



Original Article

Electron mobility limited by surface polar phonons in graphene

Ghassem Ansaripour*, Ahmad Al-Jadiri

Department of Physics, Faculty of Science, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran

Received: Nov 16, 2024

Revised: Jan 08, 2025

Accepted: Jan 22, 2025

Abstract: The excellent transport and optical properties of graphene have attracted much attention for possible application of this material in nanoscale electronics and optoelectronics. Electrostatics modulation of the graphene channel through the gates results in promising two-dimensional field effect devices for analogue and radiofrequency applications. These devices ideally act in the limits of saturation and their current is saturated by increasing the source-drain field. While elastic scattering determines low field mobility, the saturation velocity is related to inelastic scattering by surface polar phonon of polar substrates or intrinsic graphene optical phonons. In this study, using the Boltzmann equation and with viewpoint acoustic phonon and surface optical phonon, the effects of Coulomb impurity and surface polar phonon scattering, have been investigated. Also, the mobility of electrons calculated and plotted in terms of temperature and their density respectively, for the substrates HfO_2 , Al_2O_3 and ZrO_2 . The obtained results are in agreement with recent experimental and theoretical data.

Keywords: Surface polar phonon, Graphene; Inelastic scattering

*Corresponding Author: ghansaripour@yahoo.com

How to Cite This Article:

Ansaripour G, Al-Jadiri A. Electron mobility limited by surface polar phonons in graphene. Nanomeghyas. 2025; 12(1): 1-10.
DOI: [10.22034/ns.2025.722233](https://doi.org/10.22034/ns.2025.722233)



©2025 The Author(s). Published by the Iranian Nanotechnology Society under the terms of the CC BY 4.0, Creative Commons Attribution License, which permits use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited. To view a copy of this license, visit <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0>



تحرك الکترونی محدود توسط فونون‌های قطبی سطحی در گرافن

قاسم انصاری پور*^{1D}، احمد الجادری

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، ایران

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۱/۳

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۳/۱۰/۱۹

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۸/۲۶

چکیده: خواص تراپردی و اپتیکی عالی گرافن توجه زیادی را به کاربردهای این ماده در الکترونیک و اپتوالکترونیک نانومقیاس به خود جلب کرده است. مدوله کردن الکتروستاتیکی کانال گرافن از طریق دروازه، افزاره‌های اثرمیدان دو بعدی، نتیجه امید بخشی برای کاربردهای آنالوگ و رادیوفرکانس داشته است. این دستگاه‌ها به طور آرمانی در محدوده‌ی اشباع عمل کرده و در آن‌ها جریان با افزایش میدان چشمه-دررو به اشباع می‌رسد. در حالی که پراکندگی کشسان تحرک میدان پایین را تعیین می‌کند، سرعت اشباع به پراکندگی غیرکشسان توسط فونون‌های قطبی سطحی بستریهای قطبی یا فونون‌های اپتیکی گرافن ذاتی مربوط می‌شود. در این پژوهش با استفاده از معادله بولتزمن و با لحاظ فونون آکوستیکی و فونون اپتیکی سطحی، اثرات ناخالصی کولنی و پراکندگی فونون قطبی سطحی مورد بررسی قرار گرفته است، هم چنین تحرک الکترون‌ها به ترتیب بر حسب دما و چگالی آن‌ها، برای بستریهای ZrO_2 ، Al_2O_3 ، HfO_2 ، محاسبه و رسم شده است. نتایج به دست آمده در توافق با داده‌های تجربی و نظری اخیر است.

واژگان کلیدی: فونون قطبی سطحی، گرافن، پراکندگی غیر کشسان

* ghansaripour@yahoo.com

نحوه استناد به این مقاله:

انصاری پور، قاسم، و الجادری، احمد. (۱۴۰۳). تحرک الکترونی محدود توسط فونون‌های قطبی سطحی در گرافن. *نانومقیاس*، ۱۲(۱)،

DOI: 10.22034/ns.2025.722233 .۱۰-۱

۱- مقدمه

کرده است. همه این ویژگی‌ها گرافن را به ماده‌ای امیدوارکننده برای بسیاری از کاربردهای فناورانه تبدیل می‌کند. علاوه بر این خواص بسیار مهم این ماده برای الکترونیک و اپتوالکترونیک، باعث پژوهش‌های برانگیزی بر روی سایر مواد دو بعدی (2D) شده

گرافن به صورت تک لایه به لحاظ خواص بی‌نظیر فراواش از جمله بالا بودن فوق‌العاده تحرک الکترون‌های رسانش و رسانایی بالا، شفافیت زیاد، انعطاف پذیری و استحکام توجه بسیاری را به خود جلب

1 Two dimensional



فونون قطبی سطحی^۱ (SPP) یک ویژگی سطحی است که به خوبی در فصل مشترک نیمه هادی‌های قطبی تعریف شده است [۱۵، ۱۶]. امکان پذیر است که حامل‌ها در لایه گرافن از طریق جفت شدگی قطبی بلندبرد فروهلیخ به فونون SPP شبکه بستر زیرین جفت شوند. اخیراً نقش احتمالی فونون نوری سطحی در تحرک دمای بالا گرافن بررسی شده است [۱۴، ۱۶]. با توجه به ماهیت قطبی دی الکتریک‌های دروازه استفاده شده در ترانزیستورهای اثر میدان گرافن، حامل‌ها در کانال رسانا به فونون‌های سطحی بلندبرد ایجاد شده در فصل مشترک دی الکتریک به طور الکتریکی جفت می‌شوند. به طور کلی، فونون نوری سطحی سهم اندکی در مقاومت حامل در دمای پایین به دلیل انرژی بالای آن ($\omega_{SPP} > 50 \text{ meV}$) دارد. با این حال، مشارکت سایر فرآیندهای پراکندگی در مقاومت گرافن در دمای اتاق کوچک است و بنابراین فونون SPP ممکن است به مکانیسم پراکندگی غالب در گرافن بر روی یک بستر دی الکتریک قطبی در دمای بالا تبدیل شود. از اینرو بسیار محتمل است، که در زمینه کاربردهای فناوری گرافن، اثرات فونون SPP بسیار مهم بوده و باید لحاظ شوند.

در این مقاله، تأثیر پراکندگی حامل به دلیل SPPها را بر خواص ترابرد الکترونی گرافن تک لایه به طور نظری بررسی شده است. به ویژه، تحرک الکترون در میدان کم و سرعت اشباع در حضور بسترهای قطبی دی اکسید هافنیم (HfO_2)^۲، دی اکسید آلومینیوم - آلومینا (Al_2O_3)^۳ و دی اکسید زیرکونیوم - زیرکونیا (ZrO_2)^۴ محاسبه و رسم شده است. هدف از این کار پژوهشی بررسی برهمکنش الکترون - فونون SPP القایی پراکندگی قطبی حامل‌های آزاد است. انتظار می‌رود بسیاری از خواص الکترونی گرافن روی بسترهای قطبی با پراکندگی الکترون - فونون SPP از طریق برهمکنش فروهلیخ اصلاح شود. در سطح میکروسکوپی این برهم کنش سرعت فرمی گرافن

است [۱-۳]. گرافن هم چنین در دستگاه‌های مختلفی مانند الکترودهای شفاف، سلول‌های خورشیدی، آشکارسازهای نوری، نانوژنراتورها و دیودهای ساطع کننده نور دارای کاربرد است [۴-۸]. این ماده خواص اپتوالکترونیکی فوق‌العاده‌ای که برگرفته از ساختار نواری عجیب حامل‌های بار بدون جرم و خواص نسبیتی الکترون‌های هدایت آن در یک لایه گرافن است را به نمایش می‌گذارد [۹]. گرافن به لحاظ خواص الکتریکی، مکانیکی، نوری و حرارتی افسانه‌ای اش یک نامزد عالی برای نسل بعدی افزاره‌های الکترونیکی است [۱۰-۱۲].

جفت شدن درجات آزادی الکترونی به درجات آزادی شبکه برای درک خواص مواد بسیار مهم است. این جفت شدگی معمولاً با برهمکنش بین برانگیختگی‌های الکترونی و فونون‌ها که مسئول بسیاری از اثرات جالب در یک کریستال، مانند تشکیل پلارون‌ها است، توصیف می‌شود. خواص ارتعاشی گرافن نشان می‌دهد که پاشندگی فونون توسط اثرات برهمکنش الکترون-فونون شکل می‌گیرد، که منجر به حضور دو ناهنجاری کوهن در بالاترین شاخه نوری می‌شود. بنابراین خواص فونون‌ها در گرافن، توجه شدید محققان را برای توضیح اثر برهمکنش الکترون - فونون در خواص نوری گرافن به خود جلب کرده است [۲].

از آنجایی که گرافن یک ماده غیر قطبی است، فقدان پراکندگی فونون نوری قطبی بلندبرد قوی منجر به تحرک ذاتی بسیار بالای گرافن در دمای اتاق می‌شود [۱۳-۱۹]. در واقع تحرک دمای اتاق گرافن در نمونه‌های گرافن معلق بی نظم به طور معمول بسیار زیاد است [۲۰، ۲۱]. با این حال، بیشتر نمونه‌های گرافن موجود فعلی برای مطالعات بنیادی و مطمئناً برای کاربردهای فناوری از یک بستر قطبی مانند SiO_2 ، SiC یا HfO_2 استفاده می‌کنند. چنین بسترهای قطبی امکان وجود فونون‌های نوری قطبی جایگزیده در نزدیکی فصل مشترک گرافن - بستر می‌تواند یک منبع پراکندگی مهم برای حامل‌های گرافن از طریق جفت شدگی بلندبرد فروهلیخ را فراهم کند. معادله ویژه مقدار برای حالت فونون سطحی در فصل مشترک مسطح بین دو دی الکتریک قطبی استخراج شده است [۲۲-۲۴].

1. Surface polar phonon
2. Hafnium dioxide
3. Aluminum oxide
4. Zirconium dioxide

مستقل از اسپین در نظر گرفته می‌شود، و درجه آزادی اسپین حذف می‌شود. اشاره شد که این معادله برای پراکندگی کشسان دقیق است، اما در حضور فرآیندهای پراکندگی غیرکشسان ناموفق عمل می‌کند. برای حل این مساله، روش رود^۱ یک جایگزین آسان برای تقریب زمان واهلش (RTA)^۲ بوده و برای محاسبه توزیع واقعی میدان الکتریکی پایین که شامل مکانیسم‌های پراکندگی کشسان و غیرکشسان است به کار می‌رود. طبق این روش پاسخ خطی تابع توزیع به صورت زیر است:

$$f(\vec{k}) = f_0(F) + g(\vec{k}) \cos(\theta) \quad (2)$$

که در آن $g(\vec{k})$ چگالی ترازها و θ زاویه بین میدان الکتریکی F و تکانه \vec{k} است. با لحاظ معادله ترابری بولتزمن و با استفاده از روش تکرار $g(\vec{k})$ به صورت زیر داده می‌شود [۲۷]:

$$g_{r+1}(k) = \frac{S_{in}[g_r(k)] - ev_F \frac{df_0}{E}}{S_{out} + \frac{1}{\tau_m}} \quad (3)$$

$$S_{in} = \sum_k g(k, \vec{k}) \{ p^{in}(k', k) [(1 - f_0) + p^{in}(k, k') f_0] \} \cos(\theta_0)$$

$$S_{out} = \sum_k \{ p^{in}(k, k') [(1 - f_0) + p^{in}(k', k) f_0] \}$$

توابع پراکندگی اصلی داخل و خارج هستند و f_0 تابع توزیع تعادلی فرمی-دیراک است. در اینجا $p^{in}(\vec{k}, \vec{k}')$ نسبت پراکندگی غیرکشسان و θ_0 زاویه بین بردار \vec{k} و \vec{k}' است. در ابتدا فرض می‌شود که $g_0(\vec{k}) = 0$ و بنابراین $S_{in} = 0$ می‌باشد. اگر S_{out} مشخص شده باشد، آنگاه می‌توان $g_1(\vec{k})$ برای مرحله تکراری بعدی محاسبه کرد و S_{in} را مشخص می‌شود. برای مرحله تکراری دوم یعنی $g_2(\vec{k})$ از هر دو مقدار S_{in} و مقدار S_{out} محاسبه می‌شود [۲۵]. نهایتاً با استفاده از رابطه زیر تحرک در گرافن محاسبه می‌شود:

را بازبهنجار می‌کند. درک کمی کاملی از برهمکنش الکترون-فونون SPP باعث ایجاد اثرات بس ذره ای در گرافن با تحرک بالا شده و با توجه به دو عامل عملکرد دستگاه و فیزیک پایه گرافن روی بسترها بسیار مهم است. این اثر سطح پلارونی عامل مهمی در تعیین تحرک دمای بالا و خواص الکترون داغ گرافن روی بسترهاست [۲۴].

۲- ملاحظات نظری

در این کار پژوهشی از سه بستر مختلف HfO_2 , ZrO_2 و Al_2O_3 برای انجام محاسبات استفاده شد. چنین بستری قطبی در نزدیکی فصل مشترک گرافن-بستر که به صورت یک منبع پراکندگی مهم برای حامل‌های بار امکان وجود فونون‌های نوری قطبی را در گرافن فراهم می‌کنند. بدین ترتیب مطالعه اثرات جفت شدگی الکترون-فونون سطحی نوری با استفاده از این بستری قطبی و بستری مشابه برای درک کامل خواص الکترونیکی گرافن مهم است. می‌دانیم در دمای اتاق و بالاتر حامل‌های بار اساساً توسط فونون‌ها به صورت غیرکشسان پراکنده و در دماهای پایین‌تر از دمای اتاق کشسان می‌شوند. معمولاً معادله بولتزمن رایج‌ترین انتخاب برای محاسبه ترابری حامل‌ها است. این معادله نشان دهنده تابع توزیع رامان است که نیروی محرک در سیستم را متعادل می‌کند. در غیاب میدان‌های خارجی (میدان‌های الکتریکی و میدان‌های مغناطیسی) انرژی و تکانه حامل‌های بار از طریق برخوردهای تصادفی حادث شده سیستم را در حالت تعادلی نگه می‌دارند. شکل کلی معادله بولتزمن به صورت زیر داده می‌شود [۲۶، ۲۵]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} * \nabla_{\vec{k}} f + \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} * \nabla_{\vec{r}} f = s[f] \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \vec{v}_{\vec{k}} \quad \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \frac{2\pi e}{h} \left(\vec{F} + \frac{\vec{v}_{\vec{k}} \times \vec{B}}{c} \right) \quad (\vec{r}, \vec{k}, t)$$

که در آن $\vec{v}_{\vec{k}}$ سرعت فرمی، \vec{B} میدان مغناطیسی عمودی، h ثابت پلانک و c سرعت نور. $s[f]$ حد انگرال برخورد است. در این معادله فرآیند پراکندگی

1. Rodé's method
2. Relaxation time approximation

عیوب شبکه با پراکندگی فونون‌های گرافنی مشخص می‌شود. در گرافن دو شاخه فونون اکوستیکی عرضی TA^۱ و طولی LA^۲ با یک جفت شدگی الکترون-فونون محسوس وجود دارد [۲۹-۲۷]. تحرک میدان پایین μ با استفاده از نظریه بولتزمن به صورت زیر است:

$$\sigma = en\mu = \frac{e^2 v_F^2 D_n \tau}{2} \quad (۹)$$

که در آن σ رسانندگی، $D_n = \frac{2E_F}{\pi \hbar^2 v_F^2}$ چگالی حالت‌ها، $E_F = \hbar v_F \sqrt{\pi n}$ انرژی فرمی و τ زمان واهلش است. مقدار تحرک میدان پایین μ در دماهای بالا که در آن حامل‌های بار توسط فونون‌های صوتی پراکنده می‌شوند تغییر می‌کند. مقدار تحرک متناظر با این پراکندگی با نماد μ_{ac} داده می‌شود و در حد دماهای بالا از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۲۷، ۳۰]:

$$\mu_{ac} = \frac{e \rho_m \hbar v_F^2 v_{ph}^2}{\pi D_{ac}^2} \frac{1}{n K_B T} \quad (۱۰)$$

که در آن $D_{ac} = 3.7 eV$ مقدار پتانسیل تغییر شکل، $\rho_m = 7.66 \times 10^{-7} \text{ kgm}^{-2}$ چگالی گرافن [۲۷] و K_B ثابت بولتزمن است. در اینجا مقدار پتانسیل تغییر شکل از ۱۰ الکترون ولت تا ۳۰ الکترون ولت تغییر می‌کند، علاوه بر این عدم قطعیت در سرعت صوت می‌تواند در پتانسیل تغییر شکل نقش داشته باشد. جفت شدگی شاخه‌های فونون اپتیکی LO^۳ و TO^۴ با الکترون‌ها به ترتیب به صورت [۲۹]

$$|M_{k,k+q}^{s,s'}|^2 = \frac{D_{\Gamma}^2 \hbar}{2NM_{\text{cof}} (1 + ss' \cos(\theta_k - \theta_{k+q}))} \quad (۱۱)$$

برای الکترون-فونون LO و

$$|M_{k,k+q}^{s,s'}|^2 = \frac{D_{\Gamma}^2 \hbar}{NM_{\text{cof}} (1 + ss' \cos(\theta_k - \theta_{k+q}))} \quad (۱۲)$$

1. Transverse acoustic branch
2. Longitudinal acoustic branch
3. Longitudinal optical branch
4. Transverse optical branch

$$\mu(n_s) = \frac{2v_F \int_0^{\infty} g(\bar{k}) k dk}{\pi n_s F} \quad (۵)$$

ویژگی خاص گرافن این است که سرعت حامل‌ها در این نوارهای انرژی خطی سرعت فرمی است، که در معادله زیر نشان داده شده است [۲۶]:

$$E = \pm \hbar v_F k \quad (۶)$$

که در آن علامت بالایی برای الکترون‌ها است و علامت پایینی برای حفره‌ها است. در نتیجه سرعت سوق حامل‌ها از عدم تعادل تابع توزیع میدان الکترونیکی اعمالی ناشی می‌شود.

بیشتر الکترون‌ها بدون برخورد با ناخالصی شیمیایی یا نقص بلوری می‌توانند منتقل شوند. در حقیقت منبع دیگری از این تحرک بالا مربوط به الکترون‌های استثنایی خود گرافن است. این الکترون‌ها بر خلاف الکترون‌های بیشتر مواد، باید در نظر گرفته شوند؛ زیرا این الکترون‌ها با جرم موثر صفر حرکت می‌کنند. تحرک میدان پایین μ با استفاده از توضیح معادله بولتزمن با روش ثابت می‌توان یافت [۲۷، ۲]:

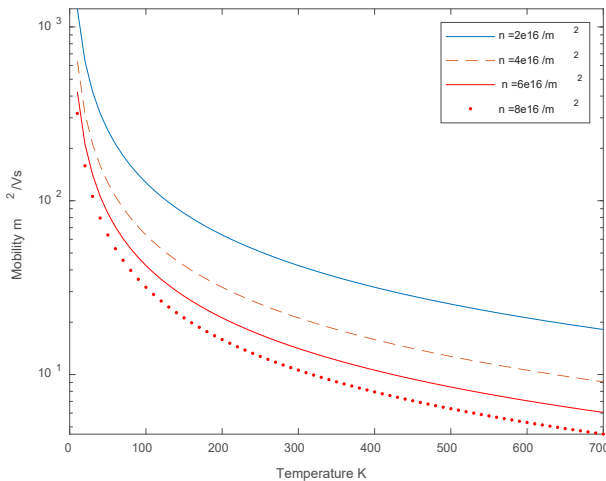
$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{\gamma \pi}{\hbar} \sum_q |M_{k,k+q}|^2 [1 - \cos(\theta_k - \theta_{k+q})] \times \{N_q \delta(E_k - E_{k+q} + \hbar \omega_q) + (N_q + 1) \delta(E_k - E_{k+q} - \hbar \omega_q)\} \quad (۷)$$

که در آن d فاصله وان دروالسی، $\frac{1}{N} \sum_q = \frac{A}{4\pi^2} \int q dq d\theta$

بین لایه قطبی و گرافن تک لایه، q بردار موج پراکندگی، $A = \sqrt{3}a_0^2$ مساحت یاخته بسیط دو اتم، N چگالی فضای k ، N_q تعداد فونون‌های اشغالی بوز-اینشتن، θ_k زاویه بردار \vec{k} و

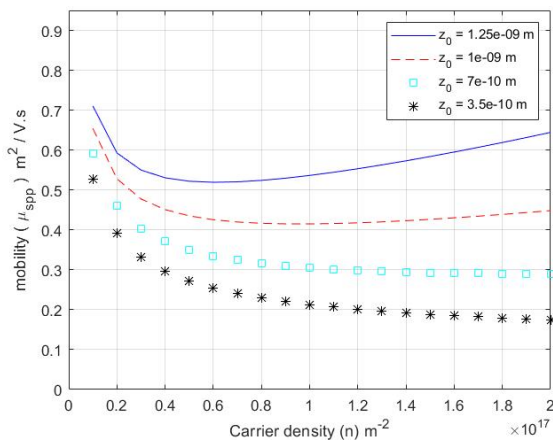
$$|M_{k,k+q}|^2 = \frac{1 + ss' \cos(\theta_k - \theta_{k+q})}{2} \frac{4\pi^2 e^2 F_v^2}{NAq} e^{-2 \gamma q d} \quad (۸)$$

تحرک میدان پایین در گرافن، در غیاب ناخالصی‌ها و

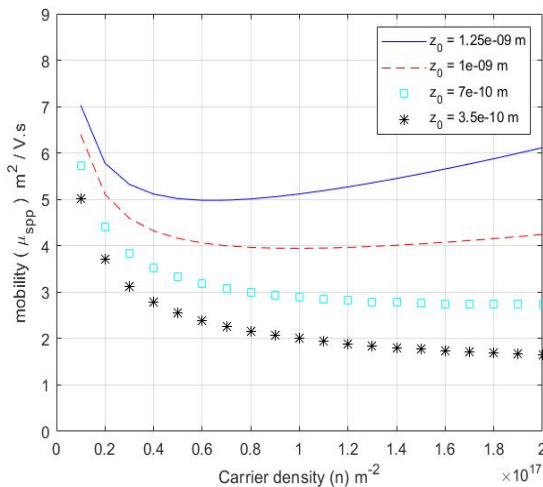


شکل ۱: نمودار تغییرات تحرک میدان پایین بر حسب دما در گرافن از بالا به پایین به ترتیب برای چگالی حامل $۲ \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ ، $۴ \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ ، $۶ \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ و $۸ \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$

(الف)



(ب)



شکل ۲: نمودار تغییرات تحرک میدان پایین بر حسب چگالی حامل‌های سطحی برای شاخه اول در دمای اتاق (۳۰۰K) برای فاصله‌های ۱۰، ۷، ۴/۵، و ۱۲/۵ آنگستروم بین لایه گرافن و بستر الف) HfO₂ ب) Al₂O₃.

برای الکترون-فونون TO داده می‌شوند. در اینجا $s = 1$ برای الکترون‌ها، $s' = -1$ برای حفره‌ها و M_c جرم اتم کربن است. تحرک حامل‌های بار ناشی از پراکندگی فونون اپتیکی برابر است با

$$\mu_{op} = \frac{e\rho_m v_F^2 \hbar \omega_{op}}{2\pi \hbar D_{op}} \frac{1}{nN_{op}} \quad (۱۳)$$

که در آن $D_{op} = 2D_\Gamma$ پتانسیل جفت شدگی الکترون-فونون، $N_{op} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_{op}}{K_B T}\right) - 1}$ عدد اشغال بوز-اینشتن و $\hbar \omega_{op}$ انرژی فونون است. حامل‌های بار توسط فونون‌های سطحی قطبی SPP که بر روی بستر قطبی میدان الکتریکی تولید می‌شوند نیز پراکنده شده و تحرک آنها به صورت زیر داده می‌شود [۲۷]:

$$\mu_{spp,v} = \sqrt{\frac{\beta}{\hbar \omega_v}} \frac{\hbar v_F}{e^2} \frac{ev_F}{F_v^2} \frac{\exp(k_0 z_0)}{N_{spp,v} \sqrt{n}} \quad (۱۴)$$

که در آن v تعداد شاخه‌ها، $F_v^2 = \frac{\hbar \omega_{so,v}}{2\pi} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty + 1} - \frac{1}{\epsilon_0 + 1} \right)$ پارامتر جفت شدگی حامل بار-فونون سطحی قطبی، ϵ_∞ و ϵ_0 به ترتیب مقادیر فرکانس‌های پایین و بالا، $k_0 = \sqrt{\left(\frac{2\hbar \omega_{so,v}}{v_F} \right)^2 + \alpha n}$ فاصله بین گرافن و بستر دی الکتریک، $N_{spp,v} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_{spp,v}}{K_B T}\right) - 1}$ عدد اشغال بوز-

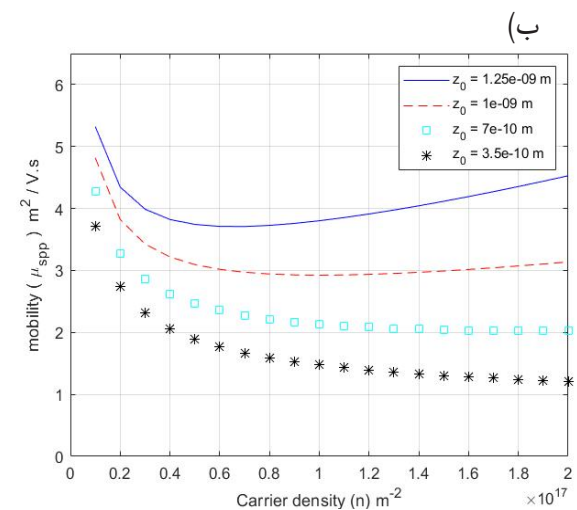
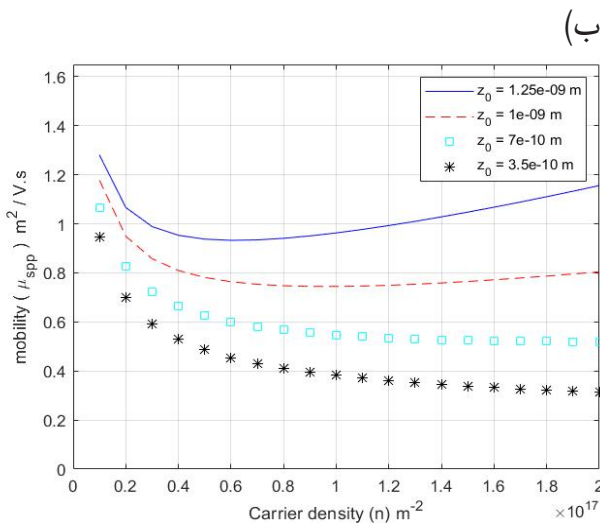
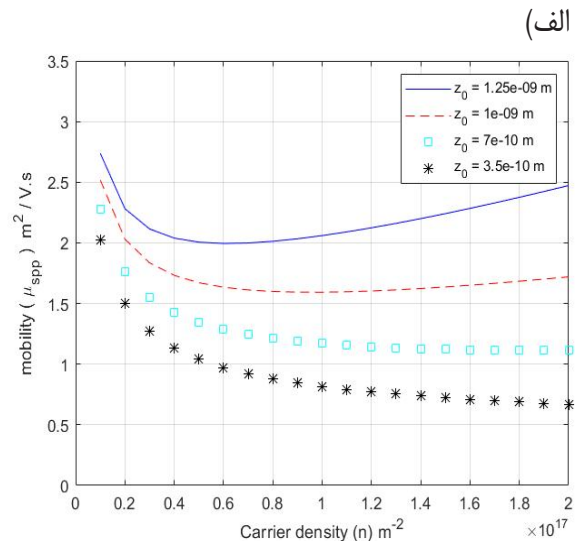
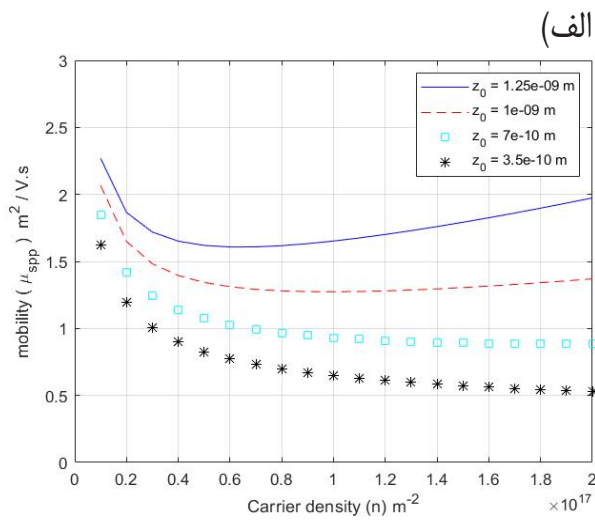
اینشتن و $\hbar \omega_{spp,v}$ انرژی فونون است. نهایتاً با استفاده از معادلات (۱۰، ۱۳ و ۱۴) می‌توان تحرک میدان پایین را با استفاده از رابطه ماتیسن^۱ محاسبه کرد [۲۷، ۲۹]

$$\mu^{-1} = \mu_{ac}^{-1} + \mu_{op}^{-1} + \sum_v \mu_{spp,v}^{-1} \quad (۱۵)$$

۳- نتایج و بحث

در تمام محاسبات زیر کد نوشته شده با استفاده از نرم افزار متلب می‌باشد. شکل ۱ منحنی تغییرات تحرک میدان پایین حامل بر حسب دما برای چگالی‌های مختلف $n = ۲، ۴، ۶، ۸ \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ در لایه گرافن نشان می‌دهد [۳۰]. با توجه به این شکل ملاحظه می‌کنیم

1. Matthiessen's rule.



شکل ۴: نمودار تغییرات تحرک میدان پایین بر حسب چگالی حامل‌های سطحی برای شاخه اول در دمای ۳۰۰ K برای فاصله‌های ۱۰، ۷، ۳/۵، ۱۰، ۱۲/۵ آنگستروم بین لایه گرافن و بستر الف) ZrO_2 ب) Al_2O_3 .

شکل ۳: نمودار تغییرات تحرک میدان پایین بر حسب چگالی حامل‌های سطحی برای شاخه اول (به جز نمودار ب) در دمای ۳۰۰ K برای فاصله‌های ۱۰، ۷، ۳/۵، ۱۰، ۱۲/۵ آنگستروم بین لایه گرافن و بستر الف) ZrO_2 ب) ZrO_2 شاخه دوم ω_{so2} .

سطحی قطبی در گرافن به ترتیب بر روی بسترهای ZrO_2 و Al_2O_3 ، HfO_2 با چهار فاصله متفاوت ۱۰، ۷، ۳/۵، ۱۰، ۱۲/۵ آنگستروم بین گرافن و بستر دی الکتریک بر حسب چگالی حامل n و برای شاخه فونونی اول ω_{so1} (شاخه فونونی دوم ω_{so2} برای شکل ۳ ب) و در دمای اتاق محاسبه و رسم شده است.

در نمودار شکل‌های ۲ و ۳ مشاهده می‌شود که برای همه بسترهای مورد استفاده با افزایش چگالی حامل‌ها به ترتیب در گستره $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ تا $6/5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ و در گستره $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ به بالا، تحرک کاهش و افزایش پیدا می‌کند. این وضعیت

که تحرک در دماهای پایین و چگالی کم، بالا و در دماهای بالا و چگالی بالا، کم می‌باشد، توضیح این که در دماهای پایین پراکندگی حامل‌ها، کشسان و در دماهای بالا پراکندگی از نوع غیرکشسان بوده و در نتیجه حامل‌ها مقدار زیادی از انرژی خود را خود از دست می‌دهند و تحرک آنها کاهش می‌یابد.

تحرک حامل‌ها نه تنها به پراکندگی آنها توسط فونون‌ها، بلکه به فاصله وان دروالسی بین گرافن و بستر دی الکتریکی قطبی نیز بستگی دارد. در شکل‌های ۲ (الف، ب) و شکل‌های ۳ (الف، ب) نمودار تغییرات تحرک حامل‌ها در اثر پراکندگی فونون‌های

جدول ۱: پارامترهای پراکندگی سطحی قطبی برای گرافن بر روی بستریهای ZrO_2 و Al_2O_3 [۳۱]

	ZrO_2	Al_2O_3	
ϵ_0	۲۴	۱۲/۵۳	
ϵ_∞	۴	۳/۲	
$\hbar\omega_{so1}$	۲۸/۱۸meV $10^{-21} \times 4/5149J$	۶۱/۶۳meV $10^{-21} \times 9/8742J$	
$\hbar\omega_{so2}$	۷۶/۳۳meV $10^{-20} \times 1/2229J$	۱۰۰/۲meV $10^{-20} \times 1/6053J$	
F_1^2	۱/۰۵meV $10^{-22} \times 1/6822J$	۱/۴۵meV $10^{-22} \times 2/3231J$	

جدول ۲: ثابت‌های مورد نیاز برای محاسبات [۲۷]

پارامتر	مقدار	
e	$1.602176634 \times 10^{-19} C$	
ρ_m	$7.66 \times 10^{-11} kg/cm^2$	$7.66 \times 10^{-7} kg/m^2$
\hbar	$1.054571817 \times 10^{-34} J \cdot s$	
v_F	$10^6 \times 1 m/s$	
v_{ph}	$17/3 km/s$	$17/3 m/s$
D_{ac}	$7/3 eV$	$5/9280 J$
D_{op}	$22/4 eV/A^\circ$	$3/5889 J/m$
K_B	$10^{-23} \times 1/380 J/K$	
$\hbar\omega_{op}$	$0/19 eV$	$3/044 J$
n	$10^{12} \times 1,3,5 cm^{-2}$	$10^{16} \times 1,3,5 m^{-2}$
T	$0-600 K$	
α	$10/5$	
β	$eV 10^{-4} \times 153/0$	$2/4512 J$
z_0	$12/5, 10, 7/5, 5, 3/5$	$10^{-10} \times 10, 7/5, 5, 3/5$
F	A°	$12/5 m$
F	$1-2V/\mu m$	$10^6 \times (1-2)V/m$
η	$cm^{-2} 10^{12} \times 2$	$10^{16} \times 2 m^{-2}$

ω_{so2} بالاتر است (شکل های ۳ الف و ب). در حالت فاصله کم بین بستر و لایه گرافن و با لحاظ افزایش پراکندگی حامل‌ها توسط فونون‌های سطحی قطبی و افزایش میدان وان دروالس، تحرک با افزایش چگالی حامل‌ها ثابت و یا کاهشی با شیب بسیار کم دارد [۲۹]. نمودار شکل های ۴ الف و ب) به ترتیب شبیه شکل ۲ب) و شکل ۳ الف) اما در دمای $500 K$ محاسبه و رسم شده اند. با تحلیل نمودارهای شکل ۴ و با لحاظ پراکندگی غیرکشسان نتیجه می شود که در دماهای بالاتر از دمای اتاق ارتعاشات شبکه گرافن و بستر بیشتر شده و با افزایش چگالی حامل‌ها تحرک کمتر می شود. نتایج به دست آمده در این پژوهش در توافق با داده‌های تجربی و نظری اخیر است [۲۷، ۳۱].

۴- نتیجه گیری

از محاسبات تحرک قطبی سطحی حامل‌ها ملاحظه کردیم که تحرک قطبی سطحی تابعی از چگالی حامل‌ها است، نیز مشخص شد که فاصله ون در والس نقش مهمی برای افزایش تحرک حامل‌ها دارد هر چه فاصله بیشتر شود تحرک افزایش می یابد با افزایش چگالی حامل‌ها در شرایط دماهای بالا و با استفاده از گیت گرافنی بر روی بستر Al_2O_3 با فاصله‌های ون در والس زیاد بیشتر از $12/5$ آنگستروم برای کنترل گیت گرافنی دستگاه‌ها مناسب تر است. می دانیم که سرعت حامل‌ها با تحرک در میدان‌های الکتریکی پایین متناسب است، از این رو بستر Al_2O_3 به دلیل داشتن تحرک بالا پاسخ فرکانس بالایی دارد؛ زیرا حامل‌ها زمان کمتری برای عبور از دستگاه می گیرند.

در حالت بستر Al_2O_3 گرافن با داشتن تحرک بالا جریان بالاتری دارد، این جریان‌های بالا در دستگاه‌های الکترونیکی مانند خازن‌ها سریع تر شارژ می کند، در نتیجه پاسخ فرکانس بالاتری خواهند داشت. خواص منحصر به فرد گرافن در کنار دارای کاربردهای زیاد در زمینه تکنولوژی توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده است. با این ماده و با ترکیب دی الکتریک‌های

به دلیل افزایش پراکندگی حامل‌ها در اثر افزایش چگالی سطحی حامل هاست که منجر به کاهش تحرک می شود در حالی که افزایش تحرک در چگالی بالای حامل‌های سطحی به دلیل فاصله نسبتا بالای بستر و لایه گرافن رخ می دهد.

بستر ZrO_2 دارای دی الکتریک بالا با دو شاخه فونونی ω_{so1} و ω_{so2} می باشد که در آن مقدار انرژی

adma.201401184

- [8] K. Chung, C.-H. Lee, G.-C. Yi, "Transferable GaN layers grown on ZnO-coated graphene layers for optoelectronic devices," *Science* 330, 655-657, 2010. doi: [10.1126/science.1195403](https://doi.org/10.1126/science.1195403)
- [9] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, "The electronic properties of graphene," *Review modern physics*, 81, 109-162, 2009. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
- [10] F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan, A.C. Ferrari, "Graphene photonics and optoelectronics," *Nature photonics*, 4, 611-622, 2010. doi: [10.1038/nphoton.2010.186](https://doi.org/10.1038/nphoton.2010.186)
- [11] Y. Don Kong, J. G. Champlain, and J. B. Boos, "Hot electron inelastic scattering and transmission across graphene surfaces," *Journal of applied physics*, 121, 235101, 2017. doi: [10.1063/1.4984590](https://doi.org/10.1063/1.4984590)
- [12] S. Stankovich, D.A. Dikin, G.H.B. Dommett, K.M. Kohlhaas, E.J. Zimney, E.A. Stach, R.D. Piner, S.T. Nguyen, R.S. Ruoff, "Graphene-based composite materials," *Nature*, 442, 282-286, 2006.
- [13] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, D. C. Elias, J. A. Jaszczak, and A. K. Geim, "Giant intrinsic carrier mobilities in graphene and its bilayer," *Physical review letters*, 100, 016602, 2008. doi: [10.1103/PhysRevLett.100.016602](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.016602)
- [14] J. H. Chen, C. Jang, S. Xiao, M. Ishigami, and M. S. Fuhrer, "Intrinsic and extrinsic performance limits of graphene devices on SiO₂," *Nature nanotechnology*, 3, 206-209, 2008. doi: [10.1038/nano.2008.58](https://doi.org/10.1038/nano.2008.58)
- [15] X. Hong, K. Zou, A. M. DaSilva, C. H. Ahn, and J. Zhu, "Integrating functional oxides with graphene," *Solid state communication*, 152, 1365-1374, 2012. doi: [10.1016/j.ssc.2012.04.050](https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.04.050)
- [16] X. Li, E. A. Barry, J. M. Zavada, M. B. Nardelli, and K. W. Kim, "Surface polar phonon dominated electron transport in graphene," *Applied physics letters*, 97, 232105, 2010. doi: [10.1063/1.3525606](https://doi.org/10.1063/1.3525606)

قطبی، یک نوار گاف قابل تنظیم با سرعت نوترکیبی پایین و پاسخ جریان نوری بالا می‌توان به دست آورد.

مراجع

- [1] A. G. Geha, Y. Aguado, M. B. Nadiaye, "Graphene, a material with exceptional electronic properties," *arXiv, Condensed matter*, 1-8, 2024. doi: [10.48550/arXiv.2402.00599](https://doi.org/10.48550/arXiv.2402.00599)
- [2] M. Mahdouani, "Investigation of the electron-surface phonon interaction effects in graphene on a substrate made of polar materials," *Physica E*, 87, 192-197, 2017. doi: [10.1016/j.physe.2016.04.020](https://doi.org/10.1016/j.physe.2016.04.020)
- [3] B.D. Briggs, B. Nagabhirava, G. Rao, R. Geer, H.Y. Gao, Y. Xu, B. Yu, "Electromechanical robustness of monolayer graphene with extreme bending," *Applied physics letters*, 97, 223102, 2010. doi: [10.1063/1.3519982](https://doi.org/10.1063/1.3519982)
- [4] S.K. Bae, H.K. Kim, Y. Lee, X.F. Xu, J.S. Park, Y. Zheng, J. Balakrishnan, T. Lei, H.R. Kim, Y.I. Song, Y.J. Kim, K.S. Kim, B. Özyilmaz, J.-H. Ahn, B.H. Hong, S. Iijima, "Roll-to-roll production of 30-inch graphene films for transparent electrodes," *Nature nanotechnology*, 5, 574-578, 2010. doi: [10.1038/nnano.2010.132](https://doi.org/10.1038/nnano.2010.132)
- [5] X.S. Li, Y.W. Zhu, W.W. Cai, M. Borysiak, B.Y. Han, D. Chen, R.D. Piner, L. Colombo, R.S. Ruoff, "Transfer of large-area graphene films for high-performance transparent conductive electrodes," *Nano letters*, 9, 4359-4363, 2009. doi: [10.1021/nl902623y](https://doi.org/10.1021/nl902623y)
- [6] T. Mueller, F. Xia, P. Avouris, "Graphene photodetectors for high-speed optical communications," *Nature photonics*, 4, 297-301, 2010. doi: [10.1038/nphoton.2010.40](https://doi.org/10.1038/nphoton.2010.40)
- [7] D. Choi, M.-Y. Choi, W.M. Choi, H.-J. Shin, H.-K. Park, J.-S. Seo, J. Park, S.-M. Yoon, S.J. Chae, Y.H. Lee, S.-W. Kim, J.-Y. Choi, S.Y. Lee, J.M. Kim, "Hydrophobic sponge structure-based triboelectric nanogenerator," *Advanced materials*, 22, 2187, 2014. doi: [10.1002/](https://doi.org/10.1002/)

- [17] E. H. Hwang and S. Das Sarma, "Acoustic phonon scattering limited carrier mobility in two-dimensional extrinsic graphene," *Physical review B*, 77, 115449, 2008. doi:10.1103/PhysRevB.77.115449
- [18] H. Min, E. H. Hwang, and S. Das Sarma, "Chirality-dependent phonon-limited resistivity in multiple layers of graphene," *Physical review B*, 83, 161404(R), 2011. doi.org/10.1103/PhysRevB.83.161404
- [19] D. K. Efetov and P. Kim, "Controlling electron-phonon interactions in graphene at ultrahigh carrier densities," *Physical review letters*, 105, 256805, 2010. doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.256805
- [20] A. S. Mayorov, D. C. Elias, I. S. Mukhin, S. V. Morozov, L. A. Ponomarenko, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and R. V. Gorbachev, "How close can one approach the Dirac point in graphene experimentally," *Nano letters*, 12, 4629-4634, 2012. doi.org/10.1021/nl301922d
- [21] S. Adam and S. Das Sarma, "Transport in suspended graphene," *Solid state communication*, 146, 356, 2008. doi:10.1016/j.ssc.2008.03.021
- [22] R. Fuchs and K. L. Kliewer, "Optical modes of vibration in an ionic crystal slab," *Physical review*, 140, A2076, 1965. doi.org/10.1103/PhysRev.140.A2076
- [23] E. N. Economou, "Surface plasmons in thin films," *Physical review*, 182, 539, 1969. doi.org/10.1103/PhysRev.182.539
- [24] E. H. Hwang and S. Das Sarma, "Surface polar optical phonon interaction induced many-body effects and hot-electron relaxation in graphene," *Physical review B*, 87, 115432, 2013. doi.org/10.1103/PhysRevB.87.115432
- [25] J. H. Chen, "Electrical transport in graphene: carrier scattering by impurities and phonons," Cambridge university press, London, 25-37, 2017. doi:10.1017/9781316681619.003
- [26] D. L. Rode, "Electron mobility in direct-gap polar semiconductors," *Physical review B*, 2, 1012-1024, 1970. doi:10.1103/physrevb.2.1012
- [27] V. Perebeinos, P. Avouris, "Inelastic scattering and current saturation in graphene," *Physical review B*, 81, 195442, 2010. doi:10.1103/physrevb.81.195442
- [28] E. H. Hwang, S. Sarma, "Acoustic phonon scattering limited carrier mobility in two-dimensional extrinsic graphene," *Physical review B*, 77, 115449, 2008. doi:10.1103/physrevb.77.115449
- [29] L. Pietronero, S. Strassler, H. R. Zeller, M. J. Rice, "Electrical conductivity of a graphene layer," *Physical review B*, 22, 904, 1980. doi.org/10.1103/PhysRevB.22.904
- [30] H. Ho, Y. I. Chang, and J. Y. Lee, "The temperature dependence of the electron mobility degradation mechanisms in n-channel metal-oxide-semiconductor field effect transistors with ZrO_2 and Sm_2O_3 gate dielectrics," *Applied physics letters*, 91, 173510, 2007. doi:10.1063/1.2802729
- [31] I. T. Lin, J. M. Liu, "Surface polar optical phonon scattering of carriers in graphene on various substrates," *Applied physics letters*, 103, 081606, 2013.