

Ю.О. КРУГЛЯК,¹ М.В. СТРИХА^{2,3}¹ Одеський державний екологічний університет, факультет комп'ютерних наук
(Вул. Львівська, 15, Одеса 65016; e-mail: quantumnet@yandex.ua)² Київський національний університет імені Тараса Шевченка, факультет радіофізики,
електроніки та комп'ютерних систем
(Просп. Глушкова, 4г, Київ 03022)³ Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
(Просп. Науки, 41, Київ 03680; e-mail: maksym_strikha@hotmail.com)**УЗАГАЛЬНЕНА МОДЕЛЬ
ЛАНДАУЕРА–ДАТТА–ЛУНДСТРОМА
В ЗАСТОСУВАННІ ДО ТРАНСПОРТНИХ
ЯВИЩ У ГРАФЕНІ**

УДК 538.9, 540.145

У методичному огляді, розрахованому на науковців, викладачів та студентів вищої школи, викладено узагальнену модель транспорту електронів у режимі лінійного відгуку, яку було розвинуто Р. Ландауером, С. Датта та М. Лундстромом (модель ЛДЛ). Цю модель може бути застосовано до провідника будь-якої вимірності, будь-якого масштабу і з довільним законом дисперсії, а також для опису транспорту в балістичному, квазібалістичному або дифузійному режимі. Обговорено особливості рухливості електронів, дисипації тепла і падіння напруги в балістичних резисторах.

З позиції транспортної моделі ЛДЛ описано такі характеристики графену, як густина електронних станів і залежність концентрації носіїв струму від напруги на затворі; залежність числа мод провідності від енергії й величина максимальної провідності; різні механізми розсіяння носіїв у графені; зумовлена цим рухливість, визначена згідно з формулою Друде; циклотронна частота і ефективна маса носіїв у графені; частотні межі роботи графенового польового транзистора; функція густини фононних станів; порівняльний внесок електронів і фононів у теплопровідність графену, залежність коефіцієнта Зеебека в графені від напруги на затворі.

Ключові слова: графен, транспортні рівняння, транспортні коефіцієнти, моди провідності, циклотронна частота, ефективна маса, теплопровідність.

ЗМІСТ

1. Вступ	3	3.4. Провідність графену	19
2. Основні поняття моделі Ландауера–Датта–Лундстрома	4	3.5. Розсіяння носіїв у графені	20
2.1. Густина станів, число мод провідності, коефіцієнт проходження	4	3.6. Рухливість у графені й формула Друде	21
2.2. Режим лінійного відгуку	8	3.7. Циклотронна частота в графені	22
2.3. Від балістичної провідності до дифузійної в моделі ЛДЛ	9	3.8. Ефективна маса – загальний підхід	23
2.4. Поняття рухливості носіїв струму	11	3.9. Густина фононних станів у графені	24
2.5. Дисипація потужності й падіння напруги в балістичних резисторах	12	3.10. Вклад електронів і фононів у теплопровідність графену	25
2.6. Базові транспортні рівняння в моделі ЛДЛ	13	3.11. Максимальна провідність графену	26
3. Транспортні явища в графені в моделі ЛДЛ	14	3.12. Частотні межі для графенового польового транзистора	27
3.1. Початок “фізики графену”	14	3.13. Термоелектричні властивості графену	28
3.2. Елементарна теорія зонної структури графену	16	4. Висновки	29
3.3. Густина станів і концентрація носіїв у графені	19		

1. Вступ

У серії навчально-оглядових статей, які друкувалися в журналі “Сенсорна електроніка і мікросистемні технології”, починаючи з №4 за 2012 рік,

© Ю.О. КРУГЛЯК, М.В. СТРИХА, 2015

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. Огляди. 2015. Т. 10, № 1

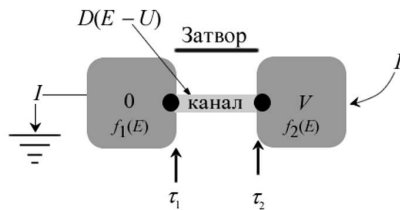


Рис. 1. Типовий електронний пристрій з контактами, що характеризуються часами прольоту τ

автори у рамках концепції “знизу–вгору” сучасної наноелектроніки розглядали фізичні основи виникнення струму в наносистемах [1], термоелектричні явища [2], основи спинтроніки [3] та застосування методу нерівноважної функції Гріна (НРФГ) до транспортних задач [4, 5], класичний та квантовий ефекти Холла [6], спіновий ефект Холла [7], роль квантової інтерференції та дефазування [8], роль електростатики і контактів [9], рівноважну термодинаміку провідника зі струмом [10]. Проте реальний стан викладання в українських вишах на спеціалізаціях фізичного й інженерного профілю, який дуже часто зводиться до використання традиційних, десятиліттями ustalених концепцій, зумовлює необхідність глибшого ознайомлення вітчизняних викладачів, аспірантів і студентів із сучасною концепцією викладання фізики наносистем, автором якої є професор Супрійо Датта (Supriyo Datta), сформульованою в рамках ініціативи Purdue University/nanoHUB-U [www.nanohub.org/u] і до певної міри альтернативною традиційній, що має за відправну точку розгляд аналогічних явищ у великих об’ємних провідниках.

Тому ми розглянемо у цій статті основи моделі електронного транспорту Ландауера–Датта–Лундстрома (ЛДЛ), яка вже знайшла широке застосування при аналізі як електронного, так і фононного транспорту не тільки в режимі лінійного відгуку, а й у високовольтному режимі гарячих електронів, для нелокального і квантового транспорту, транспорту в неупорядкованих і наноструктурованих матеріалах, у резисторах як нанорозмірних, так і довгих чи об’ємних. Основи цієї моделі було закладено в піонерських працях Р. Ландауера, який задовго до появи реальних низьковимірних провідників передбачив квантування електричної провідності [11, 12]. Згодом запропонований Р.Ландауером підхід було розвину-

то С. Датта [13–15] і М. Лундстромом [16, 17] щодо найрізноманітніших матеріалів і систем.

Виклад основ цієї моделі для електронного і фононного транспорту зроблено нами в роботах [18–22]. Використовуючи методологію перелічених вище робіт, у другій частині статті ми покажемо, як узагальнена модель ЛДЛ описує транспортні явища в графені – ідеальному 2D-матеріалі, дослідження якого інтенсивно триває впродовж останнього десятиліття. Ми побачимо, як застосування цієї моделі приводить до наочного і несуперечливого пояснення особливостей транспортних явищ у цьому матеріалі з лінійним спектром ферміонів, які було складно зрозуміти, базуючись на традиційних уявленнях на основі моделі Друде. Необхідність такої статті посилюється тим, що на сьогодні, попри величезну кількість присвяченої графену літератури, фактично відсутній послідовний виклад фізики основних транспортних явищ у графені на рівні, доступному для інженерів і фахівців із суміжних галузей.

2. Основні поняття моделі

Ландауера–Датта–Лундстрома

2.1. Густина станів, число мод провідності, коефіцієнт проходження

Центральне місце в типовому сучасному електронному пристрої відіграє канал провідності, який характеризується густиною станів $D(E - U)$, де E – енергія станів провідника, а U – самоузгоджений електростатичний потенціал затвора, що дозволяє зміщувати стани вниз або вгору за шкалою енергії (рис. 1).

Спершу ми розглядатимемо випадок $U = 0$. Канал провідності перебуває між двома “ідеальними” контактами (витоком і стоком), які здатні до швидкого відновлення рівноваги в процесі електронного транспорту, і які характеризуються фермівськими функціями

$$f_1(E) = \frac{1}{e^{(E - E_{F1})/kT} + 1} \quad (1a)$$

та

$$f_2(E) = \frac{1}{e^{(E - E_{F2})/kT} + 1} \quad (1b)$$

з відповідними електрохімічними потенціалами E_{F1} і E_{F2} . При прикладенні напруги V на стік електрохімічний потенціал E_{F2} знижується щодо

потенціалу E_{F1} на величину qV (q – заряд електрона). Відтак стани контакту 1 в енергетичному проміжку $E_{F1} - E_{F2}$ прагнуть наповнити канал провідника електронами, а стани контакту 2 у тому самому проміжку – прагнуть спустошити його. Це значить, що в колі з'являється електричний струм. При цьому зауважмо: для з'ясування причини цього струму нам поки не знадобилося поняття напруженості електричного поля, яке діє на електрони, змушуючи їх рухатися між контактами.

Канали провідності характеризуються часами прольоту τ , які дають уявлення про те, як швидко електрони можуть залишати контакт або провідник. Для нанорозмірних резисторів, наприклад, молекул, часи τ контролюються контактами. Для довгих резисторів із добрими контактами (роль контактів докладно обговорено нами в [9]), як ми пересвідчимось пізніше, часи τ стають зіставними з часом прольоту всієї довжини каналу провідника. В загальному випадку якість двох контактів може бути різною, що призводить до різних значень τ_1 і τ_2 , проте ми без втрати загальності користуватимемося в цій статті єдиним часом τ , який інколи наочніше зображати в енергетичних одиницях $\gamma = \hbar/\tau$. Якщо каналом провідності є одна молекула, величина γ набуває простого фізичного змісту розширення енергетичних рівнів молекули за рахунок скінченності часу життя електронів на молекулярних рівнях.

Вважаємо, що канал має зонну структуру, описувану законом дисперсії $E(k)$. Ця вимога, однак, не є обов'язковою [14]. Обговорення обмежень і застосовності моделі ЛДЛ можна знайти в роботах [13–17].

У роботах [18, 20] показано, як одержати два основні рівняння транспортної моделі ЛДЛ:

$$N = \int \frac{D(E)}{2} (f_1 + f_2) dE, \quad (2)$$

$$I = \frac{2q}{h} \int \gamma(E) \pi \frac{D(E)}{2} (f_1 - f_2) dE. \quad (3)$$

Перше з них виражає число електронів у провіднику в стані динамічної рівноваги через густина електронних станів провідника і фермівські функції контактів, а друге визначає струм через ці ж характеристики плюс характеристичний час прольоту, який входить у параметр $\gamma = \hbar/\tau$. Обидва ці вирази фізично цілком зрозумілі: концентрацію визначає густина станів і ступінь її заповнення носіями з

двох контактів. Натомість диференціальний струм носіїв з певною енергією E пропорційний частці від ділення заряду електрона на час прольоту провідника, помноженій на число електронів, які зумовлюють цей струм, яке, в свою чергу, пропорційне добуткові щільності станів і різниці функцій розподілу на лівому контакті (який наповнює канал електронами), і на правому (який цей канал спустошує); а повний струм визначається інтегралом від диференціального струму за всіма можливими енергіями. Важливо, що вираз (3) знов-таки не містить електричного поля, яке звикли вважати причиною струму в макроскопічній фізиці і яке є базовим у традиційній моделі Друде (докладніше про це див. [1]). Ця обставина – вельми суттєва, оскільки неможливо коректно оперувати як базовим поняттям зовнішнього електричного поля на наномасштабах, де відсутня трансляційна симетрія і неочевидно, як проводити усереднення полів, створених атомними потенціалами.

Дальша побудова моделі ЛДЛ фактично зводиться до використання й розвитку цих двох основних рівнянь. Для початку поставимо питання: який фізичний зміст має добуток $\gamma\pi D/2$ у виразі (3). Параметр γ має вимірність енергії, а вимірність щільності станів D – це обернена енергія, тож добуток $\gamma\pi D/2$ безвимірний. Звернімо увагу на те, що ми поки оперуємо поняттям числа електронів (2), а не електронної концентрації, як це зазвичай роблять у фізиці напівпровідників. Тому густина станів у нас має вимірність (енергія)⁻¹, а не (енергія · об'єм)⁻¹, як цю величину зазвичай вводять для 3D-зразка.

Зараз ми переконаємося, що добуток $\gamma\pi D/2 = M(E)$ має фізичний зміст числа мод (чи, інакше, каналів) провідності резистора.

Розгляньмо 2D балістичний резистор (тобто резистор, який електрон проходить без розсіяння), витягнутий вздовж осі x , з довжиною L , меншою від середньої довжини вільного пробігу λ , і з шириною W уздовж осі y . Повна густина станів у ньому дорівнює:

$$D(E) = D_{2D}(E) LW, \quad (4)$$

$$D_{2D}(E) = g_v \frac{m^*}{\pi \hbar^2}, \quad (5)$$

де D_{2D} – густина станів на одиницю площі, отримана для параболічного спектра електронів $E(k) =$

$E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ з ефективною масою m^* і долинним виродженням g_v (див., наприклад, [23]). Визначимо характеристичний час τ як

$$\tau(E) = \frac{L}{\langle v_x^+(E) \rangle}, \quad (6)$$

що є просто середнім часом прольоту електрона через усю довжину пружного (такого, який електрон проходить без розсіяння) резистора. Для оцінки τ потрібно обчислити середню швидкість прольоту від контакту 1 до контакту 2 в напрямку $+x$ (додатним ми вважаємо напрям від виток до стоку). Ця швидкість у випадку балістичного транспорту, тобто без зміни напрямку руху, дорівнює:

$$\langle v_x^+(E) \rangle = v(E) \langle \cos \theta \rangle, \quad (7)$$

де кут θ відраховано від додатного напрямку осі x . Оскільки в нашому випадку

$$\langle \cos \theta \rangle = \frac{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \theta d\theta}{\pi} = \frac{2}{\pi}, \quad (8)$$

то для середньої швидкості у випадку параболічного дисперсійного співвідношення та ізотропії швидкості маємо:

$$\langle v_x^+(E) \rangle = \frac{2}{\pi} v = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2(E - E_C)}{m^*}}. \quad (9)$$

Визначаючи число мод провідності як

$$M(E) = \gamma(E) \pi \frac{D(E)}{2}, \quad (10)$$

використовуючи визначення $\gamma = \hbar/\tau$ і густини станів для 2D-провідника з (4), одержуємо для числа мод вираз, який запишемо нижче разом з аналогічними виразами для 1D- та 3D-провідників:

$$\begin{aligned} M(E) &= M_{1D}(E) = \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{1D}(E), \\ M(E) &= M_{2D}(E) = W \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E), \\ M(E) &= M_{3D}(E) = A \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{3D}(E). \end{aligned} \quad (11)$$

Звернімо увагу на те, що у випадку 2D-провідника число мод провідності пропорційне ширині провідника W , а для 3D-провідника – площі поперечного перерізу A .

Заслуговує на увагу фізичний зміст отриманих результатів (11). Так, для 2D провідника з урахуванням (5) і (9) число мод провідності:

$$M_{2D}(E) = g_v W \frac{\sqrt{2m^*(E - E_C)}}{\pi \hbar}. \quad (12)$$

Для часткового випадку параболічного закону дисперсії, записуючи хвильовий вектор через де-бройлівську довжину хвилі

$$k = 2\pi/\lambda_B, \quad (13)$$

перепишемо (12) як:

$$M_{2D}(E) = g_v \frac{Wk}{\pi} = g_v \frac{W}{\lambda_B(E)/2}. \quad (14)$$

З цього виразу стає зрозумілим фізичний зміст поняття: число мод провідності 2D-провідника (з урахуванням долинного виродження) показує, скільки півдовжин де-бройлівської хвилі, що відповідає енергії E , вкладається на ширині 2D-провідника. Цілочисельність числа мод забезпечується крайовими умовами, згідно з якими хвильові функції електронів на обох краях 2D-провідника повинні перетворюватися на нуль (отже, коректно говорити про число мод як про цілочисельну частину (14)). Сам термін “моди” запозичено з теорії хвилеводів.

Таким чином, з вигляду (2), (3) випливає, що для обчислення числа електронів і струму в провіднику, окрім фермівських функцій контактів, потрібно знати густину станів $D(E)$ і число мод $M(E)$ провідника.

Для параболічного закону дисперсії вирази для густини станів добре відомі [23]:

$$D_{1D}(E)L = \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{(E - E_C)}} H(E - E_C), \quad (15)$$

$$D_{2D}(E)A = A \frac{m^*}{\pi \hbar^2} H(E - E_C), \quad (16)$$

$$D_{3D}(E)\Omega = \Omega \frac{m^* \sqrt{2m^*(E - E_C)}}{\pi^2 \hbar^3} H(E - E_C), \quad (17)$$

де $H(E - E_C)$ – східчаста функція Хевісайда, а відповідні моди провідності записуються з урахуванням (11) як:

$$M_{1D}(E) = H(E - E_C), \quad (18)$$

$$M_{2D}(E) = g_v \frac{\sqrt{2m^*(E - E_C)}}{\pi \hbar} H(E - E_C), \quad (19)$$

$$M_{3D}(E) = g_v \frac{m^*(E - E_C)}{2\pi \hbar^2} H(E - E_C). \quad (20)$$

Поведінку густини станів $D(E)$ і числа мод $M(E)$ для 1D-, 2D- та 3D-провідників з параболічним законом дисперсії якісно зображено на рис. 2.

Густина станів для 1D-провідника обернено пропорційна \sqrt{E} , для 2D провідника вона стала, для 3D – прямо пропорційна \sqrt{E} . Щодо мод провідності, то 1D-провідник характеризується єдиною модою провідності, яка дорівнює функції Хевісайда, що дозволяє визначити її калібрування для використання її у формулах (19), (20). Число ж мод 2D-провідника прямо пропорційне \sqrt{E} , а 3D-провідника – зростає з енергією лінійно.

Досі ми розглядали балістичний транспорт. Перейдімо до розгляду дифузійного транспорту, коли $L \gg \lambda$. Електрони, інжектвані контактами 1 і 2, здійснюють випадкові блукання. Деякі з них приводять носії в кінцевому підсумку на контакт 1, інші – на контакт 2. Якщо до контакту 2 прикладено позитивний потенціал, то переважна частина електронних блукань закінчуватиметься саме на цьому контакті.

Ключовим параметром у моделі ЛДЛ є величина $\gamma\pi D(E)/2$, яка в випадку балістичного транспорту виявляється рівною числу мод провідності $M(E)$. Енергетичне розширення γ і час прольоту τ пов'язані між собою: $\gamma = \hbar/\tau$. У режимі дифузійного транспорту природно очікувати збільшення часу τ , що тягне за собою зменшення величини $\gamma\pi D(E)/2$. Далі ми покажемо, що у випадку дифузійного транспорту $\gamma\pi D(E)/2 = M(E)T(E)$, де величина $T(E) \leq 1$ отримала назву коефіцієнта проходження (transmission coefficient). Отже, наше завдання зараз – оцінити $\langle \tau(E) \rangle$ у режимі дифузійного транспорту.

Скористаємося першим законом дифузії Фіка до потоку електронів у 2D провіднику:

$$J = q\bar{D} \frac{dn_S}{dx}, \quad (21)$$

де густина струму J пропорційна градієнтові поверхневої 2D концентрації електронів з коефіцієнтом дифузії \bar{D} як коефіцієнтом пропорційності.

Нехай електрони у провідник постачає тільки контакт 1, тобто $f_1 \approx 1$, а $f_2 \approx 0$. На лівому кінці

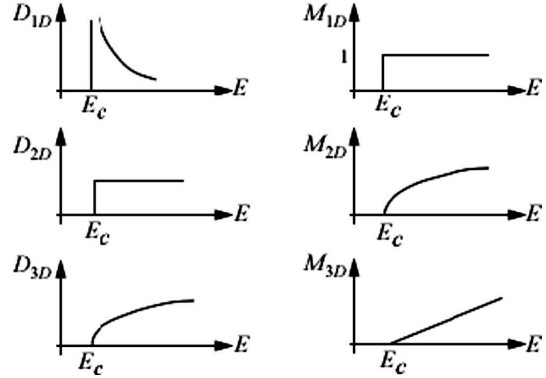


Рис. 2. Густина станів $D(E)$ і число мод $M(E)$ для 1D-, 2D- і 3D-провідників з параболічним законом дисперсії

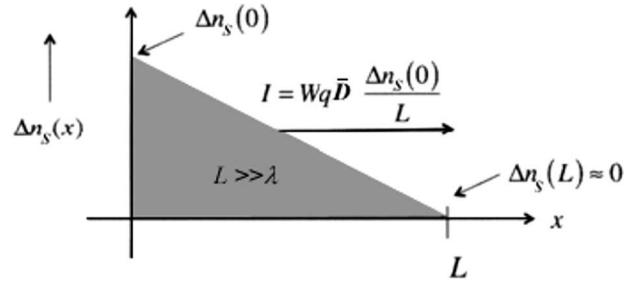


Рис. 3. До виведення часу прольоту τ_D в дифузійному режимі

провідника ($x = 0$) є ненульова концентрація електронів $\Delta n_S(0)$ (рис. 3).

Оскільки ми не враховуємо процеси рекомбінації/генерації носіїв струму, то профіль концентрації електронів на всій довжині провідника буде лінійним з практично нульовим значенням концентрації на правому кінці провідника: $\Delta n_S \rightarrow 0$ за рахунок $f_2 \approx 0$. Час прольоту, за загальним визначенням, є відношенням накопиченого у провіднику заряду до струму:

$$\tau_D = \frac{qN}{I} = \frac{Wq\Delta n_S(0)L/2}{Wq\bar{D}\Delta n_S(0)/L} = \frac{L^2}{2\bar{D}}, \quad (22)$$

де накопичений у провіднику заряд qN – половина площі прямокутника (рис. 3), побудованого для 2D-провідника з довжиною L й шириною W , а струм $I = JW$ і, згідно з (21), $dn_S/dx = \Delta n_S(0)/L$. Таким чином, час прольоту в дифузійному режимі дорівнює

$$\tau_D = \frac{L^2}{2\bar{D}}. \quad (23)$$

З урахуванням цього виразу маємо:

$$\gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2} = \frac{\hbar}{\tau_D} \pi \frac{D(E)}{2} = \frac{\hbar}{\tau_B} \pi \frac{D(E)}{2} \frac{\tau_B}{\tau_D} \equiv M(E)T(E), \quad (24)$$

де введено коефіцієнт проходження, який є співвідношенням двох часів прольоту – в балістичному режимі й у дифузійному:

$$T(E) = \frac{\tau_B}{\tau_D}. \quad (25)$$

Іншими словами, за наявності розсіяння число мод $M(E)$ у виразах (2), (3) слід замінити на добуток $M(E)T(E)$. Підставивши в (24) вирази (6) і (23), одержимо:

$$T(E) = \frac{2\bar{D}}{L\langle v_x^+ \rangle}. \quad (26)$$

Спираючись на теорію випадкових блукань (див., наприклад, [24]), можна показати, що коефіцієнт дифузії записується через середню швидкість і довжину вільного пробігу λ як

$$\bar{D} = \frac{\langle v_x^+ \rangle \lambda}{2}, \quad (27)$$

що разом з (23) дає простий вираз для коефіцієнта проходження:

$$T(E) = \frac{\lambda}{L} \ll 1. \quad (28)$$

Як і слід було очікувати, коефіцієнт проходження в дифузійному режимі малий.

Вираз (28) справедливий для дифузійного режиму. Можна показати [13], що в загальному випадку коефіцієнт проходження

$$T(E) = \frac{\lambda(E)}{\lambda(E) + L}. \quad (29)$$

Цей вираз справедливий як для дифузійного режиму ($L \gg \lambda$), так і для балістичного ($L \ll \lambda$, тоді він прямує до одиниці), а також для проміжних випадків.

Тож у загальному випадку має місце співвідношення:

$$\gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2} = M(E)T(E), \quad (30)$$

в якому число мод визначається загальними виразами (11), а коефіцієнт проходження може відповідати трьом різним експериментальним режимам:

$$\begin{aligned} \text{Дифузійний:} & \quad L \gg \lambda; \quad T = \lambda/L \ll 1. \\ \text{Балістичний:} & \quad L \ll \lambda; \quad T \rightarrow 1. \\ \text{Квазібалістичний:} & \quad L \approx \lambda; \quad T < 1. \end{aligned} \quad (31)$$

Важливо, що порівняно просту транспортну модель ЛДЛ можна застосувати до всіх трьох режимів.

2.2. Режим лінійного відгуку

З урахуванням (3), (30), для струму в моделі ЛДЛ отримано два тотожні вирази:

$$\begin{aligned} I &= \frac{2q}{h} \int \gamma(E)\pi \frac{D(E)}{2} (f_1 - f_2) dE, \\ I &= \frac{2q}{h} \int T(E)M(E) (f_1 - f_2) dE. \end{aligned} \quad (32)$$

Слід пам'ятати: при виведенні (32) ми фактично використовували наближення не надто високих напруг. Адже, якщо подати на провідник напругу, вищу від певного критичного значення, то внаслідок появи великої кількості непружних зіткнень у режимі гарячих електронів застосована нами модель незалежних мод провідності перестане працювати. Надалі ми запишемо вирази моделі ЛДЛ для режиму лінійного відгуку, що дозволить суттєво спростити їх порівняно з (32).

У режимі лінійного відгуку, або ж лінійного транспорту чи майже рівноважного транспорту (near-equilibrium transport) обидві функції $f_1(E)$, $f_2(E)$ мало відрізняються від рівноважної функції $f_0(E)$ з енергією Фермі E_{F0} . При цьому вважаємо, що напруга, яка подається на контакти,

$$V = \Delta E_F / q = (E_{F1} - E_{F2}) / q, \quad (33)$$

настільки невелика, що фермівську функцію контакту 2 можна розкласти в ряд Тейлора за величиною ΔE_F , обмежившись лінійним членом розкладу:

$$f_2 = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial E_F} \Delta E_F = f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial E_F} qV. \quad (34)$$

Враховуючи очевидну властивість фермівської функції

$$\left(\frac{\partial f}{\partial E_F} \right)_{E_F=E_{F0}} = \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right)_{E_F=E_{F0}}, \quad (35)$$

остаточно для різниці фермівських функцій контактів у режимі лінійного відгуку маємо:

$$f_1 - f_2 = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) qV. \quad (36)$$

Звідси для струму (32) і провідності в режимі лінійного відгуку одержуємо:

$$I = \left[\frac{2q^2}{h} \int T(E)M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \right] V = GV, \quad (37)$$

$$G = \frac{2q^2}{h} \int T(E)M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (38)$$

де другий вираз відомий як формула Ландауера для провідності.

Отже, ми отримали вираз для провідності, де її зв'язано з властивостями матеріалу провідника. Вирази (37) і (38) справедливі для 1D-, 2D- і 3D-провідників як у балістичному режимі, так і в дифузійному, якщо використати відповідні формули для числа мод (11).

2.3. Від балістичної провідності до дифузійної в моделі ЛДЛ

Розгляньмо електричну провідність у моделі ЛДЛ для 1D-, 2D- і 3D-провідників, починаючи з дуже коротких балістичних резисторів, потім перейдемо до звичайних резисторів, які працюють у дифузійному режимі, а надалі зупинимося на проміжних режимах. В 1D-провіднику (“нанодріт”) завдовжки L електрони можуть квазікласично переміщуватися тільки вздовж однієї осі, в 2D-провіднику (“нанояма”) завширшки W – вздовж двох осей, у 3D-провіднику з площею перерізу A – електрони квазікласично рухаються вздовж усіх трьох декартових осей.

Згідно із загальноприйнятою домовленістю [1, 13], опір R і його питоме значення ρ для провідників усіх трьох вимірностей запишемо так:

$$R_{1D} = \rho_{1D}L; \quad \rho_{1D} = \frac{1}{n_L q \mu}, \quad (39)$$

$$R_{2D} = \rho_{2D} \frac{L}{W}; \quad \rho_{2D} = \frac{1}{n_S q \mu}, \quad (40)$$

$$R_{3D} = \rho_{3D} \frac{L}{A}; \quad \rho_{3D} = \frac{1}{n q \mu}, \quad (41)$$

де μ – рухливість електронів, а n_L , n_S і n – концентрація електронів для провідників вимірності 1D, 2D і 3D, співвіднесена до їх довжини, площі й об'єму відповідно. Тому питомий опір має різну вимірність залежно від вимірності провідника. Такий запис фізично цілком коректний: у всіх випадках опір пропорційний довжині провідника, а для 2D-і 3D-провідників – ще й обернено пропорційний, відповідно, ширині W і площі A поперечного перерізу провідника, оскільки збільшення W та A фізично еквівалентне паралельному з'єднанню провідників. І, разом із цим, ми побачимо, що вирази (39)–(41) не завжди коректні: несподіванки зустрічаються навіть у таких простих на позір пристроях, якими є резистори різної вимірності.

Формула Ландауера для провідності (38) буде для нас вихідною точкою; вона справедлива для провідників будь-якої вимірності, якщо тільки використано коректні вирази для числа мод провідності $M(E)$.

Розгляньмо 2D-провідник, провідність якого запишемо через питому провідність σ_S у вигляді

$$G = \frac{1}{\rho_{2D}} \frac{W}{L} = \sigma_S \frac{W}{L}. \quad (42)$$

Можна пересвідчитися [1], що в масивних і довгих 2D-провідниках, які працюють у дифузійному режимі, питома поверхнева провідність не залежить від ширини W і довжини L провідника, натомість для коротких провідників σ_S починає залежати від довжини провідника, а для вузьких провідників провідність зростає зі збільшенням їхньої ширини східчато.

Основну увагу ми приділимо 2D-провідникам, хоч схожі міркування й викладки можна провести й для 1D- та 3D-провідників. У балістичних 2D резисторах коефіцієнт проходження $T(E) = 1$, а число мод провідності в (38), згідно з (11), $M(E) = WM_{2D}(E)$. Розгляньмо докладніше множник $(-\partial f_0/\partial E)$ у формулі Ландауера, який отримав назву “фермівського вікна провідності”.

На рис. 4 якісно зображено графік функції Фермі $f_0(E)$ і функції $(-\partial f_0/\partial E)$ в залежності від енергії E .

Ми бачимо, що функція $(-\partial f_0/\partial E)$ суттєво відмінна від нуля тільки в околі $\sim \pm 2kT$ поблизу енергії Фермі E_F . Площа під цією кривою дорівнює одиниці, тож для низьких температур фермівське

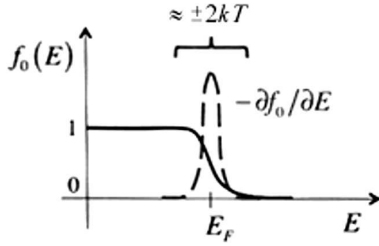


Рис. 4. Фермівське вікно провідності

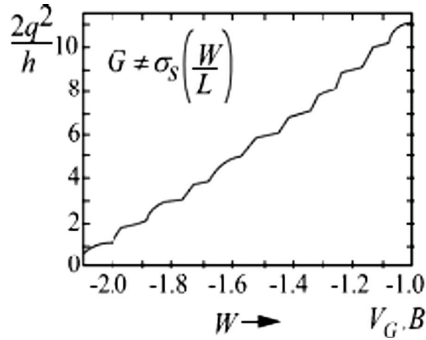


Рис. 5. Квантування провідності електронного газу в інтерфейсі $\text{AlAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [25]

вікно провідності можна записати через дельта-функцію:

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} \approx \delta(E - E_F). \quad (43)$$

Використовуючи (43) і $T(E) = 1$, з формули Ландауера (38) отримуємо вираз для балістичної провідності

$$G^{\text{ball}} = \frac{2q^2}{h} M(E_F), \quad (44)$$

який є загальним і справедливим для резисторів будь-якої вимірності. Якщо число мод невелике, то його можна встановити з експериментальних вимірювань, і тоді провідність і, відповідно, опір не можуть набувати довільних значень, а квантуються згідно з

$$R^{\text{ball}} = \frac{h}{2q^2} \frac{1}{M(E_F)} = \frac{12,9}{M(E_F)} [\text{кОм}]. \quad (45)$$

Величину $R = \frac{h}{q^2} = 25,812807572$ кОм називають сталою Клітцинга на честь ученого, який, відкривши 1980 р. цілочисельний квантовий ефект Холла, вперше виявив можливість квантування

опору. У 1998 році саме це значення було оголошено Міжнародним консультативним комітетом еталонним для визначення електричного опору. Наголосимо на важливій обставині: опір у балістичному режимі не залежить від довжини провідника. Це є фізично очікуваним результатом: лінійна залежність опору від L у виразах (39)–(41) є наслідком припущення про дифузійний характер руху електронів, яке було використано “за умовчужанням”, і за якого довший провідник означає більшу міру розсіяння. Натомість балістичний резистор електрон проходить без розсіяння взагалі.

Той факт, що опір квантується, надійно встановлено експериментально [25]. В класичних експериментах де Віза і колег ширина резистора W (1D-каналу провідності у квантовій ямі $\text{AlAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) контролювалася електростатичною напругою на затворі V_G (достатньо велика негативна напруга на затворі взагалі “закриває” канал для електронів, і провідність стає рівною нулю). Балістичний режим транспорту забезпечувався низькою температурою. Зі зменшенням негативної напруги на затворі й відповідним збільшенням ширини резистора провідність зростає сходинками (рис. 5) відповідно до формули (44).

Відзначимо, що східчастий характер провідності в сучасних експериментах спостерігається навіть при кімнатних температурах завдяки проведенню вимірювань на нанорезисторах, де балістичний режим транспорту зумовлений вже не низькою температурою, а малими лінійними розмірами резистора між контактами 1 і 2.

Перейдімо від розгляду балістичного 2D транспорту з коефіцієнтом проходження $T(E) = 1$ до дифузійного транспорту з $T(E) = \lambda(E)/L$.

Формулу Ландауера (38) перепишемо з урахуванням (11) для 2D резистора в дифузійному режимі, а саме:

$$G_{2D}^{\text{diff}} = \frac{2q^2}{h} \frac{W}{L} \int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (46)$$

Поява множника W/L узгоджується з традиційним визначенням (40) опору 2D провідника. В моделі ЛДЛ пропорційність провідності ширині резистора W пояснюється тим, що число мод провідності 2D-провідника має бути пропорційне його ширині, а обернена пропорційність довжині провідника L спричинена дифузійним режимом.

Для низьких температур вираз (46) суттєво спрощується за рахунок звуження фермівського вікна провідності (43), тож можна відразу записати

$$G_{2D}^{\text{diff}} = \frac{2q^2}{h} \frac{W}{L} M_{2D}(E_F) \lambda(E_F) = \frac{\lambda(E_F)}{L} G_{2D}^{\text{ball}}, \quad (47)$$

де балістична провідність визначається виразом (44). Якщо відома довжина вільного пробігу λ , то провідність у дифузійному режимі можна вирахувати через її значення в балістичному режимі.

Вище ми обговорили провідність в області низьких температур окремо для балістичного, й окремо для дифузійного режиму. Однак можна розглянути весь спектр режимів при переході від балістичного до дифузійного. Використавши загальний вираз для коефіцієнта проходження (29), одержимо

$$\begin{aligned} G_{2D} &= \frac{2q^2}{h} W M_{2D}(E_F) \frac{\lambda(E_F)}{\lambda(E_F) + L} = \\ &= \frac{\lambda(E_F)}{\lambda(E_F) + L} G_{2D}^{\text{ball}}, \end{aligned} \quad (48)$$

а для опору маємо

$$R_{2D} = \left(1 + \frac{L}{\lambda(E_F)}\right) R_{2D}^{\text{ball}}. \quad (49)$$

Отриманий результат свідчить про те, що при низьких температурах опір 2D резистора в дифузійному режимі пропорційний довжині провідника, а в балістичному режимі – від довжини провідника не залежить.

2.4. Поняття рухливості носіїв струму

Традиційно обговорення опору провідників починають з визначень (39)–(41), які, однак, не можна застосувати до резисторів, які працюють у балістичному, чи квазібалістичному режимі. У цих режимах не зовсім зрозуміло, що означає рухливість носіїв струму. Транспортна модель ЛДЛ має за відправний пункт формулу Ландауера (38), й тому вона застосовна для всіх транспортних режимів, від балістичного до дифузійного, включаючи всі проміжні випадки. В рамках моделі ЛДЛ взагалі немає потреби звертатися до поняття рухливості. Проте це поняття й донині широко застосовують, попри те, що в окремих випадках воно призводить до непорозумінь. Так, вирази (39)–(41) стверджують, що провідність пропорційна добутковій концентрації електронів і рухливості, тоді як, згідно

з формулою Ландауера (38), провідність визначають тільки ті електрони, енергія яких потрапляє в фермівське вікно провідності ($-\partial f_0/\partial E$). Для напівпровідників n -типу це можуть бути всі електрони в зоні провідності (випадок невідроджених напівпровідників), а може бути й тільки мала їх частина (вироджені напівпровідники). Тому слід обговорити межі застосовності поняття рухливості в рамках концепції ЛДЛ.

Прирівняємо провідність за формулою Ландауера (38) і провідність 2D провідника за виразом (40):

$$G_{2D} = \frac{2q^2}{h} \int T(E) M(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE \equiv n_S q \mu \frac{W}{L}. \quad (50)$$

Звідси формальну рухливість для 2D резистора можна записати як:

$$\mu_{2D}^{\text{app}} \equiv \frac{2q}{h} \frac{1}{n_S} \int T(E) L M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE. \quad (51)$$

Цей вираз ми візьмемо як визначення рухливості, яке, таким чином, сильно відрізняється від того визначення, яке виникає в моделі Друде:

$$\mu = \frac{q\tau}{m^*}, \quad (52)$$

де τ – середній час розсіяння, або інакше, час релаксації імпульсу (m^* – ефективна маса носіїв заряду). Ми називаємо рухливість (51) формальною, бо це визначення (51) застосовне як для балістичної рухливості, так і для дифузійної. Наприклад, поклавши коефіцієнт проходження $T(E) = 1$, для балістичної рухливості одержуємо

$$\mu_{2D}^{\text{ball}} \equiv \frac{2q}{h} \frac{1}{n_S} \int L M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE; \quad (53)$$

аналогічно, поклавши $T(E) = \lambda(E)/L$, отримаємо вираз для дифузійної рухливості:

$$\mu_{2D}^{\text{diff}} \equiv \frac{2q}{h} \frac{1}{n_S} \int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE. \quad (54)$$

Концепцію балістичної рухливості ввів у обіг Шур [26]; вона виявилася корисною для аналізу різних електронних пристроїв. Порівнюючи вирази (53) і (54), ми бачимо, що дифузійна рухливість відрізняється від балістичної тільки заміною середньої довжини вільного пробігу на просто довжину балістичного резистора. Така заміна фізично виглядає цілком умотивовано. Адже рівновага в контактах досягається швидко за рахунок інтенсивних

процесів розсіяння. Електрон, інжектований у балістичний канал витоком, брав участь у розсіянні у витоку, а наступного разу розсіявся, вже потрапивши у стік. Відстань між цими подіями – якраз і є довжиною резистора L , що й відіграє роль довжини вільного пробігу електрона. А в дифузійному випадку такою довжиною очевидно є $\lambda(E)$.

Проблеми в нанoeлектроніці виникають в області, проміжній між балістичним і дифузійним граничними режимами. В цій області коефіцієнт проходження визначається виразом (20) і можна показати [27], що для формальної рухливості має місце таке співвідношення:

$$\frac{1}{\mu^{\text{app}}} = \frac{1}{\mu^{\text{diff}}} + \frac{1}{\mu^{\text{ball}}}. \quad (55)$$

Воно схоже на традиційне правило Матіессена [28], що відбиває фундаментальну фізичну обставину: сумарна обернена довжина вільного пробігу електрона дорівнює сумі обернених довжин вільного пробігу щодо всіх можливих механізмів розсіяння. Тому по-інакшому можемо запровадити в (54) формальну довжину вільного пробігу як:

$$\frac{1}{\lambda^{\text{app}}} = \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{L}. \quad (56)$$

Отже, в граничних випадках формальна довжина вільного пробігу переходить або в реальну середню довжину вільного пробігу (дифузійний режим), або ж у довжину резистора (балістичний режим).

При $T = 0$ похідні від формули Ландауера (38) інтеграли легко беруться завдяки виразу (43). Однак при ненульових температурах інтеграл (56) потрібно вираховувати дещо складніше. Діятимо далі так: помноживши й розділивши його на

$$\langle M_{2D} \rangle \equiv \int M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (57)$$

перепишемо (56) як:

$$G_{2D}^{\text{diff}} = \frac{2q^2}{h} \langle W M_{2D} \rangle \frac{\langle \langle \lambda \rangle \rangle}{L} = \frac{\langle \langle \lambda \rangle \rangle}{L} G_{2D}^{\text{ball}}, \quad (58)$$

де усереднене значення довжини вільного пробігу визначається як

$$\langle \langle \lambda \rangle \rangle = \frac{\int \lambda(E) M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int M_{2D}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE} = \frac{\langle M \lambda \rangle}{\langle M \rangle}. \quad (59)$$

Вираз (58) за формою такий самий, як і (47). Просто при низьких температурах ми усереднене значення $\langle M \rangle$ заміняємо на $M(E_F)$, а усереднене значення $\langle \langle \lambda \rangle \rangle$ – на $\lambda(E_F)$. Одиничні й подвійні кутові дужки вказують тільки на те, як здійснюється усереднення.

Щоб реально оцінити усереднене значення довжини вільного пробігу, потрібно знати дисперсійне співвідношення й вираз для залежності $\lambda(E)$. У випадку найбільш поширених механізмів розсіяння $\lambda(E)$ може бути апроксимоване степеневим виразом [14]:

$$\lambda(E) = \lambda_0 \left(\frac{E - E_C}{kT} \right)^r, \quad (60)$$

де значення показника степені r визначається конкретним механізмом розсіяння, а константа λ_0 в типових випадках ще й залежить від температури. Наприклад, при розсіянні електронів на акустичних фононах у 3D-провіднику $r = 0$, а на заряджених домішках $r = 2$, що зумовлено різним виглядом інтеграла взаємодії електрона в одному випадку – з фононом, у другому – з кулонівським потенціалом іонізованої домішки.

2.5. Дисипація потужності й падіння напруги в балістичних резисторах

Будь-який провідник, на який подано напругу V , розсіює потужність $P = VI = V^2/R$. Дисипація потужності зазвичай відбувається внаслідок електрон-фононої взаємодії, енергія якої передається гратці провідника, й провідник через це гріється. В балістичних резисторах транспорт електронів відбувається без розсіяння, однак розсіювана потужність далі дорівнює V^2/R . Де ж ця потужність розсіюється? Оскільки дисипація потужності не може відбуватися в каналі провідності, то відповідь єдина – на контактах, де відбуваються інтенсивні процеси розсіяння, скеровані на швидке відновлення рівноважних значень електрохімічних потенціалів.

Дисипація потужності в балістичному резисторі проілюстрована на рис. 6.

Струм виникає в фермівському вікні, створеному різницею фермівських функцій $f_1 - f_2$, відмінною від нуля, і, відповідно, різницею електрохімічних потенціалів $E_{F1} - E_{F2} = qV$. Як схематично зображено на рис. 6, коли електрон залишає кон-

такт 1, у спектрі енергетичних станів цього контакту утворюється незаповнений стан (“дірка”). Досягнувши без розсіювання (балістично) контакту 2 з надлишком енергії порівняно з хімпотенціалом E_{F2} , електрон втрачає цей надлишок шляхом непружного розсіювання на контакті 2. Якщо електрон має енергію посередині вікна $E_{F1} - E_{F2} = qV$, то втрата енергії на контакті 2 становитиме $qV/2$ (половина потужності розсіюється на контакті 2). Зарядова нейтральність контакту 2 відновлюється тоді, коли електрон залишить контакт 2 і через зовнішнє коло досягне контакту 1. Електрон входить у контакт 1 з енергією E_{F1} , втрачає енергію непружно, заповнюючи собою “дірку”, і розсіюючи потужність $qV/2$ на контакті 1.

Легко узагальнюючи ці міркування на будь-яку енергію електрона у вікні $V = (E_{F1} - E_{F2})/q$, доходимо висновку, що при транспорті електрона в балістичному каналі в режимі лінійного відгуку на двох контактах розсіюється сумарна потужність VI .

В дифузійному режимі роботи однорідного резистора напруга падає лінійно вздовж його довжини. А як падає напруга в балістичному резисторі? Відповідь очікувана – на контактах (див. рис. 7).

В контакті 1 існує один визначений рівень Фермі E_{F1} , аналогічно і в контакті 2 існує теж один рівень Фермі E_{F2} . Всередині ж усього пристрою рівнів Фермі два. Частина електронних станів резистора заповнюється витоком. Оскільки вони перебувають у рівновазі з ним, то заповнені вони відповідно до фермівської функції контакту 1. Аналогічна ситуація має місце з боку стоку. Відповідні стани заповнюються згідно з фермівською функцією контакту 2. Коли контакти рівноправні, половина падіння електрохімічного потенціалу відбувається на витоку, половина – на стоці. Тому балістичний опір у 12,9 кОм називають ще квантом контактного опору.

2.6. Базові транспортні рівняння в моделі ЛДЛ

Досі розгляд здійснювався нами для випадку, коли температура контактів резистора однакова. Проте розклад (34) легко узагальнити на випадок, коли різною є не тільки енергія Фермі, а й температура контактів. На основі цього в [2, 18, 21] ми розглянули термоелектричні ефекти Зеєбека і Пельт’є

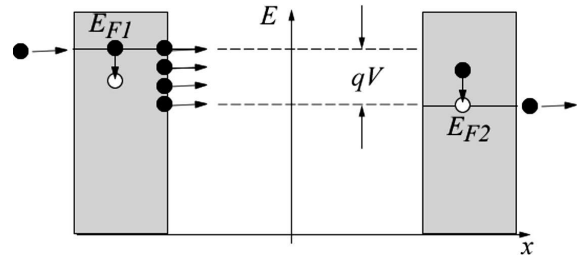


Рис. 6. Дисипація потужності в балістичному каналі відбувається на контактах

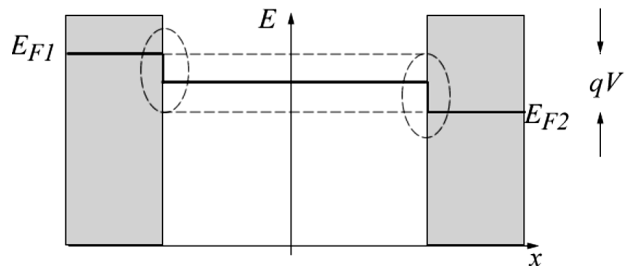


Рис. 7. В балістичному резисторі з рівноправними контактами падіння напруги $V = (E_{F1} - E_{F2})/q$ розподіляється на контактах порівну

т’є в моделі ЛДЛ, а також якісно обговорили закон Відемана–Франца й основні рівняння термоелектрики з відповідними транспортними коефіцієнтами.

Можна показати, що узагальнена модель транспорту електронів і тепла в режимі лінійного відгуку, викладена в [20–22], базується на парі транспортних рівнянь:

$$J_x = \sigma \frac{d(E_F/q)}{dx} - S\sigma \frac{dT}{dx} \text{ [A/m}^2\text{]}, \quad (61)$$

$$J_{Qx} = \pi\sigma \frac{d(E_F/q)}{dx} - \kappa_0 \frac{dT}{dx} \text{ [Вт/м}^2\text{]}, \quad (62)$$

де (61) описує густину струму, (62) – густину потоку тепла; до них входять чотири транспортні коефіцієнти: питома провідність σ , коефіцієнт Зеєбека S , питома теплопровідність у режимі короткого замикання κ_0 , коефіцієнт Пельт’є π . Насправді незалежними є тільки три коефіцієнти, бо коефіцієнти Зеєбека і Пельт’є пов’язані через співвідношення Кельвіна $\pi = TS$. В узагальненій формі ці рівняння записуються як:

$$\frac{d(E_F/q)}{dx} = \rho J_x + S \frac{dT}{dx}, \quad (63)$$

$$J_{Qx} = \pi J_x - \kappa \frac{dT}{dx}, \quad (64)$$

де введено електронну теплопровідність у режимі незамкнутого кола $\kappa = \kappa_0 - S^2 \sigma T$. Транспортні коефіцієнти, які входять до (61)–(64), для двовимірних 2D-провідників мають вигляд [20–22]:

$$\sigma = 1/\rho = \int \sigma'(E) dE, \quad (65)$$

куди входить диференціальна питома провідність σ' :

$$\sigma'(E) = \frac{2q^2}{h} \frac{M(E)}{W} \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (66)$$

$$S = -\frac{k}{q} \frac{1}{\sigma} \int \left(\frac{E - E_F}{kT} \right) \sigma'(E) dE = \frac{s_T}{\sigma} = \frac{\pi}{T}, \quad (67)$$

$$\kappa_0 = T \left(\frac{k}{q} \right)^2 \int \left(\frac{E - E_F}{kT} \right)^2 \sigma'(E) dE = \kappa + \pi S \sigma, \quad (68)$$

де в (67), (68) k – стала Больцмана, в (67) s_T – коефіцієнт Соре. Функцію $M(E)$ залежності числа мод провідності від енергії для різних вимірностей провідника отримано вище (11).

Формули (61)–(68) можна застосовувати до дифузійних резисторів будь-якої вимірності й будь-якого масштабу, за будь-якого типу провідності, включаючи біполярну. Вираз (66) записано для 2D-провідника; це видно з множника $M(E)/W$, де W – ширина 2D провідника. При розгляді 3D-провідників цей множник слід замінити на $M(E)/A$, де A – площа перерізу 3D-провідника, а для 1D провідника замінити просто на число мод провідності $M(E)$. Під час розгляду транспорту у всіх режимах від дифузійного до балістичного середню довжину вільного пробігу $\lambda(E)$ потрібно замінити на формальну довжину вільного пробігу згідно з виразом (56). Фактично вирази (65)–(68) містять тільки два параметри, $M(E)$ і $\lambda(E)$. Число мод провідності для провідників будь-якої вимірності з параболічним законом дисперсії визначене в (18)–(20), але самі вирази (61)–(68) справедливі для будь-якої зонної структури, потрібно тільки коректно визначити число мод провідності. Вигляд залежності $\lambda(E)$ визначається характером розсіяння в провіднику; зазвичай цю залежність апроксимують степеневим законом (60).

3. Транспортні явища в графені в узагальненій моделі Ландауера–Датта–Лундстрома

3.1. Початок “фізики графену”

З графеном – моноатомним шаром вуглецю, запакованим у гексагональну ґратку – людство зустрічалося давно, зокрема й на графічних роботах художників (звичайний графітовий олівець подекуди лишав на папері слід завтовшки в один атомний шар). Проте графен на діелектричній підкладці з підведеними електричними контактами було вперше отримано й досліджено тільки в 2004 році в Центрі мезоскопії й нанотехнологій Манчестерського університету (Велика Британія) [29] групою на чолі з Андре Геймом. Відтоді вивчення графену, а пізніше – й інших моношарових структур – тривало настільки інтенсивно, що стали говорити про появу “фізики графену” – нової інтердисциплінарної області досліджень на стикові фізики конденсованого середовища, фізики високих енергій і матеріалознавства (див., наприклад, огляди [30–37]). У 2010 році відкривачі графену Андре Гейм і Костя Новосьолов стали лауреатами Нобелівської премії з фізики.

Справді, напівметал (або безщільний напівпровідник) графен багатий на унікальні фізичні характеристики. Йдеться не лише про значно вищу від сталі механічну жорсткість (модуль Юнга становить ~ 1 ТПа) чи про дуже високу теплопровідність $\sim 5 \cdot 10^3$ Вт \cdot м $^{-1}$ \cdot К $^{-1}$. Найбільш приголомшливою властивістю нового матеріалу виявилось те, що, на відміну від майже усіх інших відомих науці твердих тіл, електрони і дірки (ферміони!) мають у графені лінійний за імпульсом (а не квадратичний, як це начебто має впливати з рівняння Шредингера) енергетичний спектр. Такий спектр досі вважали притаманним лише для квазірелятивістських бозонів – фотонів і нейтрино (щоправда, нещодавнє відкриття нейтринних осциляцій, за яке Нобелівську премію з фізики 2015 року присуджено Тааки Каїта й Артуру Макдональду, свідчить про наявність у нейтрино невеликої маси спокою, що не перевищує 2 еВ). Таким чином, графен дозволив вивчати ряд суто релятивістських ефектів (наприклад, парадокс Клейна) в експериментах “на поверхні письмового столу”.

Важливо відзначити, що в творенні підвалин фізики графену помітну роль відіграли україн-

ські теоретики В. Гусинін та С. Шарапов (Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України). Вони теоретично передбачили такі неординарні властивості графену, як незвичайний цілочисельний квантовий ефект Холла (КЕХ) [38, 39], зсув фази квантових магнітних осциляцій [40] (зокрема, осциляцій Шубнікова–де Гааза [41]) і концентраційну залежність циклотронної маси [41]. Зокрема, КЕХ для діраківських ферміонів у графені є аномальним (напівцілим) з фактором заповнення $\nu = \pm 4(n + 1/2)$, $n = 0, 1, \dots$

Аномальність КЕХ викликана виродженням найнижчого рівня Ландау, яке дорівнює половині виродження вищих рівнів. Саме на основі експериментального спостереження цих передбачень загальноприйнятим фактом стало те, що квазічастинки у графені поблизу K -точки дотикання зони провідності й валентної зони описуються за допомогою рівняння діраківського типу, а не рівняння Шредінгера, як у інших матеріалах з трансляційною симетрією. Передбачена у роботі [42] універсальна оптична провідність та її порогова залежність від густини носіїв також спостерігалася експериментально, що свідчить: керовані оптичні властивості графену мають великий потенціал застосувань в інфрачервоній оптиці та оптоелектроніці.

До того ж, як виявилось вже в роботі [29], електрони і дірки в графені мають дуже високу рухливість (теоретична верхня межа становить $2 \cdot 10^6 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, що на чотири порядки перевищує рухливість носіїв у кремнії – основному матеріалі сучасної електроніки [37]). Як відомо, основним елементом електроніки сьогодні залишається польовий транзистор метал–діелектрик–напівпровідник (МДН) із ізольованим затвором. Гранична частота роботи такого транзистора f_t пов'язана з рухливістю носіїв μ і довжиною каналу d простим співвідношенням $f_t \sim \mu/d$. Протягом останніх 40 років швидкодію транзисторів підвищували зменшенням розмірів каналу (досягнуто робочих величин, що трохи перевищують десять нанометрів). Проте тут, схоже, майже досягли принципової межі, пов'язаної з наявністю короткоканальних ефектів [43], і тому дальший поступ пов'язують із застосуванням нових матеріалів зі значно більшою, аніж у кремнії, рухливістю. Графен, на думку окремих експертів, міг виявитися ідеальним кандидатом на таку роль.

Коли в 2010 році застосування технологій хімічного осаджування з парової фази (CVD) дозволило отримувати порівняно дешеві графенові плівки великих розмірів, поява масової вуглецевої електроніки здавалася багатьом питанням найближчого часу. Проте на сьогодні ці надії поки не справдилися. На базі графену вже створені газові та біосенсори, світлодіоди, швидкодіючі пристрої енергонезалежної пам'яті, прозорі провідні покриття для фотовольтаїки тощо. Проте польових транзисторів на основі графену, які масово замінили б у комп'ютерах кремнієві, досі немає. Основною причиною цього стала безщільна зонна структура графену, яка робить його вольт-амперну характеристику симетричною і відтак ускладнює отримання двох чітко розрізнених станів, які відповідали б логічному “0” і “1”. А численні фізичні методи створення в графені забороненої зони (шляхом створення нанострічок, гідрогенізації його поверхні, внесення механічних напружень тощо) залишаються на сьогодні нетехнологічними.

Тому, хоча можливість широких “нішових” застосувань графену (в електроніці, фотовольтаїці, сенсоріці, медицині тощо) ніхто сьогодні не ставить під сумнів, тривають інтенсивні пошуки інших графеноподібних матеріалів, які б могли замінити традиційний кремній у комп'ютерах. До них належать матеріали, об'ємні зразки яких утворено моношарами, з'єднаними слабкими ван-дер-Ваальсовими силами, подібно до того, як шари графену утворюють графіт (h -BN, MoS_2 , α - MoO_3 , V_2O_5), а також, потенційно, низка інших, ще не синтезованих сполук (див., наприклад, огляди [44, 45]). Водночас графен досі лишається як цікавим самостійним об'єктом для вивчення, так і модельною системою для розгляду інших ідеальних 2D матеріалів.

Хоч як це дивно, теоретичний опис графену було здійснено задовго до експериментального отримання моношарових зразків, у зв'язку з увагою до графіту, зумовленою його використанням в атомних реакторах. Ще в 1947 році канадійський теоретик П. Воллес показав, що в наближенні сильного зв'язку енергетичний спектр електронів у моношарі графіту (який пізніше стали називати графеном) лінійний [46]. Пізніше ці результати було уточнено з урахуванням слабких міжшарових ван-дер-Ваальсових зв'язків [47, 48], а також узагальнено на випадок вуглецевих нанотрубок [49].

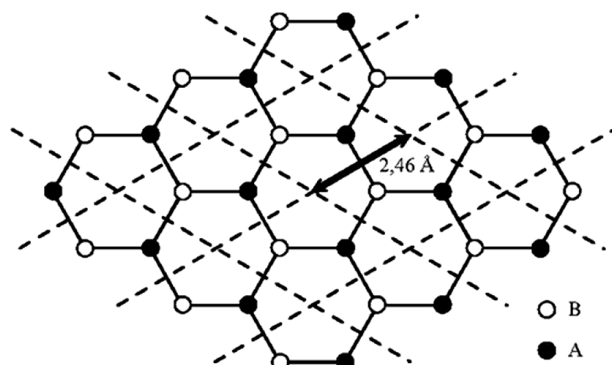


Рис. 8. Елементарна комірка графену й вектор трансляції ґраток Браве А та В

Транспорт електронів у такій екзотичній системі так само почали моделювати ще до отримання графену в експерименті [50]. Вже в першій роботі з отримання графену методом мікровідшарування піролітичного графіту [29] було показано, що провідність у ньому може мати квазібалістичний характер (що вказувало на високу структурну досконалість зразків). Невдовзі ці результати було підтверджено і вдосконалено в [51]. Експериментальне спостереження [52, 53] особливостей цілочисельного КЕХ з урахуванням наявної вже на той час теорії [38, 39] стало підтвердженням “нейтринного” безмасового характеру носіїв струму в графені.

Упродовж 2000-х років було закладено основи фізики транспортних явищ у графені (див., наприклад, [53–55]), а також фундаментальний огляд [37]). При цьому українські теоретики (група Ф. Васька, Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України) зробили значний внесок у фізику нерівноважних носіїв у графені (див. огляд [36]). Водночас фізика графену стала частиною навчальних курсів усіх провідних університетів світу: наприклад, Стенфордського [56], Перд’ю [57–59], Київського національного університету імені Тараса Шевченка [60].

3.2. Елементарна теорія зонної структури графену

Нижче ми дамо виклад простої π -моделі графену в рамках теорії сильного зв’язку [46, 61] й наведемо дані про його зонну структуру. Це дасть нам основу для розрахунку транспортних властивостей графену в рамках узагальненої моделі ЛДЛ.

Більш докладний розгляд теорії зонної структури графену можна знайти, наприклад, у [60], а дещо альтернативний підхід до задачі з використанням методу НРФГ викладено в [5].

Атом вуглецю має шість електронів, розподілених між орбіталями як $1s^2 2s^2 2p^2$. Внутрішні $1s$ електрони інертні й не беруть участі у формуванні хімічних зв’язків. Натомість $2s$, $2p_x$, $2p_y$ орбіталі гібридизуються і утворюють у площині xy три нові sp^2 орбіталі, кожна з яких містить один електрон. Ці орбіталі зорієнтовані вздовж ліній, що виходять з ядра і розташовані під кутом 120° одна від одної. Саме ці орбіталі сусідніх атомів формують міцні σ -зв’язки, що зумовлюють гексагональний вигляд ґратки графену. Ці зв’язки визначають, зокрема, механічні властивості графену з його унікальною жорсткістю.

Проте лишається ще $2p_z$ орбіталь, ортогональна до площини атомів вуглецю. Такі орбіталі різних атомів формують π -зв’язки, які в графіті відповідають за слабкі ван-дер-Ваальсові сили між площинами. На кожену $2p_z$ орбіталь припадає один електрон і, отже, в ізольованому шарі графену на кожен вузол ґратки припадає цей самий один електрон. Такі системи називають напівзаповненими (бо взагалі в одному енергетичному стані можуть перебувати два електрони, які різняться спінами). Саме $2p_z$ орбіталі зумовлюють дивовижні електронні властивості графену.

Кристалічна ґратка графену є сукупністю двох взаємопроникних ґраток Браве атомів А та В з елементарною коміркою у вигляді ромба (рис. 8). Попри те, що хімічно атоми сортів А і В цілком тожді, фізично між ними існує відмінність: атоми сорту А мають одного сусіда ліворуч і двох – праворуч, атоми сорту В – навпаки. Ця на збір малозначуща деталь є насправді причиною унікальності зонної структури графену [5, 46, 60].

Період цієї ґратки становить $a = a_0\sqrt{3} \approx 2,46 \text{ \AA}$, де довжина зв’язку між двома сусідніми атомами вуглецю $a_0 = 1,42 \text{ \AA}$. Зона Бріллюена для графену є правильним шестикутником зі стороною $4\pi/3a$ (рис. 9).

Примітивні вектори трансляції (рис. 9) вибрано як: $\mathbf{a} = a(1, 0)$ і $\mathbf{b} = a(-1/2, \sqrt{3}/2)$. Вектори, що з’єднують сусідні атоми, є $\boldsymbol{\tau}_1 = a(0, 1/\sqrt{3})$, $\boldsymbol{\tau}_2 = a(-1/2, -1/2\sqrt{3})$, $\boldsymbol{\tau}_3 = a(1/2, -1/2\sqrt{3})$. Вектори оберненої ґратки дорівнюють $\mathbf{a}^* = (2\pi/a)(1, 1/\sqrt{3})$ і $\mathbf{b}^* = (2\pi/a)(0, 2/\sqrt{3})$. Перша зона Бріллюена

має дві вузлові точки K та K' . Хвильові вектори, які їм відповідають, визначаються виразами $\mathbf{K} = (2\pi/a)(-2/3, 0)$ і $\mathbf{K}' = (2\pi/a)(2/3, 0)$. Надалі ми використаємо співвідношення:

$$\begin{aligned} \exp(i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}_1) &= \omega, \quad \exp(i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}_2) = \omega^{-1}, \quad \exp(i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}_3) = 1, \\ \exp(i\mathbf{K}' \cdot \boldsymbol{\tau}_1) &= 1, \quad \exp(i\mathbf{K}' \cdot \boldsymbol{\tau}_2) = \omega^{-1}, \quad \exp(i\mathbf{K}' \cdot \boldsymbol{\tau}_3) = \omega, \end{aligned} \quad (69)$$

де $\omega = \exp(2\pi i/3)$ і задовольняє умову $1 + \omega + \omega^{-1} = 0$.

Нехай $\varphi(\mathbf{r})$ позначає $2p_z$ атомну орбіталь атома вуглецю C . Періодичний потенціал ґратки формують дві зміщені одна щодо одної підґратки A та B . Хвильова функція електрона в такому потенціалі є лінійною комбінацією двох блохівських хвиль, побудованих на цих підґратках:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{R}_A} \psi_A(\mathbf{R}_A) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) + \\ &+ \sum_{\mathbf{R}_B} \psi_B(\mathbf{R}_B) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B), \end{aligned} \quad (70)$$

де амплітуди $\psi_A(\mathbf{R}_A)$ та $\psi_B(\mathbf{R}_B)$ беруться в точках $\mathbf{R}_A = n_a \mathbf{a} + n_b \mathbf{b} + \boldsymbol{\tau}_1$ і $\mathbf{R}_B = n_a \mathbf{a} + n_b \mathbf{b}$ при цілочисельних значеннях n_a і n_b . Знехтуємо інтегралом перекриття двох сусідніх $2p_z$ орбіталей ($S[2p_z(A), 2p_z(B)] = 0$) і врахуємо резонансний інтеграл тільки між сусідніми атомами, що описує силу σ -зв'язку ($\gamma_0 \approx 3$ еВ), що дозволить отримати всі розв'язки в аналітичному вигляді. Тоді:

$$\begin{aligned} E\psi_A(\mathbf{R}_A) &= -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_B(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l), \\ E\psi_B(\mathbf{R}_B) &= -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_A(\mathbf{R}_B + \boldsymbol{\tau}_l), \end{aligned} \quad (71)$$

де за нуль відліку енергії взято енергію $2p_z$ орбіталі атома C .

Поклавши $\psi_A(\mathbf{R}_A) = f_A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_A)$ і $\psi_B(\mathbf{R}_B) = f_B(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_B)$, одержимо

$$\begin{pmatrix} 0 & h_{AB}(\mathbf{k}) \\ h_{AB}(\mathbf{k})^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_A(\mathbf{k}) \\ f_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} f_A(\mathbf{k}) \\ f_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (72)$$

$$h_{AB}(\mathbf{k}) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_l).$$

Тоді для енергії зонних станів маємо

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \gamma_0 \left| \sum_{l=1}^3 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_l) \right|. \quad (73)$$

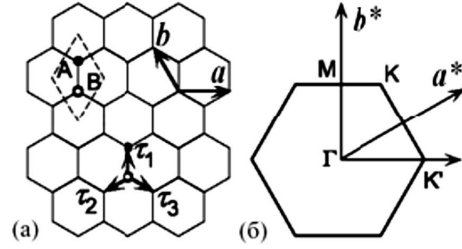


Рис. 9. Ґратка графену (а) і його перша зона Бріллюєна (б)

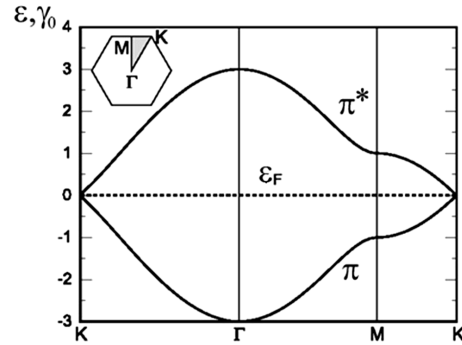


Рис. 10. Симетричний зонний спектр графену в наближенні Гюккеля (інтеграли перекриття $S = 0$; $\gamma_0 \neq 0$)

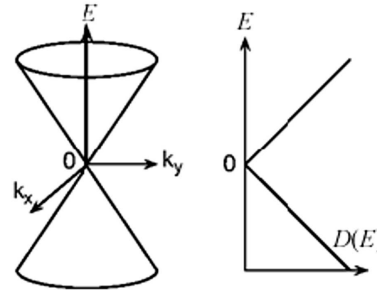


Рис. 11. Зонний спектр і густина станів $D(E)$ в околі точок Дірака K і K'

Відповідно до (70) маємо $E_{\pm}(\mathbf{K}) = E_{\pm}(\mathbf{K}') = 0$. Це означає, що в так званих діраківських точках K і K' відсутня енергетична щілина між валентною зоною π і зоною провідності π^* (рис. 10 і 11).

Розгляньмо поведінку енергії в околі точки K . Перепишемо \mathbf{k} як $\mathbf{K} + \mathbf{k}$ і розкладемо енергію $E_{\pm}(\mathbf{k})$ за степенями $|\mathbf{k}|a$. В найнижчому, першому порядку одержимо

$$-\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \exp[-i(\mathbf{K} + \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\tau}_l] = -\omega^{-1} \gamma (k_x - ik_y), \quad (74)$$

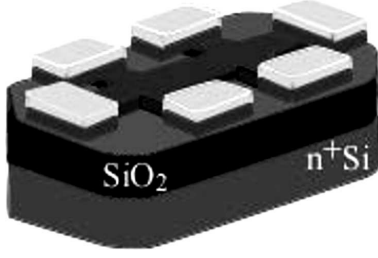


Рис. 12. Реальний польовий транзистор з графеновим каналом (згори) на підкладці SiO₂, поміщений на електричний затвор – сильно легований кремій. Контакти витоку і стоку розташовано в кінцях графенового каналу, ще чотири контакти, по два з кожного боку каналу, використовують для холлівських вимірювань тощо

$$\gamma = \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0. \quad (75)$$

Перевизначивши $f_A(\mathbf{K} + \mathbf{k}) = \tilde{f}_A(\mathbf{k})$ і $f_B(\mathbf{K} + \mathbf{k}) = -\omega \tilde{f}_B(\mathbf{k})$, одержимо

$$\gamma \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{f}_A(\mathbf{k}) \\ \tilde{f}_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \tilde{f}_A(\mathbf{k}) \\ \tilde{f}_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (76)$$

Використавши матриці Паулі:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (77)$$

перепишемо (76) як:

$$\gamma (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}) \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{k}) = E \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{k}), \quad \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \tilde{f}_A(\mathbf{k}) \\ \tilde{f}_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (78)$$

де $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$. Аналогічно можна одержати вираз для точки K' . Фактично, для цього досить замінити $\boldsymbol{\sigma}$ у (78) на $\boldsymbol{\sigma}^*$.

Таким чином, в околі точок K і K' зонний спектр графену визначається простим лінійним виразом,

$$E_s(\mathbf{k}) = s\gamma |\mathbf{k}|, \quad s = \pm 1, \quad (79)$$

що й зображено на рис. 11. Валентна зона й зона провідності вироджені в точці $E = 0$. Тому графен розглядають як двовимірний безщільний напівпровідник, або ж як напівметал.

У використаному наближенні ефективної маси (або ж у так званому $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ наближенні), рух електрона поблизу точок K і K' фактично описується рівнянням Шредінгера, в якому вектор \mathbf{k} замінено оператором

$$\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla. \quad (80)$$

Така заміна приводить до рівнянь:

$$\begin{aligned} \gamma (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \mathbf{F}^K(\mathbf{r}) &= E \mathbf{F}^K(\mathbf{r}), \\ \gamma (\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \hat{\mathbf{k}}) \mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}) &= E \mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (81)$$

де $\mathbf{F}^K(\mathbf{r})$ і $\mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r})$ – двокомпонентні хвильові функції:

$$\mathbf{F}^K(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F_A^K(\mathbf{r}) \\ F_B^K(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F_A^{K'}(\mathbf{r}) \\ F_B^{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (82)$$

Рівняння (81) цілком тотожні до рівнянь Дірака–Вейля для безмасового нейтрино, за винятком того, що швидкість світла в них замінено на ізотропну швидкість

$$v_F = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\gamma}{\hbar}, \quad (83)$$

яка визначається силою енергетичного зв'язку між двома сусідніми атомами вуглецю й менша від швидкості світла приблизно в 300 разів. Цю швидкість зазвичай називають “швидкістю Фермі”, хоча правильніше було б називати її “швидкістю Воллеса” на честь теоретика, який вперше її отримав [46]. Така велика швидкість і стала підставою для високих очікувань щодо надзвичайної швидкодії потенційних польових транзисторів із балістичним графеновим каналом.

Ще раз перепишемо вираз (81) для спектра поблизу точки Дірака у зручному для користування вигляді:

$$E(k) = \pm \hbar v_F k = \pm \hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2}. \quad (84)$$

Виходячи з цього вигляду енергетичного спектра, важливою особливістю графену є те, що він легко може змінювати свій тип провідності. На рис. 12 зображено реальну структуру графенового польового транзистора на діелектричній підкладці, під якою розташовано затвор. Як матеріал для підкладки найчастіше використовують SiO₂, хоч протягом останніх років тривають пошуки інших матеріалів – від діелектриків з високим значенням проникності й до сегнетоелектриків; гістерезисні явища, які при цьому виникають у провідності графенового каналу, використовують для створення пристроїв швидкодіючої енергонезалежної пам'яті [68].

Прикладаючи до затвору (на рис. 12 для нього використано сильно легований n -кремній) позитивну або негативну напругу, можемо інжектувати з контактів у графеновий канал відповідно електрони, або дірки, які заповнюють конус енергій, зображений на рис. 11, до певної енергії Фермі, величина якої залежить від напруги на затворі, діелектричної проникності і товщини підкладки [37]. Якщо $E_F > 0$, графен є n -провідником, а $E_F < 0$ – p -провідником. Таким чином, графен є не тільки єдиним справжнім 2D матеріалом (інші квантові ями мають скінченну довжину вздовж осі z , що є одного порядку з довжиною хвилі де Бройля, і тільки графен має товщину атомного моношару – найменшу можливу з усіх товщин для пристроїв електроніки), а, на відміну від квантових ям (де тип провідності визначається умовами виготовлення), змінює тип провідності простою зміною полярності напруги на затворі.

Електрони в графені описуються двокомпонентною хвильовою функцією (82), яку можна переписати як:

$$\begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (85)$$

де $L_x L_y = A$ – площа графену, $\theta = \arctg(k_y/k_x)$. Такий вигляд хвильової функції тягне за собою важливі фізичні наслідки: наприклад, оскільки електрони з квазіхвильовими векторами $+k_x$ і $-k_x$ мають ортогональні хвильові функції, то ймовірність розсіяння на 180° (строго назад) у графені дорівнює нулю. І навпаки, має місце парадокс Клейна: електрон з ймовірністю 1 проходить бар'єр p - n -переходу в графені [37].

3.3. Густина станів і концентрація носіїв у графені

Функція щільності станів визначає число електронних станів в енергетичному проміжку від k до $k + dk$. Для її знаходження треба площу цього проміжку в 2D просторі квазіхвильових векторів $[k_x, k_y]$, яка дорівнює $2\pi k dk$, помножити на спінове виродження $g_s = 2$, долинне виродження $g_v = 2$, і поділити результат на об'єм елементарної комірки зони Бріллюена, що відповідає фазовому простору, який припадає на один стан, $(2\pi)^2/L_x L_y$ [63, 64]. В результаті для числа станів у такому енер-

гетичному проміжку одержуємо

$$N(k)dk = g_s g_v \frac{2\pi k dk}{(2\pi/L_x)(2\pi/L_y)}, \quad (86)$$

Для лінійного закону дисперсії (84) цей вираз перешеться як:

$$N(k)dk = g_v A \frac{E dE}{\pi(\hbar v_F)^2}. \quad (87)$$

Визначаючи $D(E)dE$ як густину станів на одиницю поверхні графену в інтервалі енергій між E і $E + dE$, і враховуючи, що енергія може бути як додатною, так і від'ємною, з урахуванням (84) остаточно одержуємо

$$D(E) = \frac{2|E|}{\pi\hbar^2 v_F^2}. \quad (88)$$

Концентрація електронів у зоні провідності (їх число, віднесене до площі поверхні графену A), дорівнює:

$$n_s(E_F) = \int_0^\infty D(E) f_0(E) dE. \quad (89)$$

Тут індексом s (від англійського *surface* – поверхня) ми, як і раніше в (40), нагадуємо про те, що йдеться про 2D електрони, концентрація яких має вимірність $[1/\text{м}^2]$. Оскільки газ безмасових носіїв струму в графені сильно вироджений вже за дуже малих напруг на затворі [37], то східчастий вигляд функції розподілу ($f_0(E) = 1$, $E \leq E_F$; $f_0(E) = 0$, $E > E_F$) може вважатися задовільним наближенням навіть для кімнатної температури. Тому переписемо (89) як:

$$n_S(E_F) = \int_0^{E_F} D(E) dE = \frac{2}{\pi\hbar^2 v_F^2} \int_0^{E_F} dE, \quad (90)$$

тож остаточно для концентрації носіїв струму маємо

$$n_S(E_F) = \frac{E_F^2}{\pi\hbar^2 v_F^2}. \quad (91)$$

3.4. Провідність графену

Провідність графену визначається загальними виразами (65), (66), які одержано з формули Ландауера [38]. Вона залежить від енергії Фермі E_F , а

та, згідно з (91), визначається концентрацією носіїв. Як було показано вище, число мод провідності в 2D-провіднику (11) дорівнює:

$$M(E) = WM_{2D}(E) = W \frac{h}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E), \quad (92)$$

де W – ширина провідника (для нашого випадку вважаємо $W = L_y$), $\langle v_x^+(E) \rangle$ – усереднена швидкість руху електронів у графеновому каналі вздовж додатного напрямку осі x . Для балістичного графенового каналу після необхідних усереднень (6), (7) легко показати, що:

$$\langle v_x^+(E) \rangle = \frac{2}{\pi} v_F. \quad (93)$$

Оскільки густина станів, що входить до (92), визначається вже не виразом (5), як для випадку параболічного закону дисперсії, а виразом (88), бо зонний спектр (84) у графені лінійний, то для числа мод провідності в графені остаточно одержуємо

$$M(E) = W \frac{2|E|}{\pi \hbar v_F}. \quad (94)$$

Отже, на відміну від випадку параболічного закону дисперсії, для якого функції густини станів і числа мод провідності мають різну залежність від енергії (див. рис. 2), у графені обидві ці функції залежать від енергії лінійно:

$$D(E), M(E) \propto E. \quad (95)$$

Тепер можемо обчислити провідність. Використовуючи в (66) східчасту апроксимацію для функції розподілу при $T = 0$ К, за якої справедливий вираз (43), одержуємо

$$\begin{aligned} \sigma'(E) &= \frac{2q^2}{h} \frac{M(E)}{W} \lambda(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) = \\ &= \frac{2q^2}{h} \frac{M(E)}{W} \lambda(E) \delta(E - E_F), \end{aligned} \quad (96)$$

тож остаточно 2D провідність (65) для графену становить:

$$\sigma_S = \int \sigma'(E) dE = \frac{2q^2}{h} \left(\frac{2E_F}{\pi \hbar v_F} \right) \lambda(E_F). \quad (97)$$

Якщо середня довжина вільного пробігу в графені не залежить від енергії, то провідність графену лінійно залежить від енергії Фермі, а, отже, згідно з (91) пропорційна $\sqrt{n_S}$.

3.5. Розсіювання носіїв у графені

Характер залежності провідності від енергії Фермі чи від 2D концентрації носіїв струму визначається залежністю середнього шляху вільного пробігу від енергії $\lambda(E)$, що, в свою чергу, визначається часом релаксації імпульсу. Тому з урахуванням (93) одержуємо

$$\lambda(E) = \frac{\pi}{2} v_F \tau_p. \quad (98)$$

Як відомо (див. [37]), у графені можуть конкурувати декілька найважливіших механізмів розсіювання: на короткодійних потенціалах (важливий для структурно недосконалого графену з великою кількістю порушень правильної ґратки, зображеної на рис. 8; слово “короткодійний” означає те, що цей потенціал локалізований на відстанях порядку сталої ґратки); на акустичних фононах (реалізується для дуже досконалого “простягнутого” графену, що “висить” над затвором); на кулонівському потенціалі іонізованих домішок підкладки (реалізується в більшості експериментів на достатньо досконалому графені при кімнатних температурах). Показано (див. [37, 65]), що для розсіювання на короткодійних потенціалах структурних недосконаlostей і на акустичних фононах швидкість розсіювання пропорційна щільності станів:

$$\frac{1}{\tau_p} \propto D(E) \propto E, \quad (99)$$

що означає: час релаксації імпульсу і довжина вільного пробігу обернено пропорційні енергії:

$$\tau_p \propto \lambda(E) \propto E^{-1}. \quad (100)$$

Відтак, відповідно до (97), за домінування розсіювання на структурних недосконаlostях і на акустичних фононах провідність графену σ_S повинна бути константою, не залежною ні від E_F , ані від n_S (рис. 13). Але оскільки

$$\sigma_S = qn_S \mu, \quad (101)$$

то це означає, що рухливість μ повинна бути обернено пропорційною до концентрації n_S . Це – фізично вельми неординарна ситуація. Адже на інтуїтивному рівні ми звикли вважати: чим більша кількість носіїв струму, тим більша й провідність.

У випадку розсіювання на екранованих та неекранованих іонізованих домішках, які неминуче

наявні в діелектричній підкладці, має місце лінійна залежність $\lambda(E)$ від енергії [37]:

$$\lambda(E) = \lambda_{ii} E, \quad (102)$$

що після підстановки в (97) дає квадратичну залежність провідності від E_F . А, з урахуванням (91), це означає, що провідність у цьому випадку лінійно залежить від концентрації носіїв n_S . Згідно з (101), рухливість у цьому випадку не є функцією концентрації.

На рис. 13 якісно проілюстровано два розглянуті вище випадки: (а) розсіювання на короткодійних потенціалах і на акустичних фонах; (б) розсіювання на іонізованих заряджених домішках. Якщо ці механізми діють одночасно, то ймовірності процесів додаються, й для середньої довжини вільного пробігу маємо

$$\frac{1}{\lambda_{\text{tot}}} = \frac{1}{\lambda_{ii}} + \frac{1}{\lambda_{sr}} \quad (103)$$

і для рухливості застосовний відомий закон Матіессена:

$$\frac{1}{\sigma_{\text{tot}}} = \frac{1}{\sigma_{ii}} + \frac{1}{\sigma_{sr}}. \quad (104)$$

Отже, для вибраного значення n_S діє принцип “вузької горловини”: менший з двох внесків обмежує сумарне значення σ_S , а сумарна залежність $\sigma_S(n_S)$ робиться нелінійною.

Проте в графені можуть виявлятися ще й інші канали розсіювання носіїв струму. У багатьох випадках важливим виявляється розсіювання на полярних оптичних фонах у SiO_2 , або в іншому матеріалі підкладки [37].

Звернімо увагу на те, що в експерименті вимірюють не залежність провідності від концентрації $\sigma_S(n_S)$, а зазвичай – залежність провідності від напруги на затворі $\sigma_S(V_g)$. При цьому концентрація і напруга на затворі пов’язані між собою лінійно простим співвідношенням для плоского конденсатора, зображеного на рис. 12, обкладинками для якого є графеновий канал і затвор: $qn_S = CV_g$, де C – ємність конденсатора. Таким чином, з урахуванням явного вигляду C , концентрація у “легованому затвором” графені лінійно залежить від напруги на затворі V_g , діелектричної проникності затвору κ , і обернено пропорційна до товщини за-

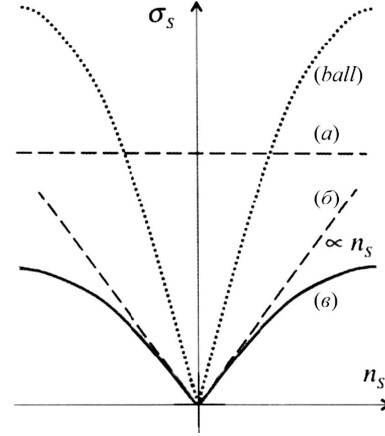


Рис. 13. Якісна картина залежності провідності графену від концентрації носіїв струму: для короткодійних потенціалів розсіювання й для розсіювання на акустичних фонах провідність стала (а), розсіювання на іонізованих заряджених домішках дає лінійну залежність (б), сумарна залежність за умови одночасної дії зазначених вище механізмів (в). Окремо показано також залежність для балістичного режиму провідності

твору d [37]:

$$n_S (\text{см}^{-2}) = 7,2 \cdot 10^{10} \left(\frac{300}{d(\text{нм})} \right) \left(\frac{\kappa}{3,9} \right) V_g (\text{В}). \quad (105)$$

Цифри в цьому виразі нормовано до характеристик кварцової SiO_2 підкладки завтовшки 300 нм, яку використовували в перших роботах на графенову тематику [29]. Тому гранично можливі значення концентрації (й провідності) графенового каналу визначаються полем пробою діелектричної підкладки, яке для SiO_2 становить близько 0,5 В/нм. У більшості випадків ці значення не перевищують 10^{13} см^{-2} .

3.6. Рухливість у графені й формула Друде

Рухливість у графені знаходимо, прирівнюючи (97) і (101):

$$\mu = \frac{2q}{h} \frac{1}{n_S} \left(\frac{2E_F}{\pi \hbar v_F} \right) \lambda(E_F). \quad (106)$$

Після підстановки сюди виразу для n_S (91) одержуємо

$$\mu = \frac{2qv_F}{\pi E_F} \lambda(E_F). \quad (107)$$

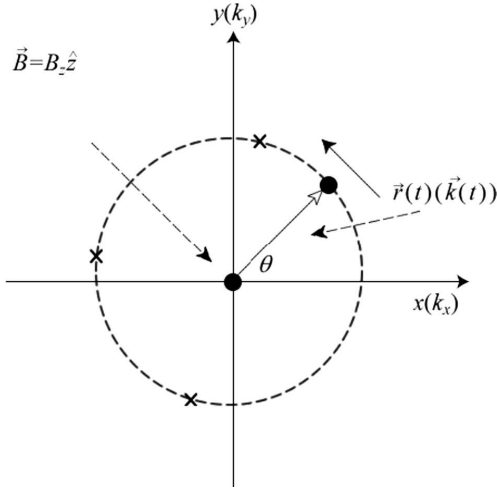


Рис. 14. До розрахунку циклотронної частоти. Хрестиками на траєкторії позначено акти розсіяння

Прийнято говорити, що електрони й дірки в графені “безмасові”. Очевидну підставу для такого твердження дає те, що лінійний закон дисперсії електронів у графені (84) нагадує так само лінійну частотну дисперсію фотонів $\omega(k)$. Тому для рухливості не варто використовувати формулу Друде (52) з певною визначеною сталою ефективною масою m^* , натомість слід відразу використовувати вираз (107). Але, разом з тим, можна встановити зв’язок між двома підходами. Для цього виразимо довжину вільного пробігу в (107) через час релаксації згідно з (98). Тоді

$$\mu = \frac{q}{E_F/v_F^2} \tau_p(E_F), \quad (108)$$

що нагадує формулу Друде для рухливості (52), якщо під ефективною масою в графені розуміти

$$m^* = \frac{E_F}{v_F^2}, \quad (109)$$

що вочевидь нагадує релятивістський вираз для енергії $E = mc^2$, в якому швидкість світла замінено на v_F . Проте введена так ефективна маса вже не є сталою, а залежить від енергії Фермі.

Звернімо увагу на те, що всі вирази цього параграфа нами записано для графену з провідністю n -типу. Але всі вони можуть бути застосовані й для “діркового” графену після простої заміни в них E_F на $|E_F|$.

3.7. Циклотронна частота в графені

При вміщенні графену в магнітне поле, направлене перпендикулярно до його площини, електрони починають обертатися з циклотронною частотою:

$$\omega_c = 2\pi/T, \quad (110)$$

де T – період обертання по коловій орбіті (рис. 14), навколо вектора магнітного поля:

$$\mathbf{V} = B_z \hat{z}. \quad (111)$$

Класично слабкі магнітні поля визначаються співвідношенням:

$$\omega_c \tau_p \ll 1, \quad (112)$$

де τ_p – середній час вільного пробігу електрона.

Для параболічного закону дисперсії носіїв з ефективною масою m^* , як відомо (див., наприклад, [65]),

$$\omega_c = \frac{qB_z}{m^*}. \quad (113)$$

Тоді умову для слабких полів (112) з урахуванням (108) можна переписати як:

$$\mu B_z \ll 1. \quad (114)$$

З (110) та (112) випливає, що для слабких полів

$$T \gg \tau_p, \quad (115)$$

тобто період обертання набагато перевищує час між зіткненнями. Іншими словами, більшість орбіт виявляються незамкненими, й можна спостерігати класичний ефект Холла. В протилежному випадку

$$\omega_c \tau_p \gg 1, \quad (116)$$

що відповідає класично сильним магнітним полям, відбувається ефективне поглинання зовнішнього електромагнітного випромінювання на циклотронній частоті – циклотронний резонанс. А при переході до квантово сильних магнітних полів виникають передумови для спостереження квантового ефекту Холла [38, 39].

Отримаємо загальний вираз для циклотронної частоти, придатний для довільного закону дисперсії. Для сили Лоренца, яка діє на електрон у магнітному полі, запишемо:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -q\mathbf{v} \times \mathbf{V}. \quad (117)$$

Врахуємо також те, що квазіімпульс зв'язаний з квазіхвильовим вектором як $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, і запишемо (117) покомпонентно:

$$\hbar \frac{dk_x}{dt} = -qv_y B_z, \quad (118a)$$

$$\hbar \frac{dk_y}{dt} = +qv_x B_z, \quad (118b)$$

що дає (рис. 14):

$$\hbar k \frac{d(\cos \theta)}{dt} = -q(v \sin \theta) B_z, \quad (119a)$$

$$\hbar k \frac{d(\sin \theta)}{dt} = +q(v \cos \theta) B_z. \quad (119b)$$

Диференціюючи (119a) за часом і використовуючи (119b), одержуємо

$$\frac{d^2(\cos \theta)}{dt^2} = -\omega_c^2 \cos \theta, \quad (120)$$

де циклотронна частота для довільного ізотропного зонного спектра дорівнює:

$$\omega_c = \frac{qv}{\hbar k} B_z. \quad (121)$$

Для параболічного закону дисперсії має місце очевидне співвідношення

$$v = \frac{\hbar k}{m^*}, \quad (122)$$

що й приводить до відомого виразу (113).

Але для графену $v = v_F$ і $E = \hbar v_F k$; тому для циклотронної частоти в графені з (121) одержуємо

$$\omega_c = \frac{qB_z}{E_F/v_F}. \quad (123)$$

Таким чином, і тут справедливий отриманий нами раніше вираз (109) для ефективної маси. Цей результат було отримано киянами В. Гусиніним і С. Шарановим [41] ще на світанку “фізики графену”. Важливо відзначити, що в силу залежності (123) від E_F рівні Ландау в квантово сильному магнітному полі перестають бути еквідистантними (як це має місце для звичайного параболічного спектра електронів).

3.8. Ефективна маса – загальний підхід

Тотожність виразів для ефективної маси в графені, отриманих з формул для рухливості (109) й для циклотронної частоти (123), вказує на те, що повинен існувати підхід до визначення ефективної маси, загальніший від традиційного, коли її вводять через другу похідну від зонного спектра поблизу його екстремуму:

$$m^* = \hbar^2 / \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k=0}. \quad (124)$$

Як ми побачили вище, модель ЛДЛ припускає дві еквівалентні форми запису струму (32), а відтак і дві еквівалентні форми запису провідності [1, 18, 20]. У першому випадку провідність записується через добуток густини станів $D(E)$ й коефіцієнта дифузії \bar{D} :

$$\sigma(E) = q^2 \bar{D} \frac{D(E)}{L} \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}, \quad (125)$$

а в другому – через добуток числа мод $M(E)$ в каналі провідності й середньої довжини вільного пробігу $\lambda(E)$:

$$\sigma(E) = \frac{q^2}{h} M(E) \lambda(E) \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}. \quad (126)$$

У фігурних дужках у (125), (126) – множники для провідників 1D, 2D, 3D вимірності відповідно, походження яких зрозумілі з формул (39)–(41).

Застосовність моделі Друде обмежена, на той час, як вирази для провідності (125) і (126) мають загальне значення. Фундаментальна різниця між цими виразами й теорією Друде полягає в тому, що усереднення (65), (66):

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \quad (127)$$

робить провідність властивістю поверхні Фермі: провідність визначається рівнями енергії, близькими до $E = E_{F0}$. Натомість у моделі Друде провідність фактично залежить від загальної електронної густини, підсумованої за всім спектром енергій, що й накладає обмеження на застосовність цієї моделі. Адже від діелектриків до металів провідність змінюється на десятки порядків, хоча загаль-

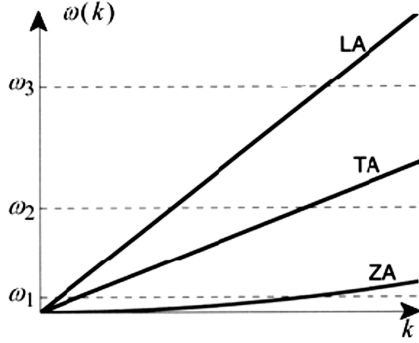


Рис. 15. До обчислення густини фононних станів на різних частотах

не число електронів і там і там приблизно однако-
ве. Прийнято вважати, що в металі значно біль-
ше число “вільних” електронів – проте саме понят-
тя “вільних” електронів значною мірою інтуїтивне.
Правильна відповідь полягає в тому, що для діелек-
триків притаманні вельми низька густина станів
і число мод провідності саме в околі $E = E_{F0}$.

Можна показати (див., наприклад, [1, 2, 20]),
що для довільних провідників – не лише кристалі-
чних, а й аморфних, чи навіть молекулярних – не-
залежно від конкретного вигляду закону дисперсії
 $E(p)$, густина станів $D(E)$, швидкість $v(E)$ та ім-
пульс $p(E)$ зв’язані з повним числом електронних
станів $N(E)$ з енергією, меншою від значення E ,
фундаментальним співвідношенням

$$D(E)v(E)p(E) = N(E)d, \quad (128)$$

де d – вимірність провідника, а повне число станів
 $N(E)$ записується як:

$$N(E) = \int_{-\infty}^E D(E) dE. \quad (129)$$

Використовуючи (128) для обчислення провідності
(125) з урахуванням значення коефіцієнта дифузії

$$\bar{D} = \langle \nu_x^2 \tau_p \rangle, \quad (130)$$

для 3D-провідника одержуємо

$$\sigma(E) = q^2 \frac{N(E) \tau_p(E)}{A \cdot L m(E)}, \quad (131)$$

де масу визначено як:

$$m(E) = \frac{p(E)}{\nu(E)}. \quad (132)$$

Фундаментальне співвідношення (128) справедли-
ве як для параболічної дисперсії, так і для лінійної.
При цьому, виходячи з (132), лише для квадратич-
ного спектра маса носіїв струму не залежить від
енергії; для інших законів дисперсії, зокрема й для
лінійного, як у графені, це вже не так.

Вираз для провідності (131) виглядає точнісінь-
ко як у моделі Друде, якщо $N/(A \cdot L)$ вважати кон-
центрацією електронів n . При низьких температу-
рах це справді так, оскільки усереднення (127) при
 $E = E_{F0}$ дає

$$\sigma = \left(q^2 \frac{N(E) \tau_p}{A \cdot L m} \right)_{E=E_{F0}} = q^2 n \tau_p / m, \quad (133)$$

де $N(E)$ при $E = E_{F0}$ є повним числом електронів.
Однак при ненульовій температурі ситуація скла-
дніша й потребує ретельнішого розгляду.

3.9. Густина фононних станів у графені

Густина фононних станів і фононні моди в моделі
ЛДЛ розглянуто нами в [2, 19]. У графені, вихо-
дячи з його фізичної природи, на додачу до оптич-
них коливань, які мають вельми високу частоту
в силу міцності σ -зв’язків, можуть реалізуватися
поздовжні LA та поперечні TA акустичні колива-
ння в площині x, y , а також так звані “вигинні”
(flexural/ZA) акустичні моди, за яких атоми змі-
щуються з цієї площини по осі z [66]. Якісно хід
цих мод зображено на рис. 15.

Обчислимо густина фононних станів на певних
конкретних частотах ω_1, ω_2 і ω_3 . Якщо поздовжні
LA і поперечні TA акустичні моди можна апрокси-
мувати звичайною лінійною залежністю $\omega(k)$:

$$\begin{aligned} \omega &= v_g^{LA} k, \\ \omega &= v_g^{TA} k, \end{aligned} \quad (134a)$$

то вигинні моди ZA найкраще апроксимуються
квадратичною залежністю вигляду:

$$\omega \propto \text{Const}^{ZA} \cdot k^2, \quad (134b)$$

де для графену $v_g^{LA} \approx 2 \cdot 10^4$, $v_g^{TA} \approx 1,5 \cdot 10^4$ м/с,
 $\text{Const}^{ZA} \approx 5 \cdot 10^{-7}$ м²/с [66, 67].

Використовуючи (134) і застосовуючи стандар-
тний формалізм [2], для густини фононних LA і
TA мод отримуємо відомі вирази:

$$D_{2D}^{LA}(\omega) = \frac{\omega}{2\pi(v_g^{LA})^2}, \quad D_{2D}^{TA}(\omega) = \frac{\omega}{2\pi(v_g^{TA})^2}.$$

Для ZA моди натомість маємо

$$D_{2D}^{ZA}(\omega) = \frac{1}{L^2} \frac{dN_{2D}(k)}{dk} \frac{dk}{d\omega} = \frac{1}{4\pi \cdot \text{Const}^{ZA}}. \quad (135)$$

Цікаво відзначити, що середньоквадратична амплітуда вигинних коливань розходиться при скінченій температурі (оскільки їх густина станів (135) не залежить від частоти), а, отже вільний графен (без підкладки) повинен спонтанно скручуватися в нанотрубку.

На частоті ω_1 (рис. 15) внесок у густину фонових станів роблять усі три моди:

$$\begin{aligned} D_{2D}^{\text{tot}}(\omega_1) &= D_{2D}^{\text{LA}}(\omega_1) + D_{2D}^{\text{TA}}(\omega_1) + D_{2D}^{\text{ZA}}(\omega_1) = \\ &= \frac{\omega_1}{2\pi(v_g^{\text{LA}})^2} + \frac{\omega_1}{2\pi(v_g^{\text{TA}})^2} + \frac{1}{4\pi \cdot \text{Const}^{ZA}}, \end{aligned} \quad (136a)$$

на частоті ω_2 – тільки моди LA і TA:

$$\begin{aligned} D_{2D}^{\text{tot}}(\omega_2) &= D_{2D}^{\text{LA}}(\omega_2) + D_{2D}^{\text{TA}}(\omega_2) = \\ &= \frac{\omega_2}{2\pi(v_g^{\text{LA}})^2} + \frac{\omega_2}{2\pi(v_g^{\text{TA}})^2}, \end{aligned} \quad (136b)$$

а на частоті ω_3 – тільки мода LA:

$$D_{2D}^{\text{tot}}(\omega_3) = D_{2D}^{\text{LA}}(\omega_3) = \frac{\omega_3}{2\pi(v_g^{\text{LA}})^2}. \quad (136c)$$

3.10. Внесок електронів і фононів у теплопровідність графену

Вивчення термічних властивостей графену розпочалося дещо пізніше від вивчення його унікальних електрофізичних чи оптичних властивостей. Проте на цей час їм теж присвячено велику кількість робіт (див., наприклад, огляд [66]). Оцінимо внесок електронів і фононів у теплопровідність графену. Як відомо, теплопровідність діелектриків визначається фононами, теплопровідність металів – електронами. Для напівметалу графену відповідь на питання про те, який внесок у теплопровідність домінує, не очевидна.

Модель ЛДЛ дозволяє відповісти на поставлене питання, оскільки в рамках цієї моделі і перенесення струму й тепла електронами, і перенесення тепла фононами можна розглянути в рамках єдиного підходу. Для цього ще раз наведемо другий з еквівалентних виразів для електричного струму в моделі ЛДЛ у вигляді:

$$I = \frac{q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(\frac{M\lambda}{L + \lambda} \right)_{\text{el}} (f_1(E) - f_2(E)), \quad (137)$$

де індекс el нагадує, що йдеться про число електронних мод провідності (11) і про довжину вільного пробігу електронів. Але вираз для перенесеного фононами теплового потоку можна отримати, просто замінивши в (137) електричний заряд q на енергію фонона $\hbar\omega$ (бо переноситься вже не заряд, а тепло), число електронних мод провідності та довжину вільного пробігу для електронів – на відповідні величини для фононів [2, 19], і фермівські функції розподілу (1) – на функції Бозе–Ейнштейна:

$$\begin{aligned} n_1(\omega) &= \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT_1) - 1} \\ i \\ n_2(\omega) &= \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT_2) - 1}. \end{aligned}$$

Провівши ці прості заміни, отримаємо фізично зрозумілий вираз для теплового потоку, зумовленого фононами:

$$I_Q = \frac{1}{h} \int_0^{+\infty} d(\hbar\omega) \left(\frac{M\lambda}{L + \lambda} \right)_{\text{ph}} \hbar\omega (n_1(\omega) - n_2(\omega)). \quad (138)$$

Таким чином, електронна теплопровідність графену через (66) і (68) пропорційна числу електронних мод, натомість фононна згідно з (138) – числу фонових мод. Згідно з (94), число мод електронної провідності в графені становить:

$$M_{2D}(E) = \frac{2|E|}{\pi\hbar v_F}.$$

Натомість для числа мод фононів можна записати [2, 19]:

$$M_{2D}(\omega) = 2v_g(\omega)D_{2D}(\omega) = \frac{k(\omega)}{\pi}. \quad (139)$$

Для LA і TA акустичних фононів знову використаємо лінійне дебаївське наближення (134a), а для ZA фононів – квадратичну апроксимацію (134b). Тоді для числа фонових мод маємо

$$\begin{aligned} M_{2D}^{\text{LA}}(\omega) &= \frac{\omega}{\pi v_g^{\text{LA}}}, \\ M_{2D}^{\text{TA}}(\omega) &= \frac{\omega}{\pi v_g^{\text{TA}}}, \\ M_{2D}^{\text{ZA}}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\omega}{\text{Const}^{ZA}}}, \end{aligned} \quad (140)$$

де чисельні значення параметрів v_g^{LA} , v_g^{TA} і Const^{ZA} наведено в попередньому параграфі.

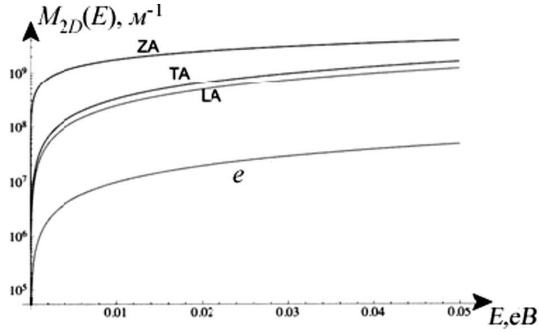


Рис. 16. Залежність числа електронних і фононних мод у графені в інтервалі 50 меВ [67]

Порівнюючи число електронних мод провідності в графені (94) з числом фононних LA і TA мод (140), ми з урахуванням рівності $E = \hbar\omega$ фактично маємо той самий за структурою вираз, за винятком того, що (94) містить ще й двійку, яка описує спінове виродження. Але чисельні значення швидкостей, що входять до (94) і до (140), суттєво різні: швидкість електронів v_F на два порядки вища від групової швидкості фононів v_g . Як наслідок, число електронних мод провідності набагато менше від числа фононних мод. Це наочно видно з рис. 16, де залежність числа всіх акустичних фононних мод відкладена разом з густиною електронних мод провідності в інтервалі $0 < E \leq 50$ меВ (цей енергетичний інтервал відповідає на верхній межі значенню $\approx 2kT$ при кімнатній температурі).

Відтак фонони роблять суттєво більший внесок у процес переносу тепла в графені, аніж електрони. А серед усіх фононних акустичних мод найбільший внесок у процес теплоперенесення, принаймні до кімнатних температур, роблять “вигинні” ZA моди, як це видно з результатів розрахунку [67], наведених на рис. 16.

3.11. Максимальна провідність графену

Для реальних графенових каналів у польових транзисторах (рис. 12) максимальна провідність, як правило, лімітується ступенем досконалості підкладки (чим менше іонізованих домішок у підкладці, тим більше значення λ_{ii} у (102)) і її діелектричною міцністю (чим вона вища, тим більшої концентрації носіїв струму в графеновому каналі можна досягнути (105)). Реальні значення питомого опору, яких при цьому досягають, становлять порядку 100 Ом/□ (значок □ означає, що йдеться

про питомий опір 2D матеріалу, який, згідно з (40), має ту саму вимірність Ом, що й повний опір). Цікаво, що мінімальну величину цього опору фактично лімітує не сам графен, а якість підкладки, на якій його розміщено!

А яка максимально можлива провідність самого графену? Розгляньмо ідеально чистий графен без дефектів і заряджених домішок підкладки, які розсіюють електрони. Експериментально таку ситуацію реалізують для так званого “протягнутого” (*stretched*) графену – дуже досконалого графену, отриманого методом мікрOMEХАНИЧНОГО відшарування, під яким витравлено певну ділянку підкладки, і, отже, ділянку самого графену “протягнуто” над підкладкою і затвором [32, 37]. Якої провідності при цьому можна очікувати? Оскільки розсіяння на короткодійних розсіювальних потенціалах недосконалостей ґратки і кулонівських потенціалах заряджених домішок у такій системі немає за означенням, то залишається розсіяння на акустичних фонах. Швидкість такого розсіяння пропорційна густині станів, а для часу розсіяння справедливий вираз [37]:

$$\tau_p(E) = \frac{4\hbar^3 \rho_m v_F^2 v_S^2}{D_A^2 kT} \left(\frac{1}{E} \right), \quad (141)$$

де ρ_m – масова густина графену на одиницю поверхні, v_S – швидкість звуку, D_A – акустичний деформаційний потенціал, який є мірою електрон-фононного зв’язку. Тоді для довжини вільного пробігу, згідно з (98), одержуємо

$$\lambda(E) = \frac{2\pi\hbar^3 \rho_m v_F^3 v_S^2}{D_A^2 kT} \left(\frac{1}{E} \right). \quad (142)$$

Далі з виразу (97) для поверхневої провідності маємо

$$\sigma_S = \frac{4q^2 \hbar \rho_m v_F^2 v_S^2}{\pi D_A^2 kT}. \quad (143)$$

Підставляючи значення параметрів графену [37] $v_S \approx 2,1 \cdot 10^4$ м/с, $\rho_m \approx 7,6 \cdot 10^{-7}$ кг/м², $D_A \approx 18$ еВ, одержуємо значення:

$$\rho_S = \frac{1}{\sigma_S} \approx 30 \text{ Ом}/\square. \quad (144)$$

Оцінка (144) дає очікувану нижню межу для питомого поверхневого опору (або верхню межу для питомої поверхневої провідності) самого графену.

Однак слід пам'ятати: в реальному графені, розміщеному на підкладці, завжди є й інші механізми розсіяння, якими ми в нашій простій оцінці знехтували; й вони неминуче збільшать поверхневий опір. Реальні найкращі досягнуті значення для великих графенових плівок, які використовуються як прозорі покриття в фотовольтаїці (при цьому використовувалося “легування” графену диполями сегнетоелектрика PVDF-TrFE, що дозволяло одержати рекордно високі значення концентрацій електронів [68]), становлять порядку 100 Ом/□.

Як це співвідноситься з поверхневим опором інших матеріалів? У сучасних MOSFET польових транзисторах на Si з $n_S \approx 10^{13}$ см⁻³ рухливість в інверсійному шарі становить $\mu_{\text{eff}} \approx 250$ см²/В·с. Отже, для цього 2D провідника $\rho_S \approx 2500$ Ом/□. Для високопровідного InGaAs з $n_S \approx 2 \cdot 10^{12}$ см⁻³ і рухливістю $\mu_{\text{eff}} \approx 1 \cdot 10^5$ см²/В·с опір становить $\rho_S \approx 300$ Ом/□. Нарешті, опір найбільш досконалих ІТО (індій – оксид олова) плівок, які використовуються сьогодні як прозорі покриття в фотовольтаїці, є порядку 100 Ом/□. Отже, прогнозована максимальна провідність графену є справді вельми високою.

3.12. Частотні межі для графенового польового транзистора

Актуальним технологічним завданням є не тільки зменшення опору графенового каналу, а й підвищення частоти роботи графенових польових транзисторів. Зменшення довжини каналу до 10 нм дозволило на цей час експериментально досягти терагерцового діапазону частот (див. [69] і посилання в ній). Отже, й тут графен виявляє унікальні властивості – адже проблема створення ефективних пристроїв для важливого терагерцового діапазону, який лежить поміж давно освоєними оптичним і радіодіапазонами, досі не вирішена до кінця. Тому важливо оцінити теоретичні межі для частоти роботи графенового польового транзистора.

Розглянемо електричне коло, що включає графеновий резистор, до якого прикладено змінну напругу. Звернімо увагу, що в більшості задач графенової фізики під вольт-амперною характеристикою розуміють залежність струму в графеновому каналі від напруги на затворі, зміною якої забезпечується “легування” графену електронами, або ж дірками. Однак у цьому випадку ми вважаємо, що затвор заземлено.

Як було показано в [70] в наближенні слабкого сигналу, кінетичне рівняння Больцмана для графенового каналу може бути переписано як:

$$L \frac{\partial I}{\partial t} = \frac{\Delta E_F}{q}, \quad (145)$$

де струм у режимі квазірівноважного балістичного транспорту пропорційний різниці хімпотенціалів на контактах ΔE_F і середньому значенню числа мод провідності $\langle M \rangle$ в околі рівноважного значення потенціалу в енергетичній смузі порядку kT :

$$I = \frac{2q}{h} \langle M \rangle \Delta E_F. \quad (146)$$

У (145) внаслідок формальних здійснених над рівнянням Больцмана у [70] перетворень введено кінетичну індуктивність L :

$$\frac{1}{L} \approx \frac{2q^2 \langle M \rangle}{h v_F l} \langle v_x^2 \rangle, \quad (147)$$

де l – довжина графенового каналу. Цей вираз дозволяє трактувати величину L , що в системі СІ має вимірність [Генрі], як індуктивність, що має, однак, не електромагнітну, а кінетичну природу, бо впливає з альтернативного представлення кінетичного рівняння Больцмана для мезоскопічної системи [71].

З іншого боку, сумарний заряд графенового каналу Q можна записати [70] після підсумовування за всіма електронними станами через співвідношення

$$C = \frac{Qq}{\Delta E_F}, \quad (148)$$

де так само формально введено квантову ємність C :

$$C \approx \frac{2q^2 \langle M \rangle l}{h v_F}. \quad (149)$$

Вирази (145), (148) дають підставу зобразити еквівалентну схему графенового каналу так, як це показано на рис. 17, а вирази (147), (149) дають значення кінетичної індуктивності й квантової ємності.

Імпеданс електричного кола, зображеного на рис. 17, описується відомим виразом:

$$Z = 2R_c + \frac{R(1 - \omega^2 LC) + \omega^2 RLC}{(1 - \omega^2 LC)^2 + (\omega RC)^2} + i \frac{\omega L(1 - \omega^2 LC) - \omega R^2 C}{(1 - \omega^2 LC)^2 + (\omega RC)^2}. \quad (150)$$

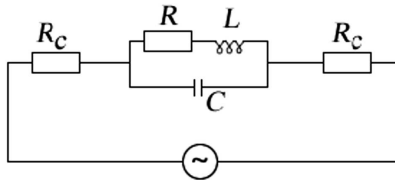


Рис. 17. Еквівалентна схема для графенового провідного каналу [70]: R – омичний опір каналу, R_C – контактні опори, C – квантова ємність, L – кінетична індуктивність

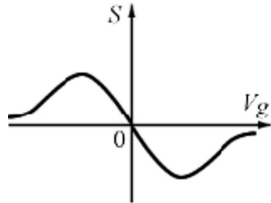


Рис. 18. Залежність коефіцієнта Зеебека у графені S від напруги на затворі V_g . Від’ємним напругам відповідає діркова провідність графену, додатним – електронна

Для $\omega = 0$ вираз (150) приводить до тривіального результату:

$$Z = 2R_C + R. \quad (151)$$

Зі зростанням частоти прикладеної змінної напруги на частоті ω_r , де уявна частина (150) робиться рівною нулеві й опір кола максимальний, спостерігатиметься резонанс. Ця частота визначається як:

$$\omega_r = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{R^2 C}{L}}; \quad \omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}}. \quad (152)$$

Оцінимо частоти, які передбачаються виразом (152). Для високоякісного графенового резистора Ландауера, де має місце балістичний режим і електрон проходить між контактами без розсіяння, $\langle v_x^2 \rangle \approx v_F^2$. Звідси з (152) з урахуванням (147), (149) маємо

$$\omega_0 \sim \sqrt{\langle v_x^2 \rangle} / l = v_F / l. \quad (153)$$

Цей інтуїтивно очікуваний вираз призводить до терагерцової частоти для графенового каналу мікронної довжини, що узгоджується за порядком величин з результатами [69]. Однак для довгого вирощеного методом CVD графенового каналу, де рух електрона має дифузійний характер, а $\sqrt{\langle v_x^2 \rangle} \sim \mu \bar{E}_{SD}$, де μ – рухливість електрона, а \bar{E}_{SD} – усереднене в часі електричне поле між контактами, для поля $\bar{E}_{SD} \sim 10^3$ В/м і для рухливості $\mu \sim 10000$ см²/В·с (що є типовим значенням

для не надто досконалого CVD графену, де носії, зокрема, розсіюються й на межах двовимірних кристалітів) частота матиме порядок мегагерців. Для ще менших полів і менших значень рухливості легко отримати й кілогерцові частоти. Таким чином, варіюючи довжину каналу (від сотень мікронів до міліметрів) і рухливість (у характерному для CVD графену інтервалі 1000–10000 см²/В·с), можна сподіватися отримати ефективні фільтри для відповідного частотного діапазону.

3.13. Термоелектричні властивості графену

В силу своїх унікальних властивостей графен може бути не тільки дуже добрим провідником, а й ефективним матеріалом для термоелектричних пристроїв. Одним із важливих завдань для термоелектрики є отримання високого значення коефіцієнта Зеебека S . З виразу (67) випливає, що коефіцієнт Зеебека визначає в основному різниця між енергією Фермі й енергією дна зони провідності. Мірою того, як рівень Фермі наближається до дна зони провідності знизу, а потім рухається вгору в зоні провідності, коефіцієнт Зеебека зменшується [2, 21].

Яких значень коефіцієнта Зеебека слід очікувати в графені? Коли рівень Фермі в графені проходить через точку Дірака, в якій дотикаються валентна зона і зона провідності, “легування” графену затвором відсутнє, зумовлена ним концентрація носіїв нульова. Проте за $T > 0$ існують “теплові” електрони і дірки, народжені термічним перекиданням з валентної зони в зону провідності. В силу абсолютної симетричності станів цих “теплових” електронів і дірок, що описуються виразом (84), коефіцієнт Зеебека, виходячи з виразу (67), нульовий (внесок станів, розташованих над рівнем Фермі, рівний за величиною і протилежний за знаком внескові станів, розташованих під рівнем Фермі).

Однак коли напруга на затворі ненульова, у “легованому” таким чином графені, коли рівень Фермі віддалений від точки Дірака на кілька kT (цього легко досягнути експериментально), можна очікувати значення коефіцієнта Зеебека, близького до $S \approx 2 \frac{k}{q}$, оскільки має місце різка асиметрія внесків станів “над” і “під” рівнем Фермі у формулі (67). Справді, експериментально вимірювані значення S у графені для кімнатних температур можуть дося-

гати порядку 100 мкВ/К (див. [72]), тобто близько 60% граничної величини $S \approx 2\frac{k}{q}$. При ще дальшому зростанні рівня Фермі коефіцієнт Зеебека зменшується в силу того, що графен набуває все більш металічних характеристик і асиметрія станів “над” і “під” хімпотенціалом у виразі (67) зменшується.

Як видно з рис. 18, змінюючи напругу на затворі, можна отримати зміну типу провідності графену і, як наслідок, зміну знака його коефіцієнта Зеебека. При цьому загальна залежність коефіцієнта Зеебека від напруги на затворі V_g матиме вигляд антисиметричної функції ($S(V_g) = -S(-V_g)$). Зрозуміло, що для отримання найкращих термоелектричних характеристик графену слід працювати в області помірних напруг на затворі (яким відповідає віддаленість рівня Фермі від точки Дірака на кілька значень kT).

У роботі [73] теоретично показано, що коефіцієнт Зеебека в графені можна додатково суттєво збільшити, внівши у спектр щілину заборонених станів і зробивши напівметал вузькощілинним напівпровідником (експериментально це досягається шляхом внесення дефектів і деформацій, формування графенових нанострічок, гідрогенізації поверхні тощо). При цьому відповідно до міркувань, викладених у [2, 20], має спостерігатися максимум коефіцієнта Зеебека при наближенні рівня Фермі до краю щілини.

Зведення аналітичних виразів для термоелектричних коефіцієнтів графену в балістичному й дифузійному режимі наведено в [74].

4. Висновки

Підб'ємо підсумки. У методичному огляді, розрахованому на науковців, викладачів та студентів вищої школи, ми виклали базові положення узагальненої моделі транспорту електронів у режимі лінійного відгуку, яку було розвинуто Р. Ландауером, С. Датта та М. Лундстромом (модель ЛДЛ) [11–17]. Ця модель набуває протягом останнього часу дедалі більшої популярності як в університетських курсах, так і серед дослідників, оскільки дозволяє побудувати загальну схему опису транспортних явищ у рамках концепції “знизу – вгору”, не вдаючись до тих уявлень традиційної фізики об'ємних матеріалів, які вочевидь погано працюють (або й не працюють зовсім) у нанофізиці. Водночас модель ЛДЛ може бути застосовано до

провідника будь-якої вимірності, будь-якого масштабу і з довільним законом дисперсії, а також для опису транспорту в балістичному, квазібалістичному або дифузійному режимі. У рамках моделі ЛДЛ зрозумілими стають особливості рухливості електронів, дисипації тепла і падіння напруги в балістичних резисторах, до яких вочевидь не застосовні традиційні уявлення “об'ємної” фізики.

У рамках моделі ЛДЛ ми спробували дати послідовний виклад фізики основних транспортних характеристик такого інтенсивно досліджуваного починаючи з 2004 року матеріалу, як графен. Нами послідовно описано густину електронних станів і залежність концентрації носіїв струму від напруги на затворі; залежність числа мод провідності від енергії й величину максимальної провідності; різні механізми розсіяння носіїв в графені, зумовлену цим рухливість, визначену згідно з формулою Друде; циклотронну частоту і ефективну масу носіїв у графені; частотні межі роботи графенового польового транзистора; функцію щільності фононних станів; порівняльний внесок електронів і фононів у теплопровідність графену; залежність коефіцієнта Зеебека в графені від напруги на затворі. Показано, що в рамках моделі ЛДЛ може бути отримано прості й наочні пояснення багатьох складних транспортних явищ, які неможливо зрозуміти, застосовуючи до графену традиційні підходи, базовані на моделі Друде.

При цьому поза межами статті залишилися велика кількість важливих явищ, також пов'язаних з провідністю графену (наявність мінімальної квантової провідності, парадокс Клейна, питання екранування, квантовий ефект Холла в графені тощо). Автори, однак, сподіваються, що отримані в цій статті базові відомості стануть корисними і при дальшому ознайомленні читачів з “фізикою графену”.

На завершення наголосимо: стаття є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОК) курсів лекцій “Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications”, прочитаних он-лайн в 2011 році професором Марком Лундстромом (Mark Lundstrom), а також “Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts”, прочитаних он-лайн в 2012 і 2015 роках професором Супрійо Датта (Supriyo Datta) в рамках ініціативи Purdue University/nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напрацювання авторського курсу “Фізи-

ка конденсованого середовища”, який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів факультету радіофізики, електроніки і комп’ютерних систем Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Автори щиро вдячні С.М. Рябченку і С.Г. Шарпову, чий цінні зауваження покращили рівень цієї статті (за всі недоліки, які в ній лишилися, відповідальність несуть виключно автори). Авторі також вдячні Н.Ю. Кругляк за допомогу в роботі над статтею і в підготовці її до друку.

1. Ю.А. Кругляк, Н.Ю. Кругляк, М.В. Стріха, Уроки наноелектроніки: виникнення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції “знизу–вгору”. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **9**, № 4, 5–30 (2012).
2. Ю.А. Кругляк, Н.Ю. Кругляк, М.В. Стріха, Уроки наноелектроніки: термоелектричні явища в концепції “знизу–вгору”. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **10**, № 1, 6–21 (2013).
3. Ю.А. Кругляк, Н.Ю. Кругляк, М.В. Стріха, Уроки наноелектроніки: спітроніка в концепції “знизу–вгору”. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **10**, № 2, 5–37 (2013).
4. Ю.А. Кругляк, М.В. Стріха, Уроки наноелектроніки: метод нерівноважних функцій Гріна у матричному зображенні. I. Теорія. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **10**, № 3, 22–35 (2013).
5. Ю.А. Кругляк, М.В. Стріха, Уроки наноелектроніки: метод нерівноважних функцій Гріна у матричному зображенні. II. Модельні транспортні задачі. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **10**, № 4, 5–22 (2013).
6. Ю.А. Кругляк, М.В. Стріха, Уроки наноелектроніки: ефект Холла і вимірювання електрохімічних потенціалів у концепції “знизу–вгору”. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **11**, № 1, 5–27 (2014).
7. Ю.А. Кругляк, М.В. Стріха, Уроки наноелектроніки: транспорт спінів і квантовий спіновий ефект Холла в концепції “знизу–вгору”. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **11**, № 2, 5–22 (2014).
8. Ю.О. Кругляк, М.В. Стріха, Уроки наноелектроніки: квантова інтерференція і дефазування в методі нерівноважних функцій Гріна. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **11**, № 3, 5–18 (2014).
9. Ю.О. Кругляк, М.В. Стріха, Уроки наноелектроніки: роль електростатики й контактів у концепції “знизу–вгору”. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **11**, № 4, 27–42 (2014).
10. Ю.О. Кругляк, М.В. Стріха, Уроки наноелектроніки: електричний струм і другий закон термодинаміки у концепції “знизу–вгору”. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **12**, № 2, 5–26 (2015).
11. R. Landauer, Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223–231 (1957).
12. R. Landauer, Electrical resistance of disordered one dimensional lattices. *Philos. Mag.* **21**, 863–867 (1970).
13. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (World Scientific Publishing Company, Hackensack, New Jersey, 2012); 2015: www.edx.org/school/purdue.
14. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
15. S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
16. M. Lundstrom and C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (World Scientific Publishing Company, Hackensack, New Jersey, 2013); www.nanohub.org/resources/11763.
17. M. Lundstrom, *Nanoscales Transistors*, www.nanohub.org/courses/NT.
18. Yu.A. Kruglyak and M. Strikha, Landauer–Datta–Lundstrom generalized electron transport model for micro- and nanoelectronics. In *Proc. 2015 IEEE 35th Intern. Conf. Electronics Nanotech. (ELNENO), April 21–24, 2015, Kyiv, Ukraine*, pp. 70–74; DOI: 10.1109/ELNENO.2015.7146837.
19. Yu.A. Kruglyak and M. Strikha, Heat flow by phonons in Landauer–Datta–Lundstrom transport model for micro- and nanoelectronics. In *Proc. 2015 IEEE 35th Intern. Conf. Electronics Nanotech. (ELNENO), April 21–24, 2015, Kyiv, Ukraine*, pp. 75–80; DOI: 10.1109/ELNENO.2015.7146838.
20. Ю.О. Кругляк, М.В. Стріха, Узагальнена модель електронного транспорту в мікро- і наноелектроніці. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **12**, № 3, 4–27 (2015).
21. Ю.О. Кругляк, М.В. Стріха, Термоелектричні явища та пристрої з позицій узагальненої моделі транспорту електронів. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **12**, № 4, 5–18 (2015).
22. Ю.О. Кругляк, М.В. Стріха, Термоелектричні коефіцієнти в узагальненій моделі транспорту електронів. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології **13**, № 1, 5–25 (2016).
23. R.F. Pierret, *Semiconductor Device Fundamentals* (Addison–Wesley, Reading, MA, 1996).
24. H.C. Berg, *Random walks in biology* (Princeton University Press, Princeton, 1993).
25. B.J. van Wees, H. van Houten, C.W.J. Beenakker, J.G. Williamson, L.P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C.T. Foxon, Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848 (1988).
26. M.S. Shur, Low ballistic mobility in GaEs HEMTs. *IEEE Electron Dev. Lett.* **23**, 511 (2002).

27. Jing Wang and M. Lundstrom, Ballistic transport in high electron mobility transistors. *IEEE Trans. Electron Dev.* **50**, 1604 (2003).
28. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела* (Москва, Мир, 1979).
29. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* **306**, 666–669 (2004).
30. М.В. Стріха, Фізика графену: стан і перспективи. *Сенсорна електроніка і мікросистемні технології* **7**, № 3, 5–13 (2010).
31. В. Гусинін, В. Локтєв, В. Шараров, Графен: неймовірне стало можливим. *Вісник НАН України* № 12, 51–59 (2010).
32. A.K. Geim, Graphene: status and prospects. *Science* **324**, 1530–1534 (2009).
33. K.S. Novoselov, Beyond the wonder material. *Physics World* **22**, 27–30 (2009).
34. С.В. Морозов, К.С. Новоселов, А.К. Гейм, Электронный транспорт в графене. *Успехи физических наук* **178**, № 7, 776–780 (2008).
35. A.K. Geim and K.S. Novoselov, The rise of graphene. *Nature Mat.* **6**, 183–191 (2007).
36. М.В. Стріха, Нерівноважні електрони й дірки в графені (огляд). *Сенсорна електроніка і мікросистемні технології* **8**, № 1, 10–19 (2011).
37. S. Das Sarma, S. Adam, E.H. Hwang, and E. Rossi, Electronic transport in two-dimensional graphene. *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407–470 (2011).
38. V.P. Gusynin and S.G. Sharapov, Unconventional integer quantum hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005).
39. V.P. Gusynin and S.G. Sharapov, Transport of Dirac quasiparticles in graphene: Hall and optical conductivities. *Phys. Rev. B* **73** 245411 (2006).
40. V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, and H. Beck, Magnetic oscillations in planar systems with the Dirac-like spectrum of quasiparticle excitations. *Phys. Rev. B* **69**, 075104 (2004).
41. V.P. Gusynin and S.G. Sharapov, Magnetic oscillations in planar systems with the Dirac-like spectrum of quasiparticle excitations. II. Transport properties. *Phys. Rev. B* **71**, 125124 (2005).
42. V.P. Gusynin and S.G. Sharapov, Unusual microwave response of Dirac quasiparticles in graphene. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 256802 (2006).
43. В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, *Наноструктуры: физика, технология, применения* (НГТУ, Новосибирск, 2008).
44. Mingsheng Xu, Tao Liang, Minmin Shi, and Hongzheng Chen, Graphene-like two-dimensional materials. *Chem. Rev.* **113**, № 5, 3766–3798 (2013).
45. Qing Tang, Zhen Zhou, and Zhongfang Chen, Innovation and discovery of graphene-like materials via density-functional theory computations. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science* **5**, 360–379 (2015).
46. P.R. Wallace, The band theory of graphite. *Phys. Rev.* **71**, 622–629 (1947).
47. J.W. McClure, Diamagnetism of graphite. *Phys. Rev.* **104**, 666–671 (1956).
48. J.C. Slonczewski and P.R. Weiss, Band structure of graphite. *Phys. Rev.* **109**, 272–279 (1958).
49. T. Ando, Theory of electronic states and transport in carbon nanotubes. *J. Phys. Soc. Japan* **74**, 777–817 (2005).
50. N.H. Shon and T. Ando, Quantum transport in two-dimensional graphite system. *J. Phys. Soc. Japan* **67**, 2421–2429 (1998).
51. R.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov, Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature* **438**, 197–200 (2005).
52. Y. Zhang, Y.-W. Tan, H.L. Stormer, and P. Kim, Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature* **438**, 201–204 (2005).
53. N.M.R. Peres, J.M.B. Lopes dos Santos, and T. Stauber, Phenomenological study of the electronic transport coefficients of graphene. *Phys. Rev. B* **76**, 073412 (2007).
54. W. Zhu, V. Perebeinos, M. Freitag, and P. Avouris, Carrier scattering, mobilities, and electrostatic potential in monolayer, bilayer, and trilayer graphene. *Phys. Rev. B* **80**, 235–402 (2009).
55. V. Perebeinos and P. Avouris, Inelastic scattering and current saturation graphene. *Phys. Rev. B* **81**, 195442 (2010).
56. R.B. Laughlin, *Condensed Matter Theory (II): Graphene Band Structure/Graphene Density of States*, <http://large.stanford.edu/courses/2008/ph373>.
57. S. Datta, *Graphene Bandstructures* (Purdue University, Purdue, 2008); www.nanohub.org/resources/5710.
58. S. Datta, *Graphene Density of States I* (Purdue University, Purdue, 2008); www.nanohub.org/resources/5721.
59. S. Datta, *Graphene Density of States II* (Purdue University, Purdue, 2008); www.nanohub.org/resources/5722.
60. Е.В. Горбар, С.Г. Шараров, *Основи фізики графену* (Київ, 2013).
61. Ю.А. Кругляк, Н.Е. Кругляк, Методические аспекты расчета зонной структуры графена с учетом σ -остова. Теоретические основы. *Вестник Одес. гос. эколог. ун-та* № 13, 207–218 (2012).
62. M.V. Strikha, Non volatile memory of new generation and ultrafast IR modulators based on graphene on ferroelectric substrate. In: *Functional Nanomaterials and Devices for Electronics, Sensors and Energy Harvesting*, edited by A. Nazarov, F. Balestra, V. Kilchytska, D. Flandre (Springer, Berlin, 2014), p. 163–178.
63. M. Lundstrom, *Sums in k-space/Integrals in Energy Space* (Purdue University, Purdue, 2009); www.nanohub.org/resources/7296.
64. D. Berdebes, T. Low, and M. Lundstrom, *Lecture Notes on Low Bias Transport in Graphene: An Introduction* (Purdue University, Purdue, 2009); www.nanohub.org/resources/7435.

65. M. Lundstrom and C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (World Scientific Publishing Company, Hackensack, New Jersey, 2013); www.nanohub.org/resources/11763.
66. D. Nika and A.A. Balandin, Two-dimensional phonon transport in graphene. *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 233203 (2012).
67. D. Singh, J.Y. Murthy, and T.S. Fisher, Spectral phonon conduction and dominant scattering pathways in graphene. *J. Appl. Phys.* **110**, 094312 (2011).
68. А.І. Курчак, М.В. Стриха, Провідність графену на сегнетоелектрику PVDF-TrFE. *УФЖ* **59**, 623–628 (2014).
69. J. Zheng, L. Wang, R. Quhe, Q. Liu, H. Li, D. Yu, W.N. Mei, J. Shi, Z. Gao, and J. Lu, Sub-10 nm gate length graphene transistors: operating at terahertz frequencies with current saturation. *Sci. Rep.* **3**, 1314–1322 (2013).
70. М.В. Стриха, Частотні межі для графенового провідного каналу, зумовлені наявністю квантової ємності та кінетичної індуктивності. *УФЖ* **60**, 355–359 (2015).
71. S. Salahuddin, M. Lundstrom, and S. Datta, Transport effects on signal propagation in quantum wires. *IEEE Transactions on Electron Devices* **52**, 1734–1742 (2005).
72. А.Ф. Варламов, А.В. Кавокин, И.А. Лукьянчук, С.Г. Шараров, Аномальные термоэлектрические и термомагнитные свойства графена. *Успехи физических наук* **182**, 1229–1234 (2012).
73. S.G. Sharapov and A.A. Varlamov, Anomalous growth of thermoelectric power in gapped graphene. *Phys. Rev. B* **86**, 035430 (2012).
74. Ю.А. Кругляк, Графен в транспортной модели Ландауэра–Датты–Лундстрема. *ScienceRise* **2**, № 2(7), 93–106 (2015).

Одержано 1.12.15

Ю.А. Кругляк, М.В. Стриха

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ
ЛАНДАУЭРА–ДАТТА–ЛУНДСТРОМА
В ПРИМЕНЕНИИ К ТРАНСПОРТНЫМ
ЯВЛЕНИЯМ В ГРАФЕНЕ

Резюме

В методическом обзоре, рассчитанном на исследователей, преподавателей и студентов высшей школы, излагается обобщенная модель транспорта электронов в режиме линейного отклика, развитая Р. Ландауэром, С. Датта и М. Лундстромом (ЛДЛ) применительно к проводникам лю-

бой размерности, любого масштаба и произвольной дисперсии, работающих в баллистическом, квазibalлистическом или диффузионном режиме. Обсуждены особенности подвижности электронов, а также диссипация тепла и падение напряжения в баллистических резисторах.

С позиций транспортной модели ЛДЛ обсуждаются также характеристики графена, как плотность электронных состояний и зависимость концентрации носителей тока от напряжения на затворе, зависимость числа мод проводимости от энергии и величина максимальной проводимости, различные механизмы рассеяния в графене и обусловленная ими подвижность, определенная по формуле Друде, циклотронная частота и эффективная масса носителей в графене, частотные пределы работы графенового полевого транзистора, функция плотности фононных состояний, и сравнительный вклад электронов и фононов в теплопроводность графена.

Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha

GENERALIZED
LANDAUER–DATTA–LUNDSTROM
MODEL IN APPLICATION TO TRANSPORT
PHENOMENA IN GRAPHENE

Summary

The generalized model of electron transport in the linear response regime developed by R. Landauer, S. Datta, and M. Lundstrom (LDL model) with application to the resistors of any dimension, any size, and arbitrary dispersion working in the ballistic, quasiballistic, or diffusion regimes is summarized in a tutorial review article for the researchers and universities' teachers and students. The peculiarities of the electron mobility, as well as the dissipation of heat and the voltage drop in ballistic resistors, are also under consideration.

On the basis of the LDL transport model, the characteristics of graphene such as the density of electronic states, dependence of the concentration of carriers on the gate voltage, dependence of the number of modes on the energy, maximum conductivity value, various mechanisms of scattering of carriers and the corresponding mobility determined through the Drude formula, cyclotron frequency, effective mass of carriers, frequency limits for a graphene FET, function of the density of phonon states, and relative contribution of electrons and phonons to the thermal conductivity are discussed.