

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

1

DOI: 10.17223/9785946217408/242

ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО ДВУХСЛОЙНОГО АВ ГРАФЕНА

¹Бобенко Н.Г., ¹Егорушкин В.Е., ²Мельникова Н.В., ¹Пономарев А.Н.,
^{1,3}Белослудцева А.А., ^{3,4}Баркалов Л.Д.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

²Сибирский физико-технический институт имени В.Д. Кузнецова Томского государственного университета, Томск, Россия

³Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Россия

⁴Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия

Основным преимуществом двухслойного графена является возможность управления величиной запрещенной зоны [1], что в будущем может привести к созданию принципиально новых электронных компонентов, обладающих лучшими быстродействием и энергоэффективностью, чем существующие кремниевые аналоги.

Получить качественные образцы двухслойного графена намного сложнее, чем однослойного, при этом электронные и тепловые свойства двухслойного графена существенно зависят от чистоты образца и точности совмещения слоев. Экспериментальные исследования структуры материала показали, что в двухслойном графене имеют место моновакансии в одном и двух слоях, дефекты Стоуна-Уэлса, ассиметрично легированные атомы примеси, пиррольные, пиридиновые и ряд других дефектов структуры. Структурные изменения в двухслойном графене при различных ориентациях листов, сорбции и легировании его химическими элементами приводят к изменению электрических свойств от полупроводниковых до металлических [2].

Существующие методы описания беспорядка в графене рассматривают случайное расположение примесей и вакансий, не учитывая рассеяние электронов на различных структурных конфигурациях, естественно возникающих в процессе его синтеза. Несмотря на значительные усилия со стороны и экспериментаторов, и теоретиков, некоторые проблемы, касающиеся электронных свойств графеновых бислоев, до сих пор не решены. Различные теоретические подходы предсказывают разные результаты для одних и тех же образцов. Более того, экспериментальные наблюдения и интерпретация причин открытия щели в ПЭС также являются спорными. На настоящий момент в рамках существующих методов не удалось описать такие экспериментально обнаруженные явления, как открытие щели в плотности состояний графена при низких концентрациях примеси и аномальное изменение температурного хода сопротивления в области низких температур.

Нами были проведены теоретические исследования влияния формирующихся в процессе роста графена дефектов структуры на изменение плотности электронных состояний с использованием методов квантовой теории поля (метод температурных функций Грина), в рамках модели разупорядоченных наноматериалов (с ближним порядком)[3].

Для получения аналитических выражений электронного времени релаксации и ПЭС был использован следующий закон дисперсии двухслойного графена АВ $\xi(p) = \frac{v_F^2 p^2}{t_0}$ [1]. Здесь

$v_F \approx 10^6$ м/с - скорость электронов на уровне Ферми, p - импульс электронов, а $2.9\text{эВ} < t_0 < 3.16\text{эВ}$ - интеграл перескока электрона между узлами [1].

Полученное выражение для времени релаксации имеет вид:

$$\frac{1}{2\tau} = \frac{1}{2\tau_{np}} - \pi U_0^2 v_0 \frac{C(1-C)}{N} \alpha(1-BT) \quad (1)$$

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

где $\frac{1}{\tau_{np}} = 2\pi C U_0^2 \nu_0$ - время релаксации электронов на примеси, C - концентрация примеси, U_0 -

потенциал межэлектронного взаимодействия, $\nu_0 = \frac{t_0}{4\pi\hbar^2 \nu_F^2}$ - ПЭС на уровне Ферми, N -

количество атомов в области, α - параметр ближнего порядка, который в рамках нашей модели является качественной и количественной характеристикой дефектности [4],

$B = \pi \frac{R^2 m}{\hbar^2} k \approx 0.1 \text{ К}^{-1}$. Первое слагаемое в (1) совпадает с обратным временем релаксации, рассчитанным с учетом многократного упругого рассеяния электронов на примесях. Второе слагаемое соответствует вкладу от многократного упругого рассеяния электронов на ближнеупорядоченных областях.

Выражение для вклада в ПЭС от рассеяния электронов на ближнеупорядоченных структурах имеет следующий вид:

$$\Delta \nu = \frac{t_0}{2\hbar^2 \nu_F^2} \left(\arctg \left[\frac{\nu_F^2 p_0^2 \hbar}{t_0} \frac{1}{2\tau} \left/ \left(\frac{\nu_F^2 p_0^2}{t_0} \varepsilon - \varepsilon^2 - \left(\frac{\hbar}{2\tau} \right)^2 \right) \right] \right) \quad (2)$$

Вклад в ПЭС (2) зависит от температуры, концентрации примеси и параметра ближнего порядка из-за времени релаксации (1).

Сопоставления экспериментальных данных, имеющих в литературе, и теоретических расчетов ПЭС двухслойного АВ графена с различными концентрациями сорбированных и легированных атомов и типов их конфигурации в слое и на поверхности графена для разных значений температуры позволили сделать выводы о том, что наличие щели и значение плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми сильно зависит от типа и местоположения дефектов в структуре. Различное расположение чужеродных атомов относительно друг друга в слое графена приводит к изменению величины вклада в плотность электронных состояний при одной и той же концентрации примесей. Таким образом, показано, что в низкотемпературной области особое значение для электрофизических свойств разупорядоченного двухслойного АВ графена играет рассеяние электронов на локальных структурных образованиях типа ближнего порядка, формирующихся в наноматериалах в процессе их получения.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23, а также при финансовой поддержке РФФИ (грант №18-42-703019 p_мол_a) и международного проекта 7th European Community Framework Program (№612552).

Литература

1. Rozhkov A.V., Sboychakov A.O., Rakhmanov A.L., Nori F., Electronic properties of graphene-based bilayer systems // *Physics Reports*. 2016. №648. С. 1-104.
2. Cann E. M., Koshino M., The electronic properties of bilayer graphene // *Rep. Progr. Phys.* 2013. №76. С. 056503
3. Bobenko N. G., Egorushkin V. E., Melnikova N. V., Belosludtseva A. A., Barkalov L. D., and Ponomarev A. N. Low-temperature peculiarities of density of electronic states and electron transport characteristics in the disordered 2D graphene // *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*. 2018. №26(3). С. 152–157.
4. Iveronova V. I.; Katsnelson A. A. *Modern Problems of Short-Range Order* // Springer: Berlin Heidelberg, 1974. pp 306–331.