

Расчет транспортных характеристик двуслойного графена с различным углом разориентации

© С.В. Хазанова, В.В. Савельев

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603950 Нижний Новгород, Россия

E-mail: khazanova@phys.unn.ru

Поступила в Редакцию 5 мая 2023 г.

В окончательной редакции 29 июня 2023 г.

Принята к публикации 6 июля 2023 г.

Рассматривается двуслойная муаровая графеновая структура с пространственным периодом изменения энергетических параметров порядка десяти нанометров. Численно исследуется влияние угла разориентации слоев, параметра энергетической щели на вольт-амперную характеристику структуры.

Ключевые слова: двуслойный графен, муаровый узор, скорость Ферми, отрицательная дифференциальная проводимость.

DOI: 10.21883/FTP.2023.05.56203.36k

1. Введение

Основными требованиями, предъявляемыми к современным электронным устройствам, являются минимальные размеры, быстродействие и низкое энергопотребление, поэтому элементная база таких устройств должна основываться на материалах с пониженной размерностью и высокой подвижностью носителей заряда. Большой интерес в последнее время вызывает создание двумерных материалов [1]. В частности, графен — монослой атомов углерода, обладающий рядом уникальных свойств, таких как отличная электропроводность при комнатной температуре, высокие подвижность, теплопроводность, прочность и прозрачность. При этом одним из недостатков изолированного монослоя графена является отсутствие ширины запрещенной зоны, необходимой для управления электронным транспортом приборов. Известно, что прикладывание электрического поля, перпендикулярного к плоскости листа [2], создание периодического потенциала в графене путем его легирования или нанесения на подложку с периодическими свойствами в латеральной плоскости [3] приводит к возникновению энергетической щели, что делает возможным реализацию быстродействующих полупроводниковых приборов нового поколения на его основе.

Устранение недостатков одиночного листа графена достигается также путем использования структур из двух или нескольких слоев двумерных материалов с различными параметрами. При использовании многослойного графена сохраняются достоинства монослойного, в частности, при нанесении на подложку проводимость осуществляется по нижнему слою [4]. В то же время уже двуслойный графен имеет особенности, которые отличают его от монослоя, такие как наличие запрещенной зоны. Возможность обращаться к каждому слою отдельно приводит к совершенно новым функциональным возможностям двуслойного графена, включая контроль ширины

запрещенной зоны до ~ 300 мэВ путем легирования или внешнего напряжения.

Дополнительные возможности открываются при использовании нескольких смещенных друг относительно друга в плоскости листов графена. При смещении двух слоев графена, соответствующие кристаллографические оси которых в латеральной плоскости расположены под некоторым углом (угол разориентации), возникает узор, напоминающий муаровый, появляются периодически расположенные области с различной кристаллографической структурой (так называемые AA упаковка и AB упаковка, также называемая упаковка Бернала) (рис. 1, а), при этом свойства графена периодически меняются. Области с AA упаковкой проявляют полуметаллические свойства, в то время как упаковки AB — полупроводниковые с запрещенной зоной ~ 10 мэВ. Кроме того, при наложении листов вследствие их взаимодействия происходит релаксация решетки, что приводит к уменьшению размера AA областей и, следовательно, к увеличению AB областей [5,6]. Наличие геометрического сверхпериода в бислойе графена приводит к изменениям и в энергетической структуре, причем параметры сверхпериода зависят от угла разориентации. Также различными теоретическими группами показано, что для самых малых углов поворота θ в спектре появляются плоские зоны, что приводит к электронной локализации (очень малой скорости Ферми). Иначе говоря, двуслойный графен весьма сложная структура, которая может вести себя по-разному (баллистическое движение или конфайнмент электронов) в зависимости от угла вращения. Учитывая, что фаза графена с упаковкой типа AA метастабильна, чередование различных упаковок делает структуру более стабильной и дает более широкие возможности для создания устройств на их основе. В частности, данные структуры могут быть использованы для высокочувствительной оптоэлектроники благодаря возникновению сингулярностей Ван Хофа в электронной плотности

состояний [7]. Приборы, созданные на основе подобных графеновых объектов, открывают новый раздел электроники — твистронику [8,9].

2. Объект исследований

В качестве исследуемой структуры рассматривается муаровый графен с малыми углами разориентации

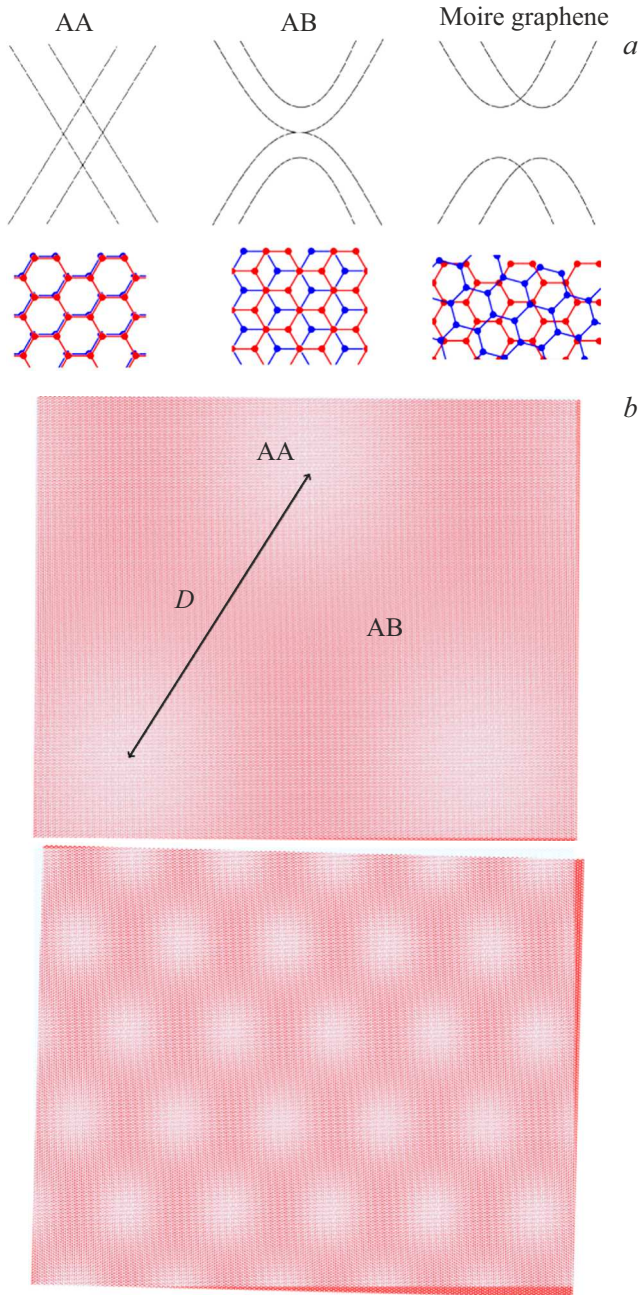


Рис. 1. *a* — структура и зонные диаграммы AA и AB упаковок графена, зонная диаграмма муарового графена в точке *K*; *b* — изображение муарового графена при углах разориентации 0.88° (слева) и 3° (справа). (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).

($\Theta = 0.88$ и 1.2°) ($\Theta = 0.88^\circ$ на рис. 1, *b* слева). В нашей модели двуслойного муарового графена мы представляем, что энергетические свойства одного слоя графена модулируются вторым слоем, повернутым в плоскости относительно первого на заданный угол. Будем считать, что в областях с AA упаковкой параметр запрещенной зоны Δ равен 0, а в AB отличен от нуля. Таким образом, дно зоны проводимости в плоскости муарового графена периодически модулировано с периодом ~ 10 нм (см. рис. 1, *b*). Тогда можно предположить, что в областях типа AA происходит локализация электронных волновых функций [10], что предполагает возможность рассмотрения транспорта по квантовым состояниям.

Известно, что дисперсионная зависимость свободного листа графена линейна. На рис. 1, *a* показаны структура и зонные диаграммы идеальных AA и AB упаковок графена. Создание же структур на основе двуслойного графена с определенной геометрией приводит к возникновению энергетической щели, подобной запрещенной зоне [11,12]. На рис. 1, *b* приведены модели листов муарового графена одинакового размера для углов разориентации $\Theta = 0.88$ и 3° . Узоры, формирующиеся при смещении двух листов, или так называемый „муар“, имеют период D , зависящий от этого угла

$$D = \frac{a}{2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)},$$

где a — постоянная решетки графена, $a \sim 0.246$ нм [13].

На рис. 1, *b* светлые области соответствуют структуре с AA упаковкой, темные — AB. При этом в силу понижения симметрии и снятия вырождения зонная структура муарового графена имеет более сложный вид. Отличительной ее особенностью является возможность существования запрещенной зоны в точке *K* для идеальной структуры [8] (рис. 1, *a*). Поскольку двухосное растяжение графена не приводит к формированию в нем запрещенной зоны [14] даже несмотря на наличие механических напряжений, AA области могут сохранять полуметаллические свойства. Таким образом, одним из вариантов создания периода в энергетической структуре является чередование областей графена, обладающих запрещенной зоной с областями без запрещенной зоны (см. вставку на рис. 2). Возникающий в данных областях с полупроводниковыми свойствами энергетический зазор описывается величиной Δ ($E_g = 2\Delta$) [15]. Для математического описания муарового графена используется модель периодической структуры с 6 периодами. Ширина барьера определяется периодом муара и составляет $D/2 = 8$ нм, параметр запрещенной зоны $\Delta = 0.04$ эВ, уровень Ферми составляет $E_F = \Delta/2$.

3. Математическая модель

Исследование влияния параметров муарового графена на вольт-амперную характеристику проводилось путем

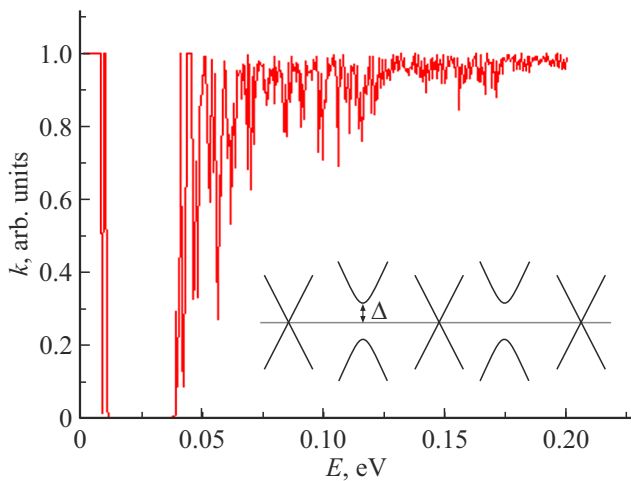


Рис. 2. Спектр коэффициента прохождения для муарового графена без учета релаксации при разных параметрах запрещенной зоны. На вставке — модель зонной диаграммы в направлении плоскости структуры.

расчета коэффициентов прохождения для заданного диапазона приложенных к структуре напряжений. Расчет коэффициента прохождения производится численно методом матрицы переноса с учетом особенностей графеновой структуры [16]. Известно, что энергетические состояния в графене описываются с помощью уравнения Дирака:

$$\hat{H} = v_F \sigma \mathbf{p} + V(x) \hat{I}.$$

Решение уравнения Дирака можно представить в виде спиноров, компоненты которых описывают волновые функции в двух подрешетках:

$$\psi_1(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{ikx}; \quad \psi_2(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ -s e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{-ikx}.$$

Введем матрицы, описывающие поведение волновой функции внутри барьера и на его границах:

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ s e^{i\phi} & -s e^{-i\phi} \end{pmatrix}, \quad T(x) = \begin{pmatrix} e^{i\lambda x} & 1 \\ 1 & e^{-i\lambda x} \end{pmatrix}.$$

Выражая матрицу прохождения через единичный барьер: $S = G_b T_b^{-1} G_b^{-1}$, получим матрицу прохождения через всю структуру: $M = G^{-1} (\prod_n S_n) G$. В произвольном случае волна падает на плоскость графена с чередующимися свойствами под некоторым углом. Для данных расчетов угол падения принимался равным $\phi = 30^\circ$ [16].

Вероятность прохождения через многобарьерную структуру определяется диагональным элементом матрицы переноса: $T(E) = |M_{22}|^{-2}$.

Таким образом, рассчитывая коэффициенты прохождения для каждого напряжения и интегрируя, можно рассчитать вольт-амперную характеристику структуры в

рамках формализма Ландауэра [17]:

$$I = \frac{e}{4\pi^3 \hbar} \int T(E) (f(E) - f(E')) dE,$$

где $E' = E + eU$ — энергия незанятого состояния, U — напряжение, приложенное к структуре, $f(E)$ — функция распределения Ферми–Дирака [18].

Расчеты зонных диаграмм [19,20] показывают, что в муаровом графене происходит перенормировка скорости Ферми вблизи точки Дирака, причем степень уменьшения скорости зависит от угла разориентации. К примеру, для угла $\Theta = 0.88^\circ$ скорость Ферми составляет 0.02 от скорости Ферми свободного листа графена, а для угла $\Theta = 1.2^\circ$ — 0.03 скорости Ферми ($2 \cdot 10^4$ м/с и $3 \cdot 10^4$ м/с соответственно). Малые значения скорости Ферми связывают с возникновением режима плоских зон, когда состояния сильно локализованы преимущественно в зонах AA муара. Кроме того, вследствие структурной релаксации потенциальные ямы, в которых происходит локализация, становятся более узкими, а барьеры расширяются и становятся более резкими. Поэтому для описания формы потенциала в структурах с релаксацией использовалась периодическая функция с постоянными энергиями в областях, соответствующих AA и AB упаковкам. Параметр Δ вдоль структуры при этом модулировался данной функцией.

4. Результаты расчетов и обсуждение

Для выбранной модели рассчитаны коэффициенты прохождения для различных периодов муара и энергетических параметров. На рис. 2 приведены зависимости коэффициента прохождения от энергии для модели муарового графена без учета релаксации (приложенное напряжение $U = 0.07$ В, $\Delta = 0.05$ эВ). На рис. 2 видно, что в спектре пропускания возникает область с низкими



Рис. 3. ВАХ для структур с различными углами разориентации слоев.

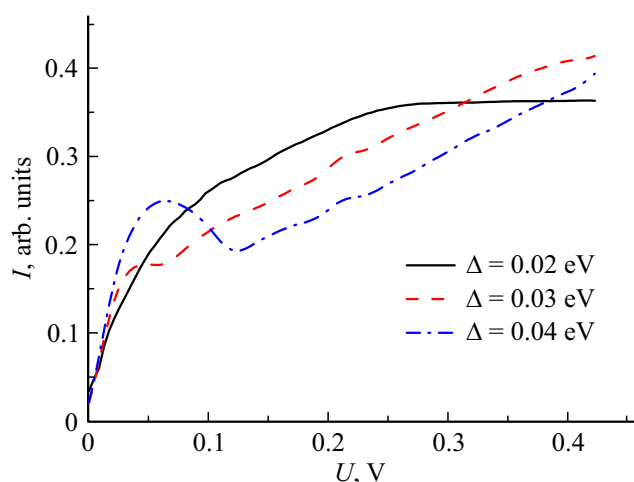


Рис. 4. ВАХ для структур с различным параметром запрещенной зоны в областях с АВ упаковкой.

значениями коэффициента прохождения, интерпретируемая как запрещенная.

Далее, в модели были учтены возможные процессы релаксации, происходящие в структуре муарового графена. Получены вольт-амперные характеристики (ВАХ) для периодов $D = 16$ и 11.76 нм (для $\Theta = 0.88$ и 1.2° соответственно), ток рассчитан в единицах $1.23 \cdot 10^{-5}$ А (рис. 3). На рис. 4 изображены ВАХ, рассчитанные для различных параметров запрещенной зоны. Из результатов видно, что участок обратного дифференциального сопротивления зависит как от угла разориентации, так и от энергетического параметра. С увеличением параметра запрещенной зоны данный участок появляется позже по напряжению и становится более выраженным. Необходимо отметить, что в литературе упоминаются приборы, созданные на основе муарового графена [9], ВАХ которых имеют участки обратного дифференциального сопротивления.

5. Заключение

В структурах двуслойного графена вследствие смещения слоев друг относительно друга возникает периодический потенциал нанометрового размера, приводящий к чередованию областей с различной кристаллической упаковкой и модулированной запрещенной зоной. Расчет коэффициентов прохождения через данную структуру демонстрирует возникновение энергетических зазоров, величина которых зависит от угла смещения слоев. ВАХ, построенные на основе коэффициентов прохождения для плавно меняющегося приложенного напряжения, обладают участками с отрицательным дифференциальным сопротивлением, положение которых в значительной степени зависит от параметров структуры.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.C. Ferrari, F. Bonaccorso, V. Fal'ko, K.S. Novoselov. *Nanoscale*, **7**, 4598 (2015).
- [2] A. Díaz-Fernández, L. Chico, J.W. González, F. Domínguez-Adame. *Scientific Reports*, **7**, 8058 (2017).
- [3] C. Hwang, D.A. Siegel, S.-K. Mo, W. Regan. *Scientific Reports*, **2** (590), 1 (2012).
- [4] J. Hass, F. Varchon, J.E. Millan-Otoya, M. Sprinkle, N. Sharma, W.A. de Heer, C. Berger, P.N. First, L. Magaud, E.H. Conrad. *Rev. Lett.*, **100**, 125504 (2008).
- [5] Nguyen N.T. Nam, Mikito Koshino. *Phys. Rev. B*, **96**, 075311 (2017).
- [6] D.A. Bahamon, G. Gómez-Santos, T. Stauber. *Nanoscale*, **12**, 15383 (2020).
- [7] T.B. Limbu, K. R. Hahn, F. Mendoza, S. Sahoo. *Carbon*, **117**, 367 (2017).
- [8] A.V. Rozhkov, A.O. Sboychakov, A.L. Rakhmanov, F. Nori. *Phys. Rep.*, **648**, 1 (2016).
- [9] D.A. Ghazaryan, A. Misra, E.E. Vdovin, K. Watanabe. *Appl. Phys. Lett.*, **118**, 183106 (2021).
- [10] G.T. de Laissardiére, D. Mayou, L. Magaud. *Phys. Rev. B*, **86**, 125413 (2012).
- [11] E. McCann, M. Koshino. *Rep. Progr. Phys.*, **76**, 056503 (2003).
- [12] Kin Fai Mak, Matthew Y. Sfeir, James A. Misewich, Tony F. Heinz. *PNAS*, **34**, 14999 (2010).
- [13] J. Wang, W. Bo, Y. Ding, X. Wang. *Mater. Today Phys.*, **14**, 100238 (2020).
- [14] K.P. Katin, K.S. Krylov, M.M. Maslov, V.D. Mur. *Diamond Relat. Mater.*, **100**, 107566 (2019).
- [15] J.V. Gomes, N.M.R. Peres. *J. Phys.: Condens. Matter*, **20**, 325221-1 (2008).
- [16] K. Uchida, S. Furuya, J.-I. Iwata, A. Oshiyama. *Phys. Rev. B*, **90**, 155451 (2014).
- [17] Ю.М. Кардона. *Основы физики полупроводников* (М., Физматлит, 2002).
- [18] S. Dubey, V. Singh, Ajay K. Bhat, P. Parikh. *Nano Lett.*, **13**, 3990 (2013).
- [19] G. Alymov, V. Vyurkov, V. Ryzhii, D. Svintsov. *Sci. Rep.*, **6**, 24654 (2016).
- [20] E. Suárez Morell, J.D. Correa, P. Vargas, M. Pacheco, Z. Barticevic. *Phys. Rev. B*, **82**, 121407 (2010).

Редактор Г.А. Оганесян

Transport characteristic calculations of bilayer graphene with different misorientation angle

S.V. Khazanova, V.V. Savel'ev

National Research Lobachevsky
State University of Nizhny Novgorod,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract Two-layer moiré graphene structure with a spatial period of energy parameters change of the ten nanometers order is considered. The layer misorientation angle effect and the energy gap parameter on the current-voltage characteristic of the structure is studied numerically.