

ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b, 73.22.Pr, 73.23.Ad, 84.32.Ff, 85.35.-p

АНИЗОТРОПІЯ ПРОВІДНОСТІ ДВОШАРОВОГО ГРАФЕНУ ПРИ СТИСКУ ВЗДОВЖ НАПРЯМКІВ «КРІСЛА» І «ЗИГЗАГУ»

В. Г. Литовченко, А. І. Курчак, М. В. Стріха

*Інститут фізики напівпровідників ім.В.Лашкарьова НАН України,
пр. Науки, 46, 03028 Київ, Україна,
maksym_strikha@hotmail.com*

АНИЗОТРОПІЯ ПРОВІДНОСТІ ДВОШАРОВОГО ГРАФЕНУ ПРИ СТИСКУ ВЗДОВЖ НАПРЯМКІВ «КРІСЛА» І «ЗИГЗАГУ»

В. Г. Литовченко, А. І. Курчак, М. В. Стріха

У рамках формалізму методу сильного зв'язку отримано хвильову функцію і зонний спектр стиснутого двошарового графену (ДГ), а також вирази для тензора провідності при стисковій в напрямку як «крісла» (вісь x), так і «zigzag» (вісь y). Суттєва (понад 20%) анізотропія провідності, яка при цьому виникає, може бути використана при створенні нових чутливих тензорів механічних напружень.

Ключові слова: двошаровий графен, стиск, анізотропія провідності, тензори напружень

ANISOTROPY OF BILAYER GRAPHENE CONDUCTIVITY UNDER COMPRESSION ALONG “ARMCHAIR” AND “ZIGZAG” DIRECTIONS

V. G. Litovchenko, A. I. Kurchak, M. V. Strikha

Within a tight binding model formalism we obtained the wave function and band spectrum of strained bilayer graphene (BG), as well as the expressions for the conductivity tensor under strain along “armchair” (x axis) and “zigzag” (y axis) directions. An arising essential (over 20%) anisotropy of conductivity can be used for the fabrication of new sensitive tensors of mechanical tensions.

Key words: bilayer graphene, compression, conductivity anisotropy, tension tensors

АНИЗОТРОПИЯ ПРОВОДИМОСТИ ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА ПРИ СЖАТИИ ВДОЛЬ НАПРАВЛЕНИИ «КРЕСЛА» И «ЗИГЗАГА»

В. Г. Литовченко, А. И. Курчак, М. В. Стриха

В рамках формализма модели сильной связи мы получили волновую функцию и зонный спектр сжатого двухслойного графена (ДГ), а также выражения для тензора проводимости при сжатии вдоль направления «кресла» (ось x) и «зигзага» (ось y). Возникающая при этом существенная (свыше 20%) анизотропия проводимости может быть использована при изготовлении новых чувствительных тензоров механических напряжений.

Ключевые слова: двухслойный графен, сжатие, анизотропия проводимости, тензоры напряжения

У роботі [1] у рамках методу сильного зв'язку нами досліджено трансформацію зонного спектру двошарового графену (ДГ, англ. bilayer graphene) зі зсунутими один щодо одного графеновими шарами. Показано, що в усьому діапазоні експериментально актуальних значень зсуву ДГ залишається матеріалом з нульовою забороненою зоною, однак розташування точок дотикання зони провідності і валентної зони при цьому суттєво залежить від напрямку зсуву площин одна щодо одної. Наслідком зсуву є поява суттєвої анизотропії зон, яка, в свою чергу, призводить до суттєвої (порядку 10-20%) анизотропії провідності ДГ. Обговорене можливе застосування такої анизотропії в чутливих сенсорах механічних напружень та для генерації в анізотропному багатодолинному ДГ суто долинного струму за умови рівності нулеві середнього електронного спіну й електронного струму.

Двошаровий графен (ДГ) є об'єктом інтенсивного вивчення впродовж останніх років (див. огляд [2] і літературу до нього). ДГ складається з двох графенових шарів, які через вимогу мінімізації енергії набувають конфігурації т.з. А-В («берналівського») пакування (рис.1), за якого половина атомів «верхнього» шару розташовані над атомами «нижнього» шару. Фактично ДГ є проміжною структурою між одношаровим графеном і об'ємним графітом. ДГ, як і одношаровий графен, є безщільним матеріалом, проте його спектр безпосередньо в околі точки K зони Бріллюена є вже не лінійним, а квадратичним (що, однак, на масштабі енергій одиниць і десятків меВ

декілька разів змінює вигляд і врешті-решт робиться лінійним зі збільшенням значення квазіхвильового вектора в площині xy) [3].

У [4] на основі методу сильного зв'язку показано, що прикладення до ДГ одновісного напруження в межах 6% у площині xy уздовж напрямків як «крісла», так і «зигзагу» призводить до суттєвої перебудови станів поблизу точки K , проте щілина між станами зони провідності й валентної зони при цьому не виникає. Однак питання анизотропії провідності в стиснутому ДГ (аналогічної до тої, яка досліджувалася в [1]) не вивчалася ані в [4], ані, скільки нам відомо, в інших роботах.

У рамках формалізму методу сильного зв'язку, аналогічно до [1, 4], ми отримаємо хвильову функцію і зонний спектр стиснутого ДГ, дослідимо його анизотропію, та, аналогічно до схеми, викладеної в [1], отримаємо вирази для тензора провідності при стиску в напрямку як «крісла» (вісь x), так і «зигзагу» (вісь y).

Хвильову функцію ψ ми будемо як лінійну комбінацію хвильових функцій χ , центрованих на чотирьох сусідніх атомах з координатами $\mathbf{r}_{A,B}$ двох площин (див. рис. 1):

$$\psi = C_{A1} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{A1} e^{i\vec{k}\vec{r}_{A1}} \chi(\vec{r} - \vec{r}_{A1}) + C_{B1} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{B1} e^{i\vec{k}\vec{r}_{B1}} \chi(\vec{r} - \vec{r}_{B1}) + C_{A2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{A2} e^{i\vec{k}\vec{r}_{A2}} \chi(\vec{r} - \vec{r}_{A2}) + C_{B2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{B2} e^{i\vec{k}\vec{r}_{B2}} \chi(\vec{r} - \vec{r}_{B2}) \quad (1)$$

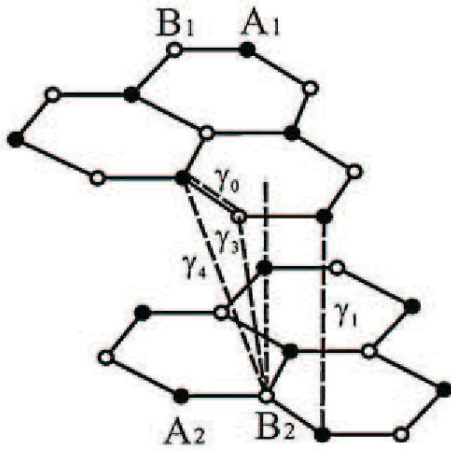


Рис. 1. Розташування атомів $A_{1,2}$ і $B_{1,2}$ у двох площинах ДГ у «берналівському» пакуванні. У позиції А атоми є в обох площинах, у позиції В – лише в одній. Вісь x відповідає напрямку «крісла», y – «зигзагу». Позначено пари близько розташованих атомів, які утворюють відповідні інтеграли перекриття γ .

Гамільтоніан стиснутого ДГ у рамках наближення пружного стиску запишеться [4] як:

$$H = \begin{pmatrix} \gamma_6 & \gamma_0 h_1 + \gamma_0^* h_2^* & \gamma_1 & \gamma_4 h_1^* + \gamma_4^* h_2^* \\ \gamma_0 h_1^* + \gamma_0^* h_2 & 0 & \gamma_4 h_1^* + \gamma_4^* h_2 & \gamma_3 h_1 + \gamma_3^* h_2^* \\ \gamma_1 & \gamma_4 h_1 + \gamma_4^* h_2^* & \gamma_6 & \gamma_0 h_1 + \gamma_0^* h_2^* \\ \gamma_4 h_1 + \gamma_4^* h_2^* & \gamma_3 h_1 + \gamma_3^* h_2 & \gamma_0 h_1 + \gamma_0^* h_2^* & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Тут

$$h_1 \equiv e^{ik_x} [b(1+\varepsilon)] \quad (3)$$

$$h_2 \equiv 2 \cos \left(k_y \left[\left(\frac{\sqrt{3}b}{2} \right) \left(1 - \frac{\varepsilon}{6} \right) \right] \right) e^{ik_x [(b/2)(1+\varepsilon)]} \quad (4)$$

Тут $b = 0,142$ нм – довжина зв'язку між двома атомами в площині графену, а інтеграли перекриття між сусідніми атомами, зображені на рис.1, модифіковано з урахуванням стиску (компоненти тензора стиску ε дорівнюють

$\varepsilon_x = \varepsilon; \varepsilon_y = -\varepsilon/6; \varepsilon_z = -\varepsilon/3$ для стиску в напрямку «крісла», $\varepsilon_x = -\varepsilon/6; \varepsilon_y = \varepsilon; \varepsilon_z = -\varepsilon/3$ для стиску в напрямку «зигзагу»):

$$\begin{aligned} \gamma_0' &= \gamma_0 / (1 + \varepsilon)^2 \\ \gamma_0'' &= \gamma_0 / (1 + \varepsilon/4 + 13\varepsilon^2/48) \\ \gamma_1' &= \gamma_1 I_c^2 / [I_c^2 (1 - \varepsilon/3)^2] \\ \gamma_3' &= \gamma_3 (b^2 + I_c^2) / [[b(1 + \varepsilon)]^2 + I_c^2 (1 - \varepsilon/3)^2] \quad (5) \\ \gamma_3'' &= \gamma_3 (b^2 + I_c^2) / \left[\left[b \frac{(1 + \varepsilon)}{2} \right]^2 + \left[b \frac{\sqrt{3}}{2} (1 - \varepsilon/6) \right]^2 + I_c^2 (1 - \varepsilon/3)^2 \right] \\ \gamma_4' &= \gamma_4 (b^2 + I_c^2) / [[b(1 + \varepsilon)]^2 + I_c^2 (1 - \varepsilon/3)^2] \\ \gamma_4'' &= \gamma_4 (b^2 + I_c^2) / \left[\left[b \frac{(1 + \varepsilon)}{2} \right]^2 + \left[b \frac{\sqrt{3}}{2} (1 - \varepsilon/6) \right]^2 + I_c^2 (1 - \varepsilon/3)^2 \right] \end{aligned}$$

Тут $I_c = 0,34$ нм – відстань між площинами ДГ. Відзначмо, що інтеграли перекриття (5) записані для випадку стиску в напрямку «крісла». Для випадку стиску вздовж напрямку «зигзагу» їх легко переписати з урахуванням поданих вище формул для компонентів тензора деформації. Надалі ми використовуватимемо стандартні чисельні значення для інтегралів перекриття у ДГ без деформації [4]: $\gamma_0 = 2,598$ еВ (описує зв'язок між сусідніми атомами в одній графеновій площині); $\gamma_1 = 0,364$ еВ (описує зв'язок між двома атомами в позиції А в різних площинах); $\gamma_3 = 0,319$ еВ (описує зв'язок між двома атомами в позиції В у різних площинах); $\gamma_4 = 0,177$ еВ (описує зв'язок між двома атомами в позиціях А і В у різних площинах, див. рис.2). Врахування різного хімічного оточення атомів у позиціях А і В призводить також до появи малого інтегралу $\gamma_6 = -0,026$ еВ.

Результатом чисельного розв'язання задачі на власні значення (4) є відомий вигляд зонного спектру ДГ (див. рис.3 роботи [1]). При цьому при всіх напрямках стиску ДГ залишається матеріалом з нульовою забороненою зоною [4]. Проте розташування точок дотикання зони провідності і валентної зони при цьому суттєво залежить від напрямку стиску (рис.2). Це є очевидним наслідком зниження симетрії системи, що включає ґратку з базисом. Ще одним наслідком стиску є поява суттєвої анізотропії зон.

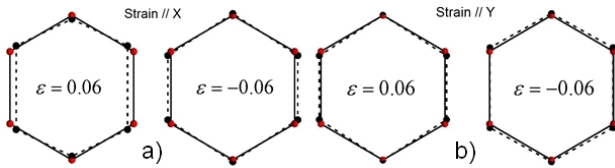


Рис. 2. Модифікація розташування точок дотикання зони провідності і валентної зони залежно від напрямку стиску S: стиск (розтяг) уздовж x (a); стиск (розтяг) уздовж y (b).

Нами розраховано зонний спектр недеформованого ДГ і матеріалу зі стиском уздовж осі x ($\varepsilon = 0,06$), отримані результати узгоджуються з [4]. З використанням наближення ефективних мас (обмеженість його застосування проаналізовано в [1]) реальні спектри, що є наслідками чисельного розв'язання (2), можуть бути апроксимовані еліпсами ефективних мас у площині k_x, k_y з точністю порядку 5%. Значення цих мас, реконструйовані з наближення простого параболічного закону дисперсії і його точного анізотропного вигляду, чисельно отриманого для енергії 0,09 eV (що відповідає реальним значенням концентрацій у ДГ порядку 10^{11} см^{-2}) подано в Таблиці 1. Як видно, стиск призводить до появи значної анізотропії зонного спектру, вигляд якої змінюється залежно від напрямку стиску.

Таблиця 1.

Ефективні маси у ДГ (у одиницях маси вільного електрона) у наближенні еліптичних поверхонь однакової енергії: без стиску, стиску уздовж x; стиск уздовж y. В останніх двох випадках індекси 1 і 2 відповідають парі й четвірці еквівалентних екстремумів, зображених на рис.2.

S = 0		Strain//X				Strain//Y			
m_1	m_2	$m_1^1=m_x$	$m_1^2=m_y$	m_2^1	m_2^2	m_1^1	m_1^2	m_2^1	m_2^2
0.064	0.069	0.057	0.0915	0.079	0.066	0.087	0.06	0.06	0.085

Електропровідність стиснутого ДГ ми розглядали в рамках стандартної схеми для багатодолинного матеріалу, аналогічно до того, як

це було зроблено в [1] для матеріалу зі зміщеними шарами. З урахуванням значень ефективних мас, наведених у Таблиці 1, тензор електропровідності запишеться як:

1. Випадок без стиску:

$$\sigma = \frac{e^2 \langle \tau_p \rangle E_f}{\pi \hbar^2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

має місце стандартна ізотропна провідність ДГ. Тут E_f - енергія Фермі, $\langle \tau_p \rangle$ - усереднений час релаксації імпульсу.

2. Стиск паралельно осі x:

$$\sigma = \frac{e^2 \langle \tau_p \rangle E_f}{\pi \hbar^2} \begin{pmatrix} 2.23 & 0 \\ 0 & 1.81 \end{pmatrix} \quad (7)$$

у провідності виникає помітна анізотропія, зумовлена індукованою стиском анізотропією зонного спектру, провідність уздовж осі x вища.

3. Стиск паралельно осі y:

$$\sigma = \frac{e^2 \langle \tau_p \rangle E_f}{\pi \hbar^2} \begin{pmatrix} 1.77 & 0 \\ 0 & 2.3 \end{pmatrix} \quad (8)$$

так само виникає анізотропія, проте в цьому випадку провідність більша вздовж осі y.

У Таблиці 2 подано значення анізотропії провідності (обчисленої як $A = \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{\sigma_0}$; де

σ_{xx}, σ_{yy} - відповідні компоненти тензора провідності, $\sigma_0 = 2$, див. (5-7)) для випадку стиску, а також, для порівняння, для випадку відносного зсуву площин ДГ, дослідженого в [1].

Таблиця 2. Анізотропія провідності для випадку стиску ДГ вздовж напрямків «крісла» і «зигзагу», а також для відносного зсуву площин ДГ одна щодо одної вздовж цих напрямків

Без деформації	Стиск		Зсув	
	x	y	x	y
0	0.21	-0.265	0.13	-0.065

Досі ми вважали, що час релаксації не залежить від напрямку. Додаткове урахування

анізотропії часу розсіяння [1] приблизно вдвічі збільшує значення анізотропії провідності, наведені в таблиці 2. Проте питання про механізми розсіяння носіїв у ДГ досі залишається дискусійним [5-7], а, отже, незрозумілі й межі застосовності того алгоритму врахування анізотропії часу релаксації, який було застосовано в [1].

Таким чином, нами показано: наслідком стиску ДГ є поява суттєвої анізотропії зон, яка, в свою чергу, призводить до суттєвої (понад 20 %) анізотропії провідності стиснутого ДГ вже для цілком помірних значень стиску ($\epsilon = 0,06$). При цьому анізотропія виявляється приблизно вдвічі більшою, аніж для випадку відносного зсуву площин ДГ, розглянутого нами в [1]. Тому може бути обговорене застосування такої анізотропії в чутливих сенсорах механічних напружень.

Наголосімо, що наші результати отримано в кількох наближеннях, межі застосовності яких проаналізовано в [1]. Насамперед, ми нехтували розкриттям щілини при прикладенні електричної напруги вздовж осі z , що накладає обмеження на величину «легкування» графену затвором (до 10^{11} см⁻²). По-друге, використання наближення еліпсоподібних зон змушує нас розглядати кінетичні енергії носіїв більші 10 еВ [3]. Нарешті, при суттєво більших деформаціях (що виллюються врешті-решт у гібридну sp^2 - sp^3 гібридизацію й появу енергетичної щілини між зоною провідності й ва-

лентною зоною, [8, 9]) слід вийти за межі використаного тут простого наближення моделі сильного зв'язку [4].

Робота підтримана НАН України й УНТЦ в рамках проекту № 5716 "Розвиток графенових технологій і дослідження базованих на графені наноструктур для наноелектроніки й оптоелектроніки".

Список використаної літератури

1. В. Г. Литовченко, А. І. Курчак, М. В. Стріха. УФЖ, **59**, 80 (2014).
2. S. Das Sarma, Shaffique Adam, E. H. Hwang, Enrico Rossi. Rev. Mod. Phys. **83**, 407 (2011).
3. E. McCann, V.I.Falko, Phys. Rev. Lett, **96**, 086805 (2006).
4. S.H. Lee, C.W. Chiua, Y.H. Ho, M.F. Lin. Synthetic Metals **160**, 2435 (2010).
5. S.Das Sarma, E.H.Hwang, E.Rossi. Phys. Rev. B **81**, 161407 (2010).
6. S.Xiao, J.-Y.Chen, S.Adam et al. Phys. Rev. B **82**, 041406 (2010).
7. H. Xu, T. Heizel, I.V.Zozulenko. Phys. Rev. B **84**, 115409 (2011).
8. V. I. Gavrilenko, N. I. Klyui, V. G. Litovchenko, V.E.Strelmetskii. Phys. Stat. Solidi **B145**, 209 (1988).
9. V. G. Lytovchenko, M. V. Strikha, M. I. Klyui, Ukr. J. Phys., **56**, 175 (2011).

Стаття надійшла до редакції 21.01.2014 р.