PREVODNOST GRAFEN NANO-TRAKOV

DOMACA NALOGA ZA PREDMET: FIZIKA NANOSISTEMOV

Jože Buh , Mentor: Tomaž Rejec

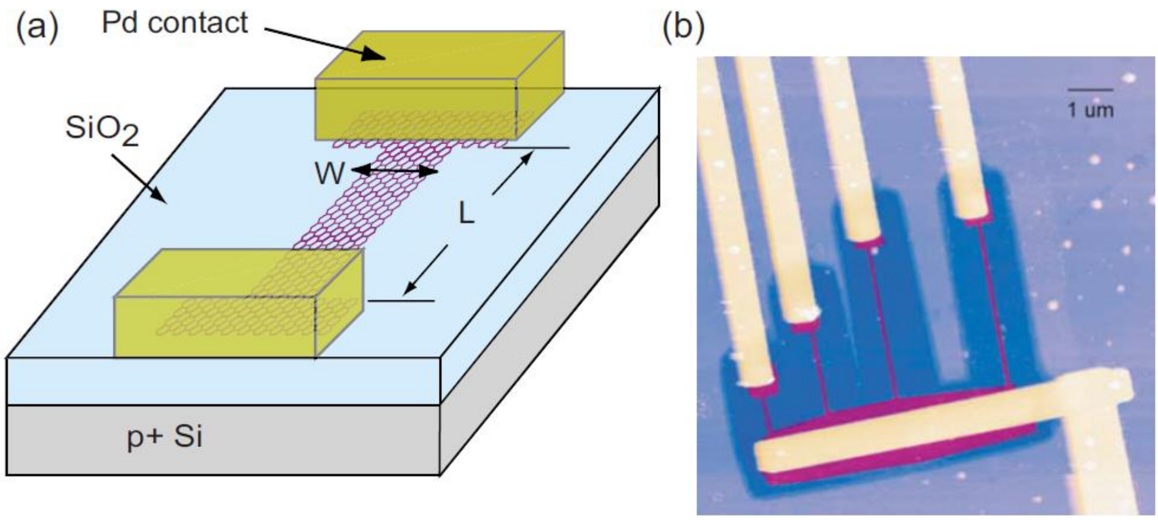
Naloga:

Cilj naloge je izračunati prevodnost nano-traku narejenega iz grafena. Pri tem se bom upiral na članek Electrical observation of subband formation in graphene nanoribbons [1].

Postavitev Experimenta:

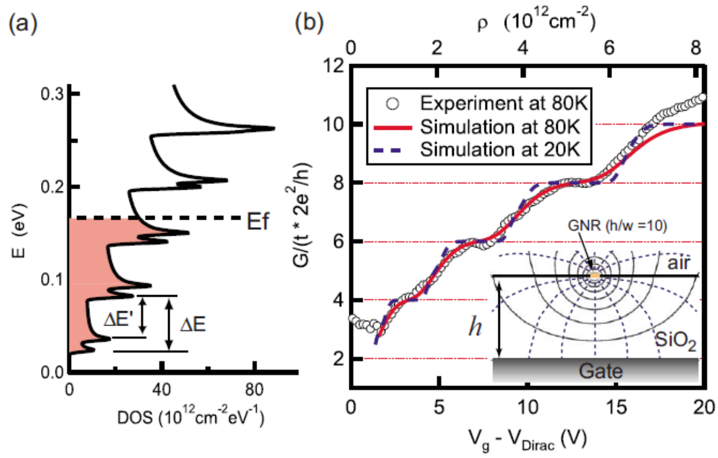
Odkritje in izolacija grafena sta omogočila mnoge experimente za preučevanje osnovnih fizikalnih konceptov v 2D materialih. Grafen je polprevodnik brez energijske verzeli vendar bi bilo za nekatere aplikacije bolj ugodno če bi v grafenu lahko imeli energijsko verzel. To lahko dosežemo tako da grafen omejimo v eni dimenziji in tako zaradi robnega pogoja odpremo energijsko verzel.

Avtorji zgoraj omenjenega članka so preučevali lastnosti 30nm ozkega traku narejenega iz enoplastnega lista grafena. Grafen je bil z mehansko eksfoliacijo nanešen na p-dopiran silicijev substrat z 300nm debelo izolativno plastjo silicijevega oksida. Kasneje so avtorji s pomočjo jedkanja z kisikovo plazmo oblikovali ozke trakove grafena. Za izvedbo meritev so s postopkom litografije naparili paladijeve elektrode na konce grafenovih trakov. Ti dve elektrodi tako služita za source in drain elektrodi silicij v substratu (pod plastjo silicijevega oksida) pa predstavlja gate elektrodo. Možno je torej sedaj meriti prevodnost tako pripravljene naprave v odvisnosti od napetosti na vratih pri različnih temperaturah. Ta meritev nam da nekaj informacij o energijski verzeli. Shema take naprave, skupaj z AFM sliko je prikazana na sliki 1.



Slika 1: *A) Shema naprave prikazuje grafenov nanotrak na silicijevem oksidu in dve elektrodi iz Paladija. Spodaj je silicij, ki služi kot gate elektroda. B) AFM slika naprave na kateri so avtorji merili prevodnost. Vijolično je obarvan grafenov trak, svetlorumene so elektrode iz paladija in modro silicijev oksid [1].*

Meritev prevodnosti v odvisnosti od napetosti na vratih razkrije platoje, ki se pojavijo pri različnih napetostih na vratih. Funkcija prevodnosti je ponovljiva. Slika 2 prikazuje prevodnost in gostoto stanj za 31 nm širok zig-zag grafenov trak.



Slika 2: *A) Gostota stanj za grafen nano trak širine 31nm. B) Prevodnost v odvisnosti od gate napetost. Spodaj desno je sheatični prikaz polja in ekvipotencialnih ploskev nanotaku. Shema prikazuje pomembno razliko v primerjavi z ploščatim kondenzatorje [1].*

Teoretično ozadje:

Najprej je poterbno izračunati disperzijo za neskončni 2D list grafena. To storim s približkom tesne vezi [2].

Pri tej metodi je potrebno izračunati prekrivalni integral za najbližje sosede s čimer za disperzijo dobimo:

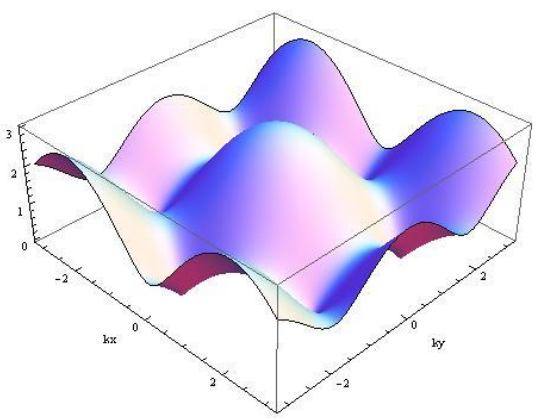
$$\varepsilon(\vec{k}) = \left|t + t\exp(-\vec{k}\overrightarrow{a_1}) + t\exp(-\vec{k}\overrightarrow{a_2})\right|,$$

tu je t prekrivalni integral $\langle\Phi_A|\Phi_B\rangle$, ki je zaradi simetrije enak za vse kombinacije najbližjih sosedov A in B atomov v mreži.

$$\varepsilon(\vec{k}) = \pm\left|g(\vec{k})\right|t$$

$$g(\vec{k}) = \sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}a\right)\cos\left(\frac{k_x}{2}a\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_x}{2}a\right)},$$

a je tukaj razdalja med najbližjima sosedoma v mreži. Kar lahko prikažem na sliki 3 za prvo briljenovo cono.



Slika 3: *Disperzija za neskončen 2D grafen za kx in ky = [-π, π].*

Pomembna je še oblika zgornje funkcije v bližini K točke grafena (točka kjer je energija najnižja) , saj nam ta pomaga najti povezavo med napetostjo na vratih in Fermijevo energijo.

$$\varepsilon(\vec{k}) \approx \frac{\sqrt{3}}{2} at|\vec{k} - \vec{k}_0|,$$

torej

$$E_F = \sqrt{\frac{\rho\pi v_F^2}{3\hbar^2}}; \qquad \rho = C_g(V_g - V_d),$$

tukaj je C_g kapaciteta silicijevega oksida med trakom grafena in ozemljeno silicijevo elektrodo.

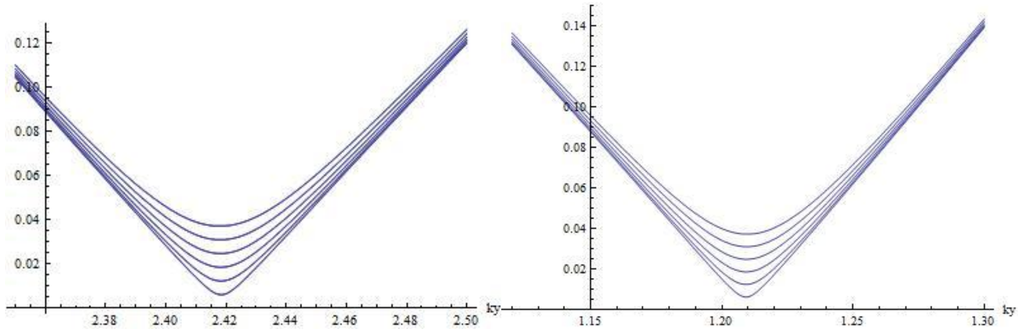
Če sedaj uvedem robni pogoj:

$$\vec{k} \cdot \vec{C} = \mathrm{INT}\pi,$$

kjer je

$$\vec{C} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$$

in kjer sta a_1 in a_2 vektorja Bravisove mreže. Za pasovno strukturo v bližini K1 in K2 točke ob upoštevanju robnega pogoja lahko izračunam prvih nekaj energijskih pasov z najnižjo energijo (slika 4). Na sliki 5 sem narisal energijsko disperzijo za grafen skupaj z črtami (ki jih določa robni pogoj) vzdolž katerih so izrisani pasovi na sliki 4.

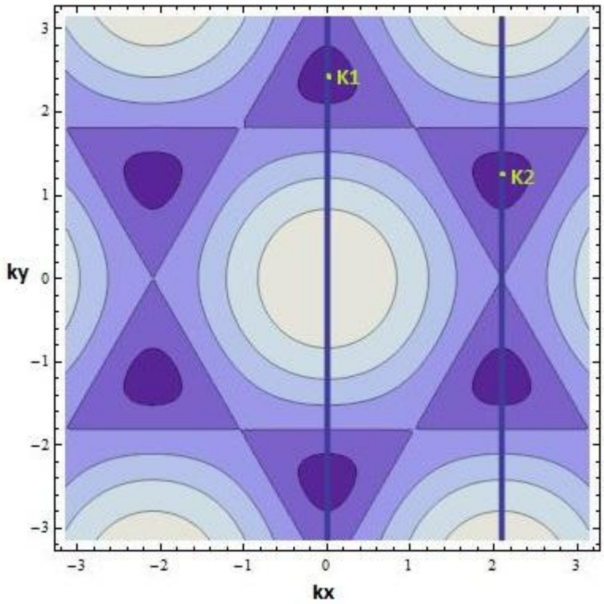


Slika 4: Levo: *Prvih nekaj pasov v bližini K (na sliki 5 označeni z K_1) točke. Prikazani so pasovi za INT=[-5,5]. Vsaka od modrih črt predstavlja dva pasova, saj za INT in –INT robni pogoj da isto obliko pasu.Vendar pa je fizikalno gledano pas z INT enak pasu z- INT.* **Desno:** *Prvih nekaj pasov v bližini K (na sliki 5 označeni z K_2) točke. Prikazani so pasovi za INT=[500,505].*

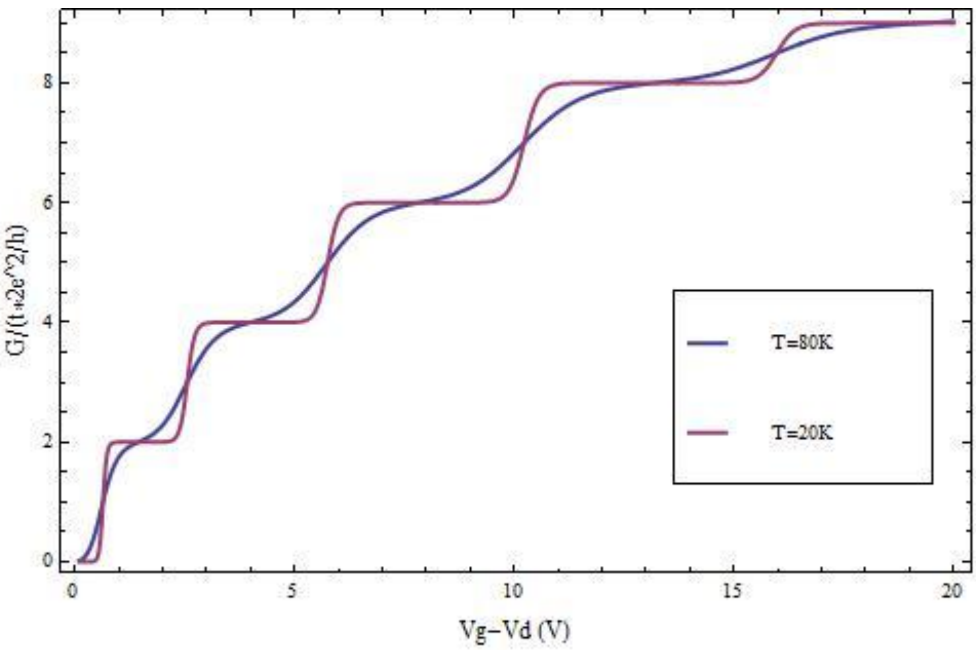
Sedaj lahko končno izračunam prevodnost v odvisnosti napetosti na vratih. Iz članka razberem povezavo med Fermijevo energijo in napetosti na vratih, ki znaša $E_F = 0.0078\sqrt{V_g}$. Sedaj lahko izračunam prevodnost z uporabo Landauerjevega pristopa [1]:

$$G = \left(2\, {e^2}/{h}\right) \sum_i \int T_i(E) \left[-\left({\partial f_0}/{\partial E}\right)\right] \mathrm{d}E,$$

Kjer seštevamo po vseh pasovih. Spodnja meja integrala je najnižja točka posameznega pasu, f_0 je Fermijeva funkcija pri dani temperaturi in $T_i(E)$ je prepustnostni koeficient, ki je enak za prvih nekaj pasov in ga lako izpostavimo iz integrala. Zgornje izračune sem napravil v programu Mathematica. Na sliki 6 je rezultat simulacije pri temperaturi 20 in 80 K. Opazim dobro ujemanje med mojimi rezultati in rezultati iz članka.



Slika 5: *'Contour plot' za energijsko disperzijo skupaj z vrisanimi črtami po katerih razreženo to disperzijo na sliki 4. Na sliki sta tudi označeni 2 fizikalno različni točki K1 in K2.*



Slika 6: *Prevodnost kot funkcija napetosti na vratih za dve različni temperaturi izračunana s pomočjo zgornje enačbe. Vidimo lahko, da je zaradi temperaturne razmazanosti fermijeve funkcije pri T=80 stopnice v prevodnosti težje opaziti. Pri višjih temperaturah sčasoma stopnic nebi več mogli opaziti, saj bi se popolnoma zamazale. Obratno so glede na to simulacijo pri nižjih temperaturah stopnice vse ostrejše.*

Komentar:

Neskončni list grafena je polprevodnik brez energijske verzeli. Ko pa iz neskončnega lista grafena izrežemo ozek trak, zaradi robnega pogoja odpremo energijsko vrzel. Za različne indekse INT dobimo različne prevodne kanale. Tok skozi te kanale pa teče zgolj, če je fermijeva energija večja (pri T=0, pri t>0 je lahko zaradi teperaturne razmazanosti E_F tudi nekoliko manjša) od minimalne energije posameznega pasu. Torej z napetostjo na vratih premikamo Fermijevo energijo in vsakič, ko ta energija preseže enega od minimumov pasov s slike 4 se nam v prevodnosti pojavi stopnica, saj k integralu dodamo dva nova kanala in sicer enega pri točki K1 in drugega pri točki K2 .

Viri:

[1] Yu-Ming Lin, Vasili Perebeinos, Zhihong Chen, Phaedon Avouris, Physical Review B 78 (2008), 161409.

[2] Ashcroft N., Mermin D., Solid State Physics, (1967).