

Спектры трансмиссии электронов через графеновую сверхрешетку Тью–Морса

А.Н. Король

Национальний університет пищевих технологій, ул. Владимирская, 68, г. Киев, 01601, Украина

Laboratory on Quantum Theory in Linkoping, ISIR, P.O., Box 8017, S-580, Linkoping, Sweden

E-mail: korolam@ukr.net

Статья поступила в редакцию 2 июля 2013 г., после переработки 1 октября 2013 г.

Изучаются энергетические спектры сверхрешетки (СР) Тью–Морса на основе монослойного графена при наличии в нем запрещенной зоны. Решетка состоит из прямоугольных барьеров, расположенных вдоль оси Ox . Аперриодическую модуляцию Тью–Морса предлагается осуществить за счет различия в значениях ширины запрещенной зоны в разных элементах СР. Показано, что эффективное расщепление разрешенных зон (и тем самым образование ряда запрещенных зон) под действием аперриодического фактора реализуется как при наклонном, так и при нормальном падении электронной волны на поверхность СР. Спектры выявляют свойство периодичности в зависимости от высоты потенциальных барьеров. В отдельных участках спектра расщепление зон происходит согласно инфляционному правилу Фибоначчи в каждой новой генерации. Как и в периодических СР на основе графена, во всех генерациях Тью–Морса образуется запрещенная зона, связанная со сверхрешеточной дираковской точкой. Ее ширина существенно зависит от параметров задачи; в то же время положение этой зоны на оси энергий слабо зависит от значения массового слагаемого в гамильтониане и не зависит от периода СР. Зависимость спектров от угла падения электронной волны на решетку незначительна.

Вивчаються енергетичні спектри надгратки (НГ) Тью–Морса на основі моношарового графену при наявності в ньому забороненої зони. Гратка складається з прямокутних бар'єрів, розташованих уздовж осі Ox . Аперіодичну модуляцію Тью–Морса пропонується здійснити за рахунок відмінності в значеннях ширини забороненої зони в різних елементах НГ. Показано, що ефективне розщеплення дозволених зон (і тим самим утворення ряду заборонених зон) під дією аперіодичного фактора реалізується як при похилому, так і при нормальному падінні електронної хвилі на поверхню НГ. Спектри виявляють властивість періодичності залежно від висоти потенціальних бар'єрів. В окремих ділянках спектра розщеплення зон відбувається згідно з інфляційним правилом Фібоначчі в кожній новій генерації. Як і в періодичних НГ на основі графену, у всіх генераціях Тью–Морса утворюється заборонена зона, пов'язана з надгратковою діраківською точкою. Її ширина істотно залежить від параметрів задачі; в той же час положення цієї зони на осі енергій слабо залежить від значення масового доданка в гамільтоніані і не залежить від періоду НГ. Залежність спектрів від кута падіння електронної хвилі на гратку є незначною.

PACS: 73.21.Cd Сверхрешетки;

73.63.–b Электронный транспорт в наноразмерных материалах и структурах.

Ключевые слова: графен, сверхрешетка Тью–Морса, спектры трансмиссии электронов.

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, например СР Фибоначчи, Тью–Морса. Это связано с их необычными свойствами, такими как самоподобие, канторова природа энергетического спектра и др. [2–6]. В свою очередь аперриодические цепи Тью–Морса по своим параметрам нахо-

дятся в промежутке между классическими квазипериодическими цепями Фибоначчи и неупорядоченными системами (см. [2–6]). Поэтому изучению структур Тью–Морса уделяется немалое внимание. Следует иметь в виду, что в литературе для общности их часто относят к квазипериодическим объектам.

С другой стороны, начиная с 2004 года пристальное внимание привлекают к себе структуры на основе графена, что естественно объясняется его нетривиальными 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. [7–10]. Следует также отметить, что графен — перспективный материал 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 (см., например, [11–18]). В частности, в работах [13,14] показано, что в графеновых СР обнаруживается новая дираковская точка и соответствующая ей запрещенная зона; она определяется через нулевое значение усредненного волнового числа. В указанных работах детально изучены свойства этой новой щели в различных графеновых СР. (Для краткости данную запрещенную зону будем называть «сверхрешеточной дираковской», а другие щели в энергетическом спектре строго периодической СР, а также аналогичные им щели в СР Фибоначчи — брэгговскими.)

Предложен и практически реализован ряд методов создания графеновых СР [19–21]. Отметим, что важно получать такие СР на графене, в которых в энергетическом спектре существует запрещенная зона, 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. С помощью различных методов — использование графеновых нанолент, взаимодействие с подложкой и др. — уже достигнуты существенные результаты [22–27]. В частности, химическими методами удалось получить ширину щели, равную нескольким десяткам электрон-вольт [25].

Существует лишь несколько работ, посвященных изучению свойств квазипериодических СР на основе графена. В частности, в статье [31] рассматривается квазипериодическая модуляция Фибоначчи, созданная за счет разных ширин барьеров и квантовых ям. Расчет проводится для бесщелевого графена на основе безмассового уравнения Вейля–Дирака. Показано, что при

наклонном падении электронов возможна квазипериодическая модуляция спектров. Аналогичная работа посвящена графеновым сверхрешеткам Тью–Морса [32].

Конкретизация постановки задачи и метод вычисления спектров

В настоящей работе мы изучаем энергетический спектр сверхрешеток Тью–Морса на основе графена в континуальной модели. Квазипериодическая модуляция вдоль оси Ox создается за счет разных ширин запрещенных зон, или, другими словами, за счет массового слагаемого в гамильтониане Δ ; оно принимает одно из двух различных значений в разных элементах в цепи СР согласно закону Тью–Морса. (Подобное предложение для создания СР рассматривалось, в частности, в работе [18].) Главным образом исследуются СР, в которых по аперидическому правилу Тью–Морса 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. Главная цель данной работы — выявление основных черт спектров графеновых сверхрешеток Тью–Морса в относительно простой модели (в частности, без учета наличия границ, дефектов, возможно, более точного закона дисперсии, взаимодействия электронов и т.д.).

Рассмотрим СР, построенную из двух элементов: a и b (рис. 1). Оба элемента содержат квантовую яму шириной w и потенциальный барьер шириной d , высота барьера обозначена V_a и V_b для a и b элементов соответственно. СР строится согласно правилу Тью–Морса: $a-ab, b-ba$. Таким образом, например, для четвертой генерации (секвенции) Тью–Морса имеем $S_4 = abbabaab$. Условия прохождения электронной волны через СР, построенную для N -й генерации Тью–Морса, 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

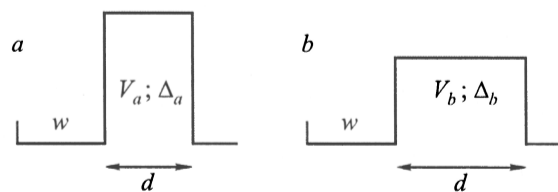


Рис. 1. Сверхрешетка, построенная из элементов a и b : w — ширина квантовой ямы, d — ширина потенциального барьера, V — высота барьера.

Грина, либо через волновые функции. Последние находятся из соответствующего задаче уравнения дираковского типа:

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

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 ; \hat{I} — единичная двумерная матрица; массовое слагаемое обозначаем, как это принято в литературе, символом Δ . Функция Ψ представляет собой двухкомпонентный псевдоспинор $\Psi = [\tilde{\Psi}_A, \tilde{\Psi}_B]^T$, $\tilde{\Psi}_A, \tilde{\Psi}_B$ — огибающие функции для графеновых подрешеток А и В; 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 $\tilde{\Psi}_{A,B} = \tilde{\Psi}_{A,B} e^{ik_y y}$ и из уравнения (1) для $\Psi_{A,B}$ получаем

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

где $k_j = \text{sign}(s_{j\pm})[(E - V_j)^2 - \Delta^2]^{1/2}/(v_F \hbar)$; $s_{\pm} \equiv E - V(x) \pm \Delta$. 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 $a_j = \text{sign}(s_{j+})\sqrt{k_j^2 - k_y^2}$, если $k_j^2 > k_y^2$, и $q_j = i\sqrt{k_y^2 - k_j^2}$ в противном случае, $g_j^{\pm} = (\pm q_j + ik_y)/k_y$, верхняя строка в (3) относится к подрешетке А, нижняя — к В. Коэффициент трансмиссии электронов через решетку T можно найти в результате сшивания волновых функций на границах барьер-яма. Поскольку эта процедура неоднократно описывалась в литературе (см., например, [12–18]), не будем на ней останавливаться.

Анализ полученных результатов

На рис. 2 представлена след-карта для начальных секвенций Тью–Морса, значения параметров таковы: $k_y = 0$; $V_a = V_b = 0,16$ эВ; $d = w = 4,5$ нм; $\Delta_a = 0,08$ эВ; $\Delta_b = 0$. На этом рисунке (и последующих) видно, что предложенный в данной работе способ аперидической модуляции сверхрешетки — за счет разных значений ширин запрещенной зоны в разных элементах решетки — весьма эффективен при нормальном падении квазичастиц на СР. С ростом уровня итерации наблюдается расщепление разрешенных зон, и их сум-

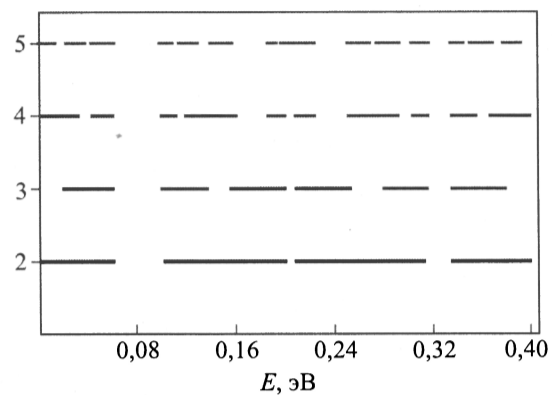


Рис. 2. След-карта начальных генераций Тью–Морса. Цифры вдоль вертикальной оси нумеруют секвенции.

марная ширина уменьшается с переходом к каждой высшей генерации. Спектры высших порядков сильно фрагментированы. Число зон на фиксированном участке спектра зависит как от уровня генерации, так и от параметров СР.

Для анализа определенных спектральных закономерностей удобно выделить некоторые фрагменты спектра, например интервал энергии между точками D и B на рис. 3, на котором представлена зависимость коэффициента T от энергии для тех же параметров, что и на рис. 2 (в отличие от полупроводников с параболическим законом дисперсии, в которых для анализа обычно используется вся подбарьерная область энергий [28–30]).

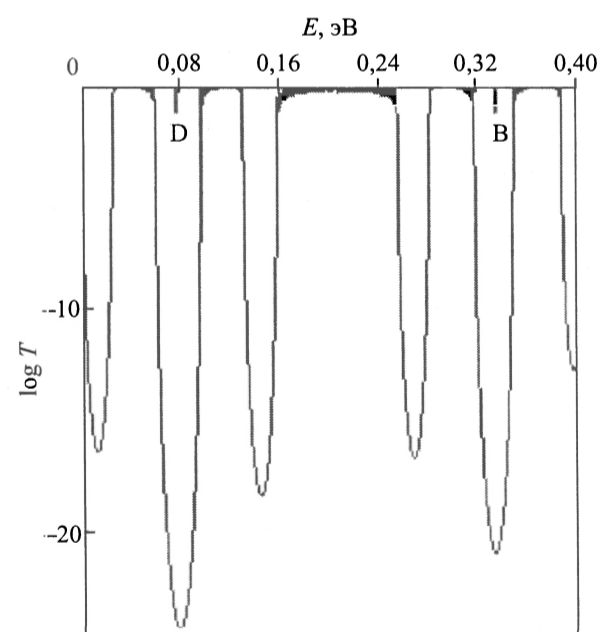


Рис. 3. Фрагмент зависимости $\log T$ от энергии E для третьей секвенции Тью–Морса. Значения параметров такие же, как на рис. 2.

Известно, что аperiodические цепи Тью–Морса имеют некоторые свойства, характерные для классических квазипериодических структур Фибоначчи [6]. Это интересное обстоятельство наблюдается и в изучаемых в данной работе сверхрешетках: так, число зон в интервале DB растет с каждой новой генерацией CP в соответствии с инфляционным правилом Фибоначчи $Z_N = Z_{N-1} + Z_{N-2}$ (для взятых на рисунках параметров имеем последовательность числа зон 2, 4, 6, 10, ...).

Заметим, что в спектрах на рис. 3 выделяются щели, ширина которых существенно больше, чем ширина других щелей, например запрещенные зоны с центрами в точках В и D на рис. 3 (обозначим их как зоны В и D). Рассчитав спектры строго периодической CP для тех же параметров, можно убедиться, что в них есть точно такие (по ширине и расположению на оси энергий) щели, как зоны В и D. Это означает, что за наличие широких (при определенном фиксированном наборе значений параметров Δ, V, d, w) зон отвечает фактор периодичности решетки, а фактор аperiodичности Тью–Морса приводит к образованию ряда узких щелей в спектре и, в частности, в интервале DB. Нижняя (по энергии) из этих широких зон получила в литературе название зоны, связанной с «новой» («необычной» или «дополнительной») дираковской точкой [13,14], а верхняя является брэгговской зоной. Для удобства первую из них называем сверхрешеточной дираковской. Как показывают расчеты, ее месторасположение на оси энергий практически одинаково для всех секвенций CP Тью–Морса и незначительно зависит от величин Δ_a, Δ_b . Характерным для этой щели есть то, что, как и в случае строго периодической CP [13,14], ее локализация не зависит от периода решетки $d+w$. Для решетки с параметрами $V_a = V_b, d = w$ середина этой зоны $E_D \approx V/2$ во всех генерациях. Положение всех других щелей зависит от периода CP, как это видно на рис. 4.

В то же время следует иметь в виду, что ширины сверхрешеточной дираковской (D) и брэгговской (B) зон существенно зависят от параметров задачи. Так, для значения $V_a = V_b = 0,32$ эВ получаем спектр на рис. 5, в котором брэгговская зона шире, чем дираковская, в отличие, например, от рис. 2.

Обратим внимание на то, что изучаемые спектры проявляют свойства периодичности в зависимости от высоты потенциального барьера V . На рис. 3 и 5 представлены спектры, отличающиеся значениями $V_{a1} = V_{b1} = 0,16$ эВ и $V_{a2} = V_{b2} = 0,32$ эВ. Это два характерных высокосимметричных спектра, структура которых периодически повторяется при изменении V : с ростом V первый спектр трансформируется во второй, через интервал $\Delta V \approx 0,3$ эВ (для данных фиксированных параметров) повторяет свою структуру и т.д.

Следует также отметить, что наиболее эффективное расщепление расширенных зон с образованием наибо-

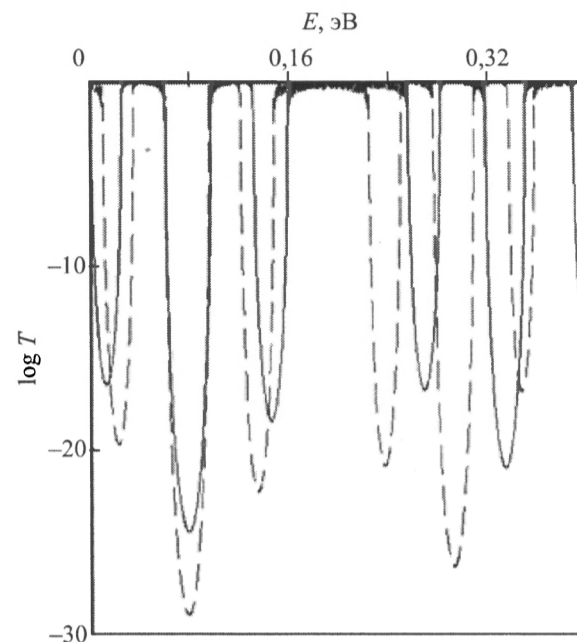


Рис. 4. Фрагмент зависимости $\log T$ от энергии E для третьей генерации Тью–Морса при различных значениях d, w : сплошной линии соответствует значение $d = w = 4,5$ нм; штриховой — $d = w = 6$ нм; остальные параметры, как на рис. 2.

лее широких щелей происходит в окрестности потолка барьера ($E \approx V$), что видно на приведенных рисунках.

В силу того, что различие в значениях параметра Δ является ключевым для формирования аperiodической модуляции Тью–Морса, представляет интерес проанализировать спектры при разных значениях величины $\Delta_a - \Delta_b$. С уменьшением разницы между Δ_a и $\Delta_b = 0$

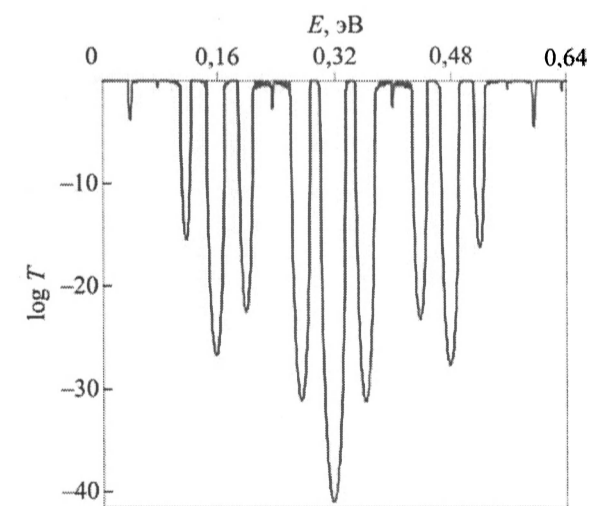


Рис. 5. Фрагмент зависимости $\log T$ от энергии E для третьей генерации Тью–Морса при значении $V = 0,32$ эВ, остальные параметры, как на рис. 2.

наблюдается сужение щелей, возникающих в результате действия квазипериодического потенциала вплоть до их полного исчезновения при $\Delta_a = \Delta_b$, т.е. в случае строго периодической бесщелевой СР. Основные щели — дираковская и брэгговская — при этом заметно расширяются. Заметим, что суммарная ширина щелей в одном периоде СР при изменении значений $\Delta_a = \Delta_b$ сохраняется.

Если же зафиксировать значение щели в элементе b , например $\Delta_b = 0,08$ эВ, и уменьшать разницу $\Delta_a - \Delta_b$ за счет увеличения Δ_a , то при этом спектры изменяются следующим образом: ширины зон, возникших в результате аперриодической модуляции, уменьшаются, но ширины брэгговской и сверхрешеточной дираковской растут; при $\Delta_a = \Delta_b = 0,08$ эВ образуется спектр, соответствующий щелевой периодической сверхрешетке. Заметим, что суммарная ширина щелей в одном периоде СР при изменении значения Δ_a в этом случае сохраняется. Сужение зон происходит почти по линейному закону с разными коэффициентами линейности для конкретного набора параметров задачи.

Рассматриваемые энергетические спектры графеновых СР Тью–Морса малочувствительны к углу падения электронной волны. Максимальное расширение наблюдается у сверхрешеточной дираковской зоны и для типичных значений параметров задачи оно не превышает 5%; другие зоны изменяются совсем незначительно. Положение зон не зависит от угла падения θ .

Указанные обстоятельства упрощают качественный анализ зависимости контактанса G изучаемой системы от энергии квазичастиц E . При низких температурах для расчета величины G обычно используется формула Буттикера–Ландауэра

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

где $G_0 = 2e^2 m v_F L_y / \hbar^2$; L_y — ширина графенового образца по оси Oy ; e — элементарный заряд; m — масса электрона. Из изложенного выше и вида подынтегральной функции очевидно, что экстремумы функции $G(E)$ соответствуют экстремумам на зависимости $T(E)$. Следовательно, сверхрешеточная дираковская щель дает на зависимости $G(E)$ минимум, положение которого не зависит от периода решетки $d + w$, но в то же время чувствительно к отношению d / w . Таким образом, изменяя параметры сверхрешетки Тью–Морса, можно регулировать ее контактанс в широких пределах.

1. R. Tsu, *Superlattice to Nanoelectronics*, Elsevier, Oxford (2005).
2. Z. Cheng, R. Savit, and R. Merlin, *Phys. Rev. B* **37**, 375 (1988).

3. E. Macia, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 036502 (2012).
4. J.M. Luck, *Phys. Rev. B* **39**, 5834 (1989).
5. M. Kolar, M.K. Ali, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **43**, 1034 (1991).
6. N. Liu, *Phys. Rev. B* **55**, 3543 (1997).
7. A.K. Geim and K.S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007).
8. A.N. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
9. J.M. Pereria, Jr, F.M. Peeters, A. Chaves, and G.A. Farias, *Semicond. Sci. Technol.* **25**, 033002 (2010).
10. V.V. Cheianov and V.I. Falko, *Phys. Rev. B* **74**, 0414033 (2006).
11. O. Zhao, J. Gong, and C.A. Muller, *Phys. Rev. B* **85**, 104201 (2012).
12. M. Barbier, P. Vasilopoulos, and F.M. Peeters, *E-print archives, cond-mat/1101.4117v1* (2011).
13. L. Wang and X. Chen, *J. Appl. Phys.* **109**, 033710 (2011).
14. L. Wang and S. Zhu, *Phys. Rev. B* **81**, 205444 (2010).
15. V.H. Nguyen, A. Bournel, and P. Dollfus, *Semicond. Sci. Technol.* **26**, 125012 (2011).
16. M. Barbier, P. Vasilopoulos, and F.M. Peeters, *Phys. Rev. B* **80**, 205415 (2009).
17. Yu.P. Bliokh, V. Freilikher, S. Savel'ev, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **79**, 075123 (2009).
18. П.В. Ратников, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 515 (2009).
19. J.C. Meyer, C.O. Girit, M.F. Crommie, and A. Zettl, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 123110 (2008).
20. P.W. Sutter, J. Flege, and E.A. Sutter, *Nat. Mater.* **7**, 406 (2008).
21. J. Coraux, A.T. N'Diaye, C. Busse, and T. Michely, *Nano Lett.* **8**, 565 (2008).
22. Y.W. Son, M.L. Cohen, and S.G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 21803 (2006).
23. M.Y. Han, B. Ozyilmaz, Y. Zhang, and P. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 206805 (2007).
24. G. Giovanetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, P.J. Kelly, and J. van den Brink, *Phys. Rev. B* **76**, 073103 (2007).
25. S.Y. Zhou, G. Gweon, A.V. Fedorov, P.N. First, W.A. der Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A.H. Castro Neto, and A. Lanzara, *Nat. Mater.* **6**, 770 (2007).
26. R. Balog, B. Jorgensen, L. Nilsson, M. Andersen, E. Rienks, M. Bianchi, M. Fanetti, E. Lægsgaard, A. Baraldi, S. Lizzit, Z. Slijivancanin, F. Besenbacher, B. Hammer, T.G. Pedersen, P. Hofmann, and L. Hornekær, *Nat. Mater.* **9**, 315 (2010).
27. S. Casolo, R. Martinazzo, and G.F. Tantardini, *J. Phys. Chem. C* **115** (8), 3250 (2011).
28. А.Н. Король, *ФТТ* **36**, 1339 (1994).
29. А.Н. Король, *Письма в ЖЭТФ* **59**, 659 (1994).
30. R. Riklund, M. Severin, and Y. Liu, *Int. J. Mod. Phys. B* **1**, 121 (1987).
31. P.-L. Zhao and X. Cheng, *arXiv:1111.1754v1 [cond-mat.mes-hall]* 7 Nov 2011.
32. T. Ma, C. Liang, L.-Gang Wang, and H.-Q. Lin, *arXiv:1202.1871v1 [cond-mat.mes-hall]* 9 Feb 2012.

Transmission spectra of electrons through the Thue–Morse graphene superlattice

A.M. Korol

The transmission spectra of the Thue–Morse superlattice (SL) based on a monolayer gapped graphene are investigated. The SL consists of rectangular barriers located along the Ox axis. The Thue–Morse aperiodic modulation is proposed to be realized due to the difference in values of the gap width in different SL elements. It is shown that the effective splitting of the allowed bands (and thereby the arising of a series of gaps) is observed under the influence of the aperiodic factor in the case of normal incidence of the electron wave on the SL as well as in the case of oblique incidence. The spectra are periodical with po-

tential barrier height. In some regions of the spectra, the splitting of bands is subjected to the Fibonacci inflation rule in every new Thue–Morse generation. As in the periodical graphene-based SL, in every Thue–Morse sequence a superlattice Dirac point is created. The width of the gap associated with this point depends on SL parameters substantially; at the same time the energy location of this gap depends weakly on mass term in the Hamiltonian and it does not depend on SL period. The spectra dependence on the angle of electron wave incidence is not substantial.

PACS: 72.21.Cd Superlattices;

73.63.–b Electronic transport in nanoscale materials and structures.

Keywords: graphene, Thue–Morse superlattice, transmission spectra of electrons.