12,18

Влияние межслойного взаимодействия на электронный спектр вертикальной сверхрешетки

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergei_Davydov@mail.ru

Поступила в Редакцию 30 мая 2022 г.
В окончательной редакции 1 июля 2022 г.
Принята к публикации 2 июля 2022 г.

Методом функций Грина получены аналитические выражения законов дисперсии для сверхрешетки с двумя чередующимися двумерными слоями. Подробно анализируется режим слабого межслойного взаимодействия. В качестве примеров рассмотрены сверхрешетки графен (Gr) — h-BN (*1*), AlN — GaN (*2*), Gr — Ni (*3*) и h-BN — Ni (*4*). Показано: 1) в слоях h-BN, AlN, GaN и Ni эффективные массы электрона увеличиваются; 2) скорость Ферми электрона в слоях бесщелевого Gr в решетке (*1*) понижается, а в решетке (*3*) остается постоянной; 3) в решетках (*1*) и (*2*) запрещенные зоны h-BN, AlN и GaN сужаются, в решетке (*4*) запрешенная зона h-BN расширяется.

Ключевые слова: дисперсия электронов, фермиевская скорость, эффективная масса, графененоподобное соединение, двумерный ферромагнитный металл.

DOI: 10.21883/FTT.2022.11.53342.392

1. Введение

Открытие уникальных свойств графена породило два направления исследований: 1) поиск новых двумерных (2D) материалов и 2) разработка способов создания гетеропереходов и сверхрешеток (SL) на их основе [1–3]. Такая деятельность оказалась вполне успешной: на сегодняшний день существуют атласы, содержащие многие сотни теоретически возможных 2D-материалов [4–7], и разработаны различные схемы формирования 2DSL [8–10]. В настоящей работе мы предложим модель электронного спектра вертикальных 2DSL, построенную на основе теории эпитаксиальных слоев [11]. Такая схема позволяет, не учитывая явно геометрию межслойных контактов, получить характеристики спектра в аналитическом виде. Основной целью работы является ответ на вопрос: как межслойное взаимодействие влияет на электронные характеристики слоев, составляющих SL.

В качестве образующих 2DSL-монослоев в настоящей работе, помимо графена, рассмотрены графеноподобные соединения (GLC) типа A_3B_5 [11,12]. Основанием для этого является потенциальная возможность успешного использования решетки GLC в наноэлектронике по аналогии с применением 3D-соединений A_3B_5 в микроэлектронике [13–20]. Обсуждаются также SL с ферромагнитными металлическими слоями, представляющие интерес для спинтроники.

2. Модель

Начнем с рассмотрения набора вертикально расположенных 2D-листов. Без учета взаимодействия между листами функция Грина листа имеет вид $G(\boldsymbol{\kappa}, \omega)$, где ω — энергетическая переменная, $\boldsymbol{\kappa}$ — волновой вектор для движения электрона в плоскости (x, y) листа. Перейдем теперь к SL, построенной из чередующихся листов 1 и 2. Воспользовавшись уравнением Дайсона [11], для диагональных функций Грина $\widetilde{G}_{11}(\boldsymbol{\kappa}_1, k_z; \omega)$ слоев 1, взаимодействующих с соседними слоями 2, запишем цепочку уравнений

$$\widetilde{G}_{11}(\boldsymbol{\kappa}_1, k_z; \omega) = G_{11}(\boldsymbol{\kappa}_1; \omega) + G_{11}(\boldsymbol{\kappa}_1; \omega)$$

$$\times \sum_{\boldsymbol{\kappa}_2, \boldsymbol{\kappa}'_1} V(\boldsymbol{\kappa}_1, \boldsymbol{\kappa}_2)\big[G^{>}_{21}(\boldsymbol{\kappa}_2, \boldsymbol{\kappa}'_1, k_z; \omega) + G^{<}_{21}(\boldsymbol{\kappa}_2, \boldsymbol{\kappa}'_1, k_z; \omega)\big],$$

$$G^{>}_{21}(\boldsymbol{\kappa}_2, \boldsymbol{\kappa}_1, k_z; \omega) = G_{22}(\boldsymbol{\kappa}_2; \omega) V(\boldsymbol{\kappa}_2, \boldsymbol{\kappa}_1) \widetilde{G}_{11}(\boldsymbol{\kappa}_1, k_z; \omega)$$

$$\times (1 + e^{2ik_z d}),$$

$$G^{<}_{21}(\boldsymbol{\kappa}_2, \boldsymbol{\kappa}_1, k_z; \omega) = G_{22}(\boldsymbol{\kappa}_2; \omega) V(\boldsymbol{\kappa}_2, \boldsymbol{\kappa}_1) \widetilde{G}_{11}(\boldsymbol{\kappa}_1, k_z; \omega)$$

$$\times (1 + e^{-2ik_z d}), \tag{1}$$

где $V(\boldsymbol{\kappa}_1, \boldsymbol{\kappa}_2)$ — недиагональный матричный элемент, связывающий состояния $|\boldsymbol{\kappa}_1\rangle$ и $|\boldsymbol{\kappa}_2\rangle$, k_z — волновой вектор для движения электрона в направлении нормали к плоскости (x, y) оси z, d — межплоскостное расстояние, обозначения $>$ и $<$ относятся к плоскостям, лежащим соответственно выше и ниже рассматриваемой плоскости. Оставляя под знаком суммы в выражении (1) для $\widetilde{G}_{11}(\boldsymbol{\kappa}_1, k_z; \omega)$ только члены с $\boldsymbol{\kappa}_1 = \boldsymbol{\kappa}'_1$ (диагональное приближение), имеем

$$\widetilde{G}_{11}(\boldsymbol{\kappa}_1, k_z; \omega) = G_{11}(\boldsymbol{\kappa}_1; \omega)/D(\boldsymbol{\kappa}_1, k_z; \omega),$$

$$D(\boldsymbol{\kappa}_1, k_z; \omega) = 1 - 4\cos^2(k_z, d) G_{11}(\boldsymbol{\kappa}_1; \omega) \times \sum_{\boldsymbol{\kappa}_2} G_{22}(\boldsymbol{\kappa}_2, k_z; \omega) V(\boldsymbol{\kappa}_1, \boldsymbol{\kappa}_2) V(\boldsymbol{\kappa}_2, \boldsymbol{\kappa}_1). \quad (2)$$

Полагая

$$\sum_{\boldsymbol{\kappa}_1(\boldsymbol{\kappa}_2)} G_{11(22)}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) V(\boldsymbol{\kappa}_1, \boldsymbol{\kappa}_2) V(\boldsymbol{\kappa}_2, \boldsymbol{\kappa}_1) = \Sigma_{1(2)}(\omega) \quad (3)$$

и заменяя у диагональных функций Грина слоев индексы 11 и 22 на индексы 1 и 2, получим для функций Грина SL выражения вида

$$\widetilde{G}^{-1}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = G^{-1}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) - 4\cos^2(k_z d) \Sigma_{2,1}(\omega), \quad (4)$$

где $\mathbf{k}_{1,2} = (\boldsymbol{\kappa}_{1,2}, k_z)$. Представим собственно-энергетическую функцию $\Sigma_{1(2)}(\omega)$ в виде разности $\Lambda_{1(2)}(\omega) - i\Gamma_{1(2)}(\omega)$, где $\Gamma_{1(2)}(\omega)$ и

$$\Lambda_{1,2}(\omega) = \pi^{-1} P \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_{1,2}(\omega')(\omega - \omega')^{-1} d\omega'$$

(P — символ главного значения интеграла) являются соответственно функциями уширения и сдвига зонных состояний слоя 2 (1) под воздействием слоя 1 (2) [11]. Положим $\Gamma_{1(2)}(\omega) = \pi V^2 \rho_{1,2}(\omega)$, где $\rho_{1,2}(\omega)$ — плотности состояний свободных слоев 1 и 2, $V^2 = \langle V(\boldsymbol{\kappa}_1, \boldsymbol{\kappa}_2) V(\boldsymbol{\kappa}_2, \boldsymbol{\kappa}_1)\rangle_{ZB_{1,2}}$ и скобки $\langle \ldots \rangle_{ZB_{1,2}}$ означают усреднение по 2D зонам Бриллюэна слоев 1 и 2.

В дальнейшем будем считать, что межслойное взаимодействие V является слабым (см. подробнее ниже). На этом основании гладкими функциями $\Gamma_{1,2}(\omega)$ можно пренебречь (т. е. игнорировать конечное время жизни электронных состояний $\tau_{1,2} \sim \hbar/\Gamma_{1,2}(\omega)$, где $\hbar$ — приведеная постоянная Планка), тогда как функциями $\Lambda_{1,2}(\omega)$, имеющими логарифмические расходимости на границах областей сплошного спектра (см. ниже), пренебрегать априорно нельзя. Воспользовавшись сделанным упрощением, получим функции Грина

$$\widetilde{G}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = (2d/\pi) \int_0^{\pi/2d} \widetilde{G}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}, k_z; \omega) dk_z,$$

характеризующие слои SL, в виде

$$\widetilde{G}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = \frac{1 + (2/\pi)\operatorname{sgn}[A_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega)] \arcsin |A_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega)|}{\sqrt{1 - A^2_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega)}} \times \bar{G}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega), \quad (5)$$

где $A_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = 2\bar{G}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega)\Lambda_{2,1}(\omega)$, $\bar{G}^{-1}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = G^{-1}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) - 2\Lambda_{2,1}(\omega)$. Из (4) следует, в частности, что $\widetilde{G}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = G_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega)$ при $V_{\alpha\beta} = 0$. Законы дисперсии электронов для листов SL определяются из уравнений $\bar{G}^{-1}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = \pm 2\Lambda_{2,1}(\omega)$. Эти уравнения дают две группы зон. При $\bar{G}^{-1}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = -2\Lambda_{2,1}(\omega)$ получаем уравнение

$$G^{-1}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = 0, \quad (6)$$

решения которого совпадают с зонами свободных слоев 1 и 2. Из (5) следует, что при этом весовой множитель перед функцией Грина $\bar{G}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega)$ обращается в 0. При $\bar{G}^{-1}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = +2\Lambda_{2,1}(\omega)$ получаем уравнение

$$G^{-1}_{1,2}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2}; \omega) = 4\Lambda_{2,1}(\omega), \quad (7)$$

определяющее перенормированные зоны, которые мы в дальнейшем будем называть зонами решеточных слоев. Для дальнейшего анализа нужно переходить к конкретным структурам.

3. Сверхрешетки графеноподобных соединений

Функция Грина свободного бинарного GLC (в расчете на один атом элементарной ячейки) имеет следующий вид [11]:

$$G_{\mathrm{GLC}}(\boldsymbol{\kappa}; \omega) = \Omega/(\Omega - R(\boldsymbol{\kappa}))(\Omega + R(\boldsymbol{\kappa})). \quad (8)$$

Здесь $\Omega = \omega - \bar{\varepsilon}$, $R(\boldsymbol{\kappa}) = \sqrt{\Delta^2 + t^2 f^2_{\mathrm{GLC}}(\boldsymbol{\kappa})}$, $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_a + \varepsilon_b)/2$, $\Delta = |\varepsilon_a - \varepsilon_b|/2$, ε_a и ε_b — энергии p-орбиталей образующих GLC атомов A и B, t — энергия перехода электрона между соседними атомами A и B, отстоящими друг от друга на расстоянии a,

$$f_{\mathrm{GLC}}(\boldsymbol{\kappa}) = \sqrt{3 + 2\cos(\kappa_x a\sqrt{3}) + 4\cos(\kappa_x a\sqrt{3}/2)\cos(3\kappa_y a/2)}. \quad (9)$$

В низкоэнергетическом приближении функция (9) переходит в $f_{\mathrm{GLC}}(\mathbf{q}) = 3a|\mathbf{q}|/2$, где $\mathbf{q} = \mathbf{K} - \boldsymbol{\kappa}$ и $\mathbf{K} = a^{-1}(2\pi/3\sqrt{3}, 2\pi/3)$ — волновой вектор точки Дирака. Плотность состояний GLC имеет вид

$$\rho_{\mathrm{GLC}}(\Omega) = \begin{cases} 2|\Omega|/\xi^2, & \Delta \le |\Omega| \le \bar{R}, \\ 0, & |\Omega| < \Delta, |\Omega| > \bar{R}, \end{cases} \quad (10)$$

где $\xi = \sqrt{2\pi\sqrt{3}t}$ и $\bar{R} = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}$ [11], а соответствующая функция сдвига, согласно [21], равна

$$\Lambda_{\mathrm{GLC}}(\Omega) = \frac{2V^2}{\xi^2}\,\Omega \ln\left|\frac{\Omega^2 - \Delta^2}{\Omega^2 - R^2}\right|. \quad (11)$$

Для перехода к графену в формулах (8), (10) и (11) нужно положить $\Delta = 0$.

Слабость межслойной связи, о крторой говорилось выше, определяется условием $(V/\xi)^2 \ll 1$. Отсюда уже при $V = t$ имеем $(V/\xi)^2 = 1/2\pi\sqrt{3} \sim 0.1$ (ковалентная связь). Таким образом, использованное нами приближение отнюдь не сводится только к ван-дер-ваальсовому межслойному взаимодействию, для которого $V/t \sim 0.1$ и $(V/\xi)^2 \sim 0.01$. Здесь и далее для всех GLC значения энергий перехода между ближайшими соседями определялось по формулам Харрисона для π-связи [22]; по поводу оценок параметра V см. [23]. Отметим, однако, что реальное значение V во многом определяется технологией изготовления сверхрешетки. Действительно, в отсутствии и при наличии разориентации решеток контауктирующих слоев эффективное взаимодействие между ними, описываемое в нашей модели параметром V, значительно различается. Так, например, в случае гетероперехода однослойный графен (Gr) — гексагональный нитрид бора (h-BN) любая разориентация приводит к практическому исчезновению щели в спектре графена [24].

Начнем рассмотрение сверхрешеток графеноподобных соединений (SL GLC) со структуры, состоящей из листов Gr (в дальнейшем лист 1) и h-BN (в дальнейшем лист 2). Считая графен бесщелевым [24], можно положить $\bar{\varepsilon} = \bar{\varepsilon}_1 = \bar{\varepsilon}_2 = 0$ и $\Delta_2 = t$ [25], где, игнорируя несущественное различие значений a_1 и a_2, мы приняли $t = t_1 = t_2$. Из (7) получаем

$$\omega\left(1 - \frac{8V^2}{\xi^2}\ln\left|\frac{\omega^2 - t^2}{\omega^2 - t^2 - \xi^2}\right|\right) \mp -\frac{3taq}{2} = 0, \qquad (12)$$

$$\omega^2\left(1 - \frac{8V^2}{\xi^2}\ln\left|\frac{\omega^2}{\omega^2 - \xi^2}\right|\right) - \frac{9t^2(aq)^2}{4} - t^2 = 0, \qquad (13)$$

где уравнения (12) и (13) относятся соответственно к слоям бесщелевого Gr и h-BN. При $V = 0$ и $q = 0$ из (12) получаем решение $\omega_0 = 0$, из (13) — решения $\omega_0^{\pm} = \pm t$. Тогда в окрестности точки Дирака $\mathbf{K}$ имеем дисперсии вида

$$\omega_1^{\pm}(q) \approx \pm 3\eta^2 taq/2,$$

$$\omega_2^{\pm}(q) \approx \pm\eta t\sqrt{1 + (3aq/2)^2},] \qquad (14)$$

где $\eta = \left[1 + 8V^2/\xi^2)\ln(2\pi\sqrt{3} - 1)\right]^{-1/2} \approx 1/\sqrt{1 + 20(V/\xi)^2}$. Из (14) следует, во-первых, что фермиевская скорость электронов в графеновых слоях SL равна $\tilde{v}_F = \eta^2 v_F < v_F$, где $v_F = 3at/2\hbar$ — фермиевская скорость в свободном Gr. Во-вторых, эффективная масса электронов в решеточных слоях h-BN равна $\tilde{m}^* = m^*/\eta > m^*$, где $m^* = 4\hbar^2/9a^2t$ — эффективная масса в свободном h-BN ($m^*/m_e \approx 0.80$ [11], m_e — масса свободного электрона). При этом запрещенная зона решеточного слоя h-BN равна $\widetilde{E}_g = \eta E_g < E_g$, где $E_g = 2t$ — ширина запрещенной зоны в свободном листе h-BN. Отметим, что в силу симметричного расположения зон относительно $\bar{\varepsilon} = 0$ переход заряда между слоями Gr и h-BN в SL отсутствует.

Интересно сопоставить полученные нами результаты с расчетами из первых принципов других авторов. Так, например, в работе [26] продемонстрировано, что взаимовлияние слоев графена и h-BN можно рассматривать как возмущение, т.е. считать слабым. (Подобное утверждение в тексте работы [26] отсутствует, но это следует из сравнения между собой рис. 6, *a, d* и *e*). В [27] показано, что слои h-BN наводят в графене щель в окрестности точки Дирака порядка 0.1 eV. В нашем подходе щель отсутствует, так как геометрическая структура контакта Gr/h-BN не учитывается и функция сдвига (11) одинакова для обеих подрешеток графена. Отметим, что в последние годы большое внимание уделяется муаровым эффектам в сверхрешетках Gr/h-BN [28,29].

Рассмотрим теперь SL, сформированную 2D-слоями AlN (лист 1) и GaN (лист 2). Воспользовавшись результатами работы [30], где рассматривались свободные слои этих соединений, положим $\bar{\varepsilon} = \bar{\varepsilon}_1 = \bar{\varepsilon}_2 = 0$, $\Delta_1 = 2.5$ eV, $\Delta_2 = 2.0$ eV. Таким образом, контакт слоев AlN и GaN представляет собой охватывающий (straddling) гетеропереход [31]. Тогда спектры решеточных слоев AlN и GaN в окрестности точки Дирака $\mathbf{K}$ имеет вид

$$\omega_{1,2}^{\pm}(q_{1,2}) \approx \pm\eta_{1,2}\sqrt{\Delta_{1,2}^2 + (3t_{1,2}a_{1,2}q_{1,2}/2)^2}, \qquad (15)$$

где

$$\eta_{1,2} = \left\{1 + (8V^2/\xi_{2,1}^2)\ln\left[(\xi_{2,1}^2 - \Delta_1^2 - \Delta_2^2)/(\Delta_1^2 - \Delta_2^2)\right]\right\}^{-1/2}.$$

Соответствующие эффективные массы равны

$$\tilde{m}_{1,2}^* = m_{1,2}^*/\eta_{1,2} > m_{1,2}^*, \qquad (16)$$

где $m_{1,2}^* = 4\hbar^2\Delta_{1,2}/9a_{1,2}^2t_{12,2}^2$. Так как $a_1 = 1.80$ Å, $a_2 = 1.88$ Å, $t_1 = 1.48$ eV, $t_2 = 1.36$ eV [30], имеем $m_1^*/m_e = 1.19$ (AlN) и $m_2^*/m_e = 1.04$ (GaN) [31]. Для коэффициентов получаем $\eta_1 \approx 1/\sqrt{1 + 12(V/\xi_2)^2}$, $\eta_2 \approx 1/\sqrt{1 + 14(V/\xi_1)^2}$, где $\xi_1 \approx 4.9$ eV, $\xi_2 \approx 4.5$ eV. $\widetilde{E}_{g1,2} = E_{g1,2}/\eta_{1,2} < E_{g1,2}$, где $E_{g1,2} = 2\Delta_{1,2}$. Для примера приведем эффективные массы электронов для 3D-соединений BN, AlN, GaN со структурой вюрцита, равные соответственно $m_{\parallel}^*/m_e = 0.35$ и $m_{\perp}^* = 0.24$, $m^*/m_e = 0.4$, $m^*/m_e = 0.2$ [32]. Таким образом, при межслойном ван-дер-ваальсовом взаимодействии эффективные массы электронов в решоточных слоях соединений h-BN, AlN и GaN увеличивается на $\sim 5-10\%$, в том же процентном отношении сужаются их запрещенные зоны. Графеновые слои при контакте со слоями h-BN считаются бесщелевым, но скорость Ферми электронов снижается на $\sim 20\%$. Отметим, что аналогичным образом можно рассмотреть SL, где одним из компонентов является щелевой (gapped) Gr, электронный спектр которого и плотность состояний описывается теми выражениями, что и GLC (h-BN, AlN, GaN).

4. Сверхрешетки с металлическими ферромагнитными слоями

Устойчивый интерес к магнитным SL (MSL) возник в связи с проблемами спинтроники и появился даже новый термин „spinterface", обозначающий контакт ферромагнитного и немагнитного слоев (см. [23,34] и ссылки, там приведенные). Здесь мы рассмотрим MSL, образованные графеном или h-BN с 2D ферромагнитным никелем.

Свойства моноатомных 2D-металлов описаны в [35], где, в частности, показано, что устойчивой структурой в этом случае является треугольная решетка. Тогда функцию Грина 2D-ферромагнетика (2DFM) для проекции спина σ можно записать как

$$G^{\sigma 1}_{\mathrm{FM}}(\boldsymbol{\kappa}_m;\omega) = (\omega - \varepsilon^{\sigma}_{\mathrm{FM}}(\boldsymbol{\kappa}_m) + i0^+)^{-1},$$

где

$$\varepsilon^{\sigma}_{\mathrm{FM}}(\boldsymbol{\kappa}_m) = \varepsilon^{\sigma}_0 - t_m f_{\mathrm{FM}}(\boldsymbol{\kappa}_m),$$

$$f(\boldsymbol{\kappa}_m) = 2\cos(\kappa_{mx}a_m) + 4\cos(\kappa_{mx}a_m/2)\cos(\sqrt{3}\kappa_{my}a_m/2), \tag{17}$$

где t_m — энергия перенхода электрона между бдижайшими атомами, находящимися на расстоянии a_m [36]. Вблизи дна σ-подзоны

$$\varepsilon^{\sigma}_{\mathrm{FM}}(\mathbf{q}) \approx \varepsilon_{0\sigma} - 6t_m + 3t_m q_m^2 a_m^2/2,$$

где $\mathbf{q}_m = \mathbf{K}_m - \boldsymbol{\kappa}_m$ и $\mathbf{K}_m = a_m^{-1}(2\pi/2, 2\pi/\sqrt{3})$, так что эффективная масса электрона свободного 2DFM равна $m_{\mathrm{FM}} = \hbar^2/6t_m a_m^2$. Хотя аналитическое выражение для плотности состояний известно [36,37], мы здесь прибегнем к аппроксимации, уже использованной нами в работе [38], где рассматривался эпитаксиальный Gr, сформированный на FM металлической подложке.

Представим плотность состояний 2DFM в виде

$$\rho^{\sigma}_{\mathrm{FM}}(\omega) = \begin{cases} 5/W_d, & |\omega - \varepsilon_{0\sigma}| \le W_d/2, \\ 0, & |\omega - \varepsilon_{0\sigma}| > W_d/2, \end{cases} \tag{18}$$

где W_d — ширина d-зоны, $\omega_{)\sigma}$ — энергия центра σ-подзоны. Такая плотность состояний соответствует магнетизму Стонера [39] в модели Фриделя [40]. Полагая $\Gamma = 5\pi V^2/W_d$, легко показать, что

$$\Lambda^{\sigma}_{\mathrm{FM}}(\omega) = (\Gamma/\pi)\ln\left|\frac{\omega - \varepsilon_{0\sigma} + W_d/2}{\omega - \varepsilon_{0\sigma} - W_d/2}\right|. \tag{19}$$

Число электронов в $d\sigma$-состоянии равно

$$N^{\sigma}_{\mathrm{FM}} = 5(E_F - \varepsilon_{0\sigma} + W_d/2)/W_d, \tag{20}$$

где E_F — уровень Ферми. В дальнейшем в качестве 2DFM будем рассматривать Ni. Округляя данные [40] по числам заполнения массивного никеля (см. табл. 2.1 в [40]), т. е. полагая $N^{\uparrow}_{\mathrm{met}}(\mathrm{Ni}) = 5$, $N^{\downarrow}_{\mathrm{met}}(\mathrm{Ni}) = 4$, при получим $E_F - \varepsilon_{0\uparrow} = 0.5W_d$ и $E_F - \varepsilon_{0\downarrow} = 0.3W_d$. Так как экспериментальное значение $W_d(\mathrm{Ni}) = 5.4\,\mathrm{eV}$ [36] и $W_d = 9t_m$ [36], получаем $T_m = 0.6\,\mathrm{eV}$. Здесь следует отметить два обстоятельства. Во-первых, как продемонстрировано в [35], характеристики 2D- и 3D-металлов близки. Во-вторых, в [41] показано, что намагниченности на поверхности и в объеме массивных образцов никеля практически совпадают. Именно это дает нам основания использовать результаты [39,40] для 3DFM для описания 2DFM.

В качестве примера MSL, рассмотрим структуру, состоящую из слоев бесщелевого Gr (лист 1) и 2D-никеля (лист 2). Такая структура сформирована [42] и к настоящему времени сравнительно хорошо изучена [43–45]. Как и в [35], положим работы выхода Gr и 2D Ni равными, исключив тем самым межслойный переход заряда. Уравнение (7) теперь преобразуется к виду

$$\left[G^{\sigma}_{\mathrm{Gr}}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2};\omega)\right]^{-1} = 4\Lambda^{\sigma}_{\mathrm{FM}}(\omega),$$

$$\left[G^{\sigma}_{\mathrm{FM}}(\boldsymbol{\kappa}_{1,2};\omega)\right]^{-1} = 4\Lambda_{\mathrm{Gr}}(\omega), \tag{21}$$

откуда для решеточных слоев Gr и Ni соответственно получаем

$$\omega - \frac{8\Gamma}{\pi}\ln\left|\frac{\omega - \varepsilon_{0\sigma} + W_d/2}{\omega - \varepsilon_{0\sigma} - W_d/2}\right| \mp \frac{3ta_1q_1}{2} = 0, \tag{22}$$

$$\omega\left(1 - \frac{8V^2}{\xi^2}\ln\left|\frac{\omega^2}{\omega^2 - \xi^2}\right|\right) - \varepsilon_{0\sigma} + 6t_m - \frac{3t_m(a_m q_m)^2}{2} = 0. \tag{23}$$

Из (22) следует, что зоны Gr зависят от спина, наведенного слоями 2D Ni. Это проявление так называемого эффекта близости (proximity effect). При этом скорость Ферми электрона не изменяется, оставаясь равной $v_F = 3at/2\hbar$. Для решеточных слоев 2D Ni спин-зависимая эффективная масса равна

$$\tilde{m}^{\sigma}_{\mathrm{FM}} \approx m_{\mathrm{FM}}/\eta_{n\sigma} > m_{\mathrm{FM}}, \tag{24}$$

где $\eta_{m\sigma} = \left[1 + (8V^2/\xi^2)\ln(\xi^2 - \omega^2_{0\sigma})/\omega^2_{\sigma 0}\right]^{-1}$, $\omega_{0\sigma} = \varepsilon_{0\sigma} - 6t_m$. Так как $\varepsilon_{0\uparrow} = -2.70\,\mathrm{eV}$, $\omega_{0\uparrow} = -6.30\,\mathrm{eV}$ и $\varepsilon_{0\downarrow} = -1.62\,\mathrm{eV}$, $\omega_{0\uparrow} = -5.22\,\mathrm{eV}$ имеем $\eta_{m\uparrow} \approx [1 + 0.1(V/\xi)^2]^{-1}$ и $\eta_{m\downarrow} \approx [1 + 3(V/\xi)^2]^{-1}$. Таким образом, эффективная масса электронов в решеточных слоях никеля при ван-дер-ваальсовой связи со слоями графена почти такая же, как и в изолированных слоях. Отметим, что понятие о зависимости эффективной массы носителя от его спина используется достаточно давно и широко (см., например, [46–50]). Можно ввести также эффективную массу, зависящую от энергии [51].

Пусть теперь в качестве листов 1 выступает h-BN (см. [45]). Тогда имеем уравнения

$$\omega^2 - \frac{8\omega\Gamma}{\pi}\ln\left|\frac{\omega - \varepsilon_{0\sigma} + W_d/2}{\omega - \varepsilon_{0\sigma} - W_d/2}\right| - \frac{9t^2(aq)^2}{4} - t^2 = 0, \tag{25}$$

$$\omega\left(1 - \frac{8V^2}{\xi^2}\ln\left|\frac{\omega^2 - t^2}{\omega^2 - t^2 - \xi^2}\right|\right) - \varepsilon_{0\sigma} + 6t_m - \frac{3t_M(a_m q_m)^2}{2} = 0. \tag{26}$$

Из (25) следует, что зоны слоев h-BN под влиянием слоев Ni расщепляются на σ-подзоны (эффект близости). Заменив в (25) логарифм на $L_{\pm}^{\sigma}(\varepsilon_{0\sigma}) = \ln\left|(\pm t - \varepsilon_{0\sigma} + W_d/2)/(\pm t - \varepsilon_{0\sigma} - W_d/2)\right|$, получим решение вида

$$\omega_{\pm}^{\sigma}(\mathbf{q}) = \left(4\Gamma L_{\pm}^{\sigma}(\varepsilon_{0\sigma})/\pi\right) \pm R_{\pm}^{\sigma}(\mathbf{q}), \qquad (27)$$

где $R_{\pm}^{\sigma}(\mathbf{q}) = \left[\left(4\Gamma L_{\pm}^{\sigma}(\varepsilon_{0\sigma})/\pi\right)^2 + t^2 + (3ta\mathbf{q}/2)^2\right]^{1/2}$, нижние индексы у функции $L_{\pm}^{\sigma}(\varepsilon_{0\sigma})$ соответствуют знакам перед t и слагаемым $R_{\pm}^{\sigma}(\mathbf{q})$. Эффективные массы электронов в слях h-BN и Ni равны соответственно

$$\tilde{m}_{\mathrm{GLC}}^{\sigma} = m^*/\eta_{\mathrm{GLC}}^{\sigma} > m^*, \;\; \tilde{m}_{\mathrm{FM}}^{\sigma} = m_{\mathrm{FM}}/\eta_m^{\sigma} > m_{\mathrm{FM}}, \qquad (28)$$

где

$$\eta_{\mathrm{GLC}}^{\sigma} = [1 + (4\Gamma L_{+}^{\sigma}/t)^2]^{-1.2}, \quad m^* = 4\hbar^2/9a^2t,$$

$$\eta_m^{\sigma} = [1 + (8V^2/\xi^2)L_m^{\sigma}(\omega_{0\sigma})]^{-1}, \quad m^* = 4\hbar^2/9a^2t,$$

$$L_m^{\sigma} = \ln[(\xi^2 - \omega_{0\sigma}^2 - t^2)/(\omega_{0\sigma}^2 - t^2)]^{-1}.$$

Так как $L_{+}^{\uparrow} = 1.1$ и $L_{+}^{\downarrow} = 1.4$, оценки для решеточных слоев h-BN дают $\eta_{\mathrm{GLC}}^{\uparrow} \sim 1/\sqrt{1 + 2V^2/t_m t}$ и $\eta_{\mathrm{GLC}}^{\downarrow} \sim 1/\sqrt{1 + 3V^2/t_m t}$. Отметим, что при $t_m \sim t$ отношение $V^2/t_m t \sim 2\pi\sqrt{3}(V/\xi)^2$. При ван-дер-ваальсовом межслойном взаимодействии $V^2/t_m t \sim 0.1$, так что эффективные массы увеличиваются на 20−30%. Далее, в отличии от случая графеноподобных SL, имеем $\widetilde{E}_g^{\sigma} = E_g/\eta_{\mathrm{GLC}}^{\sigma} > E_g$, т.е. имеет место существенное увеличение ширины запрещенных зон. Для решеточных слоев Ni имеем $L_m^{\uparrow} = 0.15$ и $L_m^{\downarrow} = 0.80$, откуда получаем $\eta_m^{\uparrow} \sim [1 + (V/\xi)^2]^{-1}$ и $\eta_m^{\downarrow} \sim [1 + 6(V/\xi)^2]^{-1}$, что отвечает слабому увеличению эффективной массы. Аналогичным образом можно рассмотреть SL, образованную щелевым Gr и 2D Ni.

5. Заключение

В настоящей работе мы рассмотрели 2DSL графен — h-BN, AlN — GaN, Gr — Ni и h-BN — Ni. Во всех рассмотренных случаях эффективные массы электронов в слоях h-BN, AlN и GaN увеличивается; для бесщелевого графена скорость Ферми электронов снижается. В первых двух случаях межслойное взаимодействие приводит к сужению запрещенных зон GLC. В решетках Gr — Ni и h-BN — Ni скорость Ферми электрона в графеновых слоях такая же, что и в свободном графене. Эффективная масса электрона в никелевых слоях в решетке Gr — Ni хоть и увеличивается, но очень слабо. В случае решетки h-BN — Ni эффектианая масса электрона и ширина запрещенной зоны слоя h-BN возрастают существенно.

К сожалению, мы не нашли в литературе каких-либо данных, с которыми можно было бы сравнить отмеченные результаты. Дело в том, что во всех известных нам работах рассматривался исключительно вертикальный транспорт. Мы же оценивали характеристики электрона, движущегося в составляющих 2DSL-слоях.

Итак, мы предложили сравнительно простую (игнорирующую геометрию контакта) схему оценки взаимовлияния компонентов 2DSL на электронный спектр образующих эту решетку слоев. Аналогичным образом в качестве составляющих 2DSL можно рассмотреть графан [52], флюорографен [53] или, шире, соединения типа h-AB — C [54]. Более того, предложенная схема позволяет достаточно легко описать 2DSL составленные из трех, четырех и т.д. типов 2D-соединений.

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

[1] A.K. Geim, I.V. Grigorieva. Nature **499**, 419 (2013).
[2] И.В. Антонова. ФТП **50**, 67 (2016).
[3] K.S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, A.H. Castro Neto. Science **353**, 9439 (2016).
[4] S. Haastrup, M. Strange, M. Pandey, T. Deilmann, P.S. Schmidt, N.F. Hinsche, M.N. Gjerding, D. Torelli, P.M. Larsen, A.C. Riis-Jensen, J. Gath, K.W. Jacobsen, J.J. Mortensen, T. Olsen, K.S. Thygesen. 2D Mater. **5**, 042002 (2018).
[5] N. Briggs, S. Subramanian, Z. Lin, X. Li, X. Zhang, K. Zhang, K. Xiao, D. Geohegan, R. Wallace, L.-Q. Chen, M. Terrones, A. Ebrahimi, S. Das, J. Redwing, C. Hinkle, K. Momeni, A. van Duin, V. Crespi, S. Kar, J.A. Robinson. 2D Mater. **6**, 022001 (2019).
[6] L. Vannucci, U. Petralanda, A. Rasmussen, T. Olsen, K.S. Thygesen. J. Appl. Phys. **128**, 105101 (2020).
[7] C. Forsythe, X. Zhou, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Pasupathy, P. Moon, M. Koshino, P. Kim, C.R. Dean. Nature Nanotechnol. **13**, 566 (2018).
[8] Y.K. Ryu, R. Frizenda, A. Castellanos-Gomez. Chem. Commun. **55**, 11498 (2019).
[9] P. Xiong, B. Sun, N. Sakai, R. Ma, T. Sasaki, S. Wang, J. Zhang, G. Wang. Adv. Mater. 1902654 (2019).
[10] C.N.R. Rao, K. Pramoda, A. Saraswat, R. Singh, P. Vishnoi, N. Sagar, A. Hezam. APL Mater. **8**, 020902 (2020).
[11] С.Ю. Давыдов. ФТТ **58**, 779 (2016).
[12] C.-J. Tong, H. Zhang, Y.-N. Zhang, H. Liu, L.-M. Liu. J. Mater. Chem. A **2**, 17971 (2014).
[13] D.L. Smith, C. Mailhiot. Rev. Mod. Phys. **62**, 173 (1990).
[14] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus. Superlattices and other heterostructures. Symmetry and optical phenomena. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer-Verlag (1997). V. 110.
[15] Ж.И. Алферов. ФТП **32**, 3 (1998).
[16] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Щукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алферов, Д. Бимберг. ФТП **32**, 385 (1998).
[17] D. Barkissy, A. Nafidi, A. Boutramine, H. Charifi, A. Saba, H. Chaib. Int. J. Eng. Res. Appl. **4**, 110 (2014).
[18] S. Meia, I. Knezevic. J. Appl. Phys. **118**, 175101 (2015).
[19] M.K. Hudait, M. Clavel, P.S. Goley, Y. Xie, J.J. Heremans, Y. Jiang, Z. Jiang, D. Smirnov, G.D. Sanderse, C.J. Stantone. Mater. Adv. **1**, 1099 (2020).

[20] М.П. Михайлова, К.Д. Моисеев, Ю.П. Яковлев. ФТП **53**, 291 (2019).
[21] С.Ю. Давыдов. ФТП **51**, 226 (2017).
[22] W.A. Harrison. Phys. Rev. B **27**, 3502 (1983).
[23] С.Ю. Давыдов. ФТТ **60**, 808 (2018).
[24] J. Jung, A.M. DaSilva, A.H. MacDonald, S. Adam. Nature Commun. **6**, 6308 (2015).
[25] С.Ю. Давыдов. ФТТ **60**, 1815 (2018).
[26] Y. Sakai, T. Koretsune, S. Saito. Phys. Rev. B **83**, 205434 (2011).
[27] T.P. Kaloni, Y.C. Cheng, U. Schwingenschlögl. J. Mater. Chem. **22**, 919 (2012).
[28] X. Lin, J. Ni. Phys. Rev. B **100**, 195413 (2019).
[29] J. Liu, C. Luo, H. Lu, Z. Huang, G. Long, X. Peng. Molecules **27**, 3740 (2022).
[30] С.Ю. Давыдов. ФТТ **62**, 955 (2020).
[31] Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн. Поверхности и границы раздела полупроводников. Мир, М. (1990).
[32] M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, M.S. Shur. Properties of Advanced Semiconductor Materials. Wiley, N.Y. (2001).
[33] J.-F. Dayen, S.J. Ray, O. Karis, I.J. Vera-Marun, M.V. Kamalakar. Appl. Phys. Rev. **7**, 011303 (2020).
[34] S. Liu, K. Yang, W. Liu, E. Zhang, Z. Li, X. Zhang, Z. Liao, W. Zhang, J. Sun, Y. Yang, H. Gao, C. Huang, L. Ai, P.K.J. Wong, A.T.S. Wee, A.T. N'Diaye, S.A. Morton, X. Kou, J. Zou, Y. Xu, H. Wu, F. Xiu. Natl. Sci. Rev. **7**, 745 (2020).
[35] J. Nevalaita, P. Koskinen. Phys. Rev. B **97**, 035411 (2018).
[36] T. Hanisch, B. Kleine, A. Ritzl, E. Miiller-Hartmann. Ann. Physik **4**, 303 (1995).
[37] E. Kogan, G. Gumbs. arXiv: 2008.05544.
[38] С.Ю. Давыдов. ФТТ **62**, 326 (2020).
[39] Дж. Займан. Принципы теории твердого тела. Мир, М. (1974).
[40] В.Ю. Ирхин, Ю.П. Ирхин. Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d- и f-металлах и их соединениях. УрО РАН, Екатеринбург, Уро РАН (2004).
[41] G. Bertoni, L. Calmels, A. Altibelli, V. Serin. Phys. Rev. B **71**, 075402 (2004).
[42] Yu.S. Dedkov, M. Fonin, C. Laubschat. Appl. Phys. Lett. **92**, 052506 (2008).
[43] Yu.S. Dedkov, M. Fonin. New J. Phys. **12**, 125004 (2010).
[44] A. Dahal, M. Batzil. Nanoscale **6**, 2548 (2014).
[45] M.Z. Iqbal, N.A. Qureshi, G. Hussain. J. Magn. Magn. Mater. **457**, 110 (2018).
[46] J. Mathon. Czech. J. Phys. B **16**, 869 (1966).
[47] L. Leibler. Phys. Rev. B **16**, 863 (1977).
[48] J. Spałek, M.M. Maśka, M. Mierzejewski, J. Kaczmarczyk. arXiv: 2008.3542.
[49] V.F. Los, V.N. Saltanov. J. Magn. Magn. Mater. **242–245**, 495 (2002).
[50] L.M. Wei, K.H. Gao, X.Z. Liu, W.Z. Zhou, L.J. Cui, Y.P. Zeng, G. Yu, R. Yang, T. Lin, L.Y. Shang, S.L. Guo, N. Dai, J.H. Chu, D.G. Austing. J. Appl. Phys. **110**, 063707 (2011).
[51] N. Kotera. J. Appl. Phys. **113**, 234314 (2013).
[52] С.Ю. Давыдов. ФТТ **62**, 2151 (2020).
[53] С.Ю. Давыдов. ФТТ **63**, 158 (2021).
[54] С.Ю. Давыдов. ФТТ **63**, 413 (2021).

Редактор Ю.Э. Китаев