

DOI:10.13718/j.cnki.xsxb.2017.03.005

吸附对外延石墨烯态密度和能隙的影响^①

高一文¹, 周虹君²

1. 重庆文理学院 教学部, 重庆 永川 402160; 2. 重庆文理学院 电子电气工程学院, 重庆 永川 402160

摘要: 利用抛物型电子能谱模型, 求出了半导体基底的态密度和半导体基底上形成的外延石墨烯的态密度, 并与理想单层石墨烯的态密度相比较, 分析外延石墨烯态密度特点和能隙产生的条件. 以 Si 基底上形成的外延石墨烯为例, 论述了外延石墨烯态密度按能量分布的特点和吸附对外延石墨烯态密度和能隙的影响. 结果表明: ①外延石墨烯的局域态密度曲线与理想单层石墨烯和基底的态密度曲线不同, 它不具有对零能量的左右对称性; ②吸附不仅使理想单层石墨烯和半导体基底的态密度曲线对零能量的左右对称性受到破坏, 而且改变了石墨烯的能隙宽度; ③外延石墨烯的能隙宽度随着半导体基底与石墨烯相互作用能的增大而增大, 但变化较小.

关键词: 外延石墨烯; 半导体基底; 态密度; 能隙; 吸附

中图分类号: O481

文献标志码: A

文章编号: 1000-5471(2017)03-0027-07

单层石墨烯具有在室温下离子高导电性等特点, 但用石墨烯来制造某种器件, 必须有接触点或附在某种基片上, 这种附在基片上的石墨烯(或石墨烯与基底相结合, 或在基底上形成石墨烯), 称为外延石墨烯. 研究与金属或半导体接触的外延石墨烯的性质, 例如: 外延石墨烯薄片的密度怎样影响薄片在基底上的形成和吸附原子的状态, 传感器仪器构件接触点的性质与单层石墨烯的功能间的关系, 都是人们正在探索的重要问题. 目前国内外学者已对理想情况的石墨烯(即单层石墨烯)的性质进行了不少研究, 但对外延石墨烯的研究还较少^[1-6]. 文献[7]对在 Si 面 4H-SiC 衬底上用近平衡法制备的外延石墨烯进行了研究, 文献[8-9]用模拟方法研究了吸附在半导体基底上的石墨烯能谱中出现能隙的条件, 但未对吸附在具体半导体基底上的外延石墨烯的能隙作具体计算, 更未分析石墨烯与基底吸附的强弱对外延石墨烯的态密度和能隙的影响. 本研究将在文献[8]的理论基础上, 分别利用 Davydov 石墨烯模型和半导体抛物型电子谱模型, 研究理想单层石墨烯和半导体基底以及在半导体基底上形成的外延石墨烯态密度的特点, 分析产生能隙的条件, 以 Si 基底上形成的外延石墨烯为例, 探讨吸附对外延石墨烯态密度和能隙的影响.

1 物理模型

本研究的石墨烯系统是由在平面状半导体(如硅)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构成, 其侧面和俯面见图 1.

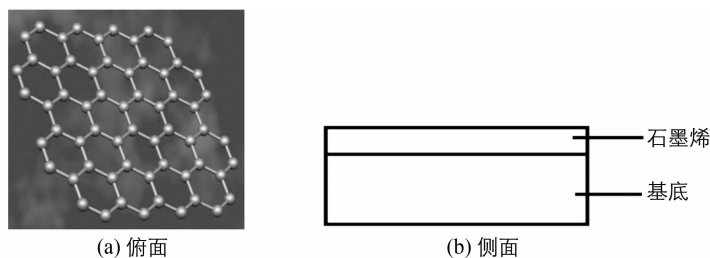


图 1 半导体基底上的外延石墨烯系统俯面和侧面

① 收稿日期: 2015-11-25

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

作者简介: 高一文(1981-), 男, 重庆合川人, 硕士, 讲师, 主要从事数学建模及应用.

设在单层石墨烯中,最近邻碳原子间距离为 a ,而半导体基底的原胞体积为 Ω ,在导带(c)和价带(v)中,电子的有效质量分别为 m_c 和 m_v ,导带、价带和禁带的宽度分别为 W_c, W_v, E_g . 电子的能量与波矢的关系(色散关系)为具有抛物型色散关系. 取禁带中心的能量为 0, 半导体基底电子能量的色散关系可写为:

$$\epsilon(k) = \begin{cases} \frac{1}{2}E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} & \text{导带} \\ \frac{1}{2}E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} & \text{价带} \end{cases} \quad (1)$$

Si 的能带结构示意图见图 2.

石墨烯的电子哈密顿遵从达维多夫(S Yu Davydov)模型^[10],可写为

$$H = \sum_{ks} \epsilon_k C_{ks}^+ C_{ks} + \sum_{a\delta} \epsilon_a a_{\delta}^+ a_{\delta} + U a_{\uparrow}^+ a_{\uparrow} a_{\downarrow}^+ a_{\downarrow} + \frac{1}{N} \sum_{ka} (V_{ks} C_{ks}^+ a_{\delta} + V_{ka}^* C_{ks} a_{\delta}^+)$$

其中, ϵ_a 等各量的意义见文献[10].

2 基底和石墨烯的局域态密度

文献[10]给出石墨烯的态密度为:

$$\begin{aligned} \rho_0(\epsilon) &= \frac{-2}{[1 + 2\ln(\frac{D}{\Delta})]\epsilon} & -\frac{D}{2} < \epsilon < -\frac{\Delta}{2} \\ \rho_0(\epsilon) &= \frac{8|\epsilon|}{[1 + 2\ln(\frac{D}{\Delta})]\Delta^2} & -\frac{\Delta}{2} < \epsilon < \frac{\Delta}{2} \\ \rho_0(\epsilon) &= \frac{2}{[1 + 2\ln(\frac{D}{\Delta})]\epsilon} & \frac{\Delta}{2} < \epsilon < \frac{D}{2} \\ \rho_0(\epsilon) &= 0 & |\epsilon| > \frac{D}{2} \end{aligned} \quad (2)$$

其中: Δ 为能隙宽度, D 为能带宽度.

利用电子能量与态密度的关系式,可由(1)式求得半导体基底电子的能量态密度为^[5]

$$\rho_s(\epsilon) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}m_c^{3/2}\Omega}{\pi h^3} \sqrt{\epsilon - \frac{1}{2}E_g} & \frac{1}{2}E_g < \epsilon < W_c + \frac{1}{2}E_g \\ \frac{\sqrt{2}m_v^{3/2}\Omega}{\pi h^3} \sqrt{-\epsilon - \frac{1}{2}E_g} & (-W_v - \frac{1}{2}E_g) < \epsilon < -\frac{1}{2}E_g \\ 0 & |\epsilon| > W_{c,v} + \frac{1}{2}E_g \end{cases} \quad (3)$$

设基底中总电子数为 N , 则态密度 $\rho_s(\epsilon)$ 满足条件:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_s(\epsilon) d\epsilon = N \quad (4)$$

由电子能量与态密度的关系式,可由(2)式求得单层外延石墨烯的局域态密度为^[9-10]

$$\begin{aligned} \rho_g(\epsilon) &= \frac{1}{\pi \zeta^2} \left\{ \Gamma(\epsilon) \ln \frac{[\epsilon - \Lambda(\epsilon) \mp \zeta]^2 + \Gamma^2(\epsilon)}{[\epsilon - \Lambda(\epsilon)]^2 + \Gamma^2(\epsilon)} + 2[\epsilon - \Lambda(\epsilon)] \right. \\ &\quad \left. \left[\arctan \frac{\epsilon - \Lambda(\epsilon)}{\Gamma(\epsilon)} - \arctan \frac{\epsilon - \Lambda(\epsilon) \mp \zeta}{\Gamma(\epsilon)} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5)$$

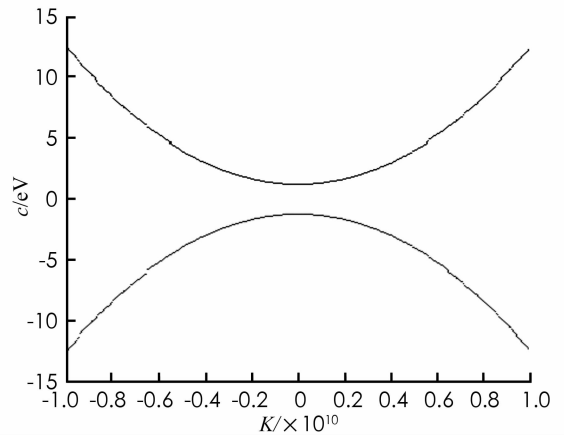


图 2 Si 的能带结构示意图

式中: $\Lambda(\epsilon)$ 为能级移动函数, $\Gamma(\epsilon)$ 为能级展宽, 它们与基底电子能量态密度 $\rho_s(\epsilon)$ 关系为

$$\Gamma(\epsilon) = \pi V^2 \rho_s(\epsilon), \Lambda(\epsilon) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(\epsilon') d\epsilon'}{\epsilon - \epsilon'} \quad (6)$$

式中的 P 代表取主值. (5) 式中取“—”号时, 对应石墨烯的 π^* 带, $\epsilon > \Lambda(\epsilon)$; 而取“+”号时, 对应石墨烯的 π 带, $\epsilon < \Lambda(\epsilon)$. 而 $\zeta = \frac{1}{2} 3taq_B$, 这里 q_B 是切断矢量, a 是石墨烯中最近邻原子之间的距离, t 是最近邻格点之间跃迁的能量积分, 按文献[9], $t = 2.8 \text{ eV}$.

3 外延石墨烯能隙产生的条件

为了确定外延石墨烯能隙产生的条件, 需要找出能级移动函数 $\Lambda(\epsilon)$ 的具体表示式. 为简便, 假定价带 (v) 和导带 (c) 的电子有效质量相等 (即 $m_c = m_v = m$), 导带和价带宽度相等 (即 $W_c = W_v = W$), 将 (3) 式代入 (6) 式, 积分后可得到:

$$\Lambda(\epsilon) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2} m^{3/2} \Omega V^2}{\pi^2 \hbar^3} [F_-(\epsilon) - L_-(\epsilon)] & \epsilon < -\frac{1}{2} E_g \\ \frac{\sqrt{2} m^{3/2} \Omega V^2}{\pi^2 \hbar^3} [F_-(\epsilon) - F_+(\epsilon)] & -\frac{1}{2} E_g < \epsilon < \frac{1}{2} E_g \\ \frac{\sqrt{2} m^{3/2} \Omega V^2}{\pi^2 \hbar^3} [-F_+(\epsilon) + L_+(\epsilon)] & \epsilon > \frac{1}{2} E_g \end{cases} \quad (7)$$

这里,

$$F_{\pm}(\epsilon) = 2 \sqrt{\pm \epsilon + \frac{1}{2} E_g} \arctan \frac{\sqrt{W}}{\sqrt{\pm \epsilon + \frac{1}{2} E_g}}$$

$$L_{\pm}(\epsilon) = \sqrt{\pm \epsilon - \frac{1}{2} E_g} \ln \left| \frac{\sqrt{\pm \epsilon - \frac{1}{2} E_g} + \sqrt{W}}{\sqrt{\pm \epsilon - \frac{1}{2} E_g} - \sqrt{W}} \right| \quad (8)$$

由 (5) 式可证明: 当 ϵ 满足条件

$$|\epsilon - \epsilon_a - \Lambda(\epsilon)| > \zeta \quad (9)$$

时, 外延石墨烯的局域态密度 $\rho_g(\epsilon) = 0$, 即这种电子在这种能量范围的状态不存在, 此电子能量范围叫能隙 (即禁带). 因此, 外延石墨烯电子出现能隙的条件由 (9) 式决定.

对 $\epsilon_a = 0$ 情况, 石墨烯的布里渊区的狄拉克点与禁带中心重合, 条件 (9) 变为

$$|\epsilon - \Lambda(\epsilon)| > \zeta \quad (10)$$

为了确定此时的能隙, 较方便的是采用作图法来确定满足条件 (10) 的能量范围 (即能隙宽度 E_g).

4 Si 基底的外延石墨烯的态密度和能隙

4.1 单层石墨烯和 Si 基底以及外延石墨烯态密度的特点

文献[10] 给出理想单层石墨烯的能带宽度为: $D = 6.135 \text{ eV}$, $\Delta = 2.046 \text{ eV}$. 文献[11] 给出: Si 的禁带宽度为 $E_g = 2.36 \text{ eV}$, 导带和价带宽度相等 (即 $W_c = W_v = W$), 取 $W = \frac{\hbar^2 k_c^2}{2m}$, $k_c = \frac{2\pi}{a}$, $m_c = 0.16 m_0$, $m_v = 0.52 m_0$, m_0 是自由电子的质量 ($m_0 = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$); 硅为面心立方结构^[12], 晶格常数为 $a_0 = 5.43 \times 10^{-10} \text{ m}$, 由此求得原胞体积 $\Omega = \frac{a_0^3}{4}$. $\xi = \frac{3}{2} taq_B$, 切断矢量 $q_B = 5.41 \times 10^{27} \text{ m}^{-1}$, 石墨烯中最近邻原子之间的距离 $a = 1.42 \times 10^{-10} \text{ m}$, 按文献[13], 最近邻格点之间跃迁的能量积分 $t = 2.8 \text{ eV}$, 由此求得 $\xi = 2.38 \text{ eV}$. 文献[13] 给出石墨烯碳原子与基底原子相互作用平均能量 $V = 6.40 \text{ eV}$, 又普朗克常数 $\hbar =$

$1.055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. 将这些数据代入(2)式和(3)式,得到理想单层石墨烯态密度的变化曲线(图 3(a)) 和 Si 基底的态密度变化曲线(图 3(b)); 代入(5)式,得到外延石墨烯的态密度曲线(图 4).

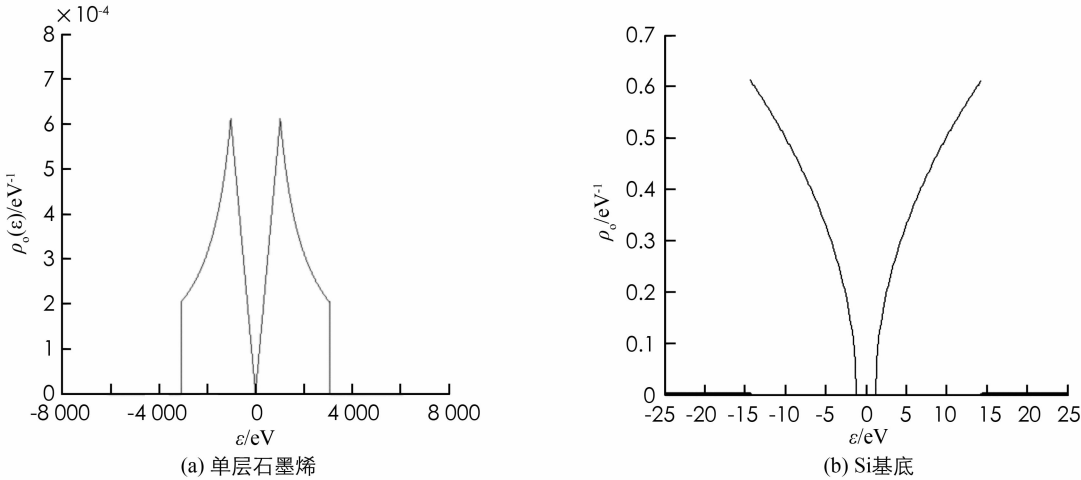


图 3 单层石墨烯和 Si 基底的态密度曲线

由图 3 看出: 理想单层石墨烯和 Si 基底的态密度曲线都具有对零能的左右对称性, 且电子按能量的分布都不是均匀的; 但两种态密度的变化情况不同, 理想单层石墨烯的能隙宽度为零, 能带宽度 $D = 6\,135 \text{ eV}$, 态密度的最大值在能量为 -938 eV 和 938 eV 附近, 其中, 电子能量在 $-3\,200 \sim 0 \text{ eV}$ 的范围内, 态密度随着能量的增大而增大; 而电子能量在 $0 \sim 3\,200 \text{ eV}$ 的范围内, 态密度随着能量的增大而减小. Si 基底的态密度在能量为 $-1 \sim 1 \text{ eV}$ 的范围内为零, 能隙宽度为 $E_g = 2.75 \text{ eV}$, 态密度的最大值在能量为 (-14 eV) 和 (14 eV) 附近; 电子能量在 $-14 \sim -1 \text{ eV}$ 的范围内, 态密度随着能量的增大而减小; 电子能量在 $1 \sim 14 \text{ eV}$ 的范围内, 态密度随着能量的增大而增大.

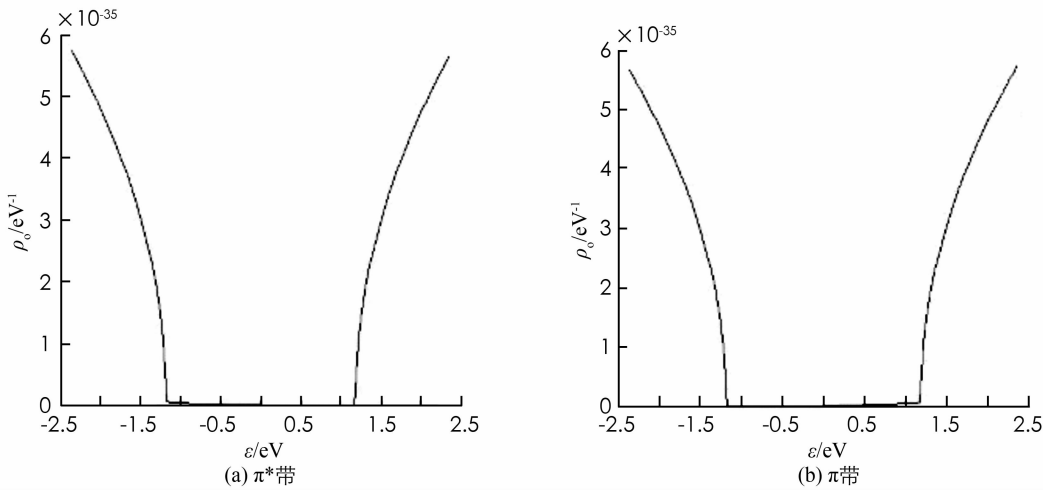


图 4 外延石墨烯的 π^* 带和 π 带电子的局域态密度曲线

由图 4 看出: 在 Si 基底上形成的外延石墨烯的局域态密度曲线已表现出与理想单层石墨烯和 Si 基底态密度曲线不同的性质, 即曲线不具有对称性. 对 π^* 带电子(图 4(a)), 能量在 $-2.4 \sim -1.3 \text{ eV}$ 范围内, 随着能量的增大而迅速减小; 而能量在 $-1.3 \sim 0 \text{ eV}$ 范围内, 态密度随着能量的增大而非常缓慢地减小, 而能量在 $1.2 \sim 2.4 \text{ eV}$ 范围内, 态密度随着能量的增大而迅速增大. 对 π 带电子(图(b)), 能量在 $-2.4 \sim -1.3 \text{ eV}$ 范围内, 随着能量的增大而迅速减小; 而能量在 $0 \sim 1.2 \text{ eV}$ 范围内, 态密度随着能量的增大而非常缓慢地增大, 而能量在 $1.2 \sim 2.4 \text{ eV}$ 范围内, 态密度随着能量的增大而迅速增大.

4.2 Si 基底外延石墨烯的能隙

图5的曲线1给出了电子能量 ϵ 与能级移动函数 $\Lambda(\epsilon)$ 的差的绝对值 $|\epsilon - \Lambda(\epsilon)|$ 随电子能量 ϵ 的变化曲线, 同时还给出 $\epsilon = \xi = 2.38$ eV的曲线2. 由图5看出, 能量在 $-2.3 \sim -0.4$ eV和 $0.4 \sim 2.3$ eV范围内, $|\epsilon - \Lambda(\epsilon)| > \xi$, 即在此范围内, 电子在这种能量范围的状态不存在. 因此, Si 基底外延石墨烯的能隙宽度为 $E_g = 3.2$ eV, 大于Si基底的能隙. 外延石墨烯能隙出现的能量范围是电子能量在 $-2.3 \sim -0.4$ eV和 $0.4 \sim 2.3$ eV之间.

5 吸附对外延石墨烯能隙的影响

为了讨论吸附对外延石墨烯能隙的影响, 现写出能隙产生的条件(10)的具体表达式. 将(7)式和(8)式代入(10)式, 得到:

当 $\epsilon < -\frac{1}{2}E_g$ 时, 能隙的范围由

$$|f_1(\epsilon)| > \frac{3}{2}taq_B \quad (11)$$

决定, 其中: $f_1(\epsilon) = \epsilon - A\Omega V^2 \left\{ 2 \sqrt{-\epsilon + E_g/2} \arctan \frac{\sqrt{W}}{\sqrt{-\epsilon + E_g/2}} - \sqrt{-\epsilon - E_g/2} \ln \left| \frac{\sqrt{-\epsilon - E_g/2} + \sqrt{W}}{\sqrt{-\epsilon - E_g/2} - \sqrt{W}} \right| \right\}$

当 $-E_g/2 < \epsilon < E_g/2$ 时, 能隙的范围由

$$|f_2(\epsilon)| > \frac{3}{2}taq_B \quad (12)$$

决定, 其中: $f_2(\epsilon) = \epsilon - A\Omega V^2 \left\{ 2 \sqrt{-\epsilon + E_g/2} \arctan \frac{\sqrt{W}}{\sqrt{-\epsilon + E_g/2}} - 2 \sqrt{\epsilon + E_g/2} \arctan \frac{\sqrt{W}}{\sqrt{\epsilon + E_g/2}} \right\}$

当 $\epsilon > E_g/2$ 时, 能隙的范围由

$$|f_3(\epsilon)| > \frac{3}{2}taq_B \quad (13)$$

决定, 其中: $f_3(\epsilon) = \epsilon - A\Omega V^2 \left\{ -2 \sqrt{\epsilon + E_g/2} \arctan \frac{\sqrt{W}}{\sqrt{\epsilon + E_g/2}} + \sqrt{\epsilon - E_g/2} \ln \left| \frac{\sqrt{\epsilon - E_g/2} + \sqrt{W}}{\sqrt{\epsilon - E_g/2} - \sqrt{W}} \right| \right\}$

由(11)-(13)式看出: 外延石墨烯能隙的有无以及大小、能隙的范围都与石墨烯的性质(t, a, q_B)和基底情况(包括原胞体积 Ω 、能带宽度 W 、能隙宽度 E_g 等)以及基底与石墨烯相互作用的强弱(吸附能 V)等有关. 在给定基底的情况下, 基底与石墨烯的相互作用的强弱对外延石墨烯能隙的产生起着重要影响.

图6给出在不同强弱的基底与石墨烯相互作用能 V 情况下, Si 基底外延石墨烯的 $|\epsilon - \Lambda(\epsilon)|$ 随 ϵ 的变化曲线, 同时还给出 $\epsilon = \xi = 2.38$ eV的曲线(曲线2).

由图6看出随着基底与石墨烯相互作用能 V 的增大, 满足 $|\epsilon - \Lambda(\epsilon)| > \xi$ 此条件的能量范围逐渐增大, 即能隙宽度 E_g 随基底与石墨烯相互作用能 V 的增大而增大, 但变化较小(图7), 例如: 当相互作用能 $V = 4.8$ eV时, 能隙宽度 $E_g = 2.5$ eV; $V = 6.4$ eV时, $E_g = 3.1$ eV; 而 $V = 8$ eV时, $E_g = 3.4$ eV; $V = 10.24$ eV时, $E_g = 3.9$ eV.

能隙宽度 E_g 随基底与石墨烯相互作用能 V 的增大而增大的原因在于: 当相互作用能 V 增大时, 电子由一个能级的状态向另一个能级的状态自由运动的可能性减少, 两能级对应的波函数重叠的能量范围减小, 相应地能量不重叠的区域(即能隙宽度)增大. 把电子作近自由电子处理时, 按照固体物理理论^[14], 表明能隙宽度与相互作用矩阵元成正比, 因此, 基底与石墨烯相互作用能 V 愈大, 能隙宽度 E_g 也愈大.

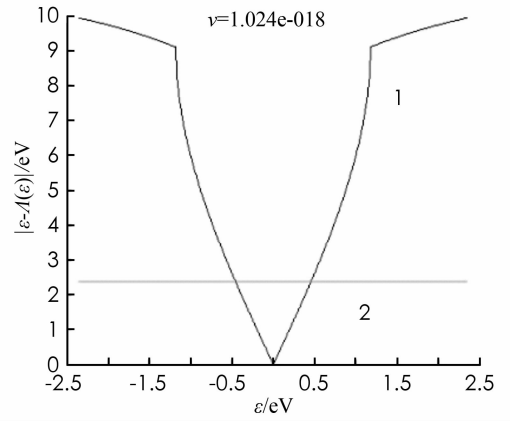


图5 $|\epsilon - \Lambda(\epsilon)|$ 随 ϵ 的变化曲线

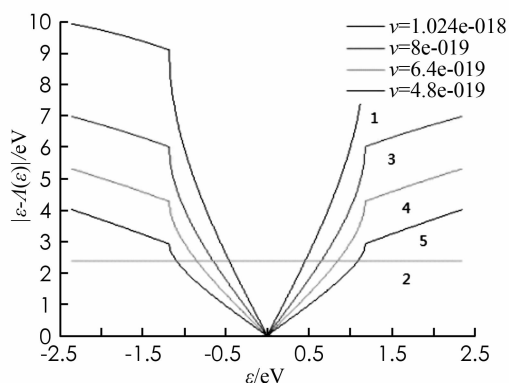


图 6 不同相互作用能 V 情况下
外延石墨烯的 $|\epsilon - \Delta(\epsilon)|$ 随 ϵ 的变化曲线

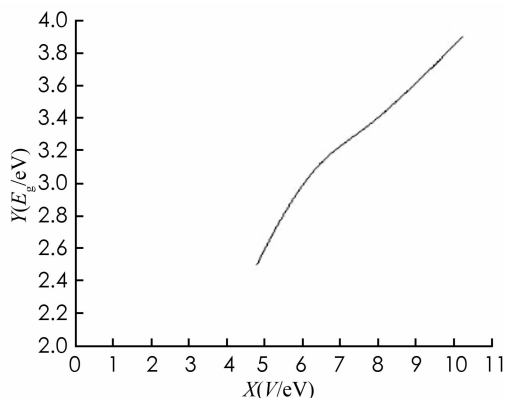


图 7 相互作用能 V 与
能隙宽度 E_g 关系图

6 结 论

1) 在半导体基底上形成的外延石墨烯的局域态密度如(5)式所示,其态密度曲线与理想单层石墨烯和基底的态密度曲线都不相同:它不具有对称性,而理想单层石墨烯和半导体基底的态密度曲线对零能具有左右对称性。吸附会破坏石墨烯和半导体基底的态密度曲线对零能的左右对称性;

2) 外延石墨烯的能隙宽度为 $E_g = 3.2$ eV,要小于理想单层石墨烯的能隙宽度,但又大于 Si 基底的能隙宽度;

3) 吸附的强弱对外延石墨烯能隙有一定的影响:半导体基底与石墨烯相互作用能 V 的增大会使外延石墨烯的能隙增大,但变化较小。

参考文献:

- [1] CASTRO NETO A H, GUINEA F, PERES N M R, et al. The Electronic Properties of Graphene [J]. Reviews of Modern Physics, 2009, 81(1): 109—162.
- [2] WU Y H, YU T, SHEN Z X. Two-dimensional Carbon Nanostructures: Fundamental Properties, Synthesis, Characterization, and Potential Applications [J]. Journal of Applied Physics, 2010, 108(1): 071301-1—0 71301-38.
- [3] HSEH C T, LIU Y Y, ROY A K. Pulse Electrodeposited Pd nanoclusters on Graphene-Based Electrodes for Proton Exchange Membrane Fuel Cells [J]. Electrochimica Acta, 2012, 64: 205—210.
- [4] WANG Tao, LUO Zhong-yang, GUO Shun-song, et al. Prepa-Ration of Controllable Nanofluids and Research on Thermal Conductivity [J]. Journal of Zhejiang University, 2003, 94(8): 4967—4970.
- [5] WANG S, TAMBRAPAMI M, QIU J J, et al. Thermal Expansion of Graphene Composites [J]. Macromolecules, 2009, 42(14): 5251—5255.
- [6] 李思明, 侯朝霞, 王少洪, 等. 石墨烯在超级电容器中的研究进展 [J]. 材料导报, 2014, 28(23): 40—45.
- [7] 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.
- [8] Давыдов С Ю. Обусловиях возникновения щели, наводимой полупроводниковой подложки й в плотностисостояний эпитаксиального графена [J]. Журнал технической физики, 2014, 84(4): 155—158.
- [9] Давыдов С Ю, Лебедев А А. Оценка влияния адсорбции на проводимость однослойного эпитаксиального о графена, сформированного на полупроводниковой подложке [J]. Физика твердого тела, 2014, 56(12): 2486—2489.
- [10] Давыдов С Ю, Сабирова Г И. Модель адсорбции на графене Физика твердого тела [J]. 2011, 53(3): 608—616.
- [11] 曹全喜, 雷天民, 黄云霞, 李桂芳. 固体物理基础[M]. 西安: 电子科技大学出版社, 2008: 233—234.
- [12] 基特尔. 固体物理导论 [M]. 杨顺华, 译. 北京: 科学出版社, 1979: 32.
- [13] 申凤娟, 唐 可. 石墨烯基底金属离子态密度变化规律研究 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2016, 40(7): 68—73.

[14] 黄 昆, 韩汝琦. 固体物理学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2001: 165—167.

On Effect of Adsorption on Density of State and Energy Gap of Graphene

GAO Yi-wen¹, ZHOU Hong-jun²

1. Office of Academic Affairs, Chongqing University of Art and Sciences, Yongchuan Chongqing 402160, China;

2. School of Electronic and Electrical Engineering, Chongqing University of Art and Sciences, Yongchuan Chongqing 402160, China

Abstract: This paper is to utilize the model of parabolic type electron spectrum to figure out the state density of semi-conductor substrate and the state density of epitaxial graphene formed on the semi-conductor substrate. The comparison between these state densities with the state density of ideal single-layer graphene will be made to analyze the features of the state density in epitaxial graphene and the condition of generating energy gap. Furthermore, the paper will take the epitaxial graphene formed on Si substrate for example to discuss the features of state density of epitaxial graphene by energy distribution, and the effect of absorption on the state density and energy gap of epitaxial graphene. The result indicates that, 1) the local density curve of the epitaxial grapheme is different from those of the ideal single-layer graphene and substrate, and it does not have the bilateral symmetry; 2), not only does the adsorption destroy the bilateral symmetry of the state density curve of the ideal single layer graphene and semi-conductor substrate, but it changes the energy gap width of graphene, and, in addition, the energy gap width of epitaxial graphene will increase along with the increase of the interaction between semi-conductor substrate and graphene, but with the less change.

Key words: epitaxial graphene; semiconductor substrate; density of state; energy gap; adsorption

责任编辑 潘春燕