

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ РАССЕЙВАНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ОДИНОЧНОМ СЛОЕ ГРАФЕНА

В.В. МУРАВЬЕВ, В.Н. МИЩЕНКО

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Республика Беларусь

Поступила в редакцию 22 июня 2017

Аннотация. Приведены результаты моделирования интенсивностей рассеивания электронов в одиночном слое графена без подложки. Высокая подвижность носителей заряда, максимально полученная среди всех известных материалов, делает графен перспективным материалом для создания новых полупроводниковых приборов с хорошими выходными характеристиками. Установлено преобладание электрон-электронного рассеивания над другими видами рассеивания в области умеренных величин энергии поля в одиночном слое графена. Исследованные зависимости интенсивностей рассеивания носителей заряда позволят путем моделирования с использованием метода Монте Карло получить основные характеристики переноса носителей заряда в полупроводниковых структурах, содержащих слои графена.

Ключевые слова: графен, полупроводниковая структура, интенсивность рассеивания, процессы переноса электронов, метод Монте Карло.

Abstract. The results of simulation of the electron scattering rates in a single graphene layer without substrate are presented. High mobility of charge carriers, maximally obtained among all known materials, makes graphene a promising material for the creation of new semiconductor devices with good output characteristics. The prevalence of electron-electron scattering over other types of scattering in the region of moderate field energy in a single graphene layer is established. The investigated dependences of the rates of carrier scattering will enable to obtain the main characteristics of charge carrier transfer in semiconductor structures containing graphene layers by modeling using the Monte Carlo method.

Keywords: graphene, semiconductor structure, scattering rates, electron transport processes, Monte Carlo method.

Doklady BGUIR. 2017, Vol. 108, No. 6, pp. 42-47

Intensity determination of the scattering rates in the monolayer graphene

V.V. Murav'ev, V.N. Mishchenka

Введение

Наиболее корректным методом для анализа физических процессов в полупроводниковых структурах считается применение статистического метода Монте Карло. Одной из основных особенностей этого метода является то, что он позволяет учесть все механизмы рассеяния носителей заряда в полупроводнике и получить зависимости их распределения для стационарных и нестационарных процессов. Исследование процессов переноса носителей заряда для полупроводниковых соединений, содержащих слои графена, является актуальной задачей, которая связана с разработкой быстродействующих и мощных приборов диапазонов СВЧ и КВЧ. Известны конструкции полупроводниковых приборов, которые содержат слои графена [1–3]. Для анализа механизмов рассеяния носителей заряда в одиночном слое графена были исследованы зависимости интенсивностей рассеивания от основных параметров полупроводниковой структуры для их последующего использования в процедуре метода Монте Карло.

Моделирование электрон-электронного рассеивания в графене имеет ряд особенностей. В полупроводниковых структурах с обычной параболической зонной структурой закон сохранения момента движения прямо ведет к закону сохранения скорости [4]. Это приводит к тому, что в таких структурах средняя дрейфовая скорость, которая при использовании метода Монте Карло обычно определяется путем усреднения мгновенных скоростей некоторого ансамбля электронов, не зависит от электрон-электронного рассеивания. Иная ситуация

в графене, где изменение энергии электрона носит линейный характер вблизи точки Дирака и описывается зависимостью [5, 6, 4, 7]

$$E = v_F \cdot \hbar \cdot k, \quad (1)$$

где v_F – скорость Ферми в графене, величина которой обычно принимается равной $1,0 \cdot 10^8$ см/с, \hbar – постоянная Планка, k – модуль вектора волнового числа. Зависимость (1) отменяет указанное выше обстоятельство, связанное с законами сохранения момента движения и средней дрейфовой скорости электронов, и представляет одну из главных особенностей, которые определяют специфику динамики электронов в графене.

С использованием «золотого правила» Ферми и матрицы рассеивания, которая определяется из выражений для диэлектрической функции, получены зависимости интенсивности рассеивания электронов от энергии электронов [4, 6]. Однако данный подход, полученный в рамках аппроксимации для диэлектрической функции, действителен только при больших концентрациях носителей заряда, которые больше или равны значению $1 \cdot 10^{12}$ см⁻². Кроме того, моделирование при данном подходе связано с расчетом функций распределения как для исходного, так и для второго электронов, которые участвуют в процедуре рассеивания, а также с необходимостью выполнения процедур двойного суммирования по всем состояниям упомянутых выше электронов. Указанные выше особенности вызывают существенные трудности при реализации обычных процедур метода Монте Карло, значительно увеличивая затраты времени при моделировании.

В [7] для моделирования электрон-электронного рассеивания в графене было предложено использовать известный из теории двумерных электронных структур [8, 9] подход, в котором электрон-электронное рассеивание из совокупности других известных механизмов рассеивания выбирается при использовании параметра Γ^{e-e} , который обозначает максимальное значение интенсивностей рассеивания. Далее, как и для обычных двумерных структур, предлагается определить величину интенсивности рассеивания для пары электронов λ^{e-e} , выражение для нахождения которой содержит интеграл в пределах изменения угла α от 0 до 2π , а сам угол α образуется между исходным вектором $(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)$ и конечным вектором $(\mathbf{k}', \mathbf{k}'_0)$ состояний электронов. В завершении процедуры необходимо генерировать случайное число r в диапазоне значений от 0 до 1 и определить выполняется или нет условие $r \cdot \Gamma^{e-e} < \lambda^{e-e}$. Если это условие соблюдается, тогда считается, что электрон-электронное рассеивание выполняется, в противном случае происходит саморассеивание [8, 9]. Однако в [7] выражение для расчета значения величины λ^{e-e} не приводится, как и отсутствует анализ полученных значений интенсивностей рассеивания по отношению к другим видам рассеивания. Таким образом, для детального описания процедуры электрон-электронного рассеивания в графене необходимо получить и исследовать выражение для параметра λ^{e-e} и выполнить сравнение полученных с его помощью результатов моделирования с другими видами рассеивания.

Определение интенсивностей рассеивания в графене

Наиболее важными механизмами рассеяния в полупроводниковых соединениях являются рассеяние на оптических фононах, на примесях, на акустических фононах и электрон-электронное рассеивание.

Электрон-электронное рассеивание в рамках теории возмущения первого порядка обычно рассматривает вероятность перехода двух взаимодействующих электронов из начального состояния волновых векторов $(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0)$ в конечное состояние $(\mathbf{k}', \mathbf{k}'_0)$, которое может быть найдено с использованием правила «золотого сечения» Ферми [8]

$$S_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}', \mathbf{k}'_0} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}_0) | V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) | \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'_0}(\mathbf{r}_0) \rangle \right|^2 \delta(E(\mathbf{k}) + E(\mathbf{k}_0) - E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}'_0)), \quad (2)$$

где $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ – волновая функция электрона в зависимости от радиус-вектора \mathbf{r} , δ – дельта-функция, $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ – потенциальная энергия при экранированном электрон-электронном взаимодействии.

Интенсивность рассеивания для пары электронов может быть записана в виде [8]

$$\lambda(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|) = \frac{1}{2} N_S \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}'_0} S_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}', \mathbf{k}'_0}, \quad (3)$$

где N_s – концентрация электронов в двумерной структуре, а также в [8] вводится параметр $g = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ – модуль разности волновых векторов исходного и второго электронов, которые участвуют в процедуре рассеивания.

Исходя из представленных выше зависимостей (1) и (3), можно получить зависимость для интенсивностей рассеивания для пары электронов:

$$\lambda^{e-e} = \frac{\pi \cdot e^4 \cdot N_s \cdot g}{\hbar^2 \cdot (\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s)^2} \int_0^{2\pi} d\alpha \frac{H(Q(\alpha))^2}{[Q(\alpha) + Q_0]^2}, \quad (4)$$

где параметр

$$Q(\alpha) = g \cdot \sin \frac{\alpha}{2} \quad [7], \quad (5)$$

$H(Q(\alpha))$ – матричный элемент, Q_0 – постоянная экранирования, для расчета которой можно использовать выражение, полученное в [10], ε_0 – электрическая постоянная, ε_s – относительная диэлектрическая проницаемость. При аппроксимации, предложенной в [8], и принимая известные параметры слоя графена, значение матричного элемента $H(Q(\alpha))$ можно положить равным единице, что подтвердили специально проведенные расчеты. Анализ уравнения (4) позволяет установить основные зависимости параметра λ^{e-e} от концентрации электронов в слое графена, от величины относительной диэлектрической проницаемости графена, а также от величины энергии электронов.

Формула (4) позволяет модернизировать полученное в [7] выражение для параметра Γ^{e-e} и представить его в виде

$$\Gamma^{e-e} = \frac{2 \cdot \pi^2 \cdot e^4 \cdot N_s \cdot g}{\hbar^2 \cdot (\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s)^2 \cdot v_F \cdot Q_0^2}. \quad (6)$$

Для перехода к значениям энергии при моделировании интенсивностей рассеивания с использованием разных подходов можно получить выражение для энергии, которая соответствует значению параметра g , используя формулу (1):

$$E_d = v_F \cdot \hbar \cdot g. \quad (7)$$

Интенсивность акустического рассеяния определяется выражением, приведенным в [5],

$$\frac{1}{\tau_{AP}(E)} = \frac{1}{\hbar^3} \frac{D_{AP}^2 \cdot k_B \cdot T}{4 \cdot v_F^2 \cdot \rho_m \cdot v_{ph}^2} E, \quad (8)$$

где D_{AP} (эВ) – акустический деформационный потенциал, $v_{ph} = 2 \times 10^4$ – скорость акустических фононов (звука) (см/с), $\rho_m = 7,6 \times 10^{-7}$ кг/м² – плотность графена, k_B – постоянная Больцмана, $T = 300$ – температура (К). В [6] приводится похожее выражение для расчета интенсивности акустического рассеяния, за исключением величины численного коэффициента 4 в знаменателе выражения (8), который в [6] принимается равным 2. Значение величины D_{AP} в литературе еще не установлено окончательно. Диапазон используемых значений этого параметра различными авторами находится в пределах от 2,6 до 29 эВ. В [5] и [6] принимаются разные значения параметра D_{AP} , что нивелирует результаты моделирования по формуле (8) при двух разных значениях численного коэффициента в знаменателе этой формулы.

Интенсивность рассеяния на оптических фононах определяется следующим выражением [5, 6]:

$$\frac{1}{\tau_{op}(k)} = \frac{D_o^2 \cdot \left(n_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right)}{2 \cdot \hbar^2 \cdot v_F^2 \cdot \rho_m \cdot \omega_o} (E \pm \hbar \omega_o), \quad (9)$$

где знак \pm выбирается при поглощении и испускания фонона соответственно, D_o (эВ) – оптический деформационный потенциал, ω_o – частота оптического фонона, $n_{op} = 1 / (e^{\hbar \omega_o / k_B T} - 1)$ – число оптических фононов.

Интенсивность рассеяния на примесях определяется выражением, представленным в [5],

$$\frac{1}{\tau_{imp}} = \left(\frac{\hbar \cdot v_F^2}{20} \right) \times \left(\frac{n_{imp}}{E} \right), \quad (10)$$

где n_{imp} – концентрация примеси в графене, которая при моделировании принималась равной $1 \cdot 10^{11}$ см⁻².

Результаты моделирования

Известно, что результаты моделирования с использованием метода Монте Карло зависят от значений основных электрофизических параметров материала и параметров модели зоны проводимости. В разработанной программе моделирования процессов переноса носителей заряда с использованием метода Монте Карло были учтены наиболее важные механизмы рассеяния: на оптических фононах, на акустических фононах, на примесях и электрон-электронное рассеивание.

На рис. 1 представлены результаты расчета интенсивностей рассеивания на оптических фононах в графене при поглощении (кривая 1) и испускании (кривая 3) фононов от энергии. Для проведения моделирования величины параметров D_0 и $\hbar\omega_0$ принималась равными – $D_0 = 1 \cdot 10^9$ эВ/см, $\hbar\omega_0 = 164,6$ мэВ [11]. Значения параметров D_0 и $\hbar\omega_0$ еще окончательно не установлены в литературе. Так, в [5] приводится величина параметра $\hbar\omega_0 \approx 200$ мэВ. Также в [5] утверждается, что за счет взаимодействия с подложкой необходимо вводить и анализировать так называемое «мягкое» оптическое рассеивание, энергия которого зависит от материала подложки. Так, для подложки из материала SiO_2 величина $\hbar\omega_0 \approx 55$ мэВ, а для подложки из материала Al_2O_3 – $\hbar\omega_0 \approx 87$ мэВ. В данной работе особенности «мягкого» оптического рассеивания не исследовались, как и ряд других механизмов рассеивания, связанных с подложкой, ввиду того, что анализировался одиночный слой графена без подложки. Кривой 4 на рис. 1 представлена суммарная интенсивность рассеивания на оптических и акустических фононах, полученная в [11] с использованием теории функционала плотности (DFT) из первых принципов. Анализ кривых 1–3 показывает, что использование формул (8) и (9) позволяет получить достаточно хорошее соответствие результатам, полученным при использовании теории из первых принципов (кривая 4). Анализ кривых 1 и 3 на рис. 1 показывает, что с ростом энергии интенсивность рассеивания на оптических фононах монотонно увеличивается при испускании и поглощении фононов.

Зависимость интенсивности рассеивания на акустических фононах от энергии поля показана кривой 2 на рис. 1. Для проведения расчетов величина параметра D_{AP} принималась равной 4,5 эВ, согласно рекомендациям, высказанным в [11]. Как видно из этих данных, интенсивность рассеивания на акустических фононах монотонно увеличивается с ростом энергии.

Зависимость интенсивности рассеивания на примесях от энергии представлена кривой 5 на рис. 1. Как видно из этого рисунка, интенсивность рассеивания на примесях монотонно уменьшается с ростом энергии. Анализ рис. 1 показывает, что рассеивание на примесях преобладает над рассеиванием на оптических фононах только при низких значениях энергии (менее 0,2 эВ) при тех значениях концентрации, которые принимались при моделировании. При увеличении концентрации примесей интенсивность рассеивания пропорционально увеличивается.

При больших энергиях преобладает рассеивание на оптических фононах при испускании фононов (рис. 1, кривая 3) над другими видами рассеивания, кроме электрон-электронного рассеивания, результаты моделирования которого представлены на рис. 2.

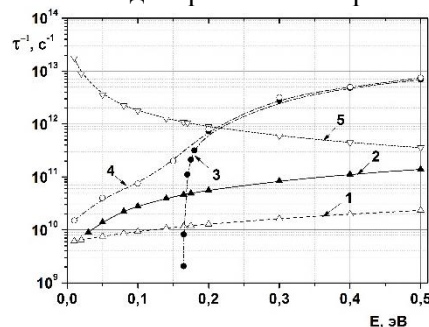


Рис. 1. Зависимости интенсивностей рассеивания электронов в графене от энергии

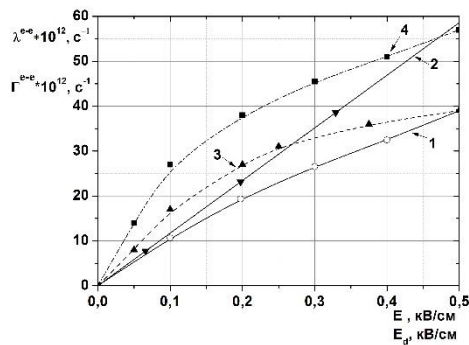


Рис. 2. Зависимости интенсивностей электрон-электронного рассеивания в графене от энергии

На рис. 2 кривыми 1 и 2 представлены рассчитанные зависимости параметров λ^{e-e} и Γ^{e-e} , которые получены с использованием формул (4) и (6) соответственно. Для удобства сравнения результатов моделирования на горизонтальную ось рис. 2 нанесены значения параметров E и E_d , имеющих одинаковую размерность. Значение величины относительной диэлектрической проницаемости ϵ_s при моделировании принималось равным 1,8 согласно данным статьи [12], предполагая преимущественное продольное направление распространения электронов вдоль структуры, хотя в литературе приводятся разные значения этого параметра. В частности, утверждается, что этот параметр зависит как от частоты приложенного внешнего сигнала, так и от направления приложенного к структуре электрического поля [12]. Кривой 3 на рис. 2 представлена зависимость λ^{e-e} , полученная в статье [4] для концентрации электронов, равной $1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Кривой 4 на рис. 2 представлена зависимость λ^{e-e} , полученная в статье [6] для концентрации электронов, равной $7,7 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Анализ зависимостей, показанных на рис. 2, показывает, что предложенный выше подход для определения интенсивностей электрон-электронного рассеивания, выраженный кривой 1, позволяет достаточно точно оценить значение интенсивностей в сравнении с кривой 3, полученной в [4]. Сравнение данных, полученных для различных интенсивностей рассеивания и представленных на рис. 1 и 2, показывает, что интенсивность электрон-электронного рассеивания преобладает над другими видами рассеивания электронов в одиночном слое графена при умеренных значениях энергии электронов, что подтверждает выводы, сделанные в статьях [4, 6].

Заключение

Приведены результаты моделирования интенсивностей рассеивания электронов в одиночном слое графена без подложки. Рассмотрены важнейшие механизмы рассеяния в графене, такие как рассеяние на оптических фононах, на акустических фононах, на примесях, электрон-электронное рассеивание. Предложено выражение для расчета интенсивности электрон-электронного рассеивания. Установлено преобладание электрон-электронного рассеивания над другими видами рассеивания в области умеренных величин энергии поля в одиночном слое графена.

Список литературы

1. A graphene field-effect device / M.C. Lemme [et al.] // IEEE Electron Dev. Lett. 2007. Vol. 28. P. 282–284.
2. 100-GHz transistors from wafer-scale epitaxial graphene / Y.-M. Lin [et al.] // Science. 2010. Vol. 327. P. 662.
3. Туннельные полевые транзисторы на основе графена / Д.А. Свинцов [и др.] // Физика и техника полупроводников. 2013. Том 47, вып. 2. С. 244–250.
4. Influence of electron-electron scattering on transport characteristics in monolayer grapheme / X. Li [et al.] // Appl. Phys. Letters. 2010. Vol. 97. P. 082101.
5. Chauhan Jyotsna, Guo Jing. High-field transport and velocity saturation in grapheme // Appl. Phys. Letters. 2009. Vol. 95. P. 023120.
6. High-field transport in two-dimensional graphene / Fang Tian [et al.] // Physical Review. 2011. Vol. B 84. P. 125450.
7. Ghosh Bahniman, Katiyar Saurabb, Salimath Akshaykumar. Role of of electron-electron scattering on spin transport in single layer grapheme // AIP Advances. 2014. Vol. 4. P. 017116.
8. Mosko Martin, Moskova Antonina. Ensemble Monte Carlo simulation of electron-electron scattering: Improvement of conventional methods // Physical Review. 2010. Vol. 44, № 19. P. 10794–10803.
9. Goodnick S.M., Lurgi P. Effect of electron-electron scattering on non equilibrium transport in quantum-well system // Physical Review. 1988. Vol. 37, № 5. P. 2578–2588.
10. Stern Frank, Howard W.E. Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit // Physical Review. 1967. Vol. 163, № 3. P. 163816–163835.

11. First-principles analysis of electron-phonon interaction in grapheme / K.M. Borysenko [et al.] // *Physical Review*. 2010. Vol. B 81. P. 121412(R).
12. Elton J.G. Santos, Efthimios Kaxiras. Electric-Field Dependence of the Effective Dielectric Constant in Graphene // *Nano Lett.* 2013. Vol. 13, № 3. P. 898–902.

References

1. A graphene field-effect device / M.C. Lemme [et al.] // *IEEE Electron Dev. Lett.* 2007. Vol. 28. P. 282–284.
2. 100-GHz transistors from wafer-scale epitaxial graphene / Y.-M. Lin [et al.] // *Science*. 2010. Vol. 327. P. 662.
3. Tunnel'nye polevye tranzistory na osnove grafena / D.A. Svincov [i dr.] // *Fizika i tehnika poluprovodnikov*. 2013. Tom 47, vyp. 2. S. 244–250. (in Russ.)
4. Influence of electron-electron scattering on transport characteristics in monolayer grapheme / X. Li [et al.] // *Appl. Phys. Letters*. 2010. Vol. 97. P. 082101.
5. Chauhan Jyotsna, Guo Jing. High-field transport and velocity saturation in grapheme // *Appl. Phys. Letters*. 2009. Vol. 95. P. 023120.
6. High-field transport in two-dimensional graphene / Fang Tian [et al.] // *Physical Review*. 2011. Vol. B 84. P. 125450.
7. Ghosh Bahniman, Katiyar Saurabb, Salimath Akshaykumar. Role of of electron-electron scattering on spin transport in single layer grapheme // *AIP Advances*. 2014. Vol. 4. P. 017116.
8. Mosko Martin, Moskova Antonina. Ensemble Monte Carlo simulation of electron-electron scattering: Improvement of conventional methods // *Physical Review*. 2010. Vol. 44, № 19. P. 10794–10803.
9. Goodnick S.M., Lurgi P. Effect of electron-electron scattering on non equilibrium transport in quantum-well system // *Physical Review*. 1988. Vol. 37, № 5. P. 2578–2588.
10. Stern Frank, Howard W.E. Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit // *Physical Review*. 1967. Vol. 163, № 3. P. 163816–163835.
11. First-principles analysis of electron-phonon interaction in grapheme / K.M. Borysenko [et al.] // *Physical Review*. 2010. Vol. B 81. P. 121412(R).
12. Elton J.G. Santos, Efthimios Kaxiras. Electric-Field Dependence of the Effective Dielectric Constant in Graphene // *Nano Lett.* 2013. Vol. 13, № 3. P. 898–902.

Сведения об авторах

Муравьев В.В., д.т.н., профессор, член-кор. НАН Беларуси, профессор кафедры инфокоммуникационных технологий Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Мищенко В.Н., к.т.н., доцент, доцент кафедры инфокоммуникационных технологий Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Information about the authors

Murav'ev V.V., D. Sci., professor, corresponding member of NAS of Belarus, professor of department of infocommunication technologies of Belarusian state university of informatics and radioelectronics.

Mishchenka V.N., PhD, associate professor, associate professor of department of infocommunication technologies of Belarusian state university of informatics and radioelectronics.

Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь,
г. Минск, ул. П. Бровки, д. 6,
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники
тел. +375-17-293-80-70;
e-mail: mishchenko@bsuir.by
Мищенко Валерий Николаевич

Address for correspondence

220013, Republic of Belarus,
Minsk, P. Brovka st., 6,
Belarusian state university
of informatics and radioelectronics
tel. +375-17-293-80-70;
e-mail: mishchenko@bsuir.by
Mishchenka Valery Nikolaevich