

原子非简谐振动对金属基外延 石墨烯电导率的影响^①

龙晓霞, 申凤娟

重庆市高校新型储能器件及应用工程研究中心, 重庆文理学院, 重庆 402160

摘要: 考虑到原子的非简谐振动和电子-声子相互作用, 建立了金属基外延石墨烯的微观物理模型, 用固体物理理论和方法, 研究了外延石墨烯电导率随温度的变化规律, 以 Cu, Ni 金属基底外延石墨烯为例, 探讨了基底材料和原子的非简谐振动对电导率的影响. 结果表明: ① 金属基外延石墨烯的电导率随温度升高而减小, 其中, 温度较低时, 变化较快, 而温度较高时则变化很慢; 它的电导率包括声子的贡献和电子的贡献两部分, 其中电子的贡献部分很小, 且随温度的变化也小, 而声子的贡献远大于电子且随温度变化较大. ② 基底材料和原子的非简谐振动对金属基外延石墨烯的电导率有重要的影响: 简谐近似下, 电导率随温度的变化较小, 考虑到非简谐振动, 电导率随温度的变化增大. 温度愈高, 非简谐效应愈显著. 理论结果与其他文献的值以及电学理论相近.

关键词: 金属基外延石墨烯; 电导率; 温度变化规律; 声子; 非简谐效应

中图分类号: TB34

文献标志码: A

文章编号: 1673-9868(2017)09-0118-07

石墨烯自 2010 年被发现以来, 由于它具有许多独特的物理化学性质和结构, 特别是它超强的导电性能, 使其在纳米电子器件、复合材料、催化剂载体、传感器和新能源等方面具有广泛的用途, 已成为当今国际研究的重要前沿之一, 并引起国内外广泛研究^[1-2]. 在石墨烯材料中, 由于外延石墨烯无论从制备还是应用上都更与现实接近, 因此, 外延石墨烯的制备和性能更引起了人们的注意. 文献[3-5] 分别对外延石墨烯的制备和性能进行了实验研究. 但目前采用的方法所制材料的性能、形貌受金属基底影响较大, 探寻一种易于制备且所制的外延石墨烯性能良好的工艺以及基底与性能的关系等是亟待解决的理论和实验问题, 为此, 文献[6-7]对这两方面作了一些初步研究.

导电性是外延石墨烯应用最广的最重要的性质之一, 目前已有一些文献对它的导电性进行了研究. 文献[8]从理论上研究了外延石墨烯的费米速度和电导率, 并对 K 和 Ca 基底的情况作了计算; 文献[9]论证了外延石墨烯费米速度与单层石墨烯中费米速度的关系; 文献[10] 设计了外延石墨烯电导率测量装置示意图, 并从理论上研究了金属基外延石墨烯的输运性质; 2015 年俄罗斯学者 ALISULTANOV Z Z 等人在文献[11]中, 研究了外延石墨烯电子电导率. 但这些研究均未涉及外延石墨烯电导率随温度的变化规律, 而且在研究中, 未考虑原子的振动(特别是非简谐振动)和电子-声子相互作用效应. 最近文献[12]研究了碱金属基底的外延石墨烯的电导率随温度的变化规律, 但未研究 Cu, Ni 基底的情况. 由于碱金属易挥发, 在

① 收稿日期: 2016-12-22

基金项目: 重庆市基础与前沿研究项目(cstc2015jcyjA40054).

作者简介: 龙晓霞(1965-), 女, 重庆永川人, 副教授, 主要从事凝聚态物理和物理教育研究.

其上制备外延石墨烯难以实现,研究 Cu, Ni 基底外延石墨烯将更有实际意义,而目前还未见探讨 Cu, Ni 基底外延石墨烯电导率随温度变化规律的报道. 鉴于 Cu, Ni 基外延石墨烯的电导率在电化学生物传感器的测试、纳米电子器件等方面的应用的重要性,本研究将建立金属基外延石墨烯的物理模型,用固体物理理论和方法,以 Cu, Ni 金属基外延石墨烯为例,探讨基底材料和原子的非简谐振动对外延石墨烯电导率随温度变化规律的影响.

1 外延石墨烯的物理模型和简谐系数以及非简谐系数

本文研究的系统是在平面状金属(如 Cu, Ni)基底上,生成由碳原子构成的理想二维六角形结构的单层石墨烯,其侧面和俯面分别见图 1(a)和(b).

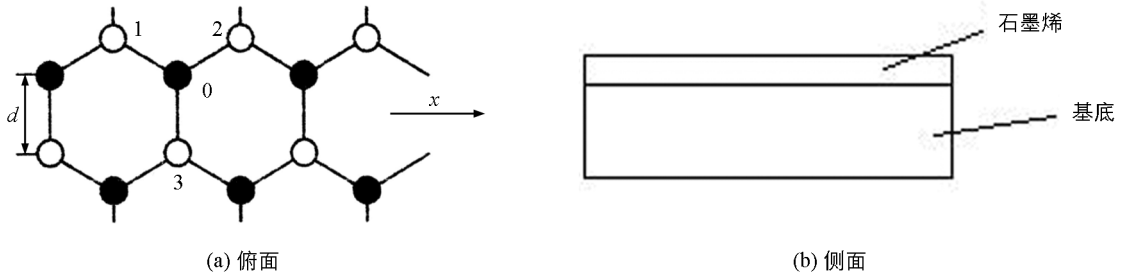


图 1 金属基外延石墨烯系统俯面和侧面

文献[9]在研究外延石墨烯的电导率时,认为碳原子静止,只有电子对电导率有贡献. 本研究认为:碳原子在石墨烯平面内在平衡位置附近作非简谐振动,不仅石墨烯碳原子间有相互作用,而且它与金属原子之间也有相互作用. 正是这些相互作用和原子的非简谐振动,外延石墨烯的电导率不仅有电子的贡献,而且有离子振动的贡献即声子的贡献.

金属与石墨烯原子之间的相互作用势与原子间距 r 的关系为^[13]

$$\phi(r) = \frac{g}{r} e^{r/r_0} \left[e^{-2n(r-r_0)/\lambda_D} - 2e^{-n(r-r_0)/\lambda_D} \right] \quad (1)$$

其中: n 为键强参数,按文献[13],取 $n=1$; g 为价电子结构有关的量,为简便起见,对碱金属取 $g=1$; r_0 为原子间最小距离,可取为 C 原子半径 r_{0C} 与金属离子半径 $r_{0m} = d - d_0$ 之和,即 $r_0 = r_{0C} + r_{0m}$; 而 λ_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 r'_0 满足

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

将(2)式代入(1)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 $V_m \approx \varphi(r'_0)$.

文献[14]考虑到原子短程相互作用,给出石墨烯一个原子的平均相互作用能为

$$\varphi = -V_2 \left[1 + \frac{9R}{V_2 d^{12}} + 5\beta_2 \left(\frac{V_1}{V_2} \right)^2 \right] \quad (3)$$

式中的 V_2 为两原子的 sp^2 轨道 σ 键的共价能,它与原子间距离 d 的平方成反比: $V_2 = 3.26 \frac{\hbar^2}{md^2} = \frac{B}{d^2}$, 这里: m 为自由电子的质量, V_1 为金属化能, $R = 0.154 \times 10^4 (\hbar^2/2m) a_0^{10}$, $a_0 = 4$ 为玻尔半径, $\beta_2 = \frac{2}{3}$.

因热振动,石墨烯碳原子要在平衡位置 d_0 附近作微振动,假设基底与石墨烯原子间相互作用不大,则振动情况主要由碳原子间相互作用决定. 将 $\varphi(d)$ 在平衡位置 d_0 附近展开,偏离 $\delta = d - d_0$ 很小时,有

$$\varphi(\delta) = \varphi(d_0) + \frac{1}{2} \epsilon_0 \delta^2 + \epsilon_1 \delta^3 + \epsilon_2 \delta^4 + \dots \quad (4)$$

将(3)代入(4)式,求得原子振动的简谐系数 ϵ_0 、第一和第二非简谐系数 ϵ_1, ϵ_2 , 其表示式见文献[15].

2 零温情况外延石墨烯的电导率

在零温情况, 原子振动很小, 振动被“冻结”在基态, 声子的贡献 $\sigma_p(T)$ 可忽略.

文献[10]采用格林函数法, 求出零温($T=0$ K)情况下, 外延石墨烯的电导率为

$$\sigma_e(0) = \frac{e^2}{\pi h} \left\{ \frac{\Gamma_{mF}^{02}}{b_m^{02} + \Gamma_{mF}^{02}} - \frac{\Gamma_{mF}^{02}}{2} \left[\frac{1}{(\xi + b_m^0)^2 + \Gamma_{mF}^{02}} + \frac{1}{(\xi - b_m^0)^2 + \Gamma_{mF}^{02}} \right] + \frac{\Gamma_{mF}^0}{2 |b_m^0|} B^0 \right\} \quad (5)$$

式中的 e 为电子电荷, 而 b_m^0, Γ_{mF}^0 和 B^0 分别为

$$\begin{aligned} b_m^0 &= \left[1 - N_m \left(\frac{V_m}{W_m} \right) \right] \epsilon_F^0 - \epsilon_D \\ \Gamma_{mF}^0 &= N_m \left(\frac{V_m}{W_m} \right)^2 \sqrt{W_m^2 - (\epsilon_F^0)^2} \\ B^0 &= \arctan \frac{\xi^2 + \Gamma_{mF}^{02} - b_m^{02}}{|b_m^0| \Gamma_{mF}^0} - \arctan \frac{\Gamma_{mF}^{02} - b_m^{02}}{|b_m^0| \Gamma_{mF}^0} \end{aligned} \quad (6)$$

式中: V_m 为石墨烯与金属原子的平均相互作用能($V_m \approx \varphi(r'_0)$), ϵ_F^0 是零温费米能, W_m 是金属导带半宽度, 在金属作为自由电子近似情况下, 与晶格常数 a 和电子的质量 m 的关系为

$$W_m = \frac{3h^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 \quad (7)$$

式中: h 为普朗克常数, N_m 是金属导带可容纳的电子数, 对 Cu 和 Ni 取 $N_m = 4$.

3 外延石墨烯的电导率随温度的变化

非零温情况下, 外延石墨烯电导率 $\sigma(T) = \sigma_e(T) + \sigma_p(T)$. 文献[9]研究外延石墨烯电导率时, 认为碳原子静止, 未考虑到声子的贡献, 且研究电子电导率时, 将费米能作为常量, 这里既考虑到声子的贡献, 又考虑到费米能随温度的变化.

3.1 电子贡献的电导率随温度的变化

文献[16]给出费米能与温度的关系为

$$\epsilon_F(T) = \epsilon_F^0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F^0} \right)^2 \right] \quad (8)$$

式中: k_B 是玻尔兹曼常数. 考虑到电子费米能随温度的变化后, 电子电导率为

$$\sigma_e(T) = \frac{e^2}{\pi h} \left\{ \frac{\Gamma_{mF}^2}{b_m^2 + \Gamma_{mF}^2} - \frac{\Gamma_{mF}^2}{2} \left[\frac{1}{(\xi + b_m)^2 + \Gamma_{mF}^2} + \frac{1}{(\xi - b_m)^2 + \Gamma_{mF}^2} \right] + \frac{\Gamma_{mF}}{2 |b_m|} B \right\} \quad (9)$$

而 b_m, Γ_{mF}, B 分别为

$$\begin{aligned} \Gamma_{mF} &= N_m \left(\frac{V_m}{W_m} \right)^2 \sqrt{W_m^2 - [\epsilon_F(T)]^2} \\ B &= \arctan \frac{\xi^2 + \Gamma_{mF}^2 - b_m^2}{|b_m| \Gamma_{mF}} - \arctan \frac{\Gamma_{mF}^2 - b_m^2}{|b_m| \Gamma_{mF}} \\ b_m &= \left[1 - N_m \left(\frac{V_m}{W_m} \right) \right] \epsilon_F(T) - \epsilon_D \end{aligned} \quad (10)$$

3.2 声子贡献的电导率随温度的变化

声子对外延石墨烯电导率的贡献, 既来源于石墨烯碳原子相互作用, 又来源于石墨烯碳原子与基底原

子的相互作用,但因后者的相互作用不大,则主要由石墨烯碳原子间相互作用决定.文献[17]应用固体理论,得到声子电导率 $\sigma_p(T)$,非低温情况下为

$$\sigma_p(T)=\frac{8ne^2M\hbar}{3\pi m^{*2}c^2}\left(\frac{k_F}{q_m}\right)^3k_B\theta_D\left(\frac{\theta_D}{T}\right)\tag{11}$$

低温情况下为

$$\sigma_p(T)=\frac{ne^2M\hbar k_F^3}{74\pi m^{*2}c^2q_m^3}k_B\theta_D\left(\frac{\theta_D}{T}\right)^5\tag{12}$$

式中: M 为碳原子质量; m^* 为电子有效质量; k_F 为电子费米波矢; $c=-2\epsilon_F/3$,这里 ϵ_F 为费米能; q_m 是声子的最大波矢,它与石墨烯原胞面积 Ω 关系为 $q_m=(4\pi/\Omega)^{1/2}$; n 为自由电子数面密度; θ_D 为德拜温度,

简谐近似下为 $\theta_D^0=\left(\frac{\hbar}{k_B}\right)\left(\frac{8\epsilon_0}{3M}\right)^{\frac{1}{2}}$,考虑到原子非简谐振动后,为^[12]

$$\theta_D=\theta_{D0}\left[1+\left(\frac{15\epsilon_1^2}{2\epsilon_0^3}-\frac{2\epsilon_2}{\epsilon_0^2}\right)k_BT\right]\tag{13}$$

分别将(13)式代入(11)和(12)式,得到声子电导率随温度 T 的变化关系.

4 非简谐振动对外延石墨烯导电率的影响

现在在Cu,Ni金属基外延石墨烯为例,研究原子非简谐振动对电导率的影响.文献[18]给出Cu,Ni的点阵常数 a ,将它代入(7)式求得 W_m .由(1)式,求得 $V_m\approx\varphi(r_o')$,数据见表1.另外,按文献[19],取 $\xi=2.38$ eV,Cu和Ni一个原胞相应的导带可容纳的电子数 $N_m=4$.文献[10]给出 Ω .由石墨烯碳原子间距离 $d_o=1.42\times10^{-10}$ m和文献[19]给出的 $t=2.8$ eV,求得费米速度 $v_F=0.904\ 493\times10^6$ m/s和 $\epsilon_F^0=\frac{mv_F^2}{2}=2.303\ 4$ eV.将上述数据代入(5)和(6)式,求得外延石墨烯的零温电导率 $\sigma_m(0)$,结果见表1;将数据代入(9)式,得到石墨烯电子费米能随温度的变化(图2(a)),代入(10)、(11)式,得到电子电导率 $\sigma_e(T)$ 随温度的变化(图2(b)).

表 1 a,W_m,V_m 以及 $\sigma_m(0)$ 随碱金属元素的变化

元素	$a/(\times10^{-10}\text{ m})$	V_m/eV	V_m/eV	$\sigma_e(0)/(\times10^{-5}\Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1})$
Cu	3.61	8.720 5	1.370 6	3.716 95
Ni	3.52	9.121 3	1.392 8	3.203 93

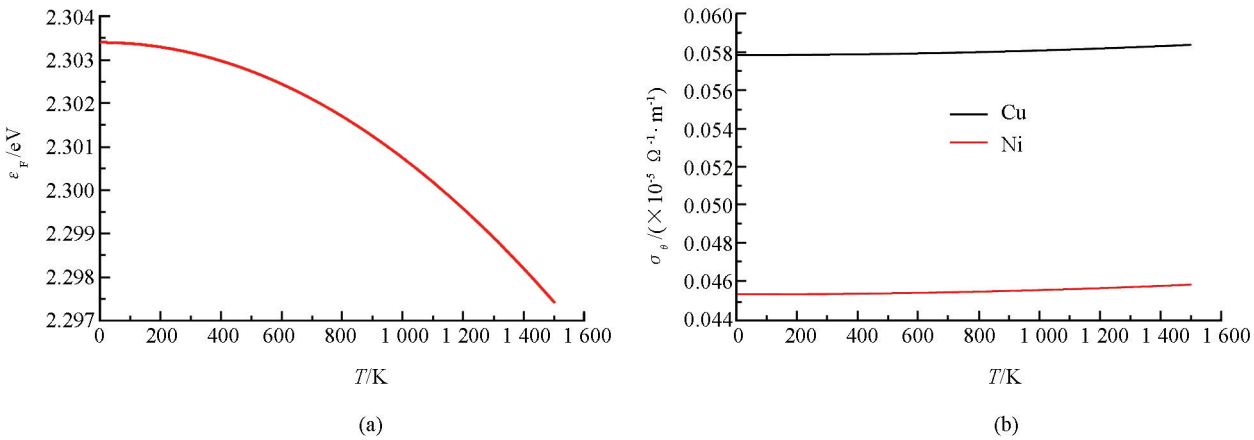


图 2 石墨烯电子费米能和电子电导率随温度的变化

由图2看出:①石墨烯电子的费米能随着温度的升高而减小,但变化很小,温度从 $T=300\text{ K}$ 升高到 $T=1\,300\text{ K}$ 时,费米能只减小 1.8% ;②金属基外延石墨烯的零温电导率 $\sigma_e(0)$ 随原子序数增大而增大.原因在于:金属基底原子序数增大时,导带半宽度 W_m 因晶格常数 a 变大而变小,金属与石墨烯碳原子相互作用能 V_m 也变小,基底对石墨烯中电子的约束减弱,因而电导率变大;③电子电导率随温度升高而增大,但变化极小,其数量级为 $10^{-5}\ \Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$,这与纯石墨烯电子贡献的电导率有区别.原因在于:金属基外延石墨烯电子电导率 σ_e 除受石墨烯原子影响外,还受到基底原子相互作用能 V_m 的影响;④外延石墨烯电子电导率随温度的变化情况与基底材料有关,在Cu、Ni这2种元素中,以Cu为基底的外延石墨烯电导率随温度的变化较大.

文献[15]已应用(4)式求得 $\epsilon_0=3.538\,8\times 10^2\text{ J/m}^2$, $\epsilon_1=-3.497\,25\times 10^{12}\text{ J/m}^3$, $\epsilon_2=3.201\,40\times 10^{22}\text{ J/m}^4$.又碳原子质量 $M=1.995\,017\times 10^{-26}\text{ kg}$,将它与 $k_B=1.38\times 10^{-23}\text{ J/K}$, $\hbar=1.055\times 10^{-34}\text{ J}\cdot\text{s}$ 等数据代入(13),求得 $\theta_{D0}=1\,660.02\text{ K}$.石墨烯碳原子间距离 $d_0=1.42\times 10^{-10}\text{ m}$,求得 $\Omega=1.746\,25\times 10^{-20}\text{ m}^2$, $q_m=2.681\,99\times 10^{10}\text{ m}^{-1}$, $k_F=1.896\,38\times 10^{10}\text{ m}^{-1}$.由前面求的 ϵ_F^0 ,求得 $c=-\frac{2\epsilon_F}{3}=-1.535\,6\text{ eV}$.将这些数据代入(11)和(12)式,求得外延石墨烯的声子电导率随温度的变化,结果见图3.图3中的曲线a、b和c分别为简谐近似、只考虑到第一非简谐项及同时考虑到第一和第二非简谐项的结果.

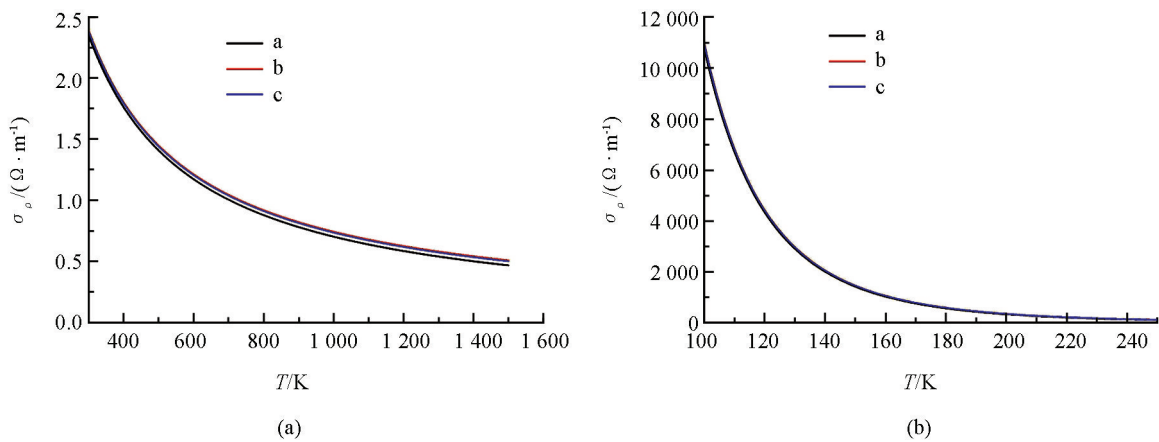


图3 非低温和低温情况外延石墨烯的声子电导率随温度的变化

由图3看出:①外延石墨烯的声子电导率随温度升高而减小,其中,非低温($T>300\text{ K}$)时变化较慢,而低温($T<250\text{ K}$)时,变化很快;②简谐近似时,电导率几乎与温度为反比关系.考虑到原子的非简谐振动项后,电导率要比简谐近似的值稍大,而且,温度愈高,非简谐效应愈明显;③声子电导率远大于电子,外延石墨烯的总电导率近似等于声子电导率,即 $\sigma\approx\sigma_p$;④与金属块体相比,金属基外延石墨烯的电导率比金属块体要几乎大一个数量级.例如块体Cu的电导率为 $0.343\ \Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$,而Cu基外延石墨烯的 $\sigma=2.394\,429\ \Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$;⑤本文结果与文献[20]的结果接近,例如: $T=295\text{ K}$ 时,本文值为 $\sigma=2.394\,429\ \Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$,与文献[20]的值 $\sigma_p=2.230\ \Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$ 的误差仅为 7.37% .此外,本研究得到的外延石墨烯电导率几乎与温度为反比的结论,与电学理论中宏观金属块体的电导率变化规律接近;⑥基底对外延石墨烯电导率有一定的影响.在Cu和Ni两种基底中,Cu基底的电导率较大,原因在于:Cu基底金属原子与石墨烯碳原子相互作用能 V_m 较小,基底对石墨烯中电子的约束减弱,因而外延石墨烯的电导率变大.

5 结 论

本文对金属基外延石墨烯电导率变化规律的研究结果表明:①零温情况下,金属基外延石墨烯的电导

率均为常数,其值与基底元素的原子序数有关,随基底元素原子序数的增大而增大;而非零温情况下,金属基外延石墨烯的电导率均随温度变化而变化.其变化情况既取决于基底元素的性质,又取决于石墨烯和基底元素原子相互作用能的大小,具体关系由(9)–(13)等式表示;② 金属基外延石墨烯电导率随温度升高而减小,其中,温度较低时($T < 300\text{ K}$)时,变化较快,而温度较高时则变化很慢.它的电导率包括声子的贡献和电子的贡献两部分,其中电子的贡献很小且随温度的变化也很小,声子贡献的电导率远大于电子且随温度变化较大;③ 原子的非简谐振动有重要的影响:简谐近似下,电导率随温度升高而减小,几乎成反比关系.考虑到原子非简谐项后,电导率随温度升高而减小的变化速度减慢.温度愈高,原子振动非简谐效应愈明显.

参考文献:

- [1] Давыдов С Ю. Простой Модельный Потенциал Для Описания Упругих Свойств Однослойного Графена [J]. Физика Твёрдого Тела, 2013, 55(4): 813–815.
- [2] 田 文,袁鹏飞,禹卓良,等. 掺杂六角形石墨烯电子输运特性的研究 [J]. 物理学报, 2015, 64(4): 046102–1–046102–8.
- [3] TETLOW H, POSTHUMA de BOER J, FORD I J, et al. Growth of Epitaxial Graphene; Theory and Experiment [J]. Physics Reports, 2014, 542(3): 195–295.
- [4] 蔚 翠,李 佳,刘庆彬,等. Si 面 4H-SiC 衬底上外延石墨烯近平衡态制备 [J]. 物理学报, 2014, 63(3): 038102–1–038102–6.
- [5] WANG R, HAO Y, WANG Z, et al. Large-Diameter Graphene Nanotubes Synthesized Using Ni Nanowire Templates [J]. Nano Lett, 2010, 10(12): 4844–4850.
- [6] GRÜNEIS A. Synthesis and Electronic Properties of Chemically Functionalized Graphene on Metal Surfaces [J]. J Phys Condens Matter, 2013, 25(4): 043001–1–043001–14.
- [7] Давыдов С Ю. Переход Заряда В Системе Эпитаксиальный Графен-Металлический Субстрат. Письма В ЖТФ, 2011, 37(10): 64–67.
- [8] Давыдов С Ю. О скорости Ферми и Статической Проводимости Эпитаксиального Графена. Физика Твёрдого Тела, 2014, 56(4): 816–820.
- [9] Алисултанов З З. О Перенормировке Скорости Ферми в Эпитаксиальном Графене. Письма В ЖТФ, 2013, 39(13): 32–38.
- [10] Алисултанов З З. Камилов И К. Транспортные Свойства Эпитаксиального Графена, Сформированного На Поверхности Металла. Физика Твёрдого Тела, 2014, 56(4): 821–830.
- [11] Алисултанов З З. Мирзегасанова Н А. Термоэлектрический Транспорт в Эпитаксиальном Графене На Размерно-квантованной Пленке. Физика и Техника Полупроводников, 2015, 49(8): 1088–1094.
- [12] 杜一帅,康 维,郑瑞伦. 外延石墨烯电导率和费米速度随温度变化规律研究 [J]. 物理学报, 2017, 66(1): 203–211.
- [13] 万纾民. 固体中原子间相互作用势函数与碱金属、碱土金属金属弹性的电子理论 [J]. 中国科学(A 辑), 1987(2): 170–178.
- [14] DAVYDOV S Y. Energy of Substitution of Atoms in the Epitaxial Graphene-Buffer Layer-SiC Substrate System [J]. Physics of Solid State, 2012, 54(4): 875–882.
- [15] 程正富,郑瑞伦. 非简谐振动对石墨烯杨氏模量与声子频率的影响 [J]. 物理学报, 2016, 65(10): 104701–1–104701–8.
- [16] 黄 昆,韩汝琦. 固体物理学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2001: 276–282.
- [17] 郑瑞伦,胡先权,杨国祥. 固体理论及其应用 [M]. 重庆: 西南师范大学出版社, 1996: 267–271.
- [18] С 基特尔. 固体物理导论 [M]. 杨顺华,等译. 北京: 科学出版社, 1979: 189.
- [19] DAVYDOV S Y. Adsorption Monolayer Graphene State Density of Energy Gap [J]. Physics and Semiconductor Technol-

ogy, 2012, 46(2): 204–209.

- [20] YU X X, ZHOU Y, LIU J, et al. Structures and Electrical Properties of Pure and Vacancy-Included ZnO NWs of Different Sizes [J]. Chinese Physics B, 2015, 24(12): 127307–1–127307–5.

The Effect of Atom Anharmonic Vibration on the Conductivity of Metal Matrix Epitaxial Graphene

LONG Xiao-xia, SHEN Feng-juan

Engineering Research Center of New Energy Storage Devices and Applications for universities in Chongqing, Chongqing University of Arts and Sciences, Chongqing 402160, China

Abstract: Based on a review of the characteristics, preparation methods and applications of graphene materials in pervious studies, we intend to do some improvement over Russian scholar Z. Z. Alisultanov's design of the graphene conductivity measurement device. Considering the non-harmonic vibration and atomic electron-phonon interaction, with the theories and methods of the physics of solids, we plan to establish a metal matrix extension graphene micro-physical model and study the change of epitaxial graphene conductivity with temperature. With Cu- and Ni-based extension graphene as an example, we discuss the influence of the basal material and of non-harmonic vibration of the atoms on the conductivity. The electrical conductivity of the metal matrix extension of graphene decreases with increasing temperature, being relatively fast with lower temperature and rather slow with higher temperature. The contribution of electrons to conductivity is small, with little change with temperature, while that of photons is much greater, with considerably large change with temperature. The non-harmonic vibration of the basal material and the atoms has important effects on the metal matrix extension of graphene's electrical conductivity. With similar harmonic vibration, the change in conductivity with temperature is small. Considering the non-harmonic vibration, the conductivity and the anharmonic effect increase with increasing temperature. The results of this study are similar to the data in other documents and consistent with the electrical theory.

Key words: metal matrix epitaxial graphene; electrical conductivity; temperature variation regularity; phonon; anharmonicity

责任编辑 潘春燕

