

ТЕМПЕРАТУРСКА ЗАВИСНОСТ ТЕРМОЕЛЕКТРОМOTORНЕ СИЛЕ КОД ПОЛИКРИСТАЛНИХ ГРАФЕНА

С. К. Јахимовски¹, С.М.Вученовић², Ј.П.Шетрајчић³, Ј.С.Ламовец¹, Г. Јованов¹

¹Криминалистичко-полицијски универзитет, Београд
²Природно математички факултет, Универзитет у Бањој Луци
³Академија наука и умјетности Републике Српске, Бања Лука

УВОД

Поликристални графен је структура која се чешће јавља од монокристалног графена. Транспортне карактеристике ових 2D структура су од значаја због својих вредности које су знатно другачије од вредности истих у балковским структурама. У раду се анализира температурна зависност једног од транспортних коефицијената (термоелектромоторне силе) из разлога што се ова зависност може лако експериментално мерити. Температурна зависност термоелектромоторне силе (ТЕМС) код поликристалних графена се одређује у овом раду нумерички у интервалу температура од 0.1 – 400 К. Израз за термоелектромоторну силу се налази из Болцманове транспортне једначине у апроксимацији времена релаксације. Времена релаксације и њихова температурна зависност се усвајају из доступних литеретералних извора. Резултати температурне зависности коефицијента термоелектромоторне силе добијени теоријски из ове анализе упоређују се са експериментално одређеним вредностима.

ТЕРМОЕЛЕКТРОМOTORНА СИЛА

ТЕМС графена на собној температури достиже око 100 $\mu\text{W/K}$, док код метала ТЕМС метала је око 0,01 $\mu\text{W/K}$. Тако велике вредности ТЕМС примећене су у графену, када је хемијски потенцијал близу нива зона. Велики слојеви графена по правилу поликристалне структуре и састоје се од многих једнокристалних зрна. Величина зрна зависи од услова раста и креће се у распону од 2,5 nm до 12,5 nm. Зебеков коефицијент ТЕМС се анализира на основу решења Болцманове транспортне једначине у апроксимацији времена релаксације:

$$Q_x = \frac{1}{eT} \frac{\int_0^{\infty} (\varepsilon - \mu) \tau(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) v^2 D(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^{\infty} \tau(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) v^2 D(\varepsilon) d\varepsilon}$$

где је $\tau(\varepsilon)$ - времена релаксације, $D(\varepsilon)$ -густина стања носилаца наелектрисања, f_0 - Ферми-Диракова функција расподеле, v - брзина кретања наелектрисања.

ВРЕМЕНА РЕЛАКСАЦИЈЕ

Примесе са краткодметним потенцијалом $U_s(q) = U_0 \delta(r)$; $U_0 = \text{const}$

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon_k)} = \frac{n_i U_0^2 \hbar v_F k}{4 \hbar^3 v_F^2} = \frac{n_i U_0^2 \varepsilon_k}{4 \hbar^3 v_F^2}$$

Примесе са дугодметним потенцијалом

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon_k)} = \frac{n_i}{4 \hbar} \left(\frac{e^2}{2 \varepsilon_0 \varepsilon_r} \right)^2 \frac{1}{\varepsilon_k}$$

Примесе са екранираним потенцијалом

$$\frac{1}{\tau_{ek}(\varepsilon_k)} = \frac{n_i}{2 \pi \hbar} \left(\frac{2 \pi e^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \right)^2 \frac{2 J_0 \varepsilon_k}{\mu \mu} \left(1 - a_1 \frac{\varepsilon_k - \mu}{\mu} + a_2 \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{\mu} \right)^2 \right)$$

$$a_1 = 2 \frac{J_1}{J_0}; a_2 = \frac{3 J_2}{J_0};$$

$$J_2 = \int_0^1 \frac{x^4 \sqrt{1-x^2}}{(x+2r_s)^2} dx; J_1 = \int_0^1 \frac{x^3 \sqrt{1-x^2}}{(x+2r_s)^2} dx; J_0 = \int_0^1 \frac{x^2 \sqrt{1-x^2}}{(x+2r_s)^2} dx;$$

Расејање на фононима

$$\frac{1}{\tau(T)} = \frac{D^2}{2 \pi r \varepsilon_F k_F v_p} \left(\frac{k_B T}{\hbar v_p} \right)^4 4! \zeta(4)$$

Расејање на ваканцијама

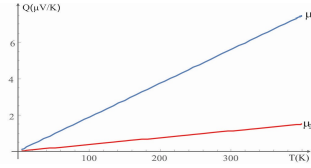
$$\frac{1}{\tau(\varepsilon_k)} = \frac{n_{vac} \pi^2 \hbar v_F^2}{\varepsilon_k \ln^2 \frac{\varepsilon_k R}{\hbar v_F}}$$

$$\text{Расејање на границама зрна} \quad \frac{1}{\tau} = \frac{4 \hbar}{m} n_{dis}$$

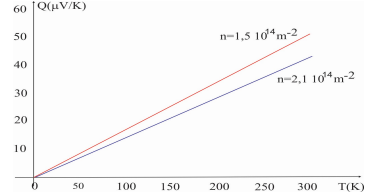
Табела 1. Вредности одговарајућих параметара код графена

ε_F [J]	v_F [m/s]	k_F [1/m]	v_{ph} [km/s]	n_{dis} [1/m ²]	n_i [1/m ³]
$17.8 \cdot 10^{-21}$	10^6	$1.94 \cdot 10^8$	21	10^{18}	$1.2 \cdot 10^{18}$
D [J]	ρ_m [kg/m ²]	r_s	ε_r	n [1/m ²]	n_{vac} [1/

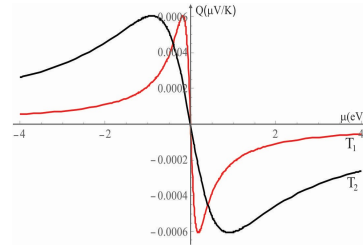
РЕЗУЛТАТИ НУМЕРИЧКИХ ПРОРАЧУНА ТЕМС



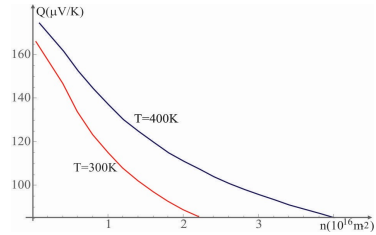
Слика 1. Зависност ТЕМС од температуре за различите вредности хемијског потенцијала $\mu_1 < \mu_2$.



Слика 2. ТЕМС у функцији температуре за различите густине носилаца наелектрисања



Слика 3 Зависност ТЕМС од хемијског потенцијала μ за различите температуре $T_1 < T_2$.



Слика 4 Зависност термоелектромоторне силе од концентрације носилаца наелектрисања за различите температуре

ЗАКЉУЧАК

Графен није најбољи термоелектрични материјал, али би могао бити врло добар избор за апликације електронског хлађења.

Из израза за ТЕМС види се да она директно зависи од густине стања носилаца наелектрисања. Густина стања се може повећати димензионом ефектом, тј. смањењем димензија узорка. Густине стања су веће у филмовима, квантним жицама и квантним тачкама, него у балк структурама, па је стога у овим структурама већа ТЕМС. У том смислу је и већа ТЕМС код графена (филмови) него код метала (балк структуре). Јасно је да су поликристални графени структуре које се чешће реализују од монокристалних. Код поликристалних графена величина ТЕМС битно зависи од величине зрна. Што су зрна ситнија повећава се број центара расејања и узорак слабије проводи топлоту, а тиме је већа ТЕМС. Поликристални графени су бољи кандидати за реализацију већих ТЕМС. Осим тога, уочљиво је да ТЕМС веома зависи од хемијског потенцијала. Уколико би се хемијски потенцијал носилаца наелектрисања смањено дошло би до наглог повећања ТЕМС, тј. уколико би се на одговарајући начин хемијски потенцијал приближио границама зона (валентне и проводне), веома би се повећала ТЕМС.

Ситуација је комплекснија када се узорак графена налази на супстрату. Експериментални подаци мерења термоелектромоторне силе се у основи могу објаснити помоћу Мотовог формуле за термоелектромоторну силу. Међутим, експерименти показују да када је графен на супстрату онда се у спектру квазичестица у графену појављује геп близу Диракове тачке, што је по свему последица утицаја подлоге на којој се графен налази. Појава гепа доводи до појаве новог канала расејања квазичестица, при чему време релаксације јако зависи од енергије квазичестица.