

PACS numbers: 61.48.Gh, 63.22.Rc, 65.80.Ck, 68.65.Pq, 72.80.Vp, 73.22.Pr, 85.80.Fi

## **Свойства графена в транспортной модели Ландауэра–Датты–Лундстрёма**

Ю. А. Кругляк

*Одесский государственный экологический университет,  
ул. Львовская, 15,  
65016 Одесса, Украина*

С позиций транспортной модели Ландауэра–Датты–Лундстрёма обсуждаются такие свойства графена как плотность электронных состояний и плотность носителей тока, число мод и максимальная проводимость, рассеяние в графене, подвижность в графене в связи с формулой Друде, циклотронная частота и эффективная масса в графене, плотность фононных состояний, сравнительный вклад электронов и фононов в теплопроводность графена. В заключение в справочных целях даётся сводка термоэлектрических коэффициентов для графена в баллистическом и диффузионном режимах проводимости со степенным законом рассеяния.

З позицій транспортної моделі Ландауера–Датти–Лундстрёма обговорюються такі графенові властивості як густина електронних станів і густина носіїв струму, число мод і максимальна провідність, розсіяння в графені, рухливість у графені у зв'язку з формулою Друде, циклотронна частота і ефективна маса в графені, густина фононних станів, порівняльний внесок електронів і фононів у графенову теплопровідність. На закінчення в довідкових цілях дається зведення термоелектричних коефіцієнтів для графену в балістичному та дифузійному режимах провідності зі степеневим законом розсіяння.

On the basis of the Landauer–Datta–Lundstrom transport model, the following properties of graphene such as the electron density of states and the density of carriers, the number of modes and maximum conductivity, scattering in graphene, mobility in graphene in connection with the Drude formula, the cyclotron frequency and the effective mass in graphene, phonon density of states, the relative contribution of electrons and phonons in the thermal conduction of graphene are discussed. In conclusion, for reference purposes, a summary of thermoelectric coefficients for graphene in ballistic and diffusion conduction regimes with the power law of scattering is given.

**Ключевые слова:** нанофизика, наноэлектроника, графен, число мод, мак-

симальная проводимость, эффективная масса, фононные состояния, теплопроводность, термоэлектрические коэффициенты.

(Получено 18 марта 2015 г.)

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Модель электронного транспорта Ландауэра–Датты–Лундстрёма (ЛДЛ) в режиме линейного отклика сводится к паре транспортных уравнений [1]

$$J_x = \sigma \frac{d(E_F / q)}{dx} - S \sigma \frac{dT}{dx} \quad [\text{А/м}^2], \quad (1)$$

$$J_{Qx} = \pi \sigma \frac{d(E_F / q)}{dx} - k_0 \frac{dT}{dx} \quad [\text{Вт/м}^2] \quad (2)$$

или в обращённой форме

$$\frac{d(E_F / q)}{dx} = \rho J_x + S \frac{dT}{dx}, \quad (3)$$

$$J_{Qx} = \pi J_x - k \frac{dT}{dx} \quad (4)$$

с транспортными коэффициентами для  $2D$ -проводников

$$\sigma = 1 / \rho = \int \sigma'(E) dE, \quad (5)$$

$$\sigma'(E) = \frac{2q^2}{h} \frac{M(E)}{W} \lambda(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (6)$$

$$S = -\frac{k}{q} \frac{1}{\sigma} \int \left( \frac{E - E_F}{kT} \right) \sigma'(E) dE = \frac{s_T}{\sigma} = \frac{\pi}{T}, \quad (7)$$

$$k_0 = T \left( \frac{k}{q} \right)^2 \int \left( \frac{E - E_F}{kT} \right)^2 \sigma'(E) dE = k + \pi S \sigma. \quad (8)$$

Уравнения (1)–(8) справедливы для диффузионных резисторов любой размерности и любого масштаба, любого типа проводимости, включая биполярную проводимость. Уравнение (6) выписано для  $2D$ -проводника; это видно по множителю  $M(E) / W$ , где  $W$  — ширина  $2D$ -проводника. При рассмотрении  $3D$ -проводников этот множитель нужно заменить на  $M(E) / A$ , где  $A$  — площадь поперечного сечения  $3D$ -проводника, а для  $1D$ -проводника заменить просто на число мод проводимости  $M(E)$ . При рассмотрении транспорта во всех режимах от диффузионного до баллистического среднюю дли-

ну свободного пробега  $\lambda(E)$  нужно заменить кажущейся длиной по уравнению  $1/\lambda^{app} = 1/\lambda + 1/L$ , где  $L$  — длина проводника. Фактически в этих уравнениях нужно задаться только двумя параметрами,  $M(E)$  и  $\lambda(E)$ . Число мод для проводников любой размерности с параболической дисперсией определяется формулами (72)–(74) в [2], но сами уравнения (1)–(8) справедливы для любой зонной структуры, нужно лишь корректно задать число мод проводимости. Зависимость  $\lambda(E)$  нужно определить в соответствии с характером рассеяния в проводнике; часто используется степенной закон рассеяния [1].

В настоящем обзоре рассматривается применение транспортной модели ЛДЛ к графену.

## 2. ГРАФЕН

Пожалуй, сегодня нет другого объекта, который вызывал бы столь пристальное и широкое внимание физиков, химиков и технологов, как графен. Опубликованы подробные обзоры по физике графена [3–9]. В приближении эффективной массы поведение электрона в графене даётся уравнением Дирака–Вейля для безмассовых нейтрино [10–12]. В такой необычной электронной системе особый интерес вызывают её транспортные свойства [13–17]. После демонстрации получения образцов графена микромеханическим методом расщепления графита [18] качество образцов графена оказалось настолько высоким, что удалось реализовать баллистический транспорт на этих образцах [18, 19] и наблюдать квантовый эффект Холла, что в свою очередь явилось фактическим подтверждением справедливости «нейтринной» трактовки электронных состояний графена [20, 21]. Это обстоятельство послужило «спусковым крючком» взрывного интереса к всесторонним исследованиям графена вплоть до включения расчётов зонной структуры графена в университетские курсы, например, в Стэнфордском университете [22] и в Университете Пердью [23–25].

Вначале дадим сжатое изложение простейшей  $\pi$ -модели зонной структуры графена в рамках теории сильной связи [26] и приведём необходимые сведения о его зонной структуре, что послужит основой для расчёта транспортных и не только свойств графена в модели ЛДЛ. В Приложении дадим сводку всех термоэлектрических свойств графена как в баллистическом, так и в диффузионном режиме.

Кристаллическая решётка графена представляет собой совокупность двух взаимно проникающих решёток Браве А и В с элементарной ячейкой в виде правильного ромба (рис. 1). Период этих решёток равен  $a = a_0\sqrt{3} \approx 2,46 \text{ \AA}$ , где длина связи СС  $a_0 = 1,42 \text{ \AA}$ . Зона Бриллюэна представляет собой правильный шестиугольник со сто-

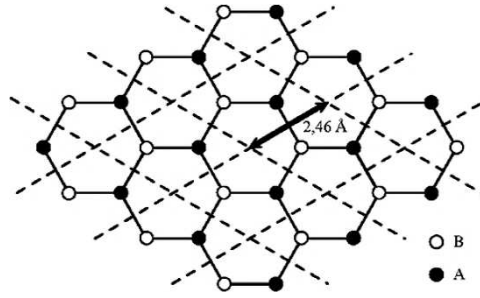


Рис. 1. Элементарная ячейка графена и вектор трансляции решёток Браве А и В.

роной  $4\pi/3a$  (Приложение I). Примитивные векторы трансляции (рис. 2) выбраны следующим образом:  $\mathbf{a} = a(1, 0)$  и  $\mathbf{b} = a(-1/2, \sqrt{3}/2)$ .

Векторы, связывающие соседние атомы, равны  $\tau_1 = a(0, 1/\sqrt{3})$ ,  $\tau_2 = a(-1/2, -1/2\sqrt{3})$ ,  $\tau_3 = a(1/2, -1/2\sqrt{3})$ . Вектора обратной решётки равны  $\mathbf{a}^* = (2\pi/a)(1, 1/\sqrt{3})$  и  $\mathbf{b}^* = (2\pi/a)(0, 2/\sqrt{3})$ . Первая зона Бриллюэна имеет две узловые точки  $K$  и  $K'$ . Соответствующие волновые векторы даются выражениями  $\mathbf{K} = (2\pi/a)(-2/3, 0)$  и  $\mathbf{K}' = (2\pi/a)(2/3, 0)$ . Далее:

$$\begin{aligned} \exp(i\mathbf{K} \cdot \tau_1) &= \omega, \quad \exp(i\mathbf{K} \cdot \tau_2) = \omega^{-1}, \quad \exp(i\mathbf{K} \cdot \tau_3) = 1, \\ \exp(i\mathbf{K}' \cdot \tau_1) &= 1, \quad \exp(i\mathbf{K}' \cdot \tau_2) = \omega^{-1}, \quad \exp(i\mathbf{K}' \cdot \tau_3) = \omega, \end{aligned} \quad (9)$$

где  $\omega = \exp(2\pi i / 3)$  и удовлетворяет условию  $1 + \omega + \omega^{-1} = 0$ .

Пусть  $\varphi(\mathbf{r})$  обозначает  $2p_z$ -АО атома углерода С. Периодический потенциал решётки создаётся двумя смещёнными друг относительно друга подрешётками А и В. Волновая функция электрона в таком потенциале даётся линейной комбинацией двух блоховских волн, построенных на этих подрешётках:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_A} \psi_A(\mathbf{R}_A) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) + \sum_{\mathbf{R}_B} \psi_B(\mathbf{R}_B) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B); \quad (10)$$

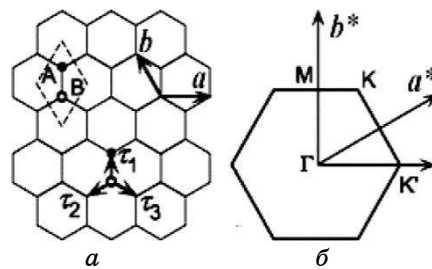


Рис. 2. Решётка графена (а) и его первая зона Бриллюэна (б).

амплитуды  $\psi_A(\mathbf{R}_A)$  и  $\psi_B(\mathbf{R}_B)$  берутся в точках  $\mathbf{R}_A = n_a \mathbf{a} + n_b \mathbf{b} + \tau_1$  и  $\mathbf{R}_B = n_a \mathbf{a} + n_b \mathbf{b}$  при целочисленных значениях  $n_a$  и  $n_b$ . Пренебрежём интегралом перекрытия двух соседних АО ( $S[2p_z(A), 2p_z(B)] = 0$ ) и учтём резонансный интеграл только между соседними атомами ( $\gamma_0 \approx 3$  эВ), что позволит получить все решения в аналитическом виде. Тогда

$$E\psi_A(\mathbf{R}_A) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_B(\mathbf{R}_A - \tau_l), \quad E\psi_B(\mathbf{R}_B) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_A(\mathbf{R}_B + \tau_l), \quad (11)$$

где за нуль отсчёта энергии принята энергия  $2p_z$ -АО атома С.

Положив  $\psi_A(\mathbf{R}_A) = f_A(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_A)$ ,  $\psi_B(\mathbf{R}_B) = f_B(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_B)$ , получим:

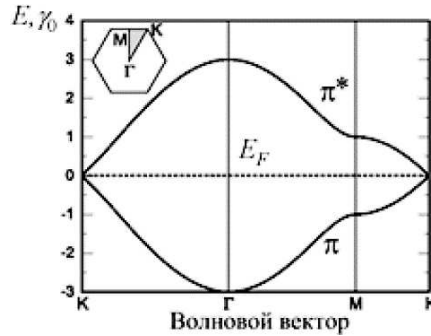
$$\begin{pmatrix} 0 & h_{AB}(\mathbf{k}) \\ h_{AB}(\mathbf{k})^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_A(\mathbf{k}) \\ f_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} f_A(\mathbf{k}) \\ f_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad h_{AB}(\mathbf{k}) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \tau_l). \quad (12)$$

Тогда для энергии зон имеем:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \gamma_0 \left| \sum_{l=1}^3 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \tau_l) \right|. \quad (13)$$

В соответствии с уравнением (10) имеем  $E_{\pm}(\mathbf{K}) = E_{\pm}(\mathbf{K}') = 0$ , т.е. в так называемых дираковских точках  $\mathbf{K}$  и  $\mathbf{K}'$  отсутствует щель между валентной зоной  $\pi$  и зоной проводимости  $\pi^*$  (рис. 3).

Посмотрим на поведение энергии в окрестности точки  $\mathbf{K}$ . Перепишем  $\mathbf{k}$  как  $\mathbf{K} + \mathbf{k}$  и разложим энергию  $E_{\pm}(\mathbf{k})$  по степеням  $|\mathbf{k}|a$ . В наинизшем, первом порядке получим:



**Рис. 3.** Симметричная зонная структура графена в приближении Хюккеля ( $S = 0, \gamma_0 \neq 0$ ).

$$-\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \exp[-i(\mathbf{K} + \mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\tau}_l] = -\omega^{-1} \gamma (k_x - ik_y) \quad (14)$$

$$\gamma = \frac{\sqrt{3}}{2} a \gamma_0. \quad (15)$$

Поэтому, переопределив  $f_A(\mathbf{K} + \mathbf{k}) = \tilde{f}_A(\mathbf{k})$  и  $f_B(\mathbf{K} + \mathbf{k}) = -\omega \tilde{f}_B(\mathbf{k})$ , имеем:

$$\gamma \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{f}_A(\mathbf{k}) \\ \tilde{f}_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \tilde{f}_A(\mathbf{k}) \\ \tilde{f}_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Используя матрицы Паули

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

предыдущее уравнение (16) можно переписать в виде

$$\gamma(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}) \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{k}) = E \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{k}), \quad \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \tilde{f}_A(\mathbf{k}) \\ \tilde{f}_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (18)$$

где  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ . Аналогичным образом получаем уравнение для точки  $K'$ . Фактически достаточно лишь  $\boldsymbol{\sigma}$  заменить на  $\boldsymbol{\sigma}^*$ .

Таким образом, в окрестностях точек  $K$  и  $K'$  дисперсия энергии даётся простым выражением

$$E_s(\mathbf{k}) = s\gamma |\mathbf{k}|, \quad s = \pm 1, \quad (19)$$

а плотность состояний равна

$$D(E) = \frac{g_v g_s}{L^2} \sum_{s,k} \delta(E - s\gamma |\mathbf{k}|) = \frac{g_v g_s |E|}{2\pi\gamma^2}, \quad (20)$$

где  $L_x L_y$  — площадь графена, вырождение по спину  $g_s = 2$ , а наличие двух долин  $K$  и  $K'$  приводит к пространственному (долинному) вырождению  $g_v = 2$ . Полученные результаты иллюстрируются рис. 4. Плотность состояний исчезает в точке  $E = 0$ . Поэтому графен часто рассматривают как двумерный полупроводник с нулевой запрещённой зоной или же как полуметалл.

В рассматриваемом приближении эффективной массы (иначе, схемы  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ ), движение электрона вблизи точек  $K$  и  $K'$  описывается уравнением Шредингера, в котором вектор  $\mathbf{k}$  заменяется оператором  $\mathbf{k} = -i\bar{\nabla}$ . Имеем:

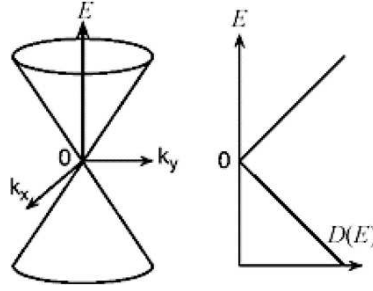


Рис. 4. Дисперсия энергии и плотность состояний  $D(E)$  в окрестности точек  $K$  и  $K'$ .

$$\gamma(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \mathbf{F}^K(\mathbf{r}) = E \mathbf{F}^K(\mathbf{r}), \quad \gamma(\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \hat{\mathbf{k}}) \mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}) = E \mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}), \quad (21)$$

где  $\mathbf{F}^K(\mathbf{r})$  и  $\mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r})$  являются двухкомпонентной волновой функцией

$$\mathbf{F}^K(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F_A^K(\mathbf{r}) \\ F_B^K(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}^{K'}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} F_A^{K'}(\mathbf{r}) \\ F_B^{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Уравнения (21) — это уравнения Дирака–Вейля для нейтрино, исключая разве что изотропную скорость

$$v_F = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\gamma}{\hbar}, \quad (23)$$

меньшую скорости света всего приблизительно в 300 раз. Столь высокая скорость электронов в графене привлекла внимание специалистов по нанoeлектронике.

Итак, вблизи точки Дирака

$$E(k) = \pm \hbar v_F k = \pm \hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2}. \quad (24)$$

Графен с  $E_F > 0$  назовём  $n$ -проводником, а с  $E_F < 0$  —  $p$ -проводником. Щели между зоной проводимости и валентной зоной нет. Обе зоны всегда спарены (рис. 5).

Электроны в графене описываются двухкомпонентной волновой функцией

$$\begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (25)$$

где  $\theta = \text{arctg}(k_y / k_x)$ , что влечёт за собой важные следствия; например, поскольку электроны вдоль  $+k_x$  и  $-k_x$  описываются ортогональными волновыми функциями, то вероятность обратного рассе-

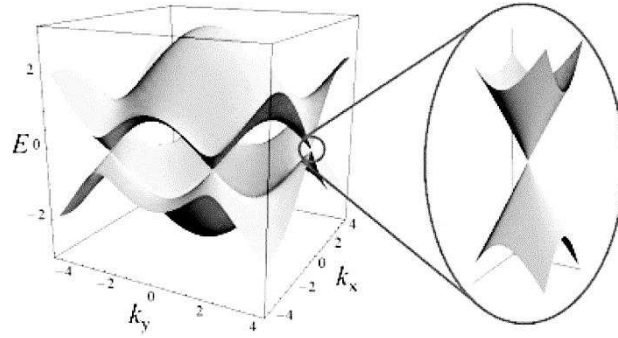


Рис. 5. Зонная структура графена. Увеличенным масштабом показан линейный спектр носителей тока в точке Дирака.

яния на  $180^\circ$  в графене нулевая.

### 2.1. Плотность состояний и плотность носителей тока

В конечном итоге нужно вычислить проводимость графена. Проводимость зависит от  $E_F$ , а положение уровня Ферми зависит от плотности носителей тока, определяемой плотностью состояний  $D(E)$ .

Опуская подробности вычисления плотности состояний [27, 28], имеем для  $2D$ -проводника число состояний между  $k$  и  $k + dk$ :

$$N(k)dk = g_s g_v \frac{2\pi k dk}{(2\pi / L_x)(2\pi / L_y)}, \quad (26)$$

где  $L_x L_y = A$  есть площадь графена, для которой вычисляется число состояний. В знаменателе стоит площадь  $\mathbf{k}$ -пространства, занятая  $\mathbf{k}$ -состояниями. Для дисперсии (24) —

$$N(k)dk = g_v A \frac{E dE}{\pi (\hbar v_F)^2}. \quad (27)$$

Определяя  $D(E)dE$  как плотность состояний на единицу поверхности графена в интервале энергий между  $E$  и  $E + dE$  и учитывая, что энергия может быть как положительной, так и отрицательной, для плотности состояний графена окончательно получаем:

$$D(E) = \frac{2 |E|}{\pi \hbar^2 v_F^2}, \quad (28)$$

а для образца графена с площадью поверхности  $WL$  это удельное выражение нужно умножить на  $WL$ .

Число электронов в зоне проводимости



$$n_S(E_F) = \int_0^{\infty} D(E) f_0(E) dE, \quad (29)$$

где индексом  $S$  пометим свойство, отнесённое к поверхности. Поскольку графен вырожден, то  $T = 0$  К будет неплохим приближением даже при комнатной температуре. Уравнение (29) становится следующим:

$$n_S(E_F) = \int_0^{E_F} D(E) dE = \frac{2}{\pi \hbar^2 v_F^2} \int_0^{E_F} dE, \quad (30)$$

так что окончательно для плотности носителей тока имеем:

$$n_S(E_F) = \frac{E_F^2}{\pi \hbar^2 v_F^2}. \quad (31)$$

## 2.2. Число мод и проводимость

Для  $2D$ -проводника число мод (формула (63) в [2])

$$M(E) = WM_{2D}(E) = W \frac{\hbar}{4} \langle v_x^+(E) \rangle D_{2D}(E), \quad (32)$$

где  $W$  — ширина проводника. Для графена

$$\langle v_x^+(E) \rangle = \frac{2}{\pi} v_F, \quad (33)$$

а плотность состояний даётся формулой (28), так что для числа мод окончательно имеем:

$$M(E) = W \frac{2|E|}{\pi \hbar v_F}. \quad (34)$$

В отличие от параболической дисперсии, для которой поведение числа мод и плотности состояний с энергией различное (рис. 8 в [2]), в графене оба эти свойства пропорциональны энергии:

$$D(E), M(E) \propto E. \quad (35)$$

Теперь можно сразу вычислить проводимость. Согласно (6) с учётом вырожденности ( $T = 0$  К)

$$\sigma'(E) = \frac{2q^2}{h} \frac{M(E)}{W} \lambda(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) = \frac{2q^2}{h} \frac{M(E)}{W} \lambda(E) \delta(E - E_F), \quad (36)$$

так что окончательно поверхностная проводимость (5)

$$\sigma_S = \int \sigma'(E) dE = \frac{2q^2}{h} \left( \frac{2E_F}{\pi \hbar v_F} \right) \lambda(E_F). \quad (37)$$

Для не зависящей от энергии средней длины свободного пробега проводимость графена пропорциональна энергии Ферми, а по (31), стало быть, линейно зависит от  $\sqrt{n_S}$ .

### 2.3. Рассеяние в графене

Характер зависимости проводимости от энергии Ферми или от поверхностной плотности носителей тока диктуется зависимостью среднего пути свободного пробега от энергии  $\lambda(E)$ , который в свою очередь определяется временем релаксации импульса согласно [29]:

$$\lambda(E) = \frac{\pi}{2} v_F \tau_p. \quad (38)$$

Там же показано, что для короткодействующих потенциалов рассеяния и рассеяния на акустических фононах скорость рассеяния пропорциональна плотности состояний:

$$\frac{1}{\tau_p} \propto D(E) \propto E, \quad (39)$$

так что в итоге

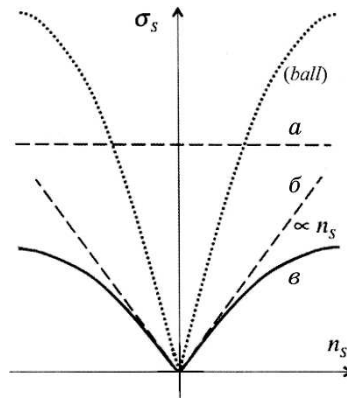
$$\tau_p \propto \lambda(E) \propto E^{-1} \quad (40)$$

и не зависит от температуры. Согласно же (37), теперь нужно признать, что для короткодействующих потенциалов рассеяния и рассеяния на акустических фононах поверхностная проводимость  $\sigma_S$  должна быть константой, независимой от  $E_F$  или  $n_S$ . Поскольку

$$\sigma_S = q n_S \mu, \quad (41)$$

то подвижность  $\mu$  должна быть обратно пропорциональна  $n_S$ . Это — необычная ситуация. Ведь обычно, чем больше плотность носителей тока, тем больше проводимость. Можно заключить, что, если доминируют короткодействующие потенциалы рассеяния или рассеяние на акустических фононах, можно ожидать независимости проводимости от  $n_S$  [13] (рис. 6).

В случае рассеяния на экранированных и неэкранированных ионизированных примесях для  $\lambda(E)$  можно ожидать линейную зависимость от энергии [15–17]:



**Рис. 6.** Качественная картина зависимости проводимости от плотности носителей тока для графена: (а) для короткодействующих потенциалов рассеяния и рассеяния на акустических фононах зависимость отсутствует; (б) рассеяние на заряженных примесях дает линейную зависимость; (в) суммарная картина; показан также баллистический режим.

$$\lambda(E) = \lambda_{ii}E, \tag{42}$$

что после подстановки в (37) дает квадратичную зависимость от  $E_F$ . Плотность носителей тока (31) также квадратична по  $E_F$ . Таким образом, рассеяние на заряженных примесях ведёт к проводимости, линейно зависящей от  $n_s$ , и, согласно (41), к постоянному значению подвижности [14].

На рисунке 6 качественно иллюстрируются два рассмотренных выше механизма рассеяния: случай короткодействующих потенциалов рассеяния (sr—short range) и рассеяние на ионизированных примесях (ii—ionized impurities). Скорости рассеяния складываются, так что суммарное значение средней длины свободного пробега

$$\frac{1}{\lambda_{tot}} = \frac{1}{\lambda_{ii}} + \frac{1}{\lambda_{sr}} \tag{43}$$

и

$$\frac{1}{\sigma_{tot}} = \frac{1}{\sigma_{ii}} + \frac{1}{\sigma_{sr}}. \tag{44}$$

Для выбранного значения  $n_s$  наименьший из двух вкладов лимитирует суммарное значение  $\sigma_s$ , из чего следует нелинейная суммарная зависимость  $\sigma_s(n_s)$ .

Ещё несколько механизмов рассеяния могут оказаться важными в графене. Это, например, короткодействующее рассеяние на дефектах сотовой структуры графена и рассеяние на полярных опти-

ческих фононах в  $\text{SiO}_2$ , часто служащем подложкой для графена [15–17].

#### 2.4. Подвижность и формула Друде

Подвижность в графене находим уравниванием выражений (37) и (41):

$$\mu = \frac{2q}{h} \frac{1}{n_s} \left( \frac{2E_F}{\pi \hbar v_F} \right) \lambda(E_F). \quad (45)$$

После подстановки выражения для  $n_s$  (31) получаем

$$\mu = \frac{2qv_F}{\pi E_F} \lambda(E_F). \quad (46)$$

Часто пишут, что электроны в графене «безмассовые». Это утверждение не лишено смысла, поскольку линейная дисперсия в графене (24) похожа на частотную дисперсию для фотонов  $\omega(k)$ . Соответственно этому для нахождения подвижности не стоит пользоваться формулой Друде с некой эффективной массой

$$\mu = \frac{q\tau_p}{m^*}, \quad (47)$$

а пользоваться напрямую формулой (46). Вместе с тем, связь между двумя подходами можно установить. Для этого выразим длину свободного пробега в (46) через время релаксации по (38). Тогда

$$\mu = \frac{q}{E_F / v_F^2} \tau_p(E_F), \quad (48)$$

что напоминает формулу Друде для подвижности (47), если под так называемой эффективной массой в графене подразумевать

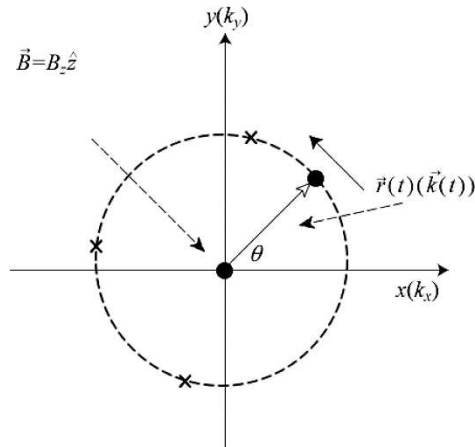
$$m^* = \frac{E_F}{v_F^2}, \quad (49)$$

что напоминает релятивистское выражение для энергии  $E = mc^2$ .

#### 2.5. Циклотронная частота в графене

При помещении графена в магнитное поле, направленное перпендикулярно его поверхности, циклотронная частота

$$\omega_c = 2\pi / T, \quad (50)$$



**Рис. 7.** К вычислению циклотронной частоты. Крестиком на траектории отмечены акты рассеяния.

где  $T$  — период обращения электрона по круговой орбите вокруг вектора магнитного поля (рис. 7)

$$\mathbf{B} = B_z \hat{z}, \tag{51}$$

для слабых полей связана со средним временем свободного пробега  $\tau_p$  соотношением

$$\omega_c \tau_p \ll 1, \tag{52}$$

$$\omega_c = \frac{qB_z}{m^*}. \tag{53}$$

Тогда условие для слабых полей (52) с учётом (47) можно переписать ещё так:

$$\mu B_z \ll 1. \tag{54}$$

Из (50) и (52) следует, что для слабых полей

$$T \gg \tau_p; \tag{55}$$

другими словами, период обращения электрона намного превышает время между столкновениями, в результате чего лишь редкие орбиты оказываются замкнутыми, что и приводит к наблюдению классического эффекта Холла. В противном случае, когда

$$\omega_c \tau_p \gg 1, \tag{56}$$

что соответствует сильным магнитным полям, наблюдается квантовый эффект Холла.

Получим общее выражение для циклотронной частоты, пригодное для произвольной дисперсии. Для силы Лоренца, действующей на электрон в магнитном поле, имеем

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (57)$$

Учтём, что импульс

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad (58)$$

и распишем (57) покомпонентно:

$$\hbar \frac{dk_x}{dt} = -qv_y B_z, \quad \hbar \frac{dk_y}{dt} = +qv_x B_z,$$

что даёт (рис. 7):

$$\hbar k \frac{d(\cos \theta)}{dt} = -q(v \sin \theta) B_z, \quad (59a)$$

$$\hbar k \frac{d(\sin \theta)}{dt} = +q(v \cos \theta) B_z. \quad (59b)$$

Дифференцируя (59a) по времени и используя (59b), получим

$$\frac{d^2(\cos \theta)}{dt^2} = -\omega_c^2 \cos \theta, \quad (60)$$

где искомая циклотронная частота для изотропной зонной структуры

$$\omega_c = \frac{qv}{\hbar k} B_z. \quad (61)$$

Для параболической дисперсии

$$v = \frac{\hbar k}{m^*}, \quad (62)$$

что и даёт для этой дисперсии циклотронную частоту (53).

Для интересующего нас случая графена  $v = v_F$ ,  $E = \hbar v_F k$ , и для циклотронной частоты в графене из (61) получаем

$$\omega_c = \frac{qB_z}{E_F / v_F^2}. \quad (63)$$

Таким образом, и здесь справедливо полученное ранее выраже-

ние (49) для эффективной массы.

## 2.6. Эффективная масса в графене

Выражение для эффективной массы в графене из подвижности (49) и циклотронной частоты (63) указывает на то, что должен быть более общий подход к понятию эффективной массы, чем традиционное определение её через кривизну дисперсионного соотношения

$$m^* = \hbar^2 / \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k=0}. \quad (64)$$

Разные способы записи проводимости для  $2D$ -проводников приведены в [31]. В общем случае имеем два эквивалентных выражения для проводимости [32], одно из которых выражает проводимость через произведение плотности состояний  $D(E)$  и коэффициента диффузии  $\bar{D}$ :

$$\sigma(E) = q^2 \bar{D} \frac{D(E)}{L} \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}, \quad (65)$$

а другое — через произведение числа мод  $M(E)$  в канале проводимости и средней длины пробега  $\lambda(E)$ :

$$\sigma(E) = \frac{q^2}{h} M(E) \lambda(E) \left\{ 1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A} \right\}, \quad (66)$$

где выражение в фигурных скобках показывает множители для проводников разной размерности.

Применимость модели Друде ограничена, в то время как уравнения для проводимости (65) и (66) имеют самое общее значение. Фундаментальное различие между этими уравнениями и теорией Друде состоит в том, что усреднение (5), (6)

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (67)$$

делает проводимость свойством поверхности Ферми: проводимость определяется уровнями энергии, близкими к  $E = E_{F0}$ . А согласно теории Друде проводимость зависит от общей электронной плотности, суммированной по всему спектру энергий, что и приводит к ограниченной применимости модели Друде.

Проводимость веществ меняется в очень широких пределах, несмотря на то, что число электронов в разных веществах приблизительно одинаково. Низкая проводимость стекла объясняется не тем, что в стекле мало так называемых «свободных» электронов, а

потому, что для стекла характерна очень низкая плотность состояний и числа мод вблизи  $E = E_{F_0}$ . Понятие же «свободных» электронов относится к интуитивным понятиям.

Для произвольных проводников, как с кристаллической структурой, так и аморфных, и для молекулярных проводников показано [32], что независимо от функциональной зависимости дисперсионного соотношения  $E(p)$  плотность состояний  $D(E)$ , скорость  $v(E)$  и импульс  $p(E)$  связаны с числом электронных состояний  $N(E)$  с энергией, меньшей значения  $E$ , фундаментальным соотношением

$$D(E)v(E)p(E) = N(E)d, \quad (68)$$

где  $d$  — размерность проводника. Используя (68) для вычисления проводимости (65) с учётом коэффициента диффузии [33]

$$\bar{D} = \langle v_x^2 \tau_p \rangle \quad (69)$$

для 3D-проводника получим

$$\sigma(E) = q^2 \frac{N(E)}{AL} \frac{\tau_p(E)}{m(E)}. \quad (70)$$

где масса определена как

$$m(E) = \frac{p(E)}{v(E)}. \quad (71)$$

Легко убедиться, что фундаментальное соотношение (68) справедливо и для параболической дисперсии, и для линейной. Для параболической зависимости масса носителей тока от энергии не зависит, что в общем случае не так.

Формула (70) выглядит как в теории Друде, если  $N/(AL)$  считать электронной плотностью  $n$ . При низких температурах это действительно так, поскольку усреднение (67) при  $E = E_{F_0}$  даёт

$$\sigma = \left( q^2 \frac{N(E)}{AL} \frac{\tau_p}{m} \right)_{E=E_{F_0}} = q^2 n \tau_p / m, \quad (72)$$

так как  $N(E)$  при  $E = E_{F_0}$  есть полное число электронов. При ненулевой температуре ситуация тем более сложнее, поскольку плотность состояний непараболическая. Отметим, что ключевым моментом в сведении общего выражения для проводимости (65) к выражению (70), похожему на формулу Друде, есть фундаментальное соотношение (68), связывающее плотность состояний  $D(E)$ , скорость  $v(E)$  и импульс  $p(E)$  для данного значения энергии с полным числом состояний  $N(E)$ , полученных интегрирование плотности со-



стояний:

$$N(E) = \int_{-\infty}^E D(E) dE. \quad (73)$$

### 2.7. Плотность фононных состояний в графене

Плотность фононных состояний и фононные моды для проводников разной размерности подробно рассмотрены в [34]. В качестве примера обратимся к вычислению плотности состояний для фононных акустических мод в графене, ход которых качественно показан на рис. 8.

Вычислим плотность фононных состояний для конкретных частот  $\omega_1$ ,  $\omega_2$  и  $\omega_3$ . Если продольные LA- и поперечные TA-акустические моды можно аппроксимировать линейной зависимостью  $\omega(k)$ , а именно,

$$\omega = v_g^{\text{LA}} k, \quad (74a)$$

$$\omega = v_g^{\text{TA}} k, \quad (74б)$$

то изгибные моды (flexural—ZA) ближе всего аппроксимируются квадратичной зависимостью частоты

$$\omega \propto \text{const}^{\text{ZA}} k^2, \quad (74в)$$

где для графена [35, 36]

$$v_g^{\text{LA}} \approx 2 \cdot 10^4 \text{ м/с}, \quad v_g^{\text{TA}} \approx 1,5 \cdot 10^4 \text{ м/с}, \quad \text{const}^{\text{ZA}} \approx 5 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}. \quad (75)$$

Подстановка (74a) в (62б) работы [34] окончательно для плотно-

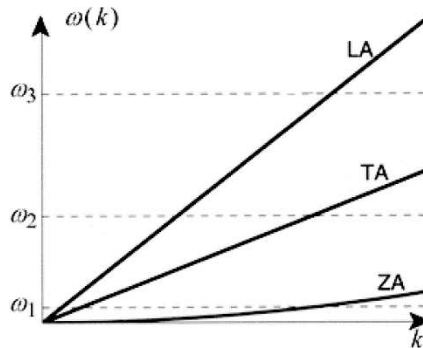


Рис. 8. К вычислению плотности фононных состояний на разных частотах.

сти фононных LA-мод даёт

$$D_{2D}^{\text{LA}}(\omega) = \frac{\omega}{2\pi(\nu_g^{\text{LA}})^2} \quad (76a)$$

и аналогично для TA-мод

$$D_{2D}^{\text{TA}}(\omega) = \frac{\omega}{2\pi(\nu_g^{\text{TA}})^2}. \quad (76b)$$

Для ZA-мод с учётом (59б) работы [34] и (74в) окончательно имеем

$$D_{2D}^{\text{ZA}}(\omega) = \frac{1}{L^2} \frac{dN_{2D}(k)}{dk} \frac{dk}{d\omega} = \frac{1}{4\pi\text{const}^{\text{ZA}}}. \quad (76в)$$

На частоте  $\omega_1$  вклад в плотность фононных состояний дают все три моды (рис. 8):

$$\begin{aligned} D_{2D}^{\text{tot}}(\omega_1) &= D_{2D}^{\text{LA}}(\omega_1) + D_{2D}^{\text{TA}}(\omega_1) + D_{2D}^{\text{ZA}}(\omega_1) = \\ &= \frac{\omega_1}{2\pi(\nu_g^{\text{LA}})^2} + \frac{\omega_1}{2\pi(\nu_g^{\text{TA}})^2} + \frac{1}{4\pi\text{const}^{\text{ZA}}}, \end{aligned} \quad (77a)$$

на частоте  $\omega_2$  — только моды LA и TA:

$$D_{2D}^{\text{tot}}(\omega_2) = D_{2D}^{\text{LA}}(\omega_2) + D_{2D}^{\text{TA}}(\omega_2) = \frac{\omega_2}{2\pi(\nu_g^{\text{LA}})^2} + \frac{\omega_2}{2\pi(\nu_g^{\text{TA}})^2}, \quad (77б)$$

а на частоте  $\omega_3$  — только мода LA:

$$D_{2D}^{\text{tot}}(\omega_3) = D_{2D}^{\text{LA}}(\omega_3) = \frac{\omega_3}{2\pi(\nu_g^{\text{LA}})^2}. \quad (77в)$$

## 2.8. Вклад электронов и фононов в теплопроводность графена

Уникальная зонная структура графена в точках Дирака порождает исключительно высокую электронную проводимость графена, что в свою очередь привело к множеству разнообразных предложений и идей по применению графена в различных и порой необычных электронных устройствах [37].

В отличие от большинства известных материалов линейность зонной структуры графена напоминает поведение длинноволновых акустических фононов. В отличие от исключительного внимания к электрическим свойствам графена его термические свойства менее

изучены. Вместе с тем именно фононы ответственны за его теплофизические свойства.

Приведём качественное объяснение причин такой ситуации. Для этого нужно обратиться к фононным модам.

Согласно (34), в случае электронов для плотности числа мод имеем:

$$M_{2D}(E) = \frac{2 |E|}{\pi \hbar v_F}. \quad (78)$$

Для плотности числа фононов, согласно (67б) работы [34], имеем:

$$M_{2D}(\omega) = 2v_g(\omega)D_{2D}(\omega) = \frac{k(\omega)}{\pi}. \quad (79)$$

Для LA- и TA-акустических фононов воспользуемся, согласно (74а), (74б), линейным дебаевским приближением, а для ZA-фононов — квадратичной аппроксимацией (74в). Тогда для плотности фононных состояний имеем:

$$M_{2D}^{\text{LA}}(\omega) = \frac{\omega}{\pi v_g^{\text{LA}}}, \quad (80а)$$

$$M_{2D}^{\text{TA}}(\omega) = \frac{\omega}{\pi v_g^{\text{TA}}}, \quad (80б)$$

$$M_{2D}^{\text{ZA}}(\omega) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\omega}{\text{const}^{\text{ZA}}}} \quad (80в)$$

с параметрами  $v_g^{\text{LA}}$ ,  $v_g^{\text{TA}}$  и  $\text{const}^{\text{ZA}}$  по (75).

Сравнивая плотность числа электронных мод (78) с плотностью LA- и TA-фононных состояний (80а), (80б), мы фактически имеем одно и то же выражение ( $E = \hbar\omega$ ) за исключением двойки, учитывающей вырождение по спину. Отличаются эти выражения лишь скоростью: скорость электронов  $v_F$  на два порядка больше групповой скорости фононов  $v_g$ . В результате плотность электронных мод намного меньше плотности фононных мод. Это наглядно видно из рис. 9, где зависимость плотности всех акустических фононных мод отложена вместе с плотностью электронных мод в интервале  $0 < E \leq 50$  мэВ с максимальным значением, соответствующим  $\approx 2kT$  при комнатной температуре.

Как следствие, нужно ожидать намного более существенный вклад фононов в передачу тепла по сравнению с электронами. А среди фононных акустических мод наиболее важную роль в передаче тепла играют изгибные моды ZA [34], по крайней мере, вплоть до комнатных температур.

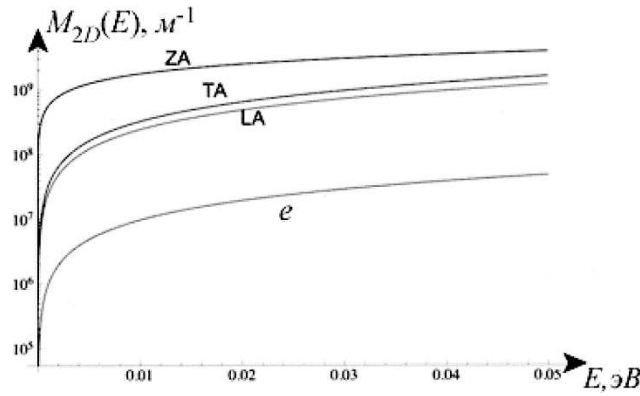


Рис. 9. Плотность электронных и фоновых состояний в графене вплоть до 50 мэВ [36].

## 2.9. Максимальная проводимость графена

Рассмотрим идеально чистый графен без дефектов и без заряженных примесей, рассеивающих электроны. Какую проводимость можно ожидать? При высоких температурах имеет место рассеяние на фононах; вблизи же комнатной температуры доминирует рассеяние на акустических фононах. Скорость рассеяния пропорциональна плотности состояний, а для времени рассеяния получено следующее выражение [28]:

$$\tau_p(E) = \frac{4\hbar^3 \rho_m v_F^2 v_s^2}{D_A^2 kT} \left( \frac{1}{E} \right), \quad (81)$$

где  $\rho_m$  — массовая плотность;  $v_s$  — скорость звука;  $D_A$  — акустический деформационный потенциал, служащий мерой электрон-фононной связи. Тогда для среднего пути свободного пробега, согласно (38), получаем:

$$\lambda(E) = \frac{2\pi\hbar^3 \rho_m v_F^3 v_s^2}{D_A^2 kT} \left( \frac{1}{E} \right) \quad (82)$$

и далее из уравнения (37) для поверхностной проводимости имеем:

$$\sigma_S = \frac{4q^2 \hbar \rho_m v_F^2 v_s^2}{\pi D_A^2 kT} \left( \frac{1}{E} \right). \quad (83)$$

Подставляя следующие значения свойств для графена [29]

$$v_s \approx 2,1 \cdot 10^4 \text{ м/с}, \quad \rho_m \approx 7,6 \cdot 10^{-7} \text{ кг/м}^2, \quad D_A \approx 18 \text{ эВ},$$

получаем

$$\rho_s = \sigma_s^{-1} \approx 30 \text{ Ом}/\square. \quad (84)$$

Оценка (84) дает ожидаемый нижний предел для удельного поверхностного сопротивления (верхний предел для удельной поверхностной проводимости). В реальности другие механизмы рассеяния увеличат поверхностное сопротивление. Как соотносится полученная оценка с поверхностным сопротивлением для других материалов? Рассмотрим, например, Si MOSFET с  $n_s \approx 10^{13} \text{ см}^{-3}$  и подвижностью в инверсионном слое  $\mu_{\text{eff}} \approx 250 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ . Для такого 2D-проводника  $\rho_s \approx 2500 \text{ Ом}/\square$ . Для высокопроводящего InGaAs с  $n_s \approx 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$  и подвижностью  $\mu_{\text{eff}} \approx 1 \cdot 10^5 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$  находим, что  $\rho_s \approx 300 \text{ Ом}/\square$ . Действительно, для графена можно ожидать исключительно высокую проводимость.

В заключение в справочных целях приводим в Приложении II термоэлектрические коэффициенты для графена в баллистическом и диффузионном режимах [29, 38].

### ПРИЛОЖЕНИЕ I. Обратная решётка и зона Бриллюэна графена

Построим обратную решётку графена и его зону Бриллюэна. Прimitives векторы трансляции можно выбрать любым приемлемым способом. В отличие от выбора на рис. 2, *a*, пусть сейчас векторы трансляции выберем иначе (рис. III-1).

Эти базисные векторы, очевидно, таковы:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{3}{2} a_0 \hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2} a_0 \hat{y}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{3}{2} a_0 \hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2} a_0 \hat{y}, \quad \mathbf{a}_3 = c \hat{z},$$

где вектор  $\mathbf{a}_3$  играет вспомогательную роль: периодичность перпендикулярно плоскости графена отсутствует, величина этого вектора, как будет видно ниже, даётся большим числом.

Произвольные векторы прямой  $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$  и обратной  $\mathbf{G} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3$  решёток связаны соотношением:

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{G} = 2\pi \text{Int},$$

где Int есть произвольное целое число, а трансляционные векторы обратной решётки —

$$\mathbf{b}_i = 2\pi \frac{\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{a}_k}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3)},$$

где знаменатель есть объём элементарной ячейки. Вычисляем векторы обратной решётки:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a_0} \left( \frac{1}{3} \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{y} \right), \\
 \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a_0} \left( \frac{1}{3} \hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{y} \right), \\
 \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{c} \hat{z},
 \end{aligned} \tag{III}$$

где  $\mathbf{b}_3 \Big|_{c \rightarrow \infty} \rightarrow \mathbf{0}$ , что соответствует двумерности обратной решётки.

Относительно центра  $\Gamma$  первой зоны Бриллюэна строим векторы  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$  и им обратные (рис. III-2).

Концы векторов А, С, Е и В, D, F образуют два симметрично пересекающихся треугольника, образующих первую зону Бриллюэна в виде правильного шестиугольника с особыми точками М и К. Из геометрических построений для стороны зоны Бриллюэна получаем  $2MK = 4\pi/(3a_0\sqrt{3})$ .

Сопоставление прямой и обратной решёток показано на рис. III-3. Обращает на себя внимание взаимное расположение векторов трансляции обеих решёток:

$$\mathbf{b}_1 \perp \mathbf{a}_2, \quad \mathbf{b}_2 \perp \mathbf{a}_1,$$

что следует из (III).

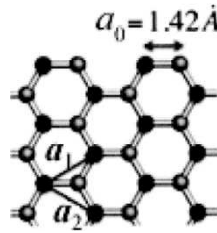


Рис. III-1. Выбор примитивных векторов трансляции.

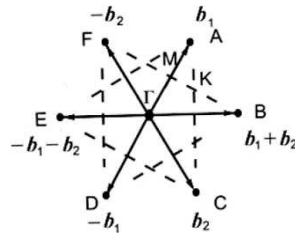
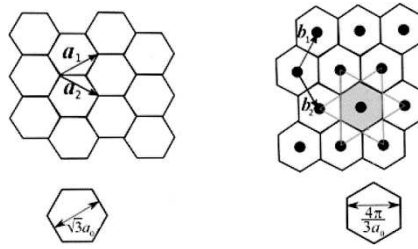


Рис. III-2. Построение первой зоны Бриллюэна.



**Рис. III-3.** Прямая (слева) и обратная (справа) решётки графена; первая зона Бриллюэна затенена.

### ПРИЛОЖЕНИЕ II. ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ДЛЯ ГРАФЕНА

В приведённых ниже формулах предполагается линейная дисперсия (24). Число мод даётся выражением (34). Рассеяние описывается степенным законом

$$\lambda(E) = \lambda_0 \left( \frac{E}{kT} \right)^r.$$

Положение уровня Ферми  $E_F$  относительно дна зоны проводимости  $E_C$  определяется параметром

$$\eta_F = \frac{E_F - E_C}{kT}.$$

Проводимость  $G = \sigma W / L$  приведена в Сименсах:  $[\sigma] = 1 \text{ См}$ . Аналогично для остальных удельных термоэлектрических коэффициентов (5)–(8):  $s_T = S_T L / W$ ;  $\kappa_0 = K_0 L / W$ ;  $k = KL / W$ .

Интегралы Ферми–Дирака порядка  $j$  определяются следующим образом [31]:

$$\mathfrak{F}_j(\eta_F) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{\eta^j}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} d\eta.$$

#### 1. Баллистический режим

$$G^{ball} = W \frac{2q^2}{h} \left( \frac{2kT}{\pi \hbar v_F} \right) [\mathfrak{F}_0(\eta_F) + \mathfrak{F}_0(-\eta_F)];$$

$$S^{ball} = -\frac{k}{q} \left\{ \frac{2[\mathfrak{F}_1(\eta_F) - \mathfrak{F}_1(-\eta_F)]}{\mathfrak{F}_0(\eta_F) + \mathfrak{F}_0(-\eta_F)} - \eta_F \right\};$$

$$\begin{aligned}
S_T^{ball} &= \\
&= -W \frac{2q^2}{h} \left( \frac{2kT}{\pi\hbar\nu_F} \right) \left( \frac{k}{q} \right) \left\{ 2[\mathfrak{I}_1(\eta_F) - \mathfrak{I}_1(-\eta_F)] - \eta_F [\mathfrak{I}_0(\eta_F) + \mathfrak{I}_0(-\eta_F)] \right\}; \\
K^{ball} &= \\
&= WT \frac{2q^2}{h} \left( \frac{2kT}{\pi\hbar\nu_F} \right) \left( \frac{k}{q} \right)^2 \left\{ 6[\mathfrak{I}_2(\eta_F) + \mathfrak{I}_2(-\eta_F)] - \frac{4[\mathfrak{I}_1(\eta_F) - \mathfrak{I}_1(-\eta_F)]^2}{\mathfrak{I}_0(\eta_F) + \mathfrak{I}_0(-\eta_F)} \right\}; \\
K_0^{ball} &= WT \frac{2q^2}{h} \left( \frac{2kT}{\pi\hbar\nu_F} \right) \left( \frac{k}{q} \right)^2 \left\{ 6[\mathfrak{I}_2(\eta_F) + \mathfrak{I}_2(-\eta_F)] - \right. \\
&\quad \left. - 4\eta_F [\mathfrak{I}_1(\eta_F) - \mathfrak{I}_1(-\eta_F)] + \eta_F^2 [\mathfrak{I}_0(\eta_F) + \mathfrak{I}_0(-\eta_F)] \right\}.
\end{aligned}$$

## 2. Диффузионный режим

$$\begin{aligned}
G^{diff} &= W \frac{2q^2}{h} \left( \frac{2kT}{\pi\hbar\nu_F} \right) \left( \frac{\lambda_0}{L} \right) \Gamma(r+2) [\mathfrak{I}_r(\eta_F) + \mathfrak{I}_r(-\eta_F)]; \\
S^{diff} &= -\frac{k}{q} \left\{ \frac{(r+2)[\mathfrak{I}_{r+1}(\eta_F) - \mathfrak{I}_{r+1}(-\eta_F)]}{\mathfrak{I}_r(\eta_F) + \mathfrak{I}_r(-\eta_F)} - \eta_F \right\}; \\
S_T^{diff} &= -W \frac{2q^2}{h} \frac{k}{q} \left( \frac{2kT}{\pi\hbar\nu_F} \right) \left( \frac{\lambda_0}{L} \right) \times \\
&\quad \times \left\{ \Gamma(r+3) [\mathfrak{I}_{r+1}(\eta_F) - \mathfrak{I}_{r+1}(-\eta_F)] - \eta_F \Gamma(r+2) [\mathfrak{I}_r(\eta_F) + \mathfrak{I}_r(-\eta_F)] \right\}; \\
K &= WT \frac{2q^2}{h} \left( \frac{k}{q} \right)^2 \left( \frac{2kT}{\pi\hbar\nu_F} \right) \left( \frac{\lambda_0}{L} \right) \Gamma(r+3) \times \\
&\quad \times \left\{ (r+3) [\mathfrak{I}_{r+2}(\eta_F) + \mathfrak{I}_{r+2}(-\eta_F)] - \frac{(r+2) [\mathfrak{I}_{r+1}(\eta_F) - \mathfrak{I}_{r+1}(-\eta_F)]^2}{\mathfrak{I}_r(\eta_F) + \mathfrak{I}_r(-\eta_F)} \right\}; \\
K_0 &= WT \frac{2q^2}{h} \left( \frac{k}{q} \right)^2 \left( \frac{2kT}{\pi\hbar\nu_F} \right) \left( \frac{\lambda_0}{L} \right) \times \\
&\quad \times \left\{ \Gamma(r+4) [\mathfrak{I}_{r+2}(\eta_F) + \mathfrak{I}_{r+2}(-\eta_F)] - 2\eta_F \Gamma(r+3) [\mathfrak{I}_{r+1}(\eta_F) + \mathfrak{I}_{r+1}(-\eta_F)] + \right. \\
&\quad \left. + \eta_F^2 \Gamma(r+2) [\mathfrak{I}_r(\eta_F) + \mathfrak{I}_r(-\eta_F)] \right\}.
\end{aligned}$$



В основу настоящего обзора положены лекции Марка Лундстрома ‘Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications’ [29], Суприе Датты ‘Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts’ [39] и Тимоти Фишера ‘Thermal Energy at the Nanoscale’ [36], прочитанных в 2011–2013 годах в рамках инициативы Purdue University/nanoHUB-U [[www.nanohub.org/u](http://www.nanohub.org/u)].

Благодарю Н. Е. Кругляк за помощь в подготовке рукописи к печати.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Yu. Kruglyak, *J. Nanoscience*, **2014**, Article ID 725420, 15 pp.; [www.dx.doi.org/10.1155/2014/725420](http://www.dx.doi.org/10.1155/2014/725420).
2. Ю. А. Кругляк, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **11**, № 3: 519 (2013); Erratum, *ibidem*, **12**, № 2: 415 (2014).
3. М. В. Стриха, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **7**, No. 3: 5 (2010).
4. А. К. Geim, *Science*, **324**: 1530 (2009).
5. К. S. Novoselov, *Physics World*, **22**, No. 8: 27 (2009).
6. Ю. Е. Лозовик, С. П. Меркулова, А. А. Соколик, *УФН*, **178**, No. 7: 757 (2008).
7. С. В. Морозов, К. С. Новоселов, А. К. Гейм, *УФН*, **178**, No. 7: 776 (2008).
8. T. Ando, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, No. 176: 203 (2008).
9. А. К. Geim and К. S. Novoselov, *Nature Mat.*, **6**: 183 (2007).
10. J. W. McClure, *Phys. Rev.*, **104**: 666 (1956).
11. J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, *Phys. Rev.*, **109**, No. 2: 272 (1958).
12. T. Ando, *J. Phys. Soc. Japan*, **74**: 777 (2005).
13. N. Y. Shon and T. Ando, *J. Phys. Soc. Japan*, **67**: 2421 (1998).
14. N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, and T. Stauber, *Phys. Rev. B*, **76**, No. 7: 073412 (2007).
15. W. Zhu, V. Perebeinos, M. Freitag, and P. Avouris, *Phys. Rev. B*, **80**: 235 (2009).
16. V. Perebeinos and P. Avouris, *Phys. Rev. B*, **81**: 195442 (2010).
17. S. D. Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.*, **83**: 407 (2011).
18. R. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science*, **306**: 666 (2004).
19. S. V. Morozov, K. S. Novoselov, F. Schedin, D. Jiang, A. A. Firsov, and A. K. Geim, *Phys. Rev. B*, **72**, No. 20: 201401 (2005).
20. R. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature*, **438**: 197 (2005).
21. Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature*, **438**: 201 (2005).
22. R. B. Laughlin, *Condensed Matter Theory (II): Graphene Band Structure / Graphene Density of States*: <http://large.stanford.edu/courses/>.
23. S. Datta, *Graphene Bandstructures* (Purdue University: 2008: [www.nanohub.org/resources/5710](http://www.nanohub.org/resources/5710)).
24. S. Datta, *Graphene Density of States I* (Purdue University: 2008: [www.nanohub.org/resources/5721](http://www.nanohub.org/resources/5721)).
25. S. Datta, *Graphene Density of States II* (Purdue University: 2008:

- www.nanohub.org/resources/5722).
26. Ю. А. Кругляк, Н. Е. Кругляк, *Вісник Одеського державного екологічного університету*, № 13: 207 (2012).
  27. M. Lundstrom, *Sums in k-space / Integrals in Energy Space* (Purdue University: 2009: www.nanohub.org/resources/7296).
  28. D. Berdebes, T. Low, and M. Lundstrom, *Lecture Notes on Low Bias Transport in Graphene: An Introduction* (Purdue University: 2009: www.nanohub.org/resources/7435).
  29. M. Lundstrom and C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); www.nanohub.org/resources/11763.
  30. Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха, *Sensor Electronics Microsys. Tech.* **11**, No. 1: 5 (2014).
  31. Ю. А. Кругляк, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **11**, № 4: 655 (2013).
  32. Ю. А. Кругляк, Н. Е. Кругляк, *Фізич. образов. в ВУЗах*, **19**, № 3: 99 (2013).
  33. Ю. А. Кругляк, Н. Е. Кругляк, *Фізич. образов. в ВУЗах*, **19**, № 2: 161 (2013).
  34. Yu. A. Kruglyak, *Proceedings of the International Conference 'Nanomaterials: Applications and Properties'*, **3**, No. 2: 02NAESF02 (2014).
  35. D. Singh, J. Y. Murthy, and T. S. Fisher, *J. Appl. Phys.*, **110**, No. 9: 094312 (2011).
  36. T. S. Fisher, *Thermal Energy at the Nanoscale* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); www.nanohub.org/courses/2.
  37. S. D. Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.*, **83**, No. 2: 407 (2011).
  38. R. S. Kim, *Physics and Simulation of Nanoscale Electronic and Thermoelectric Devices* (West Lafayette: Purdue University: 2011).
  39. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2012); www.nanohub.org/courses/FoN1.

## REFERENCES

1. Yu. Kruglyak, *J. Nanoscience*, **2014**, Article ID 725420, 15 pp.; www.dx.doi.org/10.1155/2014/725420.
2. Yu. A. Kruglyak, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **11**, No. 3: 519 (2013) (in Russian); Erratum, *ibid*, **12**, No. 2: 415 (2014) (in Russian).
3. M. V. Strikha, *Sensor Electronics Microsys. Techn.*, **7**, No. 3: 5 (2010) (in Ukrainian).
4. A. K. Geim, *Science*, **324**: 1530 (2009).
5. K. S. Novoselov, *Physics World*, **22**, No. 8: 27 (2009).
6. Yu. E. Losovik, S. P. Merkulova, and A. A. Sokolik, *Uspekhi Fiz. Nauk*, **178**, No. 7: 757 (2008) (in Russian).
7. S. V. Morosov, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Uspekhi Fiz. Nauk.*, **178**, No. 7: 776 (2008) (in Russian).
8. T. Ando, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, No. 176: 203 (2008).
9. A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Mat.*, **6**: 183 (2007).
10. J. W. McClure, *Phys. Rev.*, **104**: 666 (1956).

11. J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, *Phys. Rev.*, **109**, No. 2: 272 (1958).
12. T. Ando, *J. Phys. Soc. Japan*, **74**: 777 (2005).
13. N. Y. Shon and T. Ando, *J. Phys. Soc. Japan*, **67**: 2421 (1998).
14. N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, and T. Stauber, *Phys. Rev. B*, **76**, No. 7: 073412 (2007).
15. W. Zhu, V. Perebeinos, M. Freitag, and P. Avouris, *Phys. Rev. B*, **80**: 235 (2009).
16. V. Perebeinos and P. Avouris, *Phys. Rev. B*, **81**: 195442 (2010).
17. S. D. Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.*, **83**: 407 (2011).
18. R. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science*, **306**: 666 (2004).
19. S. V. Morozov, K. S. Novoselov, F. Schedin, D. Jiang, A. A. Firsov, and A. K. Geim, *Phys. Rev. B*, **72**, No. 20: 201401 (2005).
20. R. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature*, **438**: 197 (2005).
21. Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature*, **438**: 201 (2005).
22. R. B. Laughlin, *Condensed Matter Theory (II): Graphene Band Structure / Graphene Density of States*: <http://large.stanford.edu/courses/>.
23. S. Datta, *Graphene Bandstructures* (Purdue University: 2008: [www.nanohub.org/resources/5710](http://www.nanohub.org/resources/5710)).
24. S. Datta, *Graphene Density of States I* (Purdue University: 2008: [www.nanohub.org/resources/5721](http://www.nanohub.org/resources/5721)).
25. S. Datta, *Graphene Density of States II* (Purdue University: 2008: [www.nanohub.org/resources/5722](http://www.nanohub.org/resources/5722)).
26. Yu. A. Kruglyak and N. E. Kruglyak, *Visnyk Odeskogo Derzhavnogo Ekologichnogo Universytetu*, No. 13: 207 (2012) (in Russian).
27. M. Lundstrom, *Sums in k-space / Integrals in Energy Space* (Purdue University: 2009: [www.nanohub.org/resources/7296](http://www.nanohub.org/resources/7296)).
28. D. Berdebes, T. Low, and M. Lundstrom, *Lecture Notes on Low Bias Transport in Graphene: An Introduction* (Purdue University: 2009: [www.nanohub.org/resources/7435](http://www.nanohub.org/resources/7435)).
29. M. Lundstrom and C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport: Fundamentals and Applications* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); [www.nanohub.org/resources/11763](http://www.nanohub.org/resources/11763).
30. Yu. O. Kruglyak and M. V. Strikha, *Sensor Electronics Microsys. Tech.*, **11**, No. 1: 5 (2014) (in Ukrainian).
31. Yu. A. Kruglyak, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **11**, No. 4: 655 (2013) (in Russian).
32. Yu. A. Kruglyak and N. E. Kruglyak, *Fizich. Obrazovanie v VUZakh*, **19**, No. 3: 99 (2013) (in Russian).
33. Yu. A. Kruglyak and N. E. Kruglyak, *Fizich. Obrazovanie v VUZakh*, **19**, No. 2: 161 (2013) (in Russian).
34. Yu. A. Kruglyak, *Proceedings of the International Conference 'Nanomaterials: Applications and Properties'*, **3**, No. 2: 02NAESF02 (2014).
35. D. Singh, J. Y. Murthy, and T. S. Fisher, *J. Appl. Phys.*, **110**, No. 9: 094312 (2011).
36. T. S. Fisher, *Thermal Energy at the Nanoscale* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2013); [www.nanohub.org/courses/2](http://www.nanohub.org/courses/2).

37. S. D. Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.*, **83**, No. 2: 407 (2011).
38. R. S. Kim, *Physics and Simulation of Nanoscale Electronic and Thermoelectric Devices* (West Lafayette: Purdue University: 2011).
39. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company: 2012); [www.nanohub.org/courses/FoN1](http://www.nanohub.org/courses/FoN1).