

Ausarbeitung zum Seminarvortrag Leitfähigkeit von Graphen

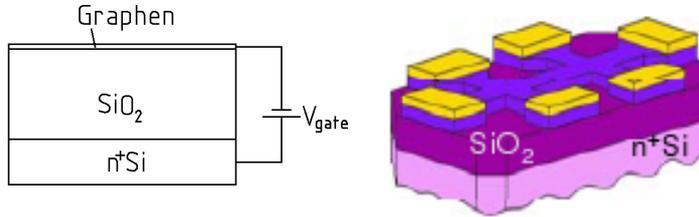
Manuel Oberfell

22. Juni 2009

Inhaltsverzeichnis

1	Ladungsträgerdichte	2
2	Ballistischer Transport in reinem Graphen	2
2.1	Landauer Formel	2
2.2	Lösung der Dirac-Gleichung unter Randbedingungen	3
2.2.1	Lokale Stromdichte außerhalb des Graphen	5
2.2.2	Randbedingungen außerhalb - Näherung der geglätteten Kanten	6
2.2.3	Quantisierungsbedingung des Wellenvektors in y -Richtung	7
2.3	Transmissionswahrscheinlichkeit	7
2.4	Leitfähigkeit für reines Graphen	9
3	Beschreibung von diffusivem Transport in Graphen	9

1 Ladungsträgerdichte



Die Ladungsträgerdichte kann durch Anlegen einer Spannung V_{gate} beeinflusst werden

$$n = \frac{q}{A} = \frac{C \cdot V_{\text{gate}}}{A} \quad (1)$$

Die Zustandsdichte $D(\epsilon)$ können wir bestimmen über

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

zu

$$D(\epsilon) = 4 \cdot \frac{\epsilon}{2\pi \hbar^2 v_F^2}, \quad (3)$$

mit einem Faktor zwei aus der Spinartung und einen Faktor zwei, weil wir zwei Dirac-Punkte in der Einheitszelle haben.

Die Ladungsträgerdichte um den Dirac-Punkt herum erhalten wir über

$$n = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon D(\epsilon) = \frac{k_F^2}{\pi}, \quad (4)$$

was zeigt, dass die Ladungsträgerdichte direkt am Dirac-Punkt verschwindet.

2 Ballistischer Transport in reinem Graphen

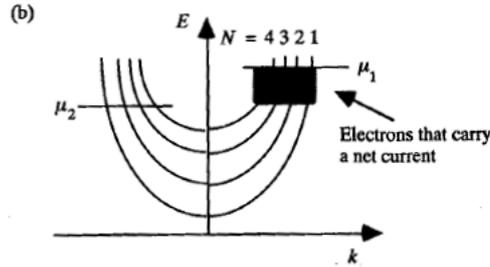
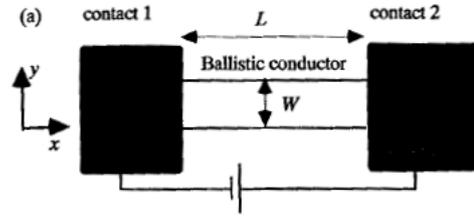
Wir wollen von reinem Graphen ausgehen, also von wenigen Störungen innerhalb der Kristallstruktur und auch wenigen langreichweitigen Streuern in der Unterlage des Graphen.

Die Bedingung der Reinheit lässt sich auch so formulieren, dass die freie Weglänge der Elektronen größer sein soll als die Länge und größer als die Breite des Graphen sein soll. In diesem Fall können wir die Elektronen im Graphen als Wellen betrachten und der Ladungsträgertransport ist ballistisch.

2.1 Landauer Formel

Bei Anlegen einer kleinen Spannung an einen endlichen Streifen eines bestimmten reinen Kristalls erhalten wir einen Strom, welcher proportional zur Anzahl der offenen Kanäle N und zur Transmissionwahrscheinlichkeit durch einen Kanal ist.

Aufgrund der endlichen Abmessungen des Streifens bekommen wir diskrete Dispersionsrelationen, was dazu führt, dass je nach Höhe der Fermienergie nur eine begrenzte Anzahl von Ladungsträgern durch die angelegte Spannung ihren Wellenvektor ändern können. Diese Ladungsträgerwellen verursachen den Stromtransport und werden als offene Kanäle bezeichnet. An den Kontakten können diese Wellen reflektiert werden, was erklärt, dass die Leitfähigkeit proportional zur Transmissionswahrscheinlichkeit der Wellen durch den Streifen ist.



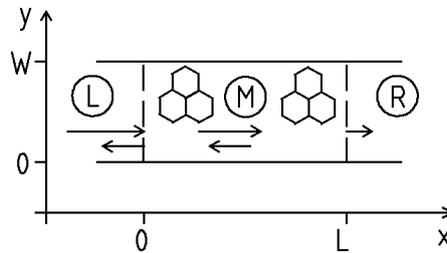
[Dat95]

Die Leitfähigkeit durch den Streifen ergibt sich über die Landauer Formel zu

$$G = \frac{4 \cdot e^2}{h} \cdot \sum_{n=0}^{N-1} T_n \quad (5)$$

mit der Anzahl an offenen Kanäle N und der Transmissionswahrscheinlichkeit T_a durch den Kanal a .

2.2 Lösung der Dirac-Gleichung unter Randbedingungen



Hamiltonian am Dirac-Punkt \vec{K}

$$H = -\hbar \cdot v_F \cdot \begin{pmatrix} 0 & i\partial_x + \partial_y \\ i\partial_x - \partial_y & 0 \end{pmatrix} + V(x) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + M(y) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

Die Randbedingungen sind gegeben durch

$$V(x < 0) = V_{\text{Kontakt}} \quad (7)$$

$$V(x > L) = V_{\text{Kontakt}} \quad (8)$$

$$V(0 \leq x \leq L) = V_{\text{gate}} \quad (9)$$

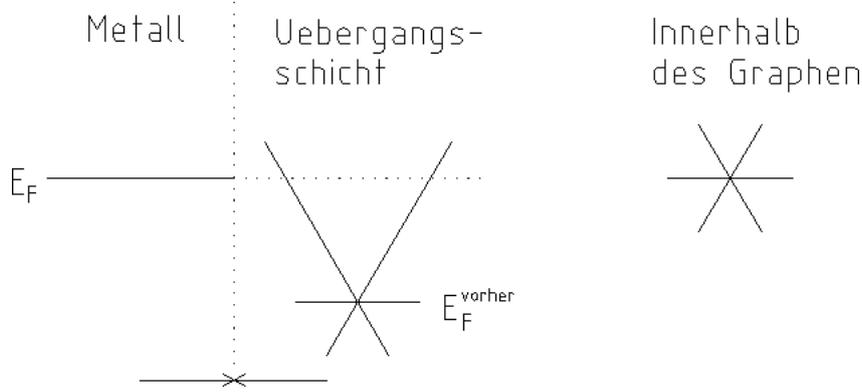
$$M(y > W) \rightarrow \infty \quad (10)$$

$$M(y < 0) \rightarrow \infty \quad (11)$$

$$M(0 \leq y \leq W) = 0 \quad (12)$$

Die Kontaktspannung V_{Kontakt} im Übergangsbereich zwischen dem Kontakt aus Metall und dem Graphen lässt sich dadurch erklären, dass die Fermi-niveaus in den beiden Materialien unterschiedlich sind. In der Übergangszone, in der es zu einem Überlapp der Wellenfunktion kommt, wandern

vereinfacht gesagt entweder Elektronen aus dem Metall in das Leitungsband des Graphen, oder Elektronen aus dem Valenzband des Graphen wandern in das Metall. Damit kommt es zur Angleichung der Fermi-Niveaus (Thermisches Gleichgewicht) an der Grenzschicht. Weiter entfernt von der Grenzschicht macht sich dieser Effekt nicht mehr bemerkbar.



Das Anheben oder Absenken des Fermi-niveaus in der Grenzschicht führt zu dem Kontaktpotenzial, welches wir durch ein Rechteckpotenzial annähern.

Die masselose Dirac-Gleichung am Dirac-Punkt \vec{K} in x -Richtung innerhalb des Graphen und in den Randbereichen der Kontakte lautet damit

$$-\hbar \cdot v_F \cdot \begin{pmatrix} 0 & i\partial_x + \partial_y \\ i\partial_x - \partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = (E - V(x)) \cdot \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} \quad (13)$$

Entkoppeln der Differentialgleichungen

$$\hbar^2 \cdot v_F^2 (-\partial_x^2 - \partial_y^2) \Psi_B = (E - V(x))^2 \cdot \Psi_B \quad (14)$$

$$\Psi_A = \frac{-\hbar \cdot v_F}{(E - V(x))} (i\partial_x + \partial_y) \Psi_B \quad (15)$$

Ansatz für eine Lösung mit einer in x -Richtung propagierenden Welle

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} \Psi_A(x, y) \\ \Psi_B(x, y) \end{pmatrix} = e^{i \cdot k_x x} \cdot \left(e^{i k_y y} \begin{pmatrix} t_1 \\ s_1 \end{pmatrix} + e^{-i k_y y} \begin{pmatrix} t_2 \\ s_2 \end{pmatrix} \right) \quad (16)$$

Wir erhalten durch Einsetzen des Ansatzes (16) in die entkoppelte Differentialgleichung (14) die Energiebeziehung

$$(E - V(x))^2 = \hbar^2 \cdot v_F^2 \cdot (k_x^2 + k_y^2) \quad (17)$$

Aus Gleichung (15) erhalten wir durch Einsetzen des Ansatzes (16)

$$e^{i k_y y} \cdot t_1 + e^{-i k_y y} \cdot t_2 = \frac{\hbar v_F}{E - V(x)} (k_x (e^{i k_y y} \cdot s_1 + e^{-i k_y y} \cdot s_2) - i k_y (e^{i k_y y} \cdot s_1 + e^{-i k_y y} \cdot s_2)) \quad (18)$$

Ein Sortieren nach Termen mit $e^{i k_y y}$ und $e^{-i k_y y}$ ergibt die Zusammenhänge

$$t_1 = M_k \cdot s_1 \quad \text{und} \quad (19)$$

$$t_2 = N_k \cdot s_2, \quad (20)$$

mit den Faktoren

$$M_k = \frac{\hbar v_F}{E - V(x)} (k_x - i k_y), \quad (21)$$

$$N_k = \frac{\hbar v_F}{E - V(x)} (k_x + i k_y). \quad (22)$$

Nun wollen wir benutzen, dass mit Hilfe der Energiebeziehung (17) gilt

$$M_k \cdot N_k = 1 \quad (23)$$

und erhalten damit für die Wellenfunktion im Graphen

$$\Psi(x, y) = e^{i \cdot k_x x} \cdot \left(e^{i k_y y} \cdot s_1 \begin{pmatrix} M_k \\ 1 \end{pmatrix} + e^{-i k_y y} \cdot t_2 \begin{pmatrix} 1 \\ M_k \end{pmatrix} \right) \quad (24)$$

Eine Beziehung zwischen den Vorfaktoren s_1 und dem undefinierten t_2 können wir im Folgenden mit Hilfe der Randbedingungen an den Kanten $y = W$ und $y = 0$ für eine unendliche Masse und einen verschwindenden Strom außerhalb.

2.2.1 Lokale Stromdichte außerhalb des Graphen

Der Hamilton-Operator mit Masse $M(y)$ am Dirac-Punkt \vec{K} außerhalb des Graphen lautet

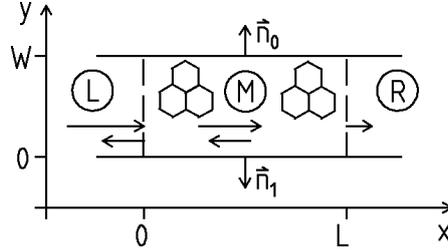
$$H = -i \cdot \hbar \cdot v_F \cdot \vec{\sigma} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \end{pmatrix} + M(y) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Die Zeitentwicklung des Elektronenortes nach dem Ehrenfest'schen Theorem ergibt

$$\frac{d\langle \hat{r} \rangle}{dt} = \frac{-i}{\hbar} \cdot \langle [\hat{r}, \hat{H}] \rangle = v_F \cdot \hat{\sigma}. \quad (26)$$

Damit erhalten wir die lokale Stromdichte \vec{j}_{lok} an der Position \vec{r}

$$\vec{j}_{\text{lok}}(\vec{r}) = e \cdot v_F \cdot \Psi^\dagger(\vec{r}) \hat{\sigma} \Psi(\vec{r}) \quad (27)$$



Der Strom außerhalb des Graphen senkrecht zur Kante verschwindet, dies ist äquivalent mit den Bedingungen

$$\vec{j}_{\text{lok}}(y > W) \cdot \vec{n}_0 = 0 \Leftrightarrow (\Psi_A^*, \Psi_B^*) \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = 0 \quad (28)$$

$$\vec{j}_{\text{lok}}(y < 0) \cdot \vec{n}_1 = 0 \Leftrightarrow (\Psi_A^*, \Psi_B^*) \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = 0 \quad (29)$$

und damit gilt außerhalb des Graphen

$$\frac{\Psi_A}{\Psi_B} = \frac{\Psi_A^*}{\Psi_B^*}. \quad (30)$$

Setzen wir komplexe Zahlen $\Psi_A = a + b \cdot i$ und $\Psi_B = c + d \cdot i$ an, so erhalten wir

$$\frac{\Psi_A}{\Psi_B} = \frac{ac + bd + (cb - ad) \cdot i}{c^2 + d^2}, \quad (31)$$

$$\frac{\Psi_A^*}{\Psi_B^*} = \frac{ac + bd + (ad - cb) \cdot i}{c^2 + d^2}. \quad (32)$$

Folglich muss der Quotient $\frac{\Psi_A}{\Psi_B}$ reell sein.

2.2.2 Randbedingungen außerhalb - Näherung der geglätteten Kanten

Die Dirac-Gleichung am Dirac-Punkt \vec{K} außerhalb des Graphen ist gegeben durch

$$-\hbar \cdot v_F \cdot \begin{pmatrix} 0 & i\partial_x + \partial_y \\ i\partial_x - \partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = E \cdot \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} - M(y) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} . \quad (33)$$

Ein Entkoppeln der Differentialgleichungen führt auf

$$\hbar^2 \cdot v_F^2 (-\partial_x^2 - \partial_y^2) \Psi_B = (E - M(y)) \cdot (E + M(y)) \cdot \Psi_B \quad (34)$$

$$\Psi_A = \frac{-\hbar \cdot v_F}{(E - V)} (i\partial_x + \partial_y) \Psi_B \quad (35)$$

Als Ansatz für das Gebiet mit $y > W$ wählen wir

$$\Psi(x, y) = e^{i \cdot q_x x} \cdot e^{-q_y y} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (36)$$

und im Gebiet $y < 0$ setzen wir an

$$\Psi = e^{i \cdot q_x x} \cdot e^{q_y y} \cdot \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} . \quad (37)$$

mit $q_y \geq 0$ damit die Wellenfunktion normierbar bleibt.

Der Ansatz für derartige Wellenfunktionen außerhalb des Graphen und der später folgenden Bedingung für die Stetigkeit der Wellenfunktion an den Kanten wird auch als Näherung der geglätteten Kanten bezeichnet.

Die Ansätze für die beiden Raumgebiete setzen wir in die entkoppelte Differentialgleichung (34) ein und erhalten die Energiebeziehung

$$E^2 - M(y)^2 = \hbar^2 \cdot v_F^2 \cdot (q_x^2 - q_y^2) , \quad (38)$$

was der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung (mit Fermi-Geschwindigkeit v_F) entspricht

$$E = \sqrt{v_F^2 \cdot p^2 + M(y)^2} . \quad (39)$$

Aus Gleichung (35) erhalten wir durch Einsetzen des Ansatzes die Beziehungen

$$a = \frac{\hbar \cdot v_F}{E - M(y)} (q_x + q_y) \cdot b , \quad (40)$$

$$c = \frac{\hbar \cdot v_F}{E - M(y)} (q_x - q_y) \cdot d \quad (41)$$

und damit sind die Quotienten $\frac{a}{b}$ und $\frac{c}{d}$ reell, was mit der Bedingung des verschwindenden Stromes senkrecht zur Kante äquivalent ist.

Lösen wir die Energiegleichung (38) nach q_y auf und setzen dies in $\frac{a}{b}$ ein, erhalten wir

$$\frac{a}{b} = \frac{\hbar v_F}{E - M(y)} q_x - \sqrt{\frac{M(y) + E}{M(y) - E} + \frac{\hbar^2 v_F}{(M(y) - E)^2} q_x^2} \xrightarrow{M(y) \rightarrow \infty} -1 \quad (42)$$

und mit dem Grenzübergang für eine unendliche Masse gilt damit für das Verhältnis der beiden Wellenfunktionen Ψ_A und Ψ_B an der Kante $y = W$

$$\frac{\Psi_A}{\Psi_B}(W) = -1 . \quad (43)$$

Analog ergibt sich für eine unendliche Masse im Raumgebiet $y < 0$

$$\frac{c}{d} \xrightarrow{M(y) \rightarrow \infty} 1 \quad (44)$$

und damit gilt an der Kante $y = 0$

$$\frac{\Psi_A}{\Psi_B}(0) = 1 . \quad (45)$$

Aufgrund der Stetigkeitsbedingung der Wellenfunktion können wir darüber einen Zusammenhang zwischen den Vorfaktoren der Wellenfunktion im Graphen s_1 und t_2 bestimmen, was wir im nächsten Unterabschnitt machen werden. Des weiteren erhalten wir darüber die Quantisierungsbedingung für den Wellenvektor in y -Richtung.

2.2.3 Quantisierungsbedingung des Wellenvektors in y -Richtung

Wir gehen von der Wellenfunktion im Graphen (24) aus und erhalten wegen der Stetigkeit an der Kante $y = W$ und damit der Bedingung (43)

$$s_1 \cdot M_k \cdot e^{i k_y W} + t_2 \cdot e^{-i k_y W} = -(s_1 \cdot e^{i k_y W} + t_2 \cdot M_k \cdot e^{-i k_y W}) \quad (46)$$

Daraus ergibt sich

$$s_1 \cdot (M_k - 1) \cdot e^{i k_y W} = -t_2 \cdot (M_k - 1) \cdot e^{-i k_y W} \quad (47)$$

$$\Rightarrow \frac{t_2}{s_1} = -e^{2i k_y W} \quad (48)$$

An der Kante $y = 0$ erhalten wir mit (45)

$$s_1 \cdot M_k + t_2 = s_1 + t_2 \cdot M_k \quad (49)$$

Daraus ergibt sich die Gleichheit der beiden Vorfaktoren

$$s_1 = t_2 . \quad (50)$$

Aus Gleichung (48) erhalten wir nun mit

$$e^{2i k_y W} = -1 = e^{i \pi (2n+1)} \quad (51)$$

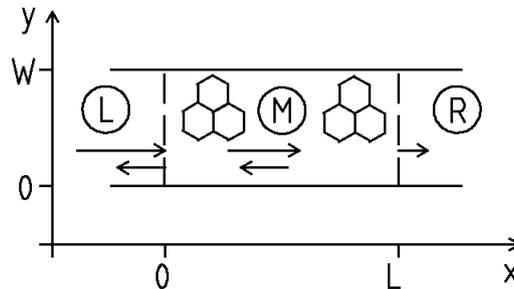
für eine natürliche Zahl n die Quantisierung der y -Komponente des Wellenvektors

$$k_y = \frac{\pi}{2W} (2n + 1) . \quad (52)$$

Die Wellenfunktion ist jetzt bis auf Normierung bestimmt

$$\Psi(x, y) = e^{i \cdot k_x x} \cdot s_1 \cdot \left(e^{i k_y y} \begin{pmatrix} M_k \\ 1 \end{pmatrix} + e^{-i k_y y} \begin{pmatrix} 1 \\ M_k \end{pmatrix} \right) . \quad (53)$$

2.3 Transmissionswahrscheinlichkeit



Wir machen folgenden Ansatz für die propagierenden Wellen durch einen Kanal n

$$\Psi^L(x) = e^{i\tilde{k}_x x} \begin{pmatrix} M_{\tilde{k}} \\ 1 \end{pmatrix} + r_n e^{-i\tilde{k}_x x} \begin{pmatrix} M_{-\tilde{k}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (54)$$

$$\Psi^M(x) = \alpha_n e^{i k_x x} \begin{pmatrix} M_k \\ 1 \end{pmatrix} + \beta_n e^{-i k_x x} \begin{pmatrix} M_{-k} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (55)$$

$$\Psi^R(x) = t_n e^{i\tilde{k}_x (x-L)} \begin{pmatrix} M_{\tilde{k}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (56)$$

Dieser Ansatz ist verkürzt, da Terme mit $e^{i k_y y}$ und $e^{-i k_y y}$ zu gleichen Bedingungen führen. Der Phasenfaktor $e^{-i\tilde{k}_x L}$ kann zur leichteren Rechnung ohne Beeinflussung der Transmission $T_n = t_n^* \cdot t_n$ eingeführt werden. Die Wellenvektoren sind bestimmt über die Energiebeziehungen

$$(E - V_{\text{gate}})^2 = \hbar^2 v_F^2 (k_x^2 + k_y^2) \quad (57)$$

$$(E - V_{\text{Kontakt}})^2 = \hbar^2 v_F^2 (\tilde{k}_x^2 + k_y^2) \quad (58)$$

Mit der Bedingung für die Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x = 0$ und $x = W$, also

$$\Psi^L(0) = \Psi^M(0), \quad (59)$$

$$\Psi^M(L) = \Psi^R(L) \quad (60)$$

erhalten wir nach langer Rechnung für den Transmissionskoeffizient t_n

$$t_n = \frac{(1 + M_{\tilde{k}}^2) \cdot (1 + M_k^2)}{e^{i k_x L} \cdot (M_{\tilde{k}} - M_k)^2 + e^{-i k_x L} \cdot (1 + M_{\tilde{k}} M_k)^2}. \quad (61)$$

Zur Vereinfachung der Gleichung lassen wir das Kontaktpotenzial $V_{\text{Kontakt}} \rightarrow \infty$ nach unendlich gehen, also wir machen die Näherung, dass das Kontaktpotenzial groß ist gegen der Gatespannung V_{gate} . Daraus folgt für den Koeffizient

$$M_{\tilde{k}} = \frac{\hbar v_F}{E - V_{\text{Kontakt}}} \cdot (\tilde{k}_x - i \cdot k_y) = \frac{\hbar v_F}{E - V_{\text{Kontakt}}} \cdot \left(\sqrt{\frac{(E - V_{\text{Kontakt}})^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2} - i \cdot k_y \right) \rightarrow 1. \quad (62)$$

und weiter gilt, dass die Anzahl der geöffneten Kanäle N auch gegen unendlich geht, da die Fermi-Energie in der Übergangsschicht am Kontakt gegen unendlich geht.

Der Transmissionskoeffizient wird zu

$$t_n = \frac{2 + 2 M_{\tilde{k}}^2}{e^{i k_x L} (1 - M_k)^2 + e^{-i k_x L} (1 + M_k)^2} = \frac{k_x}{k_x \cos(k_x L) - \frac{E - V_{\text{gate}}}{\hbar v_F} i \sin(k_x L)}. \quad (63)$$

Am Dirac-Punkt, also bei $E = 0$, erhalten wir

$$t_n = \frac{2 + 2 M_{\tilde{k}}^2}{e^{i k_x L} (1 - M_k)^2 + e^{-i k_x L} (1 + M_k)^2} = \frac{k_x}{k_x \cos(k_x L) + \frac{V_{\text{gate}}}{\hbar v_F} i \sin(k_x L)} \quad (64)$$

und bei verschwindender Gatespannung $V_{\text{gate}} = 0$ bekommen wir aus der Energierelation (17) die Beziehungen

$$k_x^2 = -k_y^2 \quad (65)$$

$$\Rightarrow k_x = \pm i k_y \quad (66)$$

und damit ein Ergebnis für die Transmissionswahrscheinlichkeit für einen Kanal n

$$T_n = t_n^* \cdot t_n = \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{\pi L}{W} \left(n + \frac{1}{2}\right)\right)} \quad (67)$$

2.4 Leitfähigkeit für reines Graphen

Die Leitfähigkeit ergibt sich mit Hilfe der Landauer-Formel zu

$$G = \frac{4e^2}{h} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{\pi L}{W}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right)} . \quad (68)$$

Die Leitfähigkeit für den zweiten Dirac-Punkt führt ziemlich analog zum gleichen Ergebnis, was uns einen Faktor zwei liefert. Der andere Faktor zwei kommt von der Spinartung.

Wir erhalten also eine endliche Leitfähigkeit am Dirac-Punkt, obwohl dort eine verschwindende Ladungsträgerdichte vorherrscht. Die Größenordnung dieser Leitfähigkeit wurde auch in Versuchen verifiziert, obwohl in diesen Versuchen die eigentliche Voraussetzung der Reinheit nicht erfüllt war. Die Unterlage auf welches das Graphen aufgedampft wurde, war durch zufällig verteilte geladene Streuzentren verunreinigt. Was uns zu einem Modell für diffusiven Transport führt. Dieses Modell wollen wir im nächsten Kapitel besprechen.

3 Beschreibung von diffusivem Transport in Graphen

Die bisher realisierten Graphenschichten sind auf Schichten aufgedampft, die mit statistisch unabhängig verteilten geladenen Streuzentren in der Größenordnung von $100 \cdot 10^{10} \frac{1}{\text{cm}^2}$ verunreinigt sind. Aufgrund der damit einhergehenden relativ kurzen freien Weglänge der Elektronen liegt es nahe, diese als Wellenpakete und nicht mehr als propagierende Wellen zu beschreiben.

Unser Problem besitzt eine räumlich homogene stationäre Verteilungsfunktion f für die Elektronen

$$f(\vec{k}, \vec{r}, t) = f(\vec{k}) \quad (69)$$

Ist es uns möglich diese Verteilungsfunktion zu bestimmen, so können wir darüber ganz einfach die Stromdichte \vec{j} durch das Graphen berechnen, denn es gilt

$$\vec{j} = 4 \sum_{\vec{k}} e \vec{v}_{\vec{k}} \frac{f(\vec{k})}{A} \quad (70)$$

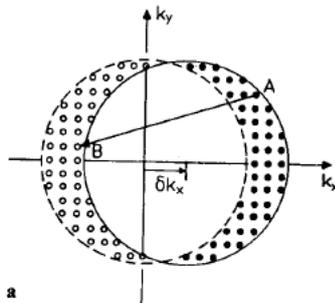
mit der Spinartung und dem Faktor 2 aufgrund der zwei Dirac-Punkte \vec{K} und \vec{K}' .

Die Verteilungsfunktion $f(\vec{k})$ kann dargestellt werden über eine Verschiebungsfunktion $g(\vec{k})$ der Verteilungsfunktion $f^0(\vec{k})$ bei keinem angelegten elektrischen Potential, also im Gleichgewicht. Es gilt

$$f(\vec{k}) = f^0(\vec{k}) + g(\vec{k}) . \quad (71)$$

Die Verschiebungsfunktion ist dem angelegten Feld proportional

$$g(\vec{k}) \propto \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} = E \cdot v_F \cdot \cos(\varphi) \quad (72)$$



[Iba02]

Die Verteilungsfunktion ändert sich zum Einen aufgrund der Beschleunigung durch das elektrische Feld und zum Anderen durch die Streuung der Elektronen an Störstellen in der Unterlage des Graphen. Mit Hilfe der Boltzmann-Gleichung

$$\sum \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} = \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} \Big|_{\text{Streuung}} + \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} \Big|_{\text{Feld}} = 0 \quad (73)$$

lassen sich dann die beiden Änderungen der Verteilungsfunktion in Relation setzen und wir können die explizite Form der Verschiebungsfunktion $g(\vec{k})$ bestimmen.

Der Einfluss des elektrischen Feldes können wir in linearer Näherung schreiben als

$$\frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} = \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \cdot \frac{\partial \epsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \cdot \dot{\vec{k}} \approx - \frac{\partial f^0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \cdot \hbar \cdot v_{\text{F}} \cdot \vec{e}_{\vec{k}} \cdot \frac{e}{\hbar} \cdot \vec{E}, \quad (74)$$

dabei benutzen wir (72). Der Einfluss der elastischen Streuung ergibt sich zu

$$\frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} = \sum_{\vec{k}'} [f(\vec{k}') \cdot (1 - f(\vec{k})) Q(\vec{k}' \rightarrow \vec{k}) - f(\vec{k}) \cdot (1 - f(\vec{k}')) Q(\vec{k} \rightarrow \vec{k}')] \quad (75)$$

$$= \sum_{\vec{k}'} (g(\vec{k}') - g(\vec{k})) \cdot Q(\vec{k} \rightarrow \vec{k}'), \quad (76)$$

dabei ist $Q(\vec{k} \rightarrow \vec{k}')$ die Übergangswahrscheinlichkeit für ein Elektron vom Zustand der durch den Wellenvektor \vec{k} bestimmt ist in den Zustand \vec{k}' zu gelangen. Dieser Term ist wie sich zeigen wird in der verwendeten Näherung symmetrisch. Die Übergangswahrscheinlichkeit für die Streuung ist weiterhin davon abhängig, wie viel freie Zustände $1 - f(\vec{k})$ und wie viel besetzte Zustände $f(\vec{k}')$ vor der Streuung vorhanden sind. Die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht hängt nicht von der Richtung des Wellenvektors \vec{k} ab und ergibt deshalb in der Näherung, in der Energieerhaltung gilt, keinen Beitrag.

Die Übergangswahrscheinlichkeit können wir mit Fermis Goldener Regel für statistisch unabhängig verteilte Streuzentren berechnen

$$Q(\vec{k} \rightarrow \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar A} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'}) \cdot n_i \left| V(\vec{k} - \vec{k}') \right|^2. \quad (77)$$

In dieser Näherung gilt sowohl die schon angesprochene Energieerhaltung, als auch die Symmetrie zwischen \vec{k} und \vec{k}' . n_i steht für die Dichte der geladenen Streuzentren. Die Fouriertransformierte des elektrischen Potentials $V(\vec{R})$ eines Streuers können wir berechnen

$$V(\vec{q}) = \alpha \cdot \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{1}{r} e^{i q r (\cos(\vartheta - \theta))} r d\vartheta dr \quad (78)$$

$$= \alpha 2\pi \int_0^\infty J_0(qr) dr = \frac{\alpha 2\pi}{q}, \quad (79)$$

mit der Konstanten

$$\alpha = \frac{eQ}{4\pi\epsilon} \quad (80)$$

und der Ladung eines Streuers Q . Weiter benutzen wir die Normiertheit der Besselfunktion $J_0(x)$. Der Streuterm lässt sich damit weiter umformen zu

$$\frac{\partial f(\vec{k})}{\partial t} \Big|_{\text{Streuung}} = \sum_{\vec{k}'} (g(\vec{k}') - g(\vec{k})) \cdot \frac{2\pi}{\hbar A} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'}) \cdot n_i \left| \frac{\alpha 2\pi}{|\vec{k} - \vec{k}'|} \right|^2 \quad (81)$$

$$= \frac{\alpha^2 2\pi n_i}{\hbar} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dk' k' (g(\vec{k}') - g(\vec{k})) \frac{1}{\hbar v_{\text{F}}} \delta(k - k') \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} \quad (82)$$

$$= \frac{\alpha^2 2\pi n_i}{k \hbar^2 v_{\text{F}}} g(\vec{k}) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1 - \cos(\varphi)}{2 - 2 \cos(\varphi)} = \frac{\alpha^2 2\pi^2 n_i}{k \hbar^2 v_{\text{F}}} g(\vec{k}). \quad (83)$$

Im vorletzten Schritt benutzen wir die Proportionalität der Verschiebungsfunktion (72), den Kosinussatz, sowie die Eigenschaft, dass das Integral in den Grenzen 0 und 2π über eine Sinusfunktion verschwindet.

Mit der Boltzmann-Gleichung erhalten wir nun

$$\frac{e}{\hbar} \cdot \vec{E} \cdot \frac{\partial f^0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \cdot \hbar \cdot v_F \cdot \vec{e}_{\vec{k}} = \frac{\alpha^2 2\pi^2 n_i}{k \hbar^2 v_F} g(\vec{k}) \quad (84)$$

und damit für die Verschiebungsfunktion

$$g(\vec{k}) = \frac{e k v_F^2 \hbar}{\alpha^2 2\pi^2 n_i} \frac{\partial f^0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \cdot (\vec{E} \cdot \vec{e}_{\vec{k}}) . \quad (85)$$

Dies bestätigt unsere vorher gemachte Annahme eines linearen Zusammenhangs (72) zwischen Verschiebungsfunktion und elektrischen Feld.

Bei verschwindender Temperatur $T = 0$ K ergibt sich für die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht eine Stufenfunktion. Für die Ableitung nach der Energie erhalten wir dann eine Deltafunktion

$$\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} = \frac{1}{\hbar v_F} \delta(k - k_F) . \quad (86)$$

Berücksichtigen wir noch, dass die Stromdichte im Gleichgewicht im Mittel verschwindet, erhalten wir die Stromdichte

$$\vec{j} = 4 \sum_{\vec{k}} e \vec{v}_{\vec{k}} \frac{g(\vec{k})}{A} = 4 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \frac{dk}{(2\pi)^2} \frac{k e^2 v_F^3 \hbar}{2\pi^2 \alpha^2 n_i} \delta(k - k_F) (\vec{e}_{\vec{k}} \vec{E}) \vec{e}_{\vec{k}} \quad (87)$$

$$= \frac{k_F e^2 v_F^2 \hbar}{2\pi^4 n_i \alpha^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \left[\begin{pmatrix} \cos(\varphi) \\ \sin(\varphi) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} \cos(\varphi) \\ \sin(\varphi) \end{pmatrix} \quad (88)$$

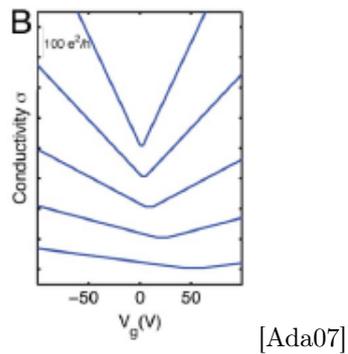
$$\stackrel{E_y=0}{=} \frac{\hbar k_F^2 e^2 v_F^2}{2\pi^4 n_i \alpha^2} \cdot E \cdot \begin{pmatrix} \pi \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{e^2 v_F^2 \hbar}{2\pi^2 n_i \alpha^2} \cdot n \cdot E \cdot \vec{e}_x . \quad (89)$$

Legen wir also ein elektrisches Feld in x -Richtung an, so erhalten wir einen Strom der auch in x -Richtung gerichtet ist.

Die Spezifische Leitfähigkeit mit

$$\sigma = \frac{e^2 v_F^2 \hbar}{2\pi^2 n_i \alpha^2} n \quad (90)$$

ist proportional zur Ladungsträgerdichte n und antiproportional zur Dichte der Streuzentren n_i . Würden wir in unsere Theorie noch einbauen, dass die Streuzentren überwiegend gleichnamig geladen sind und damit die außen angelegte Gatespannung entweder verstärkt oder schwächt, dann könnten wir noch die Verschiebung des Minimums der spezifischen Leitfähigkeit bei einer hohen Dichte an Streuzentren erklären. Des weiteren ist die Spannung, welche von den Streuzentren ausgeht, aufgrund der Nähe zum Graphen viel inhomogener als die angelegte Gatespannung, weshalb lokal endliche Ladungsträgerdichten, sogenannte Ladungsträgerpfützen, entstehen können und damit kann insgesamt eine endliche Leitfähigkeit entstehen. Damit lässt sich dann der folgende Plot quantitativ verstehen.



Die Dichte der Streuzentren nimmt vom obersten Plot zu den Plots weiter unten immer weiter ab.

Literatur

- [Dat95] DATTA, SUPRIYO: *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. 1995.
- [Two06] TWORZYDLO ET AL: *Quantum-limited shot noise in graphene*. cond-mat/0603315v3, März 2006.
- [Ada07] ADAM ET AL: *A self-consistent theory for graphene transport*. 0705.1540v2, Oktober 2007.
- [CaN09] CASTRO NETO ET AL: *The electronic properties of graphene*. Rev Mod Phys 81, 109, März 2009.
- [Iba02] IBACH UND LÜTH: *Festkörperphysik. Einführung in die Grundlagen*. 2002.
- [Jäc78] JÄCKLE, JOSEF: *Einführung in die Transporttheorie*. 1978.