

01;06

Электронные состояния системы „квантовая точка—монослой графена—подложка $\text{SiO}_2 + n^+\text{Si}$ “

© З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов, А.К. Нухов,
Г.М. Мусаев, Э.И. Идаятов

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва
Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра РАН,
Махачкала

Дагестанский государственный университет, Махачкала
E-mail: zaur0102@gmail.com

Поступило в Редакцию 20 февраля 2012 г.

Исследованы электронные состояния системы „квантовая точка—монослой графена—подложка $\text{SiO}_2 + n^+\text{Si}$ “. Получено аналитическое выражение для величины переходящего заряда в такой системе. Исследуемая система позволяет управлять оптическими свойствами квантовой точки с помощью приложенного электрического поля.

Недавние успехи в получении графена [1], монослоя атомов углерода, образующих плотную двумерную кристаллическую структуру, и открытия его уникальных электронных свойств [4] привлекли внимание многих исследователей. Одним из актуальных направлений стало исследование электронных свойств эпитаксиального графена [5–11]. Это обусловлено тем, что при создании приборных структур на основе графена, а также экспериментальном изучении свойств самого графена необходимо иметь металлические и полупроводниковые контакты. Кроме того, каталитический рост графена на поверхности металлов и полупроводников является одним из методов получения графена.

Особый интерес представляет исследование электронных состояний системы „графен–низкоразмерная структура“. Этот интерес вызван несколькими причинами. Во-первых, варьирование свойств низкоразмерных структур [12,13] дает возможность управляемого воздействия на свойства графена. Во-вторых, возможна обратная ситуация, когда с помощью графена можно варьировать свойства низкоразмерных структур, взаимодействующих с графеном. Последнее, на наш взгляд, представляет наибольший интерес с прикладной точки зрения. В данной работе на примере системы „квантовая точка–монослой графена–подложка $\text{SiO}_2 + n^+\text{Si}$ “ развиваются теоретические аспекты указанной возможности. Рассмотрение проводится в рамках модели Андерсона–Ньюнса [14,15]. В этой связи необходимо отметить, что применение этой модели для описания электронных состояний эпитаксиального графена впервые встречается в работах Давыдова (см., например, [8–10]). В работах Давыдова была предложена модель эпитаксиального графена, которая заключается в том, что эпитаксиальный графен представляется в виде адсорбированных на поверхности подложки атомов углерода, выстроенных в структуре графена. Такая модель приводит к вполне адекватным результатам (см., например, [8–11]). Отметим, что большинство теоретических расчетов в этом направлении делаются численными методами в рамках формализма функционала плотности.

Рассмотрим систему, состоящую из эпитаксиального графена и сформированной на нем квантовой точки (рис. 1). Размеры графена считаются намного большими дебройлевской длины волны его элек-

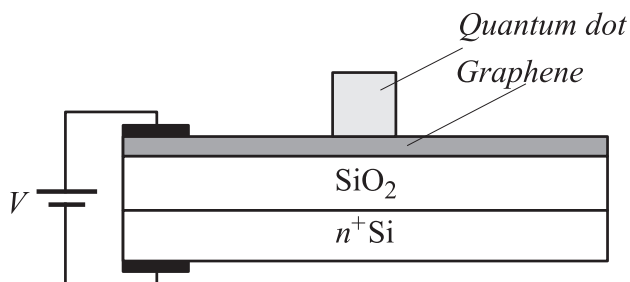


Рис. 1. Структурная схема рассматриваемой системы.

тронов, так что квантовыми размерными эффектами в графене можно пренебречь. Как легко показать, плотность состояний графена вблизи точки Дирака имеет вид

$$\rho_g(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\pi v_F^2 \hbar^2}, \quad (1)$$

где ε — энергетическая переменная, v_F — скорость Ферми, которая для электронов графена имеет значение порядка 10^8 см/с, индекс g означает graphene. Спектральная функция системы определяется мнимой частью функции Грина $G^{-1}(\varepsilon) = \varepsilon - E(p) - \Sigma(p, \varepsilon)$, где $\Sigma = \text{Re}\Sigma + \text{Im}\Sigma$ — собственно энергетическая часть, $E(p)$ — энергия основного состояния. Для рассматриваемой системы можно написать $\Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2$, где Σ_1 — собственно энергетическая часть, обусловленная взаимодействием частиц системы между собой, Σ_2 обусловлено взаимодействием с подложкой. Здесь мы пренебрегаем перенормировкой энергии электронов, следовательно, $\text{Re}\Sigma_1 = \text{Re}\Sigma_2 = 0$. С учетом сказанного для спектральной функции $A(\varepsilon) = \pi^{-1} \text{Im}(G(\varepsilon))$ квантовой точки в модели Андерсона–Ньюна получаем

$$A(\varepsilon) = \frac{\Gamma + \pi|U|^2\rho_g(\varepsilon)}{(\varepsilon - E_n)^2 + (\Gamma + \pi|U|^2\rho_g(\varepsilon))^2}, \quad (2)$$

где E_n — энергетический спектр электронов квантовой точки, U — потенциал гибридизации, $\Gamma = \text{Im}\Sigma_1$ — затухание одночастичных возбуждений в квантовой точке за счет внутренних столкновительных процессов, $\pi|U|^2\rho_g(\varepsilon) = \text{Im}\Sigma_2$. Для плотности состояний квантовой точки соответственно получим

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{n=1}^{n_F} \frac{\Gamma + \alpha\Omega}{(\varepsilon_0\Omega - E_n)^2 + (\Gamma + \alpha\Omega)^2}, \quad (3)$$

где $\alpha = |U|^2\varepsilon_0/v_F^2\hbar^2$, $\Omega = \varepsilon/\varepsilon_0$ — безразмерная энергия, ε_0 — некоторая характеристическая энергия, n_F — число состояний под уровнем Ферми. Квантовую точку можно представить в виде трехмерной прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками. Тогда для энергетического спектра электронов квантовой точки имеем $E_n = (\pi^2\hbar^2n^2)/(2mL^2) = E_1n^2$, где L — линейный размер квантовой точки. Для квантовой точки с $L = 10$ нм имеем $E_1 = 0.01$ эВ. Далее,

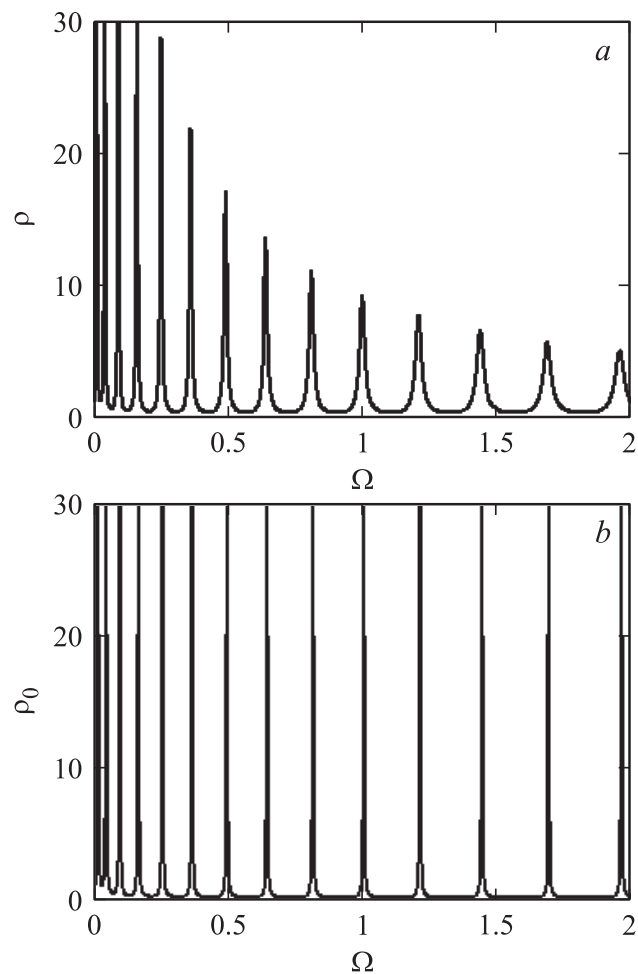


Рис. 2. Плотность состояний: *a* — квантовой точки, сформированной на поверхности графена; *b* — изолированной квантовой точки.

положим $\varepsilon_0 = 1 \text{ eV}$, $\alpha = 0.01 \text{ eV}$ и $\Gamma = 0.001 \text{ eV}$. На рис. 2 изображена зависимость плотности состояний квантовой точки, сформированной на поверхности графена от безразмерной энергетической переменной.

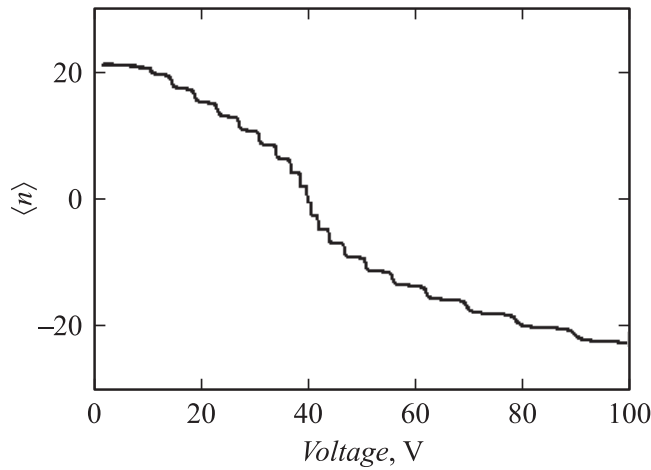


Рис. 3. Зависимость величины переходящего заряда от приложенного напряжения.

Интегрируя (3) от нуля до $\Delta\Omega_F = (E_F - \varepsilon_F)/\varepsilon_0$, можно получить выражение для переходящего заряда

$$\langle n \rangle_{\pm} = \pm \frac{\alpha}{(1 + \alpha^2)^2} \sum_{n=1}^{n_F} \left\{ \frac{1}{2} \ln \left[\frac{(\varepsilon_0 \Delta\Omega_F - F_n)^2 + \Lambda}{E_n^2 + \Lambda} \right] + \frac{E_n}{\sqrt{\Lambda}} \left[\arctg \left(\frac{\varepsilon_0 \Delta\Omega_F - E_n}{\sqrt{\Lambda}} \right) + \arctg \left(\frac{E_n}{\sqrt{\Lambda}} \right) \right] \right\}, \quad (4)$$

где знак плюс соответствует переходу заряда из графена в квантовую точку ($\varepsilon_F > E_F$), а минус — переходу заряда из квантовой точки в графен ($\varepsilon_F < E_F$), $\Lambda = E_n^2(1 - 1/(1 + \alpha^2)^2)$, ε_F — энергия Ферми электронов графена, $E_F = E_{n_F}$ — энергия Ферми электронов квантовой точки. Энергия Ферми электронов графена отлична от нуля благодаря приложенному напряжению (рис. 1). Более того, с помощью последнего можно легко управлять энергией Ферми. Прикладывая напряжение с различной полярностью, можно допировать графен как электронами, так и дырками [4]. Тем самым можно легко управлять количеством и типом носителей в графене, а следовательно, и величиной переходя-

шего заряда. Уровень Ферми зависит от приложенного напряжения V следующим образом [4]:

$$\varepsilon_F = v_F \hbar \sqrt{\frac{\xi V}{ed}}, \quad (5)$$

где d — толщина подложки, e — заряд электрона, ξ — диэлектрическая проницаемость подложки. Учитывая в выражении (4) зависимость (5), можно легко определить величину переходящего заряда как функцию от приложенного напряжения (рис. 3). Кривая на рис. 3 построена для подложки толщиной $d = 3 \cdot 10^{-7}$ м. Кроме того, положено $E_F = 1$ eV. Возможность управления величиной переходящего заряда, в свою очередь, означает, что можно регулировать количество носителей в квантовой точке. А от последнего, как известно, зависят оптические свойства квантовой точки. Возможность регулировать оптические свойства квантовых точек очень важна с прикладной точки зрения.

Насколько известно авторам, приведенная выше система ранее не рассматривалась. На наш взгляд, указанные эффекты имеют достаточный практический интерес. Отметим, что экспериментальное наблюдение этих эффектов возможно, если разность между энергетическими уровнями квантовой точки намного превышает тепловую энергию, т. е. $\Delta E_n \gg kT$ (k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура).

Список литературы

- [1] Новоселов К.С., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. // Science. 2004. V. 306. P. 666–669.
- [2] Novoselov K.S., Jiang D., Schedin F., Booth T.J., Khotkevich V.V., Morozov S.V., Geim A.K. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2005. V. 102. P. 10 451–10 453.
- [3] Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Katsnelson M.I., Grigorieva I.V., Dubonos S.V., Firsov A.A. // Nature. 2005. V. 438. P. 197–200.
- [4] Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M., Novoselov K.S., Geim A.K. // Rev. Mod. Phys. 2008. V. 81. N 1. P. 109–162.
- [5] Berger C., Song Z., Li T., Li X., Ogbazhi A.Y., Feng R., Dai Z., Marchenkov A.N., Conrad E.H., Heer W.A. // J. Phys. Chem. B. 2004. V. 108. P. 19 912–19 916.
- [6] Giovannetti G., Khomyakov P.A., Brocks G., Karpan V.M., Van den Brink J., Kelly P.J. // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. P. 026 803.
- [7] Khomyakov P.A., Giovannetti G., Rusu P.C., Van den Brink J., Kelly P.J. // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 195 425.

- [8] *Давыдов С.Ю.* // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. В. 10. С. 64–67.
- [9] *Давыдов С.Ю.* // ФТП. 2011. Т. 45. В. 6. С. 629–633.
- [10] *Давыдов С.Ю.* // ФТП. 2011. Т. 45. В. 8. С. 1102–1108.
- [11] *Алисултанов З.З., Мейланов Р.П.* // ФТТ. 2012 (в печати).
- [12] *Лозовик Ю.Е., Волков С.Ю.* // ФТТ. 2003. Т. 45. С. 345.
- [13] *Витлина Р.З., Чаплик А.В.* // Письма в ЖЭТФ. 2003. Т. 78. С. 1147.
- [14] *Anderson P.W.* // Phys. Rev. 1961. V. 124. N 1. P. 41–53.
- [15] *Newns D.M.* // Phys. Rev. 1969. V. 178. N 3. P. 1123.