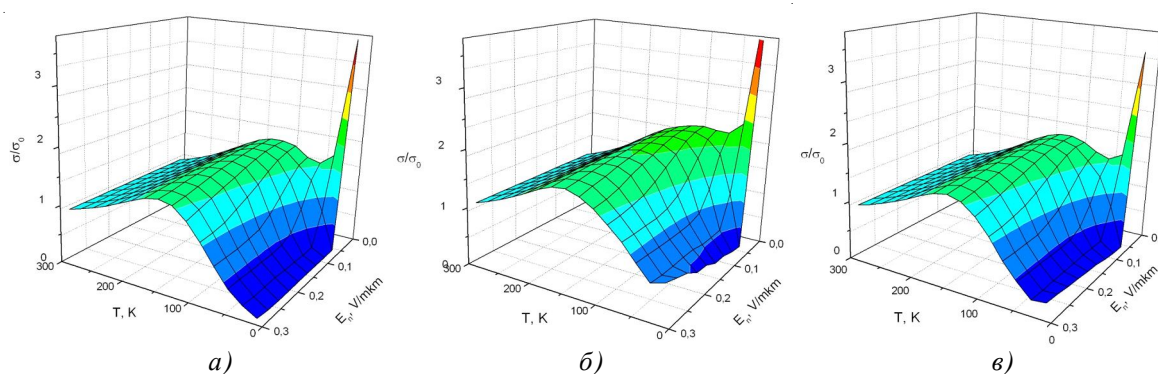


Рис. 2. Зависимость удельной проводимости двухслойной графеновой наноленты шириной  $N = 5$  гексагонов от температуры и нормальной компоненты электрического поля при значениях тангенциальной компоненты:

а)  $E_t = 0$  В/мкм; б)  $E_t = 55,2$  В/мкм; в)  $E_t = 101,2$  В/мкм

Периодическое изменение проводимости под влиянием тангенциальной компоненты поля (см. рис. 3 и 4) объясняется изменениями в зонной структуре объекта. С увеличением поля меняется ширина запрещенной зоны по периодическому закону. При нулевой ширине запрещенной зоны наблюдаются максимальные значения проводимости. Период колебаний составляет приблизительно  $E_\tau = 46$  В/мкм, а амплитуда порядка  $\sigma_0 = 0,094253$  См/м (проводимость для ширины  $N = 1$  гексагон, при температуре 300 К). Таким образом, меняя величину тангенциальной компо-

ненты электрического поля, можно управлять проводящими свойствами материала, что может быть использовано при создании новых элементов для микро- и нанoeлектроники.

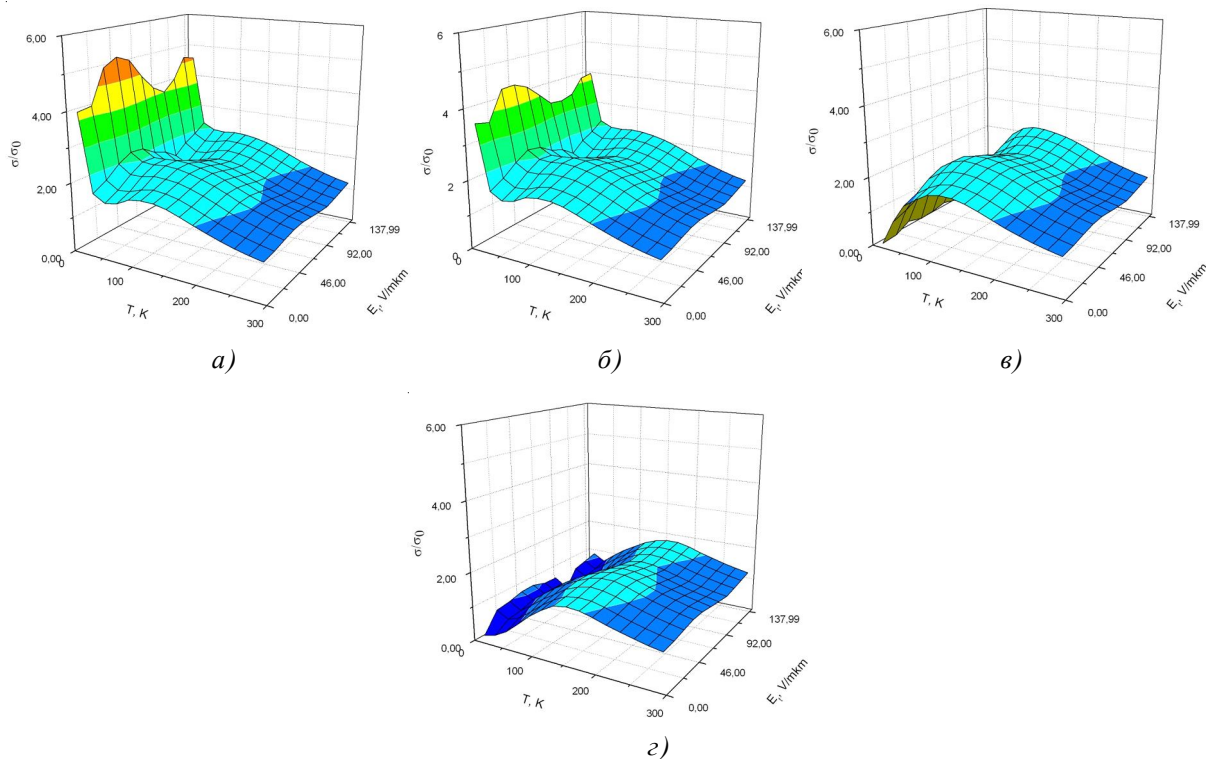


Рис. 3. Зависимость удельной проводимости двухслойной графеновой наноленты шириной  $N = 5$  гексагонов от температуры и тангенциальной компоненты электрического поля при значениях нормальной компоненты:

а)  $E_n = 0$  В/мкм; б)  $E_n = 0,003$  В/мкм; в)  $E_n = 0,03$  В/мкм; г)  $E_n = 0,3$  В/мкм

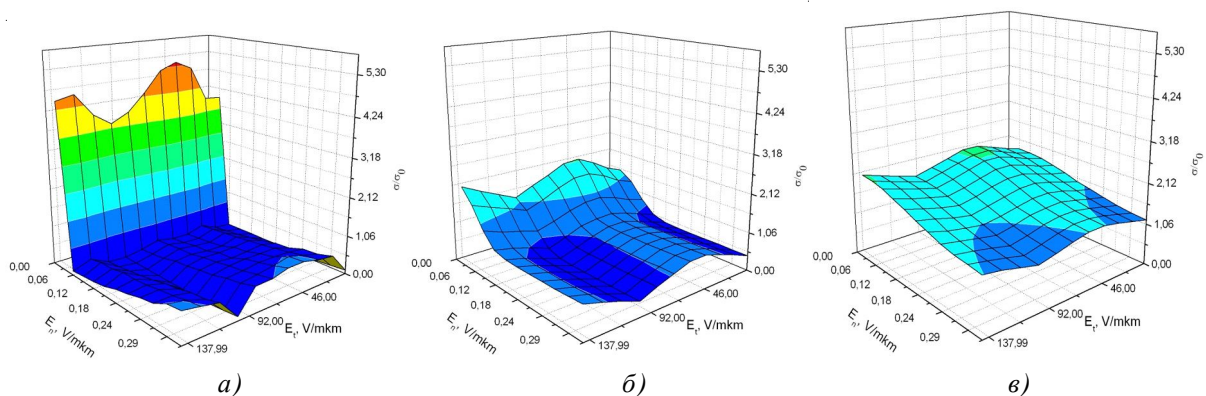


Рис. 4. Удельная проводимость двухслойной графеновой наноленты шириной  $N = 5$  гексагонов, с учетом внешнего электрического поля при температуре:

а)  $T = 10$  К; б)  $T = 50$  К; в)  $T = 100$  К

Влияние нормальной компоненты электрического поля выражается в сдвиге уровня Ферми в зону проводимости, в результате чего увеличивается количество дважды заполненных состояний, следовательно, уменьшается число носителей заряда в зоне проводимости, что приводит к уменьшению проводимости.

Дальнейший рост проводимости с увеличением перпендикулярной составляющей электрического поля является результатом накопления ошибки округления, при численном расчете проводимости, и не имеет физического обоснования.

Новый эффект выключения электропроводности двухслойного графена при низких температурах под влиянием внешнего электрического поля дает возможность использовать его как основу для создания нанотранзистора.

С увеличением ширины ленты влияние полей на проводящие свойства ослабевает, и температурная зависимость проводимости стремится к виду, характерному для графита.

### **Заключение**

Влияние нормальной компоненты электрического поля выражается в сдвиге уровня Ферми в зону проводимости, что, в свою очередь, приводит к резкому падению электропроводности в области низких температур (менее 100 К). Полученный эффект может быть использован для создания нанотранзистора на основе двухслойного графена. Влияние тангенциальной компоненты электрического поля в приближении времени релаксации приводит к периодическому изменению проводимости, что объясняется изменениями в зонной структуре объекта. Выявленная закономерность дает возможность создания элементов микро- и нанoeлектроники с переменными электронными характеристиками.

### **ПРИМЕЧАНИЕ**

<sup>1</sup> Работа проведена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (Государственный контракт № П892).

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Грантмахер, В. Ф. Электроны в неупорядоченных средах / В. Ф. Грантмахер. – М. : Физматлит, 2003. – 176 с.
2. Иванченко, Г. С. Температурная зависимость удельной проводимости бислоя графена / Г. С. Иванченко, Ю. В. Невзорова // Вестн. ВолГУ. Сер. 1, Мат. Физ. – 2010. – Вып. 13. – С. 102–106.
3. Изюмов, Ю. А. Магнетизм коллективизированных электронов / Ю. А. Изюмов. – М. : Физматлит, 1994. – 248 с.
4. Изюмов, Ю. А. Статистическая механика магнитоупорядоченных сред / Ю. А. Изюмов. – М. : Физматлит, 1987. – 264 с.
5. Имри, Й. Введение в мезоскопическую физику / Й. Имри. – М. : Физматлит, 2004. – 304 с.
6. Харрис, П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века / П. Харрис. – М. : Техносфера, 2003. – 336 с.
7. Dresselhaus, M. S. Graphite fibers and filaments / M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, K. Sugihara, I. L. Spain, H. A. Goldberg. – Berlin : Springer-Verlag, 1988. – V. 5.

## **THE CONDUCTIVITY OF A TWO-LAYER GRAPHENE NANORIBBON IN AN EXTERNAL ELECTRIC FIELD**

*G.S. Ivanchenko, Yu.V. Nevzorova*

In this work, a theoretical study of the influence of an external electric field applied as perpendicular to the graphene layers, and along them, the temperature dependence on the conductivity double layer graphene nanoribbons of method of the Green function within the limits of Huckel – Hubbard model. We will consider the strip of finite width, that is why the projection of the wave vector of the boundary conditions is imposed. As a result, the projection of the wave vector on the x-axis takes a discrete set of values for the ribbons of the zig-zag type.

**Key words:** *grapheme, electric field, zonal structure, conductivity, nanoribbon.*