

PACS numbers: 73.22 -f, 73.22. Pr, 73.61. Ey, 81.05. ue

Б.М. Рувінський¹, М.А. Рувінський²

Термоелектричний ефект у стрічках допованого графену

¹ Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу,
вул.Карпатська, 15, м.Івано-Франківськ, 76000, Україна,

² Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул.Шевченка, 57, м.Івано-Франківськ, 76000, Україна,
bruvinsky@gmail.com

Проведено теоретичне дослідження термоелектричного ефекту в нанострічках допованого графену для випадків "крісла" (armchair) та "зігзагу" (zigzag) з врахуванням відповідних електронних станів (з щільною і без щільності в енергетичному спектрі). За допомогою кінетичного рівняння Больцмана визначені електропровідність, термоелектричний коефіцієнт та термоерс. Для випадку "крісла" розглянуто пружне розсіяння носіїв струму на екранованому потенціалі зарядженої домішки, а для випадку "зігзагу" визначено вплив електрон-фононної взаємодії. Показано, що наявність щільності в енергетичному спектрі та одновимірного руху в нанострічці призводить до збільшення термоерс порівняно з випадком необмеженого графену.

Ключові слова: допований графен, нанострічки типу "крісло" ("armchair") та "зігзаг" ("zigzag"), термоерс.

Стаття постуила до редакції 10.06.2014; прийнята до друку 25.08.2014.

Вступ

Термоелектричний ефект в графені [1,2] може мати важливе значення при проектуванні сучасних елементів наноелектроніки. Вимірювана термоерс графену досягає при кімнатних температурах величини $k_B/e \sim 100$ мкВК⁻¹, де k_B – стала Больцмана, $-e < 0$ – заряд електрона. В [2,3] було показано, що можлива наявність щільності в діраківському спектрі електронів (напр., під впливом підкладки) при певному каналі розсіяння квазічастинок (з часом релаксації, сильно залежним від енергії) може привести до появи значного піку термоерс при наближенні хімічного потенціалу до краю щільності. При цьому рух електронів в необмеженому графені залишається двовимірним, а виникнення щільності для одношарового графену ще до кінця не з'ясовано.

Сучасні технології дозволяють отримати також графенові дроти або стрічки [4] – квазіодновимірні системи, в яких може бути відкрита енергетична щільність [5-7]. Схему кристалічної структури листа графену з ідеальними краями типу "крісло" і "зігзаг" показано на рис. 1. Атоми карбону, ковалентно зв'язані в графені, утворюють гексагональну двовимірну ґратку з двома базисними атомами А і В в елементарній комірці. Основні вектори ґраток Браве $\mathbf{a} = a_0(1,0)$ і $\mathbf{b} = a_0(1/2, \sqrt{3}/2)$, найближча

відстань між атомами А і В дорівнює $a_0/\sqrt{3}$, де $a_0 \approx 2.46$ Å – стала ґратки графену. В моделі сильного зв'язку з врахуванням тільки найближчих сусідів гамільтоніан містить в зоні Бриллюена дві нееквівалентні точки Дірака $\mathbf{K} = 2\pi/a_0(1/3, 1/\sqrt{3})$ і $\mathbf{K}' = 2\pi/a_0(-1/3, 1/\sqrt{3})$. В [6,7] для ідеальних стрічок типу "крісло" і "зігзаг" (рис. 1) було враховано певні крайові умови та визначено енергетичний спектр і хвильові функції електронних станів.

В даній роботі згадана модель використовується для дослідження термоелектричного ефекту в графенових нанострічках (nanoribbons).

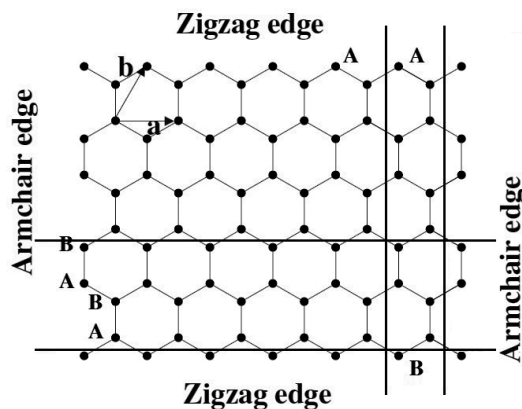


Рис. 1

I. Графенові стрічки типу "крісло"

Електронні стани графенових нанострічок сильно залежать від їх розміру та геометрії. Для нанострічок типу "крісло" [6,7] з шириною W (в напрямку осі x) і довжиною $L_y \gg W$ (в напрямку осі y) граничні умови пов'язані з обертанням в нуль хвильової функції для крайових атомів А і В обох підграток при $x = 0$ і $x = W + a_0 / 2$, що призводить до змішування двох діраківських долин. Наслідком цього є те, що нанострічки лише при деяких критичних значеннях ширин $W = (3M + 1)a_0$ (M – ціле число) можуть бути металічними, а в багатьох інших випадках при $W \neq (3M + 1)a_0$ стрічки стають напівпровідниками або ізоляторами, оскільки виникає істотна енергетична щілина $\Delta_n \neq 0$. При цьому рух носіїв струму вздовж довжини стрічки (осі y) пов'язаний з їхнім поперечним рухом (вздовж осі x) лише через відносні фази θ_n хвильових функцій [7]:

$$|k_y, n, s\rangle = \frac{e^{ik_y y}}{2\sqrt{W + a_0/2} \cdot \sqrt{L_y}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_n} \cdot e^{ik_n x} \\ s \cdot e^{ik_n x} \\ -e^{-i\theta_n} \cdot e^{-ik_n x} \\ s \cdot e^{-ik_n x} \end{pmatrix} \quad (1)$$

N_i – повне число домішок у зразку.
Точний вираз для матричного елемента

$$\frac{1}{2L_y} \cdot \left[1 + e^{i(\theta'_n - \theta_n)} \right] \cdot \frac{e^2 Z \pi}{\chi} \left[K_0(\mathbb{W}\gamma) L_{-1}(\mathbb{W}\gamma) + L_0(\mathbb{W}\gamma) K_1(\mathbb{W}\gamma) \right], \quad (7)$$

де $\mathbb{W} = W + a_0 / 2$, $\gamma = [\alpha^2 + q^2]^{1/2}$, $q = k_y - k'_y$, $K_\nu(\xi)$ – функція Макдональда, $L_\mu(\xi)$ – функція Струве [10,11]. При пружному розсіянні $k'_y = -k_y$,

$$\frac{1}{\tau_{n,s}(\varepsilon)} = 2 \frac{N_i}{L_y} \left(\frac{e^2 Z \pi}{\chi} \right)^2 \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta_n^2}}{\mathbf{h}^2 u |\varepsilon|} \left| K_0(\mathbb{W}\gamma_\varepsilon) L_{-1}(\mathbb{W}\gamma_\varepsilon) + L_0(\mathbb{W}\gamma_\varepsilon) K_1(\mathbb{W}\gamma_\varepsilon) \right|^2, \quad (8)$$

$$\gamma_\varepsilon = \left[\alpha^2 + \frac{4(\varepsilon^2 - \Delta_n^2)}{(\mathbf{h}u)^2} \right]^{1/2}, \quad \varepsilon = \sqrt{\Delta_n^2 + u^2 p_y^2}. \quad (9)$$

В умовах застосування борнівського наближення $\mathbb{W}\gamma_\varepsilon \gg 1$, використовуючи асимптотику

з енергіями

$$\varepsilon_{n,s}(k_y) = \text{sh} \mathbf{h} \sqrt{k_n^2 + k_y^2}, \quad (2)$$

$$k_n = \frac{2\pi n}{2W + a_0} + \frac{2\pi}{3a_0}, \quad (3)$$

тут $s = \pm 1$, u – швидкість Фермі для графену, $\theta_n = \text{arctg}(k_n / k_y)$, $W \neq (3M + 1)a_0$. Енергетична щілина

$$\Delta_n = \mathbf{h} u |k_n| \neq 0. \quad (4)$$

Для допованого зразка графенової стрічки скористаємось далі кінетичним рівнянням Больцмана, яке справедливе, якщо рівень хімічного потенціалу μ знаходиться подалей від точок Дірака [1,8,9]. Врахуємо пружне розсіяння носіїв струму на екранованому потенціалі зарядженої домішки з енергією взаємодії

$$U(\mathbf{r}) = \frac{e^2 Z}{\chi} \cdot \frac{e^{-\alpha r}}{r}, \quad (5)$$

де Z – заряд домішок, χ – діелектрична проникність стрічки графену, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\alpha > 0$ – константа екранування. Обернений час релаксації носіїв вздовж довжини стрічки у борнівському наближенні

$\langle k'_y, n, s | U | k_y, n, s \rangle$ виявляється рівним

$\theta'_n = -\theta_n$ і $q = 2k_y$. Згідно (2), (4), (6) і (7) отримаємо

спецфункцій в (8), одержимо

$$\tau_n(\varepsilon) \approx \frac{1}{2\mathcal{N}_1} \left(\frac{\chi}{e^2 Z \pi} \right)^2 \frac{\hbar^2 u |\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta_n^2}} \mathcal{N}_1 \gamma_\varepsilon^2, \quad (10)$$

де $\mathcal{N}_1 = N_1 / L_y \mathcal{N}$ – концентрація домішок в графеновій стрічці.

$$\frac{g_s e^2 E}{2\pi \hbar} \int_{BZ} v_y^2 \tau_n(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (f_{ov} - f_{oc}) dp_y + \frac{g_s e}{2\pi \hbar} \nabla_y T \cdot \int_{BZ} v_y^2 \tau_n(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial T} (f_{ov} - f_{oc}) dp_y, \quad (11)$$

$v_y = \partial \varepsilon / \partial p_y$, $g_s = 2$ – спінове виродження (яке залишається після зняття долинного виродження), $f_{oc} = (\exp[(\varepsilon - \mu) / T] + 1)^{-1}$ і $f_{ov} = (\exp[(-\varepsilon + \mu) / T] + 1)^{-1}$ – функції розподілу Фермі-Дірака для електронів у зоні провідності і валентній зоні, T – температура в енергетичних одиницях, $p_y = \hbar k_y$. Враховуючи в (11) вираз для часу релаксації (10), знаходимо електропровідність σ_{yy} і термоелектричний коефіцієнт β_{yy} :

$$\sigma_{yy} = \frac{g_s e^2 u}{4\pi \hbar v_0} \mathcal{N} \cdot \frac{1}{T} [J_a(\mu, T) + J_a(-\mu, T)], \quad (12)$$

$$\beta_{yy} = \frac{g_s e u}{4\pi \hbar v_0} \mathcal{N} \cdot \frac{1}{T^2} [I_a(\mu, T) - I_a(-\mu, T)], \quad (13)$$

де $v_0 = \frac{2\mathcal{N}_1}{u} \left(\frac{e^2 Z \pi}{\hbar \chi \alpha} \right)^2$, $\varepsilon_0 = \hbar u \alpha / 2$. (14)

$$J_a(\mu, T) = \int_{\Delta_n}^{\infty} \left[1 + \frac{(\varepsilon^2 - \Delta_n^2)}{\varepsilon_0^2} \right] \frac{d\varepsilon}{\text{ch}^2 \frac{(\varepsilon - \mu)}{2T}}, \quad (15)$$

$$I_a(\mu, T) = \int_{\Delta_n}^{\infty} \left[1 + \frac{(\varepsilon^2 - \Delta_n^2)}{\varepsilon_0^2} \right] \frac{(\varepsilon - \mu)}{\text{ch}^2 \frac{(\varepsilon - \mu)}{2T}} d\varepsilon. \quad (16)$$

Залежність типу (3) енергетичної щілини Δ_n від ширини ідеальної нанострічки W , з'ясована в [6,7], експериментально спостерігалася в роботі [5], причому при $W \gg a_0$ $\Delta_n \rightarrow \text{const}$. При цьому, згідно (12), при фіксованій концентрації домішок \mathcal{N}_1 і сталої екранування α , має місце лінійна залежність кондуктансу $G_{yy} = \sigma_{yy} / L$ від ефективної ширини стрічки \mathcal{N} , що також підтверджено в [5], з тією тільки різницею, що для реальної нанострічки під \mathcal{N} слід розуміти лише "активну" частину ширини $W - W_0$, де "неактивна" транспортна частина W_0 зумовлена впливом структурного безладу.

Термоерс S_{yy} знаходимо за формулою [8]

$$S_{yy} = - \frac{\beta_{yy}}{\sigma_{yy}}. \quad (17)$$

З (12) і (13) маємо (при $\Delta_n \neq 0$) в одиницях (k_B / e) :

Для одномірного електричного струму вздовж довжини стрічки, зумовленого лінійним відгуком за постійним електричним полем $E_y = E$ і градієнтом температури $\nabla_y T$ в наближенні часу релаксації маємо суму двох доданків

$$\frac{S_{yy}}{(k_B / e)} = - \frac{1}{T} \cdot \frac{[I_a(\mu, T) - I_a(-\mu, T)]}{[J_a(\mu, T) + J_a(-\mu, T)]}. \quad (18)$$

На рис. 2 наведено залежності (18) для різних значень хімічного потенціалу μ і щілини Δ_n при температурі $T = 5$ К. Максимуми $|S_{yy}|$ зростають із збільшенням Δ_n . Завдяки квазіоднорічному характеру руху $\max |S_{yy}|$ стає більшим, ніж у випадку двовимірного руху носіїв в необмеженому графені [2] (напр., вдвічі при $T = 5$ К і $\Delta = 50$ К). При $\Delta_n \neq 0$ знак S_{yy} є оберненим до знаку μ .

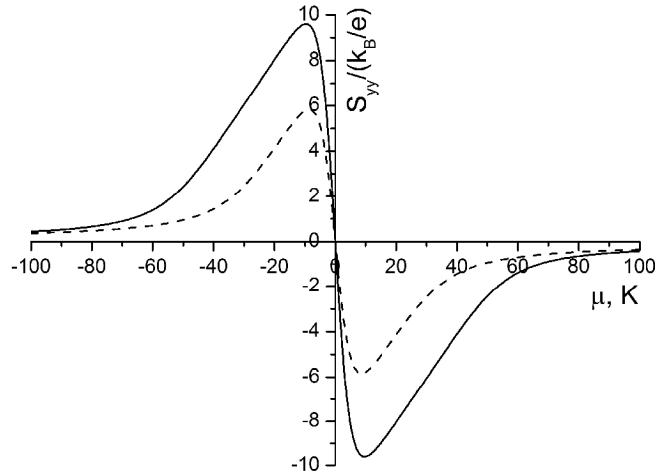


Рис. 2 – Залежність (18): $T = 5$ К, $\varepsilon_0 = 5$ К; суцільна лінія – $\Delta_n = 50$ К, пунктирна – $\Delta_n = 30$ К.

При $W = (3M + 1)a_0$ і $n = -2M + 1$ енергетична щілина $\Delta_n = 0$ [7], і стрічка стає металічною. В цьому випадку для $|\mu| \gg T$ електропровідність

$$\sigma_{yy} = \frac{g_s e^2 u}{\pi \hbar v_0} \mathcal{N} \left(1 + \frac{\mu^2}{\varepsilon_0^2} \right). \quad (19)$$

При визначенні термоелектричного коефіцієнта β_{yy} в (13) і (16) використовується розклад

$$\left(1 + \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon_0^2} \right)_\mu \approx \left(1 + \frac{\mu^2}{\varepsilon_0^2} \right) + (\varepsilon - \mu) \frac{d}{d\mu} \left(1 + \frac{\mu^2}{\varepsilon_0^2} \right).$$

Тоді

$$\beta_{yy} = \frac{2\pi g_s e u}{3\hbar v_0} \frac{\mu T}{\epsilon_0^2}, \quad (20)$$

і термоерс, згідно (17), виявляється рівною

$$S_{yy} = -\frac{2\pi^2 \mu T}{3e \epsilon_0^2} \frac{1}{(1 + \mu^2 / \epsilon_0^2)}. \quad (21)$$

При $\mu^2 / \epsilon_0^2 \gg 1$

$$S_{yy} = -\frac{2\pi^2 T}{3e \mu}, \quad (22)$$

де $|S_{yy}|$ є вдвічі більшим за термоерс у звичайних металах [2] і співпадає з результатом [1] для кулонівського розсіяння у необмеженому двовимірному графені.

II. Графенові стрічки типу "зігзаг"

Граничні умови для нанострічок типу "зігзаг" [7] пов'язані з обернуттям в нуль хвильової функції для атомів А однієї підгратки при $x = 0$ і для атомів В другої підгратки при $x = W$. При цьому не відбувається змішування в хвильовій функції двох діраківських долин \mathbf{K} і \mathbf{K}' , і кратність виродження електронних станів дорівнює $g_s g_v = 4$. Розглянемо для долини \mathbf{K} стани з енергією виду (2) і хвильовою функцією

$$|k_y, n, s\rangle = \frac{e^{ik_y y}}{C} \begin{pmatrix} -s \sin k_n x \\ i \sin(W - x) k_n \end{pmatrix}, \quad (23)$$

де стала нормування

$$C = \sqrt{L_y \left(W - \frac{k_y}{\mathcal{E}} \right)}, \quad \mathcal{E} = k_n^2 + k_y^2, \quad W > k_y / \mathcal{E}. \quad (24)$$

Дозволені значення k_n , що відповідають поперечному руху вздовж ширини W стрічки (в напрямку осі x), сильно залежать від значень k_y для поздовжнього руху:

$$k_n = k_y \operatorname{tg}(W k_n). \quad (25)$$

Дійсні розв'язки (25) для k_n існують лише в інтервалі $0 < k_y < 1/W$. Біля долини \mathbf{K}' станам з

k_y відповідають стани з $-k_y$. При пружному розсіянні на заряджених домішках перехід $k_y \rightarrow -k_y$ відповідає для спектра типу "зігзаг" міждолинним переходам $\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}'$, які ми тут не розглядаємо.

Обмежимося при певних умовах впливом електрон-фононної взаємодії. Дисперсія фононів у необмеженому графені розглядалась в [12,13]. В роботі авторів [14] розраховано дисперсійні криві обмежених акустичних фононів гібридних мод в континуальній моделі ефективної прямолінійної смужки графену при $L_y \gg W$. Гамільтоніан деформаційної електрон-фононної взаємодії має вигляд

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_f E_a A_f \frac{\omega_f^2}{c_d^2 k_{1f}} \cos(k_{1f} x) [\hat{b}_f e^{i f(y - c_f t)} + \text{h.c.}], \quad (26)$$

де E_a – константа деформаційного потенціалу; \hat{b}_f і \hat{b}_f^+ – оператори знищення і народження акустичного фонона, $\omega_f = c_f f$, $f \equiv f_y$, $k_{1f} = f \cdot \sqrt{(c_f / c_d)^2 - 1}$, $A_f = \sqrt{2\hbar / m \omega_f B_f}$ – амплітуда відповідної моди з швидкістю c_f ; c_d і c_s – швидкості поздовжнього і поперечного звуку в необмеженому графені; m – маса графенової стрічки; вираз B_f визначається формулами (П1)-(П3) роботи [15] при переході до двовимірного випадку наближення ширинних мод.

Для станів (2), (23)-(25) в межах долини \mathbf{K} повинно бути

$$0 < k_y \pm f_y < 1/W, \quad (27)$$

де верхній знак відповідає поглинанню, а нижній – випромінюванню фонона з хвильовим вектором f_y . Розглянемо область квазіпружного розсіяння [16,17], коли нехтуючи енергією фонона $\hbar \omega_f$ порівняно з енергією електрона $\epsilon_n(k_y)$, можна ввести час релаксації електронних станів:

$$\frac{1}{\tau_n(k_y)} = -\sum_{f_y} W_n^+(k_y, f_y) \frac{f_y}{k_y} + \sum_{f_y} W_n^-(k_y, f_y) \frac{f_y}{k_y}, \quad (28)$$

де перша сума в правій частині враховує поглинання, а друга – випромінювання фононів.

Імовірність квантових переходів за одиницю часу

$$W_n^\pm(k_y, f_y) \approx \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle k_y \pm f_y, N'_{f_y} | \hat{H}_{\text{int}} | k_y, N_{f_y} \rangle \right|^2 \cdot \delta[\epsilon_n(k_y \pm f_y) - \epsilon_n(k_y)], \quad (29)$$

$N'_{f_y} = N_{f_y} \pm 1$ – число фононів в кінцевому стані.

$$\varepsilon_n(k_y \pm f_y) = \hbar u \left\{ (k_y \pm f_y)^2 + [k_n^\pm(k_y, f_y)]^2 \right\}^{1/2}, \quad (30a)$$

$$\varepsilon_n(k_y) = \hbar u \left\{ k_y^2 + [k_n^\pm(k_y)]^2 \right\}^{1/2}. \quad (30b)$$

Враховуючи складний зв'язок (25) k_n з k_y , використовуємо апроксимацію

$$[k_n^\pm(k_y, f_y)]^2 \approx [k_n^\pm(k_y)]^2 \pm f_y \cdot \frac{d[k_n^\pm(k_y)]^2}{dk_y} \beta(k_y) = [k_n(k_y)]^2 \pm f_y \cdot \frac{d[k_n(k_y)]^2}{dk_y} \beta(k_y), \quad (31)$$

$k_n^\pm(k_y, 0) \equiv k_n(k_n)$, $\beta(k_y)$ – безрозмірна величина.

З (25) знаходимо

$$\frac{dk_n^2}{dk_y} = -2 \frac{k_n^2}{\varepsilon^2} \left(W - \frac{k_y}{\mathcal{G}} \right)^{-1}. \quad (32)$$

Матричний елемент в (29) для достатньо малих ширин стрічки W визначаємо при $W|f_y| \ll 1$, покладаючи в (26) $k_{lf} x \ll 1$. Внаслідок (27) і (31) в межах квазіпружного розсіяння маємо ще додаткову умову для справедливості отриманих нижче результатів для часу релаксації:

$$k_y < \left| \frac{dk_n^2}{dk_y} \beta(k_y) \right| < 2k_y, \quad \beta(k_y) = \eta W k_y, \quad (33)$$

де $(1/2) < \eta < (2/3)$. Тоді

$$\frac{1}{\tau_n(k_y)} = \frac{2E_a^2 A_t^2}{\eta^2 \hbar^2 u W} \left(\frac{\omega_f^2}{c_d^2 k_{lf}} \right)^2 (2\bar{N}_f + 1) \frac{\mathcal{G}}{k_y^3}, \quad (34)$$

$$\text{тут } f \equiv 2k_y - \left| \frac{dk_n^2}{dk_y} \eta W k_y \right| > 0.$$

При $T \gg \hbar \omega_f$ $\bar{N}_f \approx T / \hbar \omega_f$ і

$$\tau_n(\varepsilon) = \frac{m \eta^2 W}{8u E_a^2 T} \varepsilon^2 \zeta^3 Q_f, \quad (35)$$

де

$$Q_f = c_f^2 B_f \frac{[(c_f/c_d)^2 - 1]}{(c_f/c_d)^4}, \quad \zeta = \cos k_n W. \quad (36)$$

$$B_f = 4[\delta_d^{-1} + 2(1 - \delta_s + \delta_d)/(1 - \delta_d)^2],$$

$$\delta_{s,d} = (c_f/c_{s,d})^2 - 1, \quad c_d = 2.12 \cdot 10^6 \text{ см/с} \quad \text{і}$$

$c_s = 1.28 \cdot 10^6 \text{ см/с}$ – швидкості поздовжнього і поперечного звуку в необмеженому графені [12];

$(c_s/c_d)^2 = (1 - 2\sigma) / 2(1 - \sigma) \approx 0.36$, $\sigma = 0.22$ –

коефіцієнт Пуассона. Використовуючи формули (11) з

врахуванням додаткового долинного виродження і специфіки закону дисперсії (24), (25)

для носіїв у стрічці типу "зігзаг", отримаємо вирази

для електропровідності σ_{yy} і термоелектричного

коефіцієнта β_{yy} :

$$\sigma_{yy} = \frac{g_s g_v e^2 \eta^2 m}{16\pi \hbar E_a^2 T^2} W [J_z(\mu, T) + J_z(-\mu, T)], \quad (37)$$

$$\beta_{yy} = \frac{g_s g_v e \eta m}{16\pi \hbar E_a^2 T^3} W [I_z(\mu, T) - I_z(-\mu, T)], \quad (38)$$

де

$$J_z(\mu, T) = \int_{\Delta}^{\infty} \frac{\varepsilon^2 \zeta^3 (1 - \mathcal{G} W \zeta)}{(\zeta - \mathcal{G} W)} Q_f \frac{d\varepsilon}{ch^2 \frac{(\varepsilon - \mu)}{2T}}, \quad (39)$$

$I_z(\mu, T)$ відрізняється від $J_z(\mu, T)$ додатковим множником $(\varepsilon - \mu)$ у підінтегральному виразі (39);

Δ – мінімальне значення енергії $\varepsilon = \hbar u k_n / \sin k_n W$,

$\Delta = \hbar u / W \neq 0$ при $k_n \rightarrow 0$. З (37)-(39) випливає

формула (18), в якій треба провести заміну

$J_a(\mu, T) \rightarrow J_z(\mu, T)$ і $I_a(\mu, T) \rightarrow I_z(\mu, T)$. Для

найнижчої шириної моди акустичних фононів [14] можна

наближено нехтувати дисперсією

швидкостей, тобто в (36) вважати $Q_f \approx Q = \text{const}$, а

також внаслідок найбільшого внеску в підінтегральний

множник в (39) області $k_n \rightarrow 0$, покласти

$\zeta = \cos k_n W \approx 1$. Тоді для випадку $|\mu| \gg T$, Δ

звичайним шляхом, як і в розділі I, можна знайти

електропровідність σ_{yy} , термоелектричний

коефіцієнт β_{yy} і термоерс S_{yy} :

$$\sigma_{yy} = \frac{g_s g_v e^2}{4\pi\hbar} W \frac{mQ\eta^2}{E_a^2 T} \mu^2, \quad (40)$$

$$\beta_{yy} = \frac{\pi g_s g_v e m}{6\hbar E_a^2} W Q \eta^2 \mu, \quad (41)$$

$$S_{yy} = -\frac{2\pi^2}{3e} \frac{T}{\mu}. \quad (42)$$

Зауважимо, що (42) співпадає з формулою (22), отриманою для окремого випадку стрічки типу "крісло", а також з кулонівським випадком необмеженого графену [1].

На рис. 3 наведено залежності термоерс типу (18) для зігзагоподібної стрічки для різних значень хімічного потенціалу μ і щільності Δ при температурі $T = 5$ К.

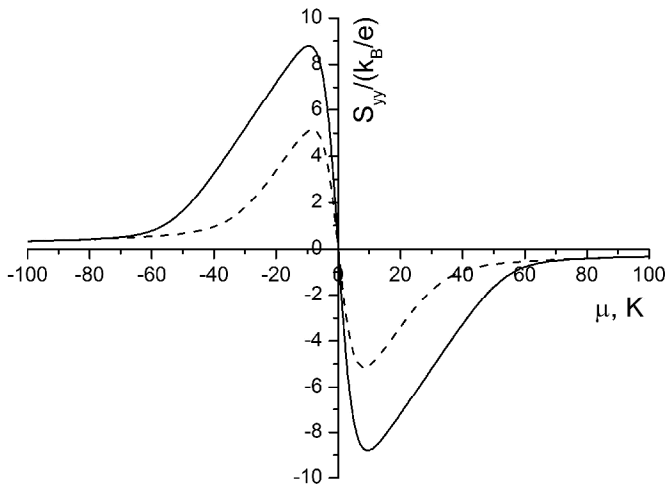


Рис. 3 Залежність типу (18) для "зігзагу": $T = 5$ К, суцільна лінія – $\Delta_n = 50$ К, пунктирна – $\Delta_n = 30$ К

За абсолютною величиною термоерс для випадку "зігзагу" виявляється дещо меншою ніж для випадку "крісла". Це пов'язано із складним характером енергетичного спектра носіїв струму та іншим механізмом розсіяння, що створюють більш жорсткі умови для реалізації термоелектричного ефекту.

Висновки

Методом кінетичного рівняння Больцмана визначені електропровідність, термоелектричний коефіцієнт і термоерс для випадків обмеженого графену з крайовими умовами типу "крісло" і "зігзаг". Показана залежність термоелектричного ефекту від механізмів розсіяння носіїв струму на екранованому потенціалі заряджених домішок і деформаційному потенціалі електрон-фононої взаємодії.

Рувінський Б.М. – к.ф.-м.н., доцент кафедри загальної та прикладної фізики;
Рувінський М.А. – д.ф.-м.н., професор кафедри фізики і хімії твердого тіла.

- [1] N.M. Peres, J.M.B. Lopes dos Santos and T. Stauber, Phys.Rev. B 76(7), 073412-1-4 (2007).
- [2] S.G. Sharapov, A.A. Varlamov, Phys.Rev.B86, 035430 (2012).
- [3] A.A. Varlamov, A.V. Kavokin, I.A.Luk'janchuk, S.G.Sharapov, UFN, 182(1), 1229-1-5 (2012).
- [4] P.B. Sorokin, L.A. Chernozatonskij, UFN 183(2), 113 (2013).
- [5] Melinda Y. Han, Barbaros Ozyilmaz, Yuanbo Zhang, and Philip Kim, Phys.Rev.Lett., 98, 206805-1-4 (2007).
- [6] L. Brey and H.A. Fertig, Rev., B73, 235411-1-5 (2006).
- [7] L. Brey and H.A. Fertig, Phys.Rev. B75, 125434-1-6 (2007).
- [8] A.A.Abrikosov. Osnovy teorii metallov (Nauka, M. 1987).
- [9] Maxim Trushin and John Schliemann, Phys.Rev.Lett., 99, 216602-1-4 (2007).
- [10] G. Bejtmen, A. Jerdeji. Vysgie transcendentnye funkicii (Nauka, M. 1966).
- [11] I.S. Gradshtejn, I.M. Ryzhik. Tablicy integralov, summ, rjadov i proizvedenij (GIFML. M. 1962).
- [12] L. Wirtz and A. Rubio, arXiv:cond.-mat. 0404637, 1, 1 (2004).
- [13] L.A. Falkovsky, ZhJeTF 132, 2(8), 446 (2007).
- [14] M.A. Ruvins'kij, B.M. Ruvins'kij, Fizika i himija tverdogo tila, 9(2), 309 (2008).
- [15] M.A. Ruvins'kij, B.M. Ruvinskij. FTT, 49(11), 2076 (2007).
- [16] V.F. Gantmaher, I.B.Levinson. Rassejanie nositelej toka v metallah i poluprovodnikah (Nauka, M. 1984).
- [17] A.I. Ansel'm. Vvedenie v teoriju poluprovodnikov. Nauka, M., 616s. (1978).

B.M. Ruvinskii¹, M.A. Ruvinskii²

Thermoelectric Effect in Nanoribbons of Doped Graphene

¹*Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas,
15, Carpatska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine,*
²*Vasyl Stefanyk Precarpathian National University,
57 Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine
bruvinsky@gmail.com*

The theoretical study of the thermoelectric effect in nanoribbons of doped graphene had been fulfilled for the cases of armchair and zigzag with the relevant electronic states (with a gap and no gap in the energy spectrum). The electrical conduction, thermoelectric coefficient and thermopower were defined by the Boltzman kinetic equation. For the case of armchair the elastic scattering of charge carriers on the screened potential of a charged impurity was considered. For the case of zigzag the effect of electron-phonon interaction was determined. It is shown that the existence of a gap in the energy spectrum and the one-dimensional motion in the nanoribbons lead to increasing of the thermoelectric power in comparison with the case of an unlimited graphene.