

Энергетический спектр графеновой сверхрешетки Фибоначчи

© А.Н. Король^{1,2}, В.Н. Исай¹

¹ Национальный университет пищевых технологий,
Киев, Украина

² Laboratory on Quantum Theory in Linköping, ISIR,
Linköping, Sweden

E-mail: korolam@ukr.net

(Поступила в Редакцию 11 марта 2013 г.
В окончательной редакции 30 мая 2013 г.)

Изучаются энергетические спектры сверхрешетки (СР) Фибоначчи на основе графена при наличии в нем запрещенной зоны. Решетка состоит из прямоугольных барьеров, расположенных вдоль оси Ox . Квазипериодическая модуляция осуществляется за счет различия в значениях массового слагаемого гамильтониана в разных элементах СР. Показано, что эффективное расщепление разрешенных зон (и тем самым образование ряда щелей) под действием квазипериодического фактора реализуется как при наклонном, так и при нормальном падении электронной волны на поверхность СР. Энергетические спектры имеют ярко выраженный периодический характер по всей шкале энергий. В отдельных участках спектра (условно — периодах) расщепление зон происходит согласно инфляционному правилу Фибоначчи в каждой новой генерации. Как и в периодических СР на основе графена, во всех генерациях Фибоначчи образуется запрещенная зона, связанная с новой дираковской точкой. Положение последней не зависит от периода СР, весьма чувствительно к высоте потенциальных барьеров, а также к отношению ширин квантовой ямы и барьера, и слабо зависит от значения массового слагаемого в гамильтониане. Зависимость спектров от угла падения электронной волны является незначительной.

1. Введение

Как известно, полупроводниковые сверхрешетки (СР) могут играть существенную роль в регулировании электронных процессов в различных приборах современной электроники (см., например, [1]). Поэтому изучению физических свойств СР уделялось и уделяется большое внимание. Рассматриваются СР различных типов: строго периодические, разупорядоченные, решетки с дефектами и пр. Особое место среди СР занимают структуры, промежуточные между периодическими и неупорядоченными — квазипериодические решетки, например, СР Фибоначчи, Тью–Морса. Это связано с их необычными свойствами, такими как самоподобие, канторова природа энергетического спектра и др. (см., например, [2]).

В то же время, начиная с 2004 г., пристальное внимание привлекают к себе структуры на основе графена, что естественно объясняется нетривиальными его свойствами, в том числе электронными. Достаточно назвать аналогию π -электронов графена с безмассовыми дираковскими фермионами при низких энергиях (формально описываемыми безмассовым уравнением Дирака), линейный закон дисперсии, свойство киральности, клейновское туннелирование, высокую подвижность, баллистический транспорт, необычный квантовый эффект Холла и т.д. [3–6]. Следует также иметь в виду, что графен является перспективным материалом в современной электронике с точки зрения замены кремниевой технологии, развитие которой подошло к своему пределу, графеновой. Очевидно, что в силу указанных обстоятельств изучение физических свойств сверхрешеток на основе графена является актуальной

задачей [7–16]. В частности, в работах [9,10,13] показано, что в графеновых СР обнаруживается новая дираковская точка и соответствующая ей запрещенная зона; она определяется через нулевое значение усредненного волнового числа [9]. В указанных работах детально изучены свойства этой новой щели в различных графеновых СР. (Для краткости данную запрещенную зону будем называть „новой дираковской“, а другие щели в энергетическом спектре строго периодической СР, а также аналогичные им щели в СР Фибоначчи — брэгговскими [13,14]).

Предложен и практически реализован ряд методов создания графеновых СР [17–19]. Отметим, что среди прочих важно получать такие СР на графене, в которых существует запрещенная зона в энергетическом спектре — поскольку именно ее наличие играет ключевую роль в создании полупроводниковых приборов транзисторного типа. Поэтому определенные усилия прилагаются к созданию графеновых структур с достаточно широкой запрещенной зоной. Тут с помощью различных методов — использование графеновых нанолент, взаимодействие с подложкой и др. — уже достигнуты существенные результаты [20–25]. В частности, химическими методами удалось получить ширину щели, равную нескольким десяткам электрон-вольт [23].

2. Конкретизация постановки задачи и метод вычисления спектров

В данной работе мы изучаем энергетический спектр сверхрешеток Фибоначчи на основе графена в конти-

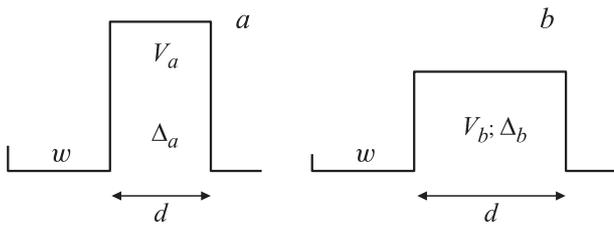


Рис. 1. Схематическое представление элементов a и b , из которых строится сверхрешетка.

нуальной модели. Квазипериодическая модуляция вдоль оси Ox создается за счет массового слагаемого в гамильтониане Δ : оно принимает одно из двух различных значений в разных элементах в цепи СР согласно закону Фибоначчи. (Подобное предложение для создания СР рассматривалось, в частности, в работе [16]). Главным образом исследуются СР, в которых по квазипериодическому правилу Фибоначчи чередуются участки бесщелевого и щелевого графена. В силу существенного прогресса в технологии создания щелевых графеновых структур, мы варьируем значения Δ в достаточно широких пределах; природа слагаемого Δ в гамильтониане, как уже указывалось, может быть различной.

Рассмотрим СР, построенную из двух элементов a и b , представленных на рис. 1. Оба элемента содержат квантовую яму шириной w и потенциальный барьер шириной d ; для элемента a параметр Δ равен Δ_a , а высота барьера обозначена V_a , для элемента b имеем соответственно Δ_b и V_b . СР строится согласно инфляционному правилу Фибоначчи: $S_n = S_{n-1} + S_{n-2}$. Таким образом, например, для четвертой генерации (секвенции) Фибоначчи имеем $S_4 = abaab$. Условия прохождения электронной волны через СР, построенную для N -й генерации Фибоначчи, определяются периодом данной генерации. Интервалы энергии E , для которых коэффициент трансмиссии электронов через решетку $T(E)$ близок к единице, образуют разрешенные зоны в энергетическом спектре, участкам же энергии с $T \ll 1$ отвечают запрещенные зоны. Коэффициент T можно рассчитать методом трансферных матриц, выразив его либо через функции Грина, либо через волновые функции. Последние находятся из соответствующего задаче уравнения дираковского типа

$$[v_F(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) + m v_F^2 \sigma_z + V(x) \tilde{\mathbf{I}}] \Psi = E \Psi. \quad (1)$$

где $v_F \approx 10^6$ м/с — скорость Ферми, $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ — оператор импульса, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y) \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ — матрицы Паули для псевдоспина, $V(x)$ — внешний потенциал, зависящий лишь от координаты x , $\tilde{\mathbf{I}}$ — единичная двумерная матрица, массовое слагаемое мы обозначаем, как это принято в литературе, символом Δ . Функция Ψ представляет собой двукомпонентный псевдоспинор $\Psi = [\tilde{\Psi}_A, \tilde{\Psi}_B]^T$, $\tilde{\Psi}_A, \tilde{\Psi}_B$ — огибающие функции для графеновых подрешеток A и B , T — символ транспонирования. Предположим, что потенциал $V(x)$

состоит из периодически повторяющихся прямоугольных барьеров вдоль оси Ox , причем внутри каждого j -го барьера $V_j(x) = \text{const}$. Тогда, учитывая трансляционную инвариантность решения по оси Oy , можно записать $\tilde{\Psi}_{A,B} = \Psi_{A,B} e^{ik_y y}$ и из уравнения (1) получить для $\Psi_{A,B}$

$$\frac{d^2 \Psi_{A,B}}{dx^2} + (k_j^2 - k_y^2) \Psi_{A,B} = 0, \quad (2)$$

где $k_j = \text{sign}(s_{j+})[(E - V_j)^2 - \Delta^2]^{1/2}$, $s_{\pm} \equiv E - V(x) \pm \Delta$, здесь и далее приняты единицы измерения $c = \hbar = e = v_F = 1$. Если представить решения для собственных функций $\Psi_{A,B}$ в виде суммы плоских волн, движущихся в прямом и обратном направлениях вдоль оси Ox , то получим

$$\Psi(x) = \left[a_j e^{iq_j x} \begin{pmatrix} 1 \\ g_j^+ \end{pmatrix} + b_j e^{-iq_j x} \begin{pmatrix} 1 \\ g_j^- \end{pmatrix} \right], \quad (3)$$

где $q_j = \text{sign}(s_{j+}) \sqrt{k_j^2 - k_y^2}$, если $k_j^2 > k_y^2$, и $q_j = i \sqrt{k_y^2 - k_j^2}$ в противном случае, $g_j^{\pm} = \frac{\pm q_j + i k_y}{k_y}$, верхняя строка в (3) относится к подрешетке A , нижняя — к B . Трансферная матрица, связывающая волновые функции в точках x и $x + \Delta x$ найдена в ряде работ (см., например, [9]) и имеет вид

$$M_j = \frac{1}{\cos \theta_j} \begin{pmatrix} \cos(q_j \Delta x - \theta_j) & i z_j^{-1}(q_j \Delta x) \\ i z_j \sin(q_j \Delta x) & \cos(q_j \Delta x + \theta_j) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где

$$z_j = \frac{s_{j-}}{k_j}, \quad \theta_j = \arcsin \left(\frac{k_y}{k_j} \right).$$

Коэффициент трансмиссии электронов через решетку: $T = |t|^2$,

$$t = \frac{2 \cos \theta_0}{R_{22} e^{-i\theta_0} + R_{11} e^{i\theta_0} - R_{12} - R_{21}}, \quad (5)$$

где θ_0 — угол падения волны, а матрица R выражается через произведение матриц M_j : $R = \prod_{j=1}^N M_j$, N — общее число элементов в сверхрешетке.

3. Полученные результаты

На рис. 2 представлена часть туннельного спектра, т. е. зависимости коэффициента прохождения электронов T от их энергии, для СР четвертой генерации Фибоначчи, при условии нормального падения электронной волны на решетку ($k_y = 0$). Значения параметров задачи приведены на рисунке; на рис. 3 изображен тот же спектр в интервале энергий $[0, 10]$ (кроме того $V_a = V_b = 4$).

Прежде всего, в спектрах обращает на себя внимание то, что использованная в данной работе квазипериодическая модуляция за счет параметра Δ приводит к весьма эффективному расщеплению энергетических зон

и тем самым к образованию ряда щелей. Причем это реализуется при нормальном падении электронов на решетку.

В спектрах выделяются отдельные участки, структура которых периодически повторяется по всей шкале энергий — условно один из этих фрагментов спектра можно считать его периодом (например, в интервале энергий LP на рис. 2; в принципе можно рассматривать и более узкие интервалы: на рис. 3 видно, что структура участков LQ и QS подобна). Характерные черты периода — количество разрешенных (запрещенных) зон, их ширины — при переходе к большим E изменяются так, что ширина щелей в среднем уменьшается с ростом E ; естественным результатом этого уменьшения

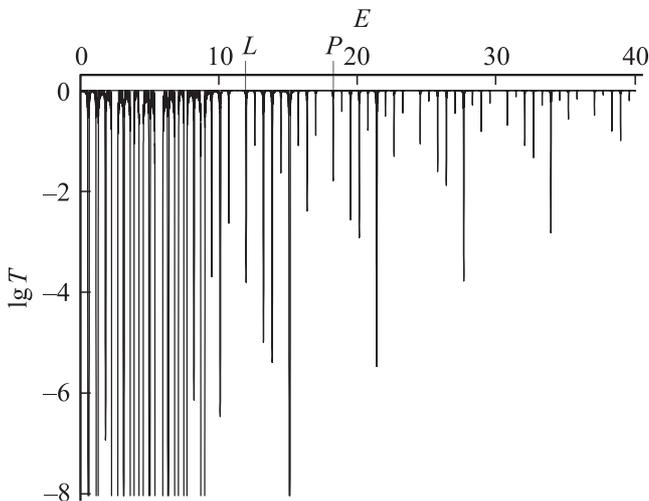


Рис. 2. Зависимость коэффициента трансмиссии T от энергии электронов E для четвертой генерации Фибоначчи. Значения параметров: $k_y = 0$, $d = w = 0.5$, $V_a = V_b = 5$, $\Delta_a = 1$; $\Delta_b = 0$.

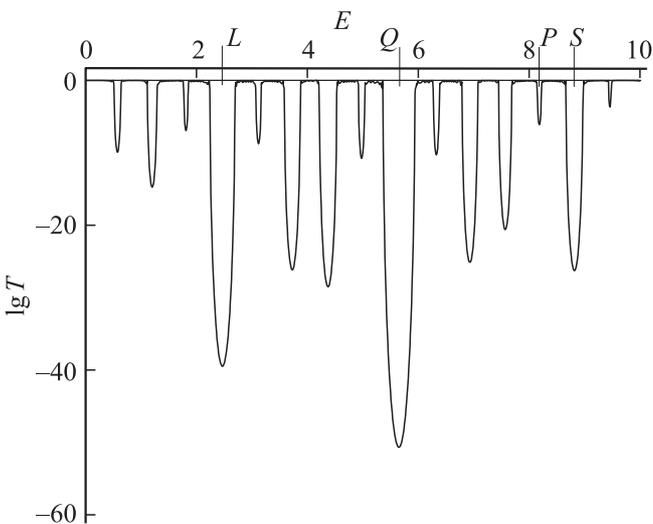


Рис. 3. Туннельный спектр четвертой генерации Фибоначчи в интервале энергий $[0, 10]$. Значения параметров такие, как и на рис. 1.

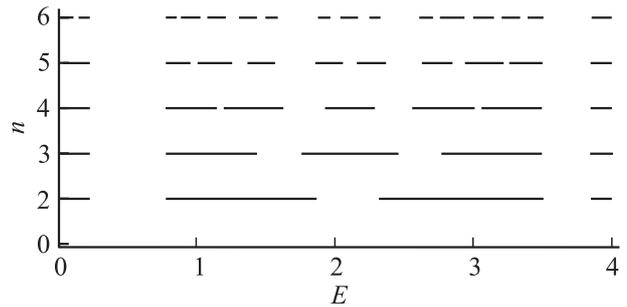


Рис. 4. След-карта для СР Фибоначчи с параметрами: $k_y = 0$, $d = w = 0.5$, $V_a = V_b = 1$; $\Delta_a = 1$; $\Delta_b = 0$.

является то, что коэффициент прохождения T асимптотически приближается к единице в достаточно далекой надбарьерной области¹. Анализ спектров при больших энергиях выходит за рамки данной работы, и далее мы ограничимся энергиями порядка нескольких единиц в принятой системе единиц измерения.

Тут хотелось бы обратить внимание на определенное отличие от ситуации в обычных СР (с параболическим законом дисперсии носителей заряда). Если в обычных СР расчет зон обычно проводится во всей барьерной области [26,27], то в графеновых структурах для этой цели целесообразно выбирать определенные интервалы энергии, например, LQ , LP , (см. рис. 1, 2 и сноску) или другие фиксированные участки спектров.

Спектры, аналогичные представленному на рис. 1 для 4-й генерации, реализуются и для других секвенций.

Число зон в каждом периоде, ширина каждой из них существенно зависят как, с одной стороны, от параметров СР, так и, с другой, — от номера генерации Фибоначчи.

Особое внимание обращает на себя интервал энергий LQ . Количество зон в этом энергетическом промежутке подчиняется инфляционному правилу Фибоначчи: $Z_n = Z_{n-1} + Z_{n-2}$. Это подтверждается рис. 4, на котором изображены зоны разрешенных (сплошные линии) и запрещенных (промежутки между зонами пропускания, т.е. щели) энергий. Изображены спектры для 2, 3, 4, 5, и 6-ой генераций Фибоначчи. Отметим, что указанная закономерность относится не только к интервалу LQ , но и к большим энергетическим промежуткам — LP и т.д.; разумеется, каждый новый сверхпериод имеет свое количество зон.

Следует также отметить, что образование зон L, Q связано с фактором периодичности, а промежуточных между ними зон — с фактором квазипериодичности. В этом легко убедиться, рассчитав спектр для строго

¹ Изменение ширин зон имеет не монотонный, а осциллирующий характер — с ростом E чередуется расширение и сужение запрещенных (разрешенных) зон. В результате этого образуются более широкие периоды (условно — сверхпериоды). Иными словами, результатом такого волнообразного изменения ширин зон является группирование меньших отдельных структурных единиц в большие с образованием дополнительного структурного порядка, в этом выражается свойство самоподобия в данной задаче.

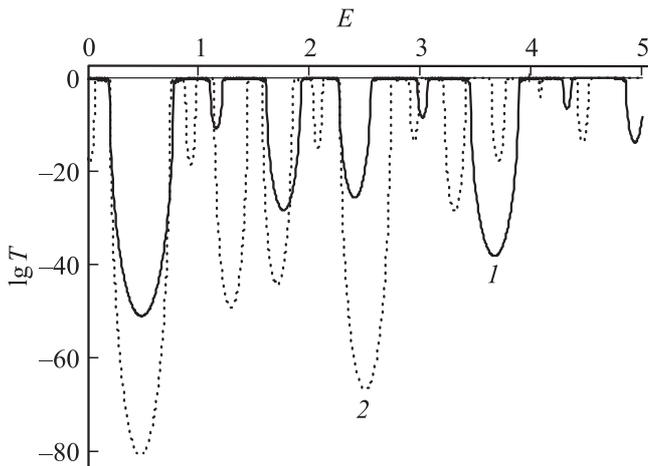


Рис. 5. Спектр четвертой генерации Фибоначчи для разных периодов решетки; 1 — $d = w = 0.5$, 2 — $d = w = 0.8$, остальные параметры, как и на рис. 1.

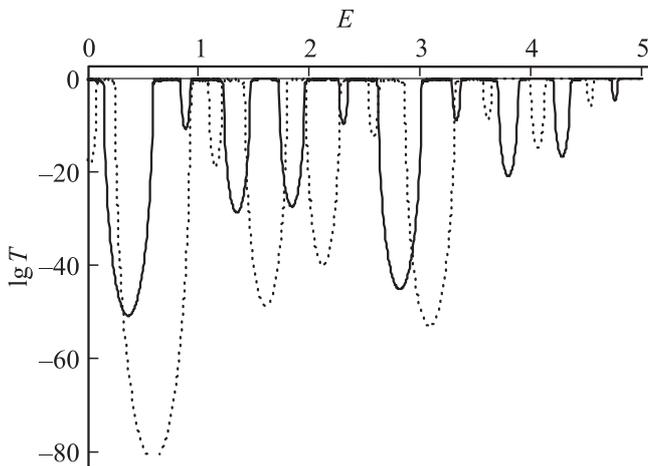


Рис. 6. Спектр четвертой генерации Фибоначчи для разных значений d и w : сплошная линия соответствует значениям $d = 0.8$, $w = 0.5$; штриховая — $d = 0.5$, $w = 0.8$; остальные параметры, как на рис. 1.

периодической решетки: для тех же параметров он имеет зоны L и Q , расположенные в тех же точках на оси энергий.

Как мы видим на рис. 4, при определенных энергиях во всех генерациях Фибоначчи образуется запрещенная зона, связанная с новой дираковской точкой E_D — „новая дираковская щель“ [9]. Ее положение практически не изменяется в разных секвенциях Фибоначчи. Характерной особенностью новой дираковской щели является то, что она не зависит от периода решетки ($d + w$) и в то же время весьма чувствительна к отношению d/w . Об этом свидетельствуют рис. 5, 6, где показана зависимость $T(E)$ для 4-й генерации Фибоначчи для разных значений параметров d и w . Еще раз обратим внимание на то, что расщепление зон (с образованием тем самым ряда щелей) реализуется уже в случае нормального

падения электронов на поверхность СР. Этот результат существенно отличается от того, что было получено в работе [13], в которой квазипериодическая модуляция создавалась за счет отличия в потенциалах элементов a — барьер, и b — яма, и проявлялась лишь при наклонном падении волны ($k_y \neq 0$).

Рис. 7 представляет собой набор разрешенных и запрещенных зон для 4-й генерации Фибоначчи при различных значениях параметра Δ_a . Видно, что эффективное расщепление зон реализуется в широком интервале значений Δ_a .

Величина E_D в общем случае зависит от значения каждого из параметров d , w , V_a , V_b , Δ_a , Δ_b . При этом оказывается, что зависимость E_D от Δ_a , Δ_b не является значительной. Так, в случае $d = w$, $V_a = V_b = V$ положение новой дираковской точки определяется в основном значением потенциального барьера и лишь немного отклоняется от величины $V/2$ с ростом Δ_a (см. все рисунки, $E_D = V/2$ — это точное положение новой дираковской точки в строго периодической решетке [9]).

Представляет интерес проследить за изменениями в зонной картине в зависимости от соотношения между величинами Δ_a и Δ_b — именно это соотношение определяет эффективность квазипериодической модуляции в данной работе. Это сделано с помощью рис. 8, на котором показаны спектры четвертой генерации Фибоначчи для трех значений соотношения Δ_a/Δ_b , а именно при фиксированном $\Delta_a = 1$ значениям $\Delta_b = 0.1$; 0.5; 0.9 соответствуют штриховая, штрих-пунктирная и сплошная линии. Остальные параметры взяты такими, как и

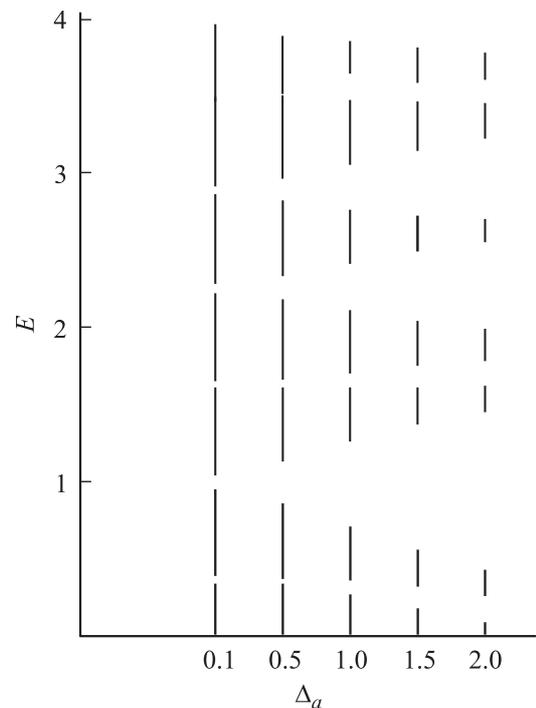


Рис. 7. Зависимость спектра четвертой генерации Фибоначчи от параметров Δ_a , значения остальных параметров, как на рис. 1, $V_a = V_b = 2$.

для рис. 4. С уменьшением разницы между Δ_a и Δ_b наблюдается сужение щелей, возникших в результате действия квазипериодического потенциала вплоть до их полного исчезновения при $\Delta_a = \Delta_b$ т.е. в случае строго периодической СР.

На рис. 9 приведена зонная структура 4-й генерации Фибоначчи в координатах E, k_y , показывающая зависимость спектров от угла падения волны. Отметим, что наблюдается определенное расширение дираковской щели, в то же время зависимость других запрещенных зон от k_y очень слабая. (Подобное обстоятельство, как известно, часто встречается при рассмотрении некоторых эффектов в графеновых структурах; в частности, аналогичный результат получен в работе [11]: если есть достаточно сильный эффект при $k_y = 0$, то его

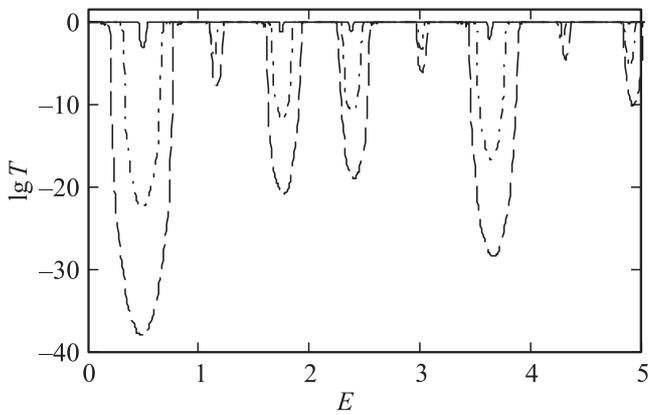


Рис. 8. Зависимость спектра четвертой генерации Фибоначчи от соотношения между параметрами Δ_a и Δ_b .

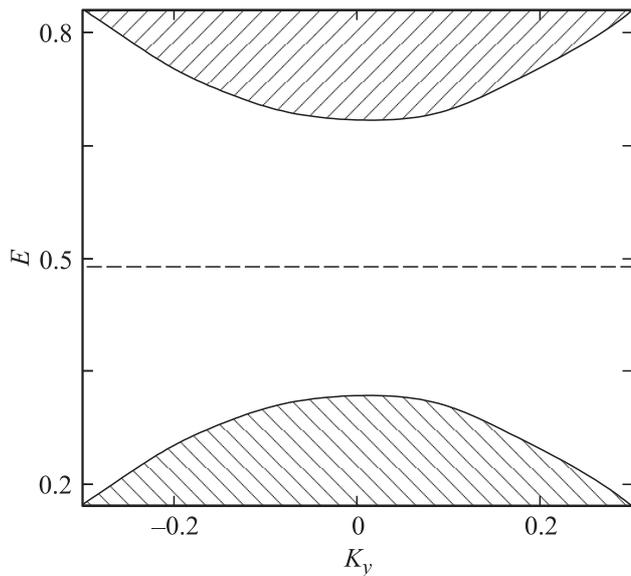


Рис. 9. Зонная структура спектра четвертой генерации Фибоначчи в зависимости от параметра k_y . Значения параметров, как на рис. 2.

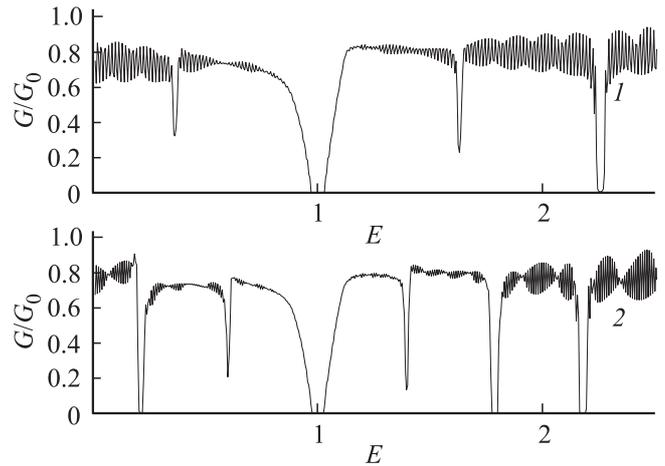


Рис. 10. Зависимость кондактанса СР четвертой генерации Фибоначчи от энергии E .

зависимость от k_y является слабой; см. также соответствующий комментарий в этой работе). Штриховая линия на рис. 8 почти точно соответствует значению $E_D \approx V/2 = 0.5$.

На рис. 10 представлены результаты расчета кондактанса для четвертой генерации рассматриваемой СР по известной формуле

$$G = G_0 \int_0^{\pi/2} T \cos \theta d\theta, \quad (6)$$

где

$$G_0 = \frac{2e^2 m v_F L}{\hbar^2},$$

L — ширина графенового образца по оси Oy , e — элементарный заряд, m — масса электрона, v_F — скорость Ферми. Значения параметров таковы: $k_y = 0$; $V_a = V_b = 2$, $\Delta_a = 1$, $\Delta_b = 0$; для рис. 10,1 $d = w = 0.5$; для рис. 10,2 $d = w = 0.8$. Видно, что первый минимум кондактанса образуется для энергии, соответствующей щели, связанной с новой дираковской точкой. При изменении периода решетки положение этого минимума не изменяется, а другие минимумы сдвигаются по оси энергий. Таким образом, изменяя, в частности, параметры решетки d и w , можно регулировать кондактанс рассматриваемой системы.

Список литературы

- [1] R. Tsu. Superlattice to Nanoelectronics. Second edition. Elsevier, Oxford (2011). 327 p.
- [2] Z. Cheng, R. Savit, R. Merlin. Phys. Rev. B **37**, 4375 (1988).
- [3] A.K. Geim, K.S. Novoselov. Natur. Mater. **6**, 183 (2007).
- [4] A.N. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- [5] J.M. Pereira, F.M. Peeters, A. Chaves, M. Barbier, P. Vasiliopoulos. Semicond. Sci. Technology **25**, 033 002 (2010).

- [6] V.V. Cheianov, V.I. Falko. Phys. Rev. B **74**, 041 403 (2006).
- [7] Q. Zhao, J. Gong, C.A. Muller. Phys. Rev. B **85**, 104 201 (2012).
- [8] M. Barbier, P. Vasilopoulos, F.M. Peeters. E-print archives, cond-mat/1101.4117 V 1 (2011).
- [9] L. Wang, X. Chen. E-print archives, cond-mat. Mes-hall/1008.0504 V 1 (2010).
- [10] L. Wang, S. Zhu. Phys. Rev. B **81**, 205 444 (2010).
- [11] V.H. Nguyen, A. Bournel, P. Dollfus. Semicond. Sci. Technol. **26**, 125 012 (2011).
- [12] M. Barbier, P. Vasilopoulos, F.M. Peeters. Phys. Rev. B **80**, 205 415 (2009).
- [13] P. Zhao, X. Chen. E-print archives, cond-mat.mes-hall/1111.1754 V 1 (2011).
- [14] T. Ma, C. Liang, L. Wang, X. Chen. E-print archives, cond-mat. 1754 V 1 (2012).
- [15] Yu.P. Bliokh, V. Freilikher, S. Savel'ev, F. Nori. Phys. Rev. B **79**, 075 123 (2009).
- [16] П.В. Ратников, Письма в ЖЭТФ **90**, 515 (2009).
- [17] J.C. Meyer, C.O. Girit, M.F. Crommie, A. Zetti. Appl. Phys. Lett. **92**, 123 110 (2008).
- [18] P.W. Sutter, J. Flege, E.A. Sutter. Natur. Mater. **7**, 406 (2008).
- [19] J. Coraux, A.T. N'Diaye, C. Busse, T. Micheli. Nano Lett. **8**, 565 (2008).
- [20] Y.W. Son, M.L. Cohen, S.G. Louie. Phys. Rev. Lett. **97**, 216 803 (2006).
- [21] M.Y. Han, B. Ozyilmaz, Y. Zhang, F. Kim. Phys. Rev. Lett. **98**, 206 805 (2007).
- [22] G. Giovanetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, P. Kelly, J. van der Brink. Phys. Rev. B **76**, 073 103 (2007).
- [23] S.Y. Zhou, G. Gweon, A.V. Fedorov, F. Guinea, A.H. Castro Neto, A. Lanzara, P. First, W. de Heer, D.-H. Lee. Natur. Mater. **6**, 770 (2007).
- [24] R. Balog, B. Jorgensen, L. Nilsson, M. Anderson, E. Rienks, M. Bianchi. Natur. Mater. **9**, 315 (2010).
- [25] S. Casolo, R. Martinazzo, G.F. Tantardini. J. Phys. Chem. C **115**, 8, 3250 (2011).
- [26] А.Н. Король. ФТТ **36**, 2339 (1994).
- [27] А.Н. Король. Письма в ЖЭТФ **59**, 659 (1994).