

Leitfähigkeit von Graphen

Manuel Obergfell

15. Juni 2009

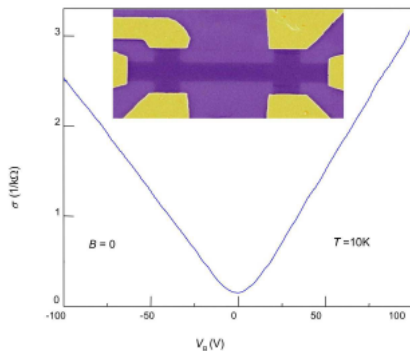
Universität
Konstanz



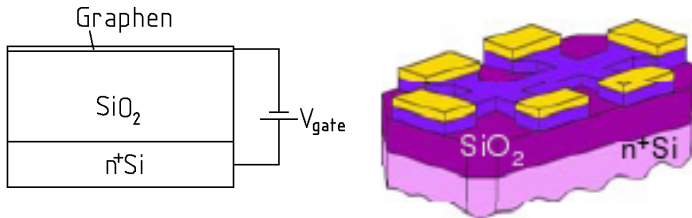
Theorieseminar: Elektronische Eigenschaften von Graphen

Übersicht

- ▶ Beeinflussung der Ladungsträgerdichte
- ▶ Modell für ballistischen Transport in Graphen
- ▶ Beschreibung für diffusiven Transport mit Hilfe der Boltzmann-Gleichung



Beeinflussung der Ladungsträgerdichte

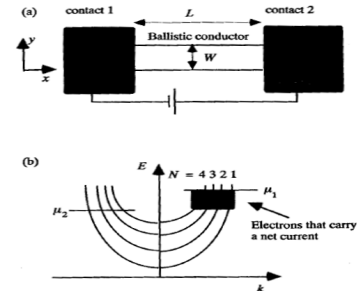


- ▶ Ladungsträgerdichte aus Beschreibung als Kondensator

$$n = \frac{q}{A} = \frac{C \cdot V_{\text{gate}}}{A}$$

Landauer Formel

- ▶ Offene Kanäle für den Transport



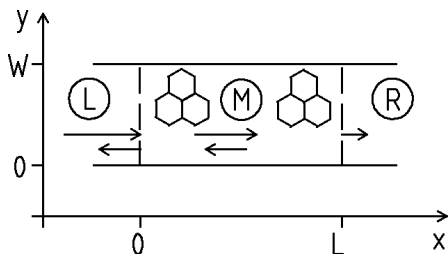
- ▶ Elektrische Leitfähigkeit - Landauer Formel

$$\Rightarrow G = \frac{2 \cdot e^2}{h} \cdot \sum_{n=0}^{N-1} T_n$$

N : Anzahl der offenen Kanäle

T_a : Transmissionswahrscheinlichkeit durch Kanal a

Ballistisches Modell für reines Graphen



- ▶ Hamiltonian am Dirac-Punkt K

$$H = -\hbar \cdot v_F \cdot \begin{pmatrix} 0 & i\partial_x + \partial_y \\ i\partial_x - \partial_y & 0 \end{pmatrix} + V(x) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + M(y) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- ▶ Randbedingungen

$$V(x < 0) = V_{\text{Kontakt}}$$

$$M(y > W) \rightarrow \infty$$

$$V(x > L) = V_{\text{Kontakt}}$$

$$M(y < 0) \rightarrow \infty$$

$$V(0 \leq x \leq L) = V_{\text{gate}}$$

$$M(0 \leq y \leq W) = 0$$

Ballistisches Modell für reines Graphen

- ▶ Dirac-Gleichung für K

$$-\hbar \cdot v_F \cdot \begin{pmatrix} 0 & i\partial_x + \partial_y \\ i\partial_x - \partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = (E - V(x)) \cdot \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}$$

- ▶ Ansatz

$$\Psi(x, y) = e^{i \cdot k_x x} \cdot \left(e^{i k_y y} \begin{pmatrix} t_1 \\ s_1 \end{pmatrix} + e^{-i k_y y} \begin{pmatrix} t_2 \\ s_2 \end{pmatrix} \right)$$

- ▶ Energiebeziehung

$$\Rightarrow \hbar^2 v_F^2 (k_x^2 + k_y^2) = (E - V_x)^2$$

- ▶ Daraus ergibt sich

$$t_1 = M_k \cdot s_1 \text{ und } s_2 = M_k \cdot t_2$$

mit

$$M_k = \frac{\hbar v_F}{E - V_x} (k_x - i k_y)$$

Geglättete Kanten

- ▶ Dirac-Gleichung für \vec{K} für y

$$-\hbar \cdot v_F \cdot \begin{pmatrix} 0 & i\partial_x + \partial_y \\ i\partial_x - \partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = \left(E - M(y) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}$$

- ▶ Ansatz

$$y > W : \quad \Psi(x, y) = e^{i \cdot K_x x} \cdot e^{-K_y y} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$y < 0 : \quad \Psi(x, y) = e^{i \cdot K_x x} \cdot e^{K_y y} \cdot \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$$

- ▶ Unendliche Masse an den Kanten

$$\begin{array}{ll} \frac{a}{b} \xrightarrow{M(y) \rightarrow \infty} -1 & \frac{c}{d} \xrightarrow{M(y) \rightarrow \infty} 1 \\ \Rightarrow \frac{\Psi_A}{\Psi_B}(W) = -1 & \frac{\Psi_A}{\Psi_B}(0) = 1 \end{array}$$

Auswirkungen der Randbedingungen

- ▶ Bei $y = W$ gilt

$$s_1 M_k e^{i k_y W} + t_2 e^{-i k_y W} = s_1 e^{i k_y W} + t_2 M_k e^{-i k_y W}$$
$$\Rightarrow \frac{t_2}{s_1} = -e^{2i k_y W}$$

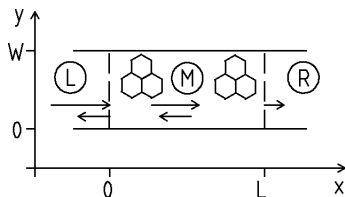
- ▶ Bei $y = 0$ gilt

$$s_1 M_k + t_2 = s_1 + t_2 M_k$$
$$\Rightarrow s_1 = t_2$$

- ▶ Der Wellenvektor in y -Richtung ist quantisiert

$$k_y = \frac{\pi}{2W} (2n + 1)$$

Transmissionswahrscheinlichkeit



- ▶ Ansatz der Wellenfunktionen für Kanal n

$$\psi^L(x) = e^{i\tilde{k}_x x} \begin{pmatrix} M_{\tilde{k}} \\ 1 \end{pmatrix} + r_n e^{-i\tilde{k}_x x} \begin{pmatrix} M_{-\tilde{k}} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\psi^M(x) = \alpha_n e^{i k_x x} \begin{pmatrix} M_k \\ 1 \end{pmatrix} + \beta_n e^{-i k_x x} \begin{pmatrix} M_{-k} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\psi^R(x) = t_n e^{i\tilde{k}_x (x-L)} \begin{pmatrix} M_{\tilde{k}} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Transmissionswahrscheinlichkeit

- ▶ Randbedingungen

$$\begin{aligned}\Psi^L(0) &= \Psi^M(0) \\ \Psi^M(L) &= \Psi^R(L)\end{aligned}$$

- ▶ Transmissionskoeffizient

$$\Rightarrow t_n = \frac{(1 + M_{\tilde{k}}^2) \cdot (1 + M_k^2)}{e^{i k_x L} \cdot (M_{\tilde{k}} - M_k)^2 + e^{-i k_x L} \cdot (1 + M_{\tilde{k}} M_k)^2}$$

- ▶ Annahme: Näherungsweise gilt $V_{\text{Kontakt}} \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow t_n = \frac{k_x}{k_x \cos(k_x L) - \frac{E - V_{\text{gate}}}{\hbar v_F} i \sin(k_x L)}$$

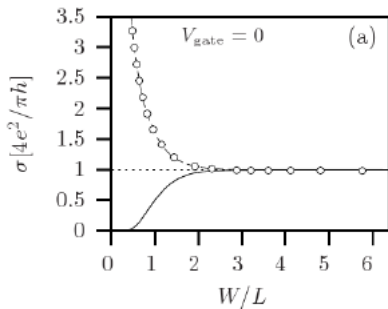
- ▶ Transmissionswahrscheinlichkeit am Dirac-Punkt $E = 0$ bei verschwindender Gatespannung $V_{\text{gate}} = 0$

$$T_n = t_n^* \cdot t_n = \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{\pi L}{W} \left(n + \frac{1}{2}\right)\right)}$$

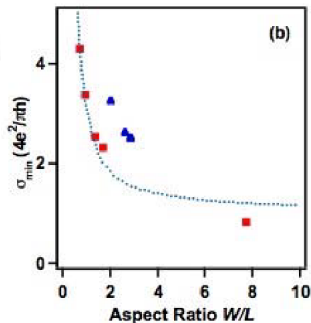
Elektrische Leitfähigkeit

► Elektrische Leitfähigkeit

$$G = \frac{4e^2}{h} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{\pi L}{W} \left(n + \frac{1}{2}\right)\right)}$$

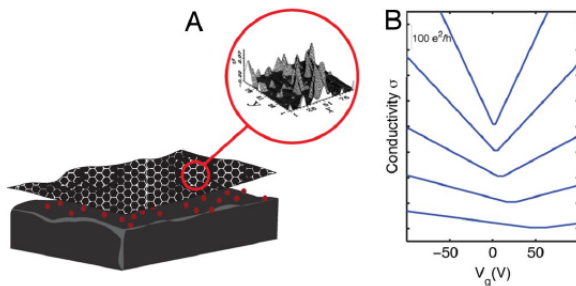


[Tworzydło et al.]



[Miao] -experimentell

Streuzentren für den diffusiven Transport



- ▶ Berücksichtigung von statistisch unabhängig angeordneten geladenen Störstellen
- ▶ Vernachlässigung der Randbedingungen

Beschreibung von diffusivem Transport

- ▶ Räumlich homogene stationäre Verteilungsfunktion

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) = f(\vec{k})$$

- ▶ Stromdichte

$$\vec{j} = 4 \sum_{\vec{k}} e \vec{v}_{\vec{k}} \frac{f(\vec{k})}{A}$$

- ▶ Darstellung der Verteilungsfunktion

$$f(\vec{k}) = f^0(\vec{k}) + g(\vec{k})$$

$f^0(\vec{k})$: Verteilungsfunktion im Gleichgewicht ($\vec{E} = 0$)

- ▶ Verschiebungsfunktion

$$g(\vec{k}) \propto \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} = E \cdot v_F \cdot \cos(\varphi)$$

Boltzmann-Gleichung

- ▶ Boltzmann-Gleichung

$$\sum \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} = \left. \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} \right|_{\text{Streuung}} + \left. \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} \right|_{\text{Feld}} = 0$$

- ▶ Beeinflussung der Verteilungsfunktion durch äußeres elektrisches Feld

$$\frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} = \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \cdot \frac{\partial \epsilon_{\vec{k}}}{\vec{k}} \cdot \dot{\vec{k}} \approx - \frac{\partial f^0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \cdot \hbar \cdot v_F \cdot \vec{e}_{\vec{k}} \cdot \frac{e}{\hbar} \cdot \vec{E}$$

- ▶ Beeinflussung durch elastische Streuungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} &= \sum_{\vec{k}'} [f(\vec{k}') \cdot (1 - f(\vec{k})) Q(\vec{k}' \rightarrow \vec{k}) - f(\vec{k}) \cdot (1 - f(\vec{k}')) Q(\vec{k} \rightarrow \vec{k}')] \\ &= \sum_{\vec{k}'} (g(\vec{k}') - g(\vec{k})) \cdot Q(\vec{k} \rightarrow \vec{k}') \end{aligned}$$

Beschreibung von diffusivem Transport

- ▶ Übergangswahrscheinlichkeit - Fermis Goldene Regel mit statistisch verteilten Streuzentren

$$Q(\vec{k} \rightarrow \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar A} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'}) \cdot n_i \left| V(\vec{k} - \vec{k}') \right|^2$$

- ▶ Fouriertransformierte des elektrischen Potentials $V(\vec{R})$

$$\begin{aligned} V(\vec{q}) &= \alpha \cdot \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{1}{r} e^{i q r (\cos(\vartheta - \theta))} r d\vartheta dr \\ &= \alpha 2\pi \int_0^\infty J_0(q r) dr = \frac{\alpha 2\pi}{q}, \quad \alpha = \frac{e Q}{4\pi \epsilon} \end{aligned}$$

Beschreibung von diffusivem Transport

► Streuterm

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{k}'} (g(\vec{k}') - g(\vec{k})) \cdot \frac{2\pi}{\hbar A} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'}) \cdot n_i \left| \frac{\alpha 2\pi}{|\vec{k} - \vec{k}'|} \right|^2 \\ &= \frac{\alpha^2 2\pi n_i}{\hbar} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dk' k' (g(\vec{k}') - g(\vec{k})) \frac{1}{\hbar v_F} \delta(k - k') \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} \\ &= \frac{\alpha^2 2\pi n_S}{k \hbar^2 v_F} g(\vec{k}) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1 - \cos(\varphi)}{2 - 2 \cos(\varphi)} = \frac{\alpha^2 2\pi^2 n_i}{k \hbar^2 v_F} g(\vec{k}) \end{aligned}$$

► Boltzmann-Gleichung

$$\frac{e}{\hbar} \cdot \vec{E} \cdot \frac{\partial f^0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \cdot \hbar \cdot v_F \cdot \vec{e}_{\vec{k}} = \frac{\alpha^2 2\pi^2 n_i}{k \hbar^2 v_F} g(\vec{k})$$

► Verschiebungsfunktion

$$g(\vec{k}) = \frac{e k v_F^2 \hbar}{\alpha^2 2\pi^2 n_i} \frac{\partial f^0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \cdot (\vec{E} \cdot \vec{e}_{\vec{k}})$$

Beschreibung von diffusivem Transport

- Stromdichte bei $T = 0$ K

$$\begin{aligned}\vec{j} &= 4 \sum_{\vec{k}} e \vec{v}_{\vec{k}} \frac{g_{\vec{k}}}{A} = 4 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \frac{dk}{(2\pi)^2} \frac{k e^2 v_F^3 \hbar}{2\pi^2 \alpha^2 n_i} \delta(k - k_F) (\vec{e}_{\vec{k}} \vec{E}) \vec{e}_{\vec{k}} \\ &= \frac{k_F e^2 v_F^2 \hbar}{2\pi^4 n_i \alpha^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \left[\begin{pmatrix} \cos(\varphi) \\ \sin(\varphi) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} \cos(\varphi) \\ \sin(\varphi) \end{pmatrix} \\ &\stackrel{E_y = 0}{=} \frac{\hbar k_F^2 e^2 v_F^2}{2\pi^4 n_i \alpha^2} \cdot E \cdot \begin{pmatrix} \pi \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{e^2 v_F^2 \hbar}{2\pi^2 n_i \alpha^2} \cdot \frac{k_F^2}{\pi} \cdot E \cdot \vec{e}_x\end{aligned}$$

Bestimmung der Leitfähigkeit

- ▶ Zustandsdichte

$$\int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk k = \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon}{\hbar^2 v_F^2}$$

$$\Rightarrow D(\epsilon) = 4 \cdot \frac{\epsilon}{\hbar^2 v_F^2}$$

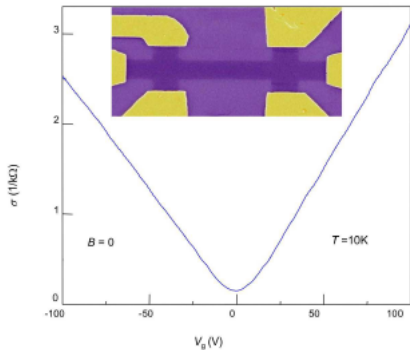
- ▶ Ladungsträgerdichte

$$n = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon D(\epsilon) = \frac{k_F^2}{\pi}$$

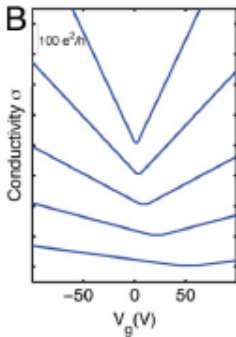
- ▶ Spezifische Leitfähigkeit

$$\Rightarrow \sigma = \frac{e^2 v_F^2 \hbar}{2\pi^2 n_i \alpha^2} n$$

Vergleich mit experimentellem Ergebnis








[Castro Neto et al.]



[Adam et al.]

- ▶ Linearer Zusammenhang zwischen Ladungsträgerdichte und elektrischer Leitfähigkeit

Literatur

-  Datta, Supriyo: *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. 1995.
-  Tworzydło et al.: *Quantum-limited shot noise in graphene*. cond-mat/0603315v3, März 2006.
-  Adam et al.: *A self-consistent theory for graphene transport*. 0705.1540v2, Oktober 2007.
-  Castro Neto et al.: *The electronic properties of graphene*. Rev Mod Phys 81, 109, März 2009.
-  Jäckle, Josef: *Einführung in die Transporttheorie*. 1978.