

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2017.05.030

# 空穴浓度、基底和温度对金属基 外延石墨烯态密度的影响

高君华, 刘 炜

(重庆文理学院新型储能器件及应用工程研究中心, 重庆 402160)

**摘要:** 以吸附在金属铜基底上的外延石墨烯为例, 研究了空穴浓度随温度的变化, 探讨了空穴浓度和基底以及温度对金属基外延石墨烯态密度的影响. 结果表明: (1) 空穴浓度随温度升高而非线性增大, 铜基底外延石墨烯的空穴浓度随温度的变化率小于石墨烯的相应值; (2) 与石墨烯相比, 基底的存在使铜基外延石墨烯的空穴浓度随温度的变化要迅速增大, 态密度在电子能量为 0 时的值要增大, 而态密度极大值相应的电子能量(称为最可几能量)变小; (3) 铜基外延石墨烯的态密度随空穴浓度  $\alpha$  的增大和温度的升高而减小, 其中, 随空穴浓度  $\alpha$  的变化为线性, 而随温度的变化为非线性.

**关键词:** 铜基外延石墨烯; 态密度; 空穴浓度; 温度

**中图分类号:** O482      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0490-6756(2017)05-1067-06

## Effect of hole concentration, base and temperature on the density of metal-based epitaxial graphene

GAO Jun-Hua, LIU Wei

(Engineering Research Center of New Energy Storage Devices and Applications,  
Chongqing University of Arts and Sciences, Chongqing 402160, China)

**Abstract:** This paper investigates the variation of hole concentration with temperature, then discussed the effect of hole concentration, base and temperature on the state density of metal-based epitaxial graphene. The results were three folds. First, the hole concentration increases nonlinearly with the temperature increasing, and the changing rate of the hole concentration of the epitaxial graphene with the temperature is smaller than that of graphene. Second, Compared with graphene, When electron energy is zero, the density of states of copper-based epitaxial graphene is higher than that of graphene. Third, the maximum of graphene state density decreases at the corresponding electron energy because of the substrate. The density of states of Cu-based epitaxial graphene decreases with the increase of hole concentration and temperature, and the change of state density is linear with the concentration of hole, but is nonlinear with the temperature.

**Keywords:** Copper-based epitaxial graphene; State density; Hole concentration; Temperature

收稿日期: 2017-01-17

基金项目: 国家自然科学基金(61604026); 重庆文理学院校级重点项目(Z2015DQ11)

作者简介: 高君华(1989-), 女, 黑龙江人, 硕士, 主要研究方向为功能材料与器件. E-mail: 958791911@qq.com

通讯作者: 刘炜. E-mail: liuwei127@126.com

## 1 引言

外延石墨烯是器件结构平面工艺的基本单元,因此,研究外延石墨烯比研究单层石墨烯具有更重要实际的意义,目前已有一些文献对外延石墨烯的性质等进行深入研究<sup>[1-3]</sup>. 作为具有广泛的理论意义和重要应用价值的态密度,不仅反映了电子能态结构,而且它的许多性质特别是电导率等电学性质都与之密切相关,因此,对外延石墨烯的态密度的研究是当今国内外学者特别关注的重点问题之一. 文献[4-6]分别研究了基底和吸附强弱对石墨烯态密度的影响,但这些研究未考虑到杂质和空穴等缺陷的存在. 由于基底和外界的影响,外延石墨烯中往往有空穴等缺陷,缺陷的存在,必然影响态密度,进而影响电学等各种性质,探讨缺陷对外延石墨烯态密度的影响是一个有趣而重要的问题. 最近文献[7]对于外延石墨烯中的空穴对石墨烯态密度的影响作了一些探讨,但未对具体

基底的外延石墨烯态密度作计算和分析,因而对空穴的影响大小不能量化,同时也未研究空穴浓度与温度的关系以及温度对外延石墨烯态密度的影响. 鉴于外延石墨烯的态密度的重要性,本文将应用固体物理理论和方法,在对金属基底、单层石墨烯和金属基底外延石墨烯态密度进行计算对比分析的基础上,探讨外延石墨烯空穴浓度随温度的变化以及温度和空穴浓度对金属基外延石墨烯态密度的影响. 本研究不仅对揭示材料的导电性、输运性质、电子能态等有重要的理论意义,而且对提高材料性能、制备高性能电极材料等有重要应用价值.

## 2 物理模型

我们所研究的系统是由在金属和半导体平面基底上,吸附有  $N$  个碳原子构成的具有六角形结构的单层石墨烯,单层石墨烯面积为  $L \times L$ ,其俯面和侧面见图 1.

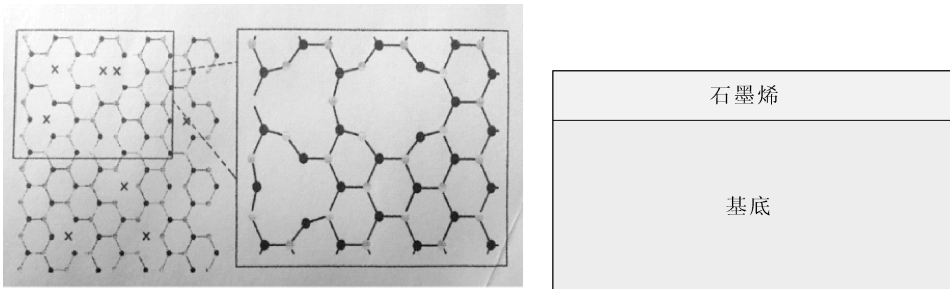


图 1 外延石墨烯俯视图和侧视图

Fig. 1 Top view and side view of epitaxial graphene

金属基底采用安德森模型,认为离子为静止,而电子可视为自由电子,其哈密顿量可为:取平面上的任一碳原子作坐标原点,单层石墨烯平面为 OXY 平面,Z 轴垂直石墨烯平面向上. 石墨烯的  $N$  个碳原子,因某种原因受到激发,有  $n$  个原子脱离正常位置形成  $n$  个空穴,空穴浓度为  $\alpha = n/N$ .

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1)$$

这里,  $m$  为自由电子的质量,  $\hbar$  为普朗克常数,  $k$  为电子波矢.

金属基外延石墨烯,采用 S Y Davydov 模型,认为基底和石墨烯中的原子为静止. 系统的能量为基底的电子能量、原子中电子的能量、原子内库仑排斥能、杂化能之和,即<sup>[8]</sup>:

$$H = \sum_{P,\sigma} \epsilon(P) C_{K\sigma}^+ C_{K\sigma} + E_a \sum_{\sigma} a_{\sigma}^+ a_{\sigma} +$$

$$\theta a_{\uparrow}^+ a_{\uparrow} a_{\downarrow}^+ a_{\downarrow} + \frac{V}{\sqrt{N'}} \sum_{P,\sigma} (C_{P\sigma}^+ a_{\sigma} + C_{P\sigma} a_{\sigma}^+) \quad (2)$$

这里,  $E_a$  是态  $|a\sigma\rangle$  中原子电子的能量,  $\theta$  是内部与相反自旋电子的库仑排斥能,  $C_{K\sigma}^+$  和  $C_{K\sigma}$  是处于态  $|p\sigma\rangle$  的基底电子的产生和消灭算符,  $a_{\sigma}^+ a_{\sigma}$  和  $a_{\sigma}$  是原子电子的自旋为  $a$  的产生和消灭算符,  $V$  是杂化势,  $N'$  为基底表面原子数.

金属基底与石墨烯原子之间有相互作用,相互作用势与原子间距  $r$  的关系可写为<sup>[9]</sup>:

$$b_m^0 = [1 - N_m (\frac{V_m}{W_m})^2] \epsilon_F^0 - \epsilon_D = \quad (3)$$

其中,  $n$  为键强参数,按文献[9],取  $n=1$ ,  $g$  为价电子结构有关的量,为简便起见,对碱金属取  $\epsilon_1 = -\frac{16V_2}{3d_0^3} [1 - \frac{5}{3} (\frac{V_1}{V_2})^2]$ ,  $r_0$  为原子间最小距离,可取为 C 原子的半径  $r_{0C}$  与金属离子半径  $r_{0m}$  之和,即  $r_0 =$

$r_{0C} + r_{0m}$ , 而  $\lambda_D$  为平均德拜波长, 与晶格常数  $a$  的关系为  $\lambda_D \approx 4.9a$ . 平衡时, 金属与石墨烯原子之间距离  $\Delta_1(\epsilon)$  满足如下关系:

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{1}{r_0} - \frac{2nr_0}{\lambda_D^2} \right) + \sqrt{\left( \frac{1}{r_0} - \frac{2nr_0}{\lambda_D^2} \right)^2 - \frac{8n}{\lambda_D^2}} \right] \quad (4)$$

将(4)式代入(3)式, 求得平衡时金属与石墨烯原子相互作用能  $\varphi(r'_0)$ , 而平均值  $w \approx \varphi(r'_0)$ .

### 3 空穴浓度随温度的变化

设  $N$  个碳原子格点上, 因某种原因受到激发, 脱离正常位置形成  $n$  个空穴, 由于形成空穴的位置是随机的, 可采用平衡态统计物理理论, 求出空穴浓度随温度的变化.  $N$  个碳原子格点中形成  $n$  个空穴的方式数为  $N!/n!(N-n)!$ , 从完整晶体到形成  $n$  个空穴, 使系统的熵由  $S(0)$  变为

$$S(n) = S(0) + k_B \ln \frac{N!}{n!(N-n)!} \quad (5)$$

设形成一个空穴的能量(激活能)为  $w$ , 当系统出现  $n$  个空穴时的系统能量由  $E_0$  变为  $E = E_0 + nw$ , 结果具有  $n$  个空穴的系统的自由能  $F = E - TS$  为:

$$F = E_0 + nw - k_B T \ln \frac{N!}{n!(N-n)!} \quad (6)$$

当温度为  $T$  达到平衡态时, 自由能极小, 有  $(\partial F/\partial n) = 0$ , 将(5)式代入, 并注意到, 通常空穴不会太多,  $n \ll N$  成立, 由此得到空穴浓度  $\alpha$  与温度的关系为:

$$\alpha = \frac{n}{N} = e^{-w/k_B T} \quad (7)$$

### 4 外延石墨的态密度均随空穴浓度的变化

为了说明空穴浓度对外延石墨态密度的影响, 先分析单层石墨烯、金属基底和无空穴的金属基外延石墨烯态密度的特点.

#### 4.1 单层石墨烯的态密度<sup>[8]</sup>

$$\rho_g(\epsilon) = \begin{cases} 0, & \epsilon < -\frac{D}{2} \\ -\frac{\rho_m \Delta}{2\epsilon}, & -\frac{D}{2} < \epsilon < -\frac{\Delta}{2} \\ \frac{2\rho_m |\epsilon|}{\Delta}, & -\frac{\Delta}{2} < \epsilon < \frac{\Delta}{2} \\ \frac{\rho_m \Delta}{2\epsilon}, & \frac{\Delta}{2} < \epsilon < \frac{D}{2} \\ 0, & \epsilon > \frac{D}{2} \end{cases} \quad (8)$$

式中,  $\frac{D}{2}$  是分别处于低于和高于  $\epsilon = 0$  的  $\pi^-$  带和  $\pi^+$  带的石墨烯的带宽度,  $\Delta$  为  $\pi$  带和  $\pi^*$  带的能隙宽度, 按文献[11],  $\Delta = 4.76 \text{ eV}$ ,  $D/\Delta = d$ , 取  $d = 3$ , 而  $\rho_m = \frac{4}{(1+2\ln d)\Delta}$ .

#### 4.2 金属基底的电子态密度

按照安德森模型, 金属基底中的电子可视为自由电子, 电子态密度为常数, 设电子最大能量为  $\epsilon_m$ , 它与金属的晶格常数  $a$  的关系为  $\epsilon_m = \frac{3\hbar^2}{2m}$

$(\frac{\pi}{a})^2$ , 一个原胞内原子数为  $n$ , 则态密度为

$$\rho_{s0} = \frac{2mna^2}{3\hbar^2 \pi^2} \quad (9)$$

#### 4.3 无空穴的金属基底外延石墨烯的态密度

文献[7]采用格林函数法求出在金属基底上形成的外延石墨烯态密度  $\rho_{eg}$  为

对  $\epsilon > 0$ :

$$\rho_{eg}(\epsilon) = \frac{1}{\pi \zeta^2} \left\{ [\Gamma_m] \ln \frac{[\epsilon - \zeta]^2 + [\Gamma_m]^2}{\epsilon^2 + [\Gamma_m]^2} + 2\epsilon \left[ \arctg \frac{\epsilon}{\Gamma_m} - \arctg \frac{\epsilon - \zeta}{\Gamma_m} \right] \right\} \quad (10)$$

对  $\epsilon < 0$ :

$$\rho_{eg}(\epsilon) = \frac{1}{\pi \zeta^2} \left\{ [\Gamma_m] \ln \frac{[\epsilon + \zeta]^2 + [\Gamma_m]^2}{\epsilon^2 + [\Gamma_m]^2} + 2\epsilon \left[ \arctg \frac{\epsilon}{\Gamma_m} - \arctg \frac{\epsilon + \zeta}{\Gamma_m} \right] \right\} \quad (11)$$

式中,  $\zeta = 3tdq_B/2$ , 其中  $t$  是自由石墨烯中最近邻原子间的相互作用能,  $q_B$  是倒格矢(切断矢量),  $d$  是石墨烯中碳原子间的距离. 文献[8]已计算出  $\xi = 2.38 \text{ eV}$ ;  $\Gamma_m = \pi V_c^2 \rho_{s0}$  是外延石墨烯中碳原子准能级展宽的最大值, 其中的  $\Delta_1(\epsilon)$  是外延石墨烯碳原子  $p>$  轨道与基底相互作用矩阵元, 就等于石墨烯与基底原子的平均相互作用能,  $\rho_{s0}$  由(7)式决定.

比较(8)、(9)、(10)、(11)式可看出: 1) 石墨烯、金属基底和无空穴的金属基底外延石墨烯的态密度相对于电子能量为零而言为对称; 2) 当给石墨烯外加上金属基底后, 石墨烯的态密度会发生变化, 表示基底对石墨烯的态密度有重要影响.

#### 4.4 有空穴的金属基底外延石墨烯的态密度

对金属基底, 有空穴的外延石墨烯的态密度为<sup>[7]</sup>:

对导带( $\epsilon > 0$ ):

$$\rho_{eg}(\alpha, \epsilon) = \frac{1}{\pi \zeta^2} \left\{ [\Gamma_m + \alpha A_2(\epsilon)] \ln \frac{[\epsilon + \alpha A_1(\epsilon) - \zeta]^2 + [\Gamma_m + \alpha A_2(\epsilon)]^2}{[\epsilon + \alpha A_1(\epsilon)]^2 + [\Gamma_m + \alpha A_2(\epsilon)]^2} + 2[\epsilon + \alpha A_1(\epsilon)] \left[ \arctg \frac{\epsilon + \alpha A_1(\epsilon)}{\Gamma_m + \alpha A_2(\epsilon)} - \arctg \frac{\epsilon + \alpha A_1(\epsilon) - \zeta}{\Gamma_m + \alpha A_2(\epsilon)} \right] \right\} \quad (12)$$

对价带( $\epsilon < 0$ ):

$$\rho_{eg}(\alpha, \epsilon) = \frac{1}{\pi \zeta^2} \left\{ [\Gamma_m + \alpha A_2(\epsilon)] \ln \frac{[\epsilon + \alpha A_1(\epsilon) + \zeta]^2 + [\Gamma_m + \alpha A_2(\epsilon)]^2}{[\epsilon + \alpha A_1(\epsilon)]^2 + [\Gamma_m + \alpha A_2(\epsilon)]^2} + 2[\epsilon + \alpha A_1(\epsilon)] \left[ \arctg \frac{\epsilon + \alpha A_1(\epsilon)}{\Gamma_m + \alpha A_2(\epsilon)} - \arctg \frac{\epsilon + \alpha A_1(\epsilon) + \zeta}{\Gamma_m + \alpha A_2(\epsilon)} \right] \right\} \quad (13)$$

其中,

$$A_1(\epsilon) = \frac{F_1(\epsilon)}{F_1(\epsilon) + F_2(\epsilon)}, \quad A_2(\epsilon) = \frac{F_2(\epsilon)}{F_{1a}(\epsilon) + F_2(\epsilon)} \quad (14)$$

$$F_1(\epsilon) = \mp \frac{2}{\zeta} \mp \frac{1}{\zeta^2} \left\{ \epsilon \ln \frac{(\epsilon \mp \zeta)^2 + \Gamma_m^2}{\epsilon^2 + \Gamma_m^2} - 2\Gamma_m \left[ \arctg \frac{\epsilon}{\Gamma_m} - \arctg \frac{\epsilon \mp \zeta}{\Gamma_m} \right] \right\} \quad (15)$$

$$F_2(\epsilon) = \frac{1}{\zeta^2} \left\{ \Gamma_m \ln \frac{(\epsilon \mp \zeta)^2 + (\Gamma_m)^2}{\epsilon^2 + (\Gamma_m)^2} + 2\epsilon \left[ \arctg \frac{\epsilon}{\Gamma_m} - \arctg \frac{\epsilon \mp \zeta}{\Gamma_m} \right] \right\} \quad (16)$$

将(7)式代入(12)、(13)式,得到有空穴情况的金属基底外延石墨烯的态密度随温度的变化.

### 5 空穴浓度和温度对外延石墨烯态密度的影响

首先研究石墨烯空穴浓度  $\alpha$  随温度的变化. 石墨烯形成一个空穴的能量(激活能)为  $w$ (它等于

内聚能),按文献[5],取  $w = 7.37 \text{ eV}$ ;而对于铜基底的外延石墨烯,形成一个空穴的能量(激活能),由(4)式经计算得到  $w = V_c = 1.3706 \text{ eV}$ . 将  $w$  和  $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$  代入式(5),分别得到石墨烯空穴浓度  $\alpha$  和铜基底的外延石墨烯的空穴浓度  $\alpha$  随温度的变化如图 1 所示:

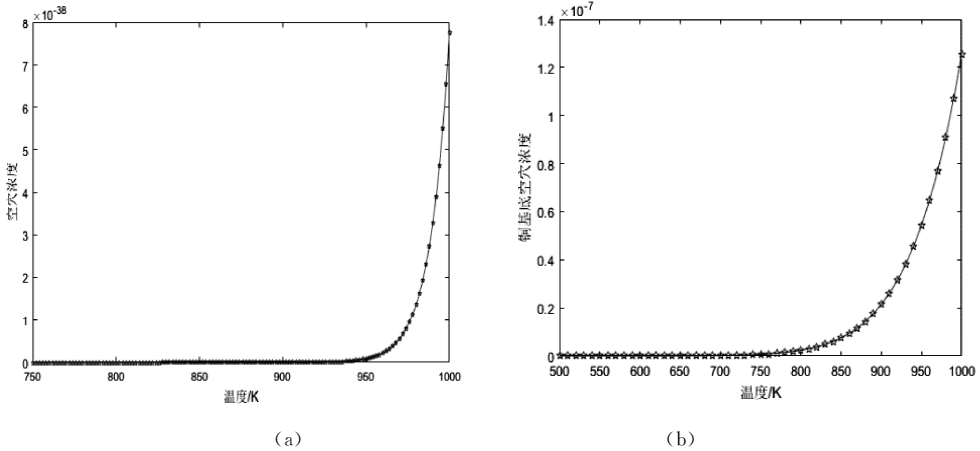


图 2 石墨烯(a)和铜基外延石墨烯(b)的空穴浓度  $\alpha$  随温度的变化

Fig. 2 Variation of hole concentration of graphene (a) and copper-based epitaxial graphene (b) with temperature

表 1 石墨烯和铜基外延石墨烯的空穴浓度  $\alpha$  随温度的变化

Tab. 1 Variation of hole concentrations of graphene and copper-based epitaxial graphene with temperature

T / K	700	750	800	850	900	950	1000
铜基石墨烯( $\times 10^{-7}$ )	0	0.063	0.236	0.760	0.215	0.544	1.255
石墨烯( $\times 10^{-38}$ )	0	0	0	0	0	0.086	7.76

由图 2 和表 1 可见,(1) 不论是石墨烯,还是铜基外延石墨烯,其空穴浓度均随温度升高而非线

性增大,其中,石墨烯当温度低于  $950 \text{ }^\circ\text{C}$  时,而铜基外延石墨烯当温度低于  $750 \text{ }^\circ\text{C}$  时,空穴浓度极小

(几乎趋于 0, 而此后, 空穴浓度随温度升高而急剧增大); (2) 与石墨烯的变化情况相比, 铜为基底的外延石墨烯空穴浓度随温度的变化情况要迅速增大. 例如: 在温度由 750~1000 K 范围内, 石墨烯的空穴浓度增大了  $7.76 \times 10^{-38}$ , 而铜基外延石墨烯空穴浓度增大了  $1.255 \times 10^{-7}$ .

现讨论铜基底外延石墨烯的态密度随电子能量的变化. 文献[9]给出铜的晶格常数  $a = 3.61 \text{ \AA}$ ,

电子质量  $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ , 普朗克常数  $\hbar = 1.0546 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ , 由  $\epsilon_m = \frac{3\hbar^2}{2m} (\frac{\pi}{a})^2$ 、 $\rho_{s0} = \frac{1}{\epsilon_m}$ 、 $\Gamma_m = \pi V_c^2 \rho_{s0}$ 、 $V_c = 1.3706 \text{ eV}$ , 求出  $\Gamma_m$ . 文献[12]已计算出  $\xi = 2.38 \text{ eV}$ , 将  $\Gamma_m$ 、 $\xi = 2.38 \text{ eV}$  代入(12)~(16)式, 取空穴浓度  $\alpha = 0.01$ , 得到铜为基底的外延石墨烯的态密度随电子能量的变化如图 3(a). 为了比较, 图 3(b)给出石墨烯的态密度曲线[6].

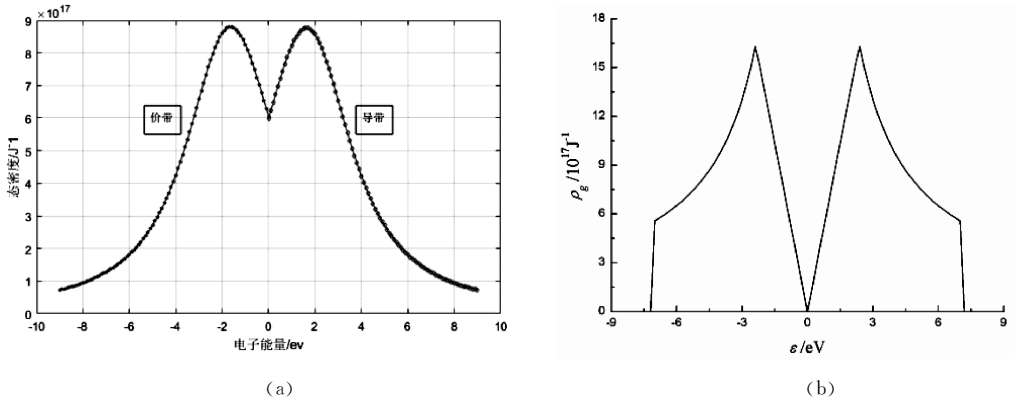


图 3 空穴浓度  $\alpha = 0.01$  时铜基底外延石墨烯态密度(a)和石墨烯的态密度(b)曲线

Fig. 3 The state density of copper-based epitaxial graphene (a) and graphene (b) at the hole density 0.01.

表 2 空穴浓度  $\alpha = 0.01$  时铜基底外延石墨烯态密度(a)和石墨烯的态密度(b)

Tab. 2 The state density of copper-based epitaxial graphene (a) and graphene (b) at the hole density 0.01

$\epsilon$ (eV)	-8	-6	-4	-2	0	2	4	6	8
铜基 $\rho_{\text{eg}} (\times 10^{17}) / \text{J}^{-1}$	9.44	1.82	4.25	8.60	5.99	8.57	4.23	1.81	9.41

由图 3 和表 2 可见: (1) 铜基的外延石墨烯导带 ( $\epsilon > 0$ ) 和价带 ( $\epsilon < 0$ ) 的态密度随电子能量的变化曲线, 相对于电子能量  $\epsilon = 0 \text{ eV}$  而言是对称的, 均随电子能量的增大而先增大后减小并逐渐趋近于 0; (2) 铜基外延石墨烯的态密度在电子能量为 0 时的值  $5.99 \times 10^{17} \text{ J}^{-1}$ , 远大于石墨烯的相应值 0; (3) 铜基外延石墨烯在电子能量为 1.6 eV 时, 态密度出现极大值  $8.767 \times 10^{17} \text{ J}^{-1}$ , 而相应的电子能量下, 石墨烯态密度极大值为  $17 \times 10^{17} \text{ J}^{-1}$  (见图 3(b)), 这表示: 在相应的电子能量下, 基底的存在会使石墨烯态密度极大值相应的能量(称为最可能能量)减小 48.5%, 原因在于金属基底与石墨烯之间存在相互作用, 从而使石墨烯态密度的极大值下降.

最后研究铜基外延石墨烯的态密度随空穴浓度  $\alpha$  和温度的变化. 取电子能量  $\epsilon = 1.19 \text{ eV}$ , 代入(14)~(16)式, 得到铜为基底的外延石墨烯的态密度随空穴浓度  $\alpha$  的变化如图 4.

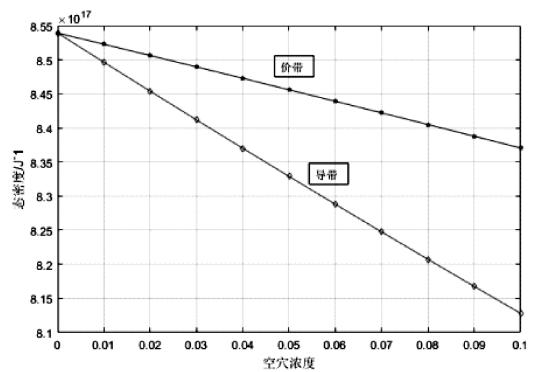


图 4 电子能量  $\epsilon = 1.19 \text{ eV}$  时铜基底外延石墨烯的态密度随空穴浓度  $\alpha$  的变化

Fig. 4 The variation of state density of copper-based epitaxial graphene with hole density at the electron energy 1.19 eV.

由图 4 和表 3 可见: 铜基底外延石墨烯导带态密度随空穴浓度  $\alpha$  的增大而线性减小, 在空穴浓度由 0 到 0.1 范围内, 态密度减小了 4.81%.

表 3 电子能量  $\epsilon = 1.19$  eV 时铜基底外延石墨烯的态密度随空穴浓度  $\alpha$  的变化

Tab.3 Variation of state density of copper-based epitaxial graphene with hole density at the electron energy 1.19 eV.

空穴浓度	0	0.02	0.04	0.06	0.08	0.1
铜基 $\rho_{eg}$ 导带	8.539	8.454	8.370	8.288	8.207	8.128
$(\times 10^{17})/J^{-1}$ 价带	8.539	8.506	8.473	8.439	8.405	8.371

取电子能量  $\epsilon = 1.19$  eV, 由(17)式得到铜基底外延石墨烯的态密度随温度的变化如图 5.

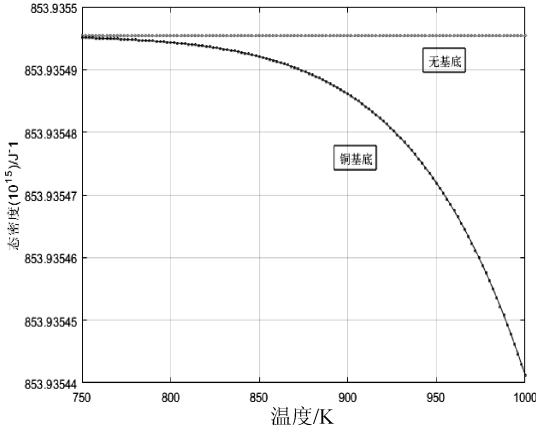


图 5 铜基外延石墨烯的态密度随温度的变化  
Fig.5 Variation of density of states of copper-based epitaxy graphene with temperature

表 4 铜基外延石墨烯的态密度随温度的变化

Tab.4 Variation of density of states of copper-based epitaxy graphene with temperature

T /K	700	750	800	850	900	950	1000
石墨烯( $\times 10^{15}$ )	853.935495	853.935495	853.935495	853.935495	853.935495	853.935495	853.935495
$\rho_{eg}$ 铜基石墨烯( $\times 10^{15}$ )	853.935495	853.935495	853.935494	853.935492	853.935486	853.935472	853.935441

参考文献:

[1] Castro A H, Guinea F, Peres N M R, *et al.* The electronic properties of graphene [J]. Rev Mod Phys, 2008, 81: 109.  
 [2] Wu Y H, Yu T, Shen Z X. Two-dimensional carbon nanostructures: fundamental properties, synthesis, characterization, and potential applications [J]. J Appl Phys, 2010, 108: 071301.  
 [3] 李杰, 杨文耀, 唐可, 等. 碱金属基底的吸附强弱对石墨烯态密度的影响 [J]. 电子元件与材料, 已接受.  
 [4] Davydov S Y. Vacancies in epitaxial grapheme [J].

由图 5 和表 4 可见: 给定电子能量情况下, 铜基底外延石墨烯的态密度随温度升高而非线性减小, 其中, 温度较低 (如  $T < 500$  K) 时变化较慢; 而温度高于 850 K, 则随温度升高而迅速减小.

6 结 论

上述研究表明: (1) 无论是石墨烯, 还是铜基底外延石墨烯, 其空穴浓度随温度升高而非线性增大, 其中, 铜基底外延石墨烯的空穴浓度随温度的变化率远大于石墨烯的相应值; (2) 石墨烯和铜基底外延石墨烯, 无论有无空穴, 其态密度随电子能量的变化曲线, 均对电子能量  $\epsilon = 0$  eV 而言为对称, 其中, 铜基外延石墨烯的态密度在  $\epsilon = 0$  eV 时的值要大于石墨烯的相应值; 基底的存在使石墨烯态密度极大值相应的电子能量 (称为最可几能量) 变小; (3) 铜基外延石墨烯的态密度随空穴浓度  $\alpha$  的增大和温度的升高而减小, 其中, 随空穴浓度  $\alpha$  的变化为线性, 而随温度的变化为非线性.

Semiconductors, 2015, 49: 1069.  
 [5] Davydov S Y. On the fermi velocity and static conductivity of epitaxial grapheme [J]. Phys Solid State+, 2014, 56: 849.  
 [6] Davydov S Y, Sabirova G I. Model of adsorption on grapheme [J]. Phys Solid State+, 2011, 53: 608.  
 [7] Alisultanov Z Z, Kamilov I K. Transport properties of epitaxial graphene formed on the surface of a metal [J]. Semiconductors, 2014, 56: 854.  
 [8] 龙晓霞, 外延石墨烯电导率随温度变化规律研究 [J]. 西南师范大学学报: 自然科学版, 已接受.  
 [9] 基泰尔, 著. 杨顺华, 等, 译. 固体物理导论 [M]. 北京: 科学出版社, 1979.