

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ имени П. Н. ЛЕБЕДЕВА  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

*На правах рукописи*

УДК 538.915

Ратников Павел Вячеславович

# ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ПЛАНАРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА

Специальность 01.04.02 — теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Москва 2016

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физическом институте им. П. Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН) в теоретическом отделе им. И. Е. Тамма

Научный руководитель:

**Силин Андрей Павлович,**  
кандидат физико-математических наук,  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН,  
старший научный сотрудник

Официальные оппоненты:

**Глазов Михаил Михайлович,**  
доктор физико-математических наук, профессор РАН,  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН,  
ведущий научный сотрудник

**Манцевич Владимир Николаевич,**  
доктор физико-математических наук,  
Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова,  
ведущий научный сотрудник

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт спектроскопии РАН (г. Троицк)

Захита состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2016 г. в \_\_\_:\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета Д 002.023.02 при ФИАН по адресу: 119991, Москва, Ленинский проспект, 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФИАН или на сайте института <http://www.lebedev.ru/>.

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2016 г.

Учёный секретарь

диссертационного совета Д 002.023.02

доктор физико-математических наук, профессор

Я. Н. Истомин

# ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

## Актуальность темы диссертации

В настоящее время микроэлектроника переходит на качественно новый уровень — в наноэлектронику: размеры мельчайших объектов варьируются от нескольких до одного-двух десятков нанометров. В последнее время область применения нанотехнологий связывают с новым материалом — графеном и с теми перспективами, которые сулит его использование в наноэлектронике.

Теоретически графен был давно исследован как составная часть графита [1–3]. Однако впервые он был получен только в 2004 году К. С. Новосёловым, А. К. Геймом, С. В. Морозовым и их коллегами методом микромеханического отщепления от графита [4–6].

Данная диссертация посвящена теоретическому исследованию гетероструктур на основе графена. Хорошо известно, что для функционирования приборов электроники нужна энергетическая щель в спектре носителей тока, а в чистом достаточно большого размера образце графена энергетическая щель равна нулю. Следовательно, нужно искать способы её открытия. Щелевые модификации графена получаются либо за счёт взаимодействия листа графена с материалом подложки, либо при напылении на лист графена определённых атомов или молекул.

В предлагаемых в настоящей диссертации планарных гетероструктурах на основе бесщелевого графена и его щелевых модификаций значительно расширяются возможности зонной технологии. Становится возможным изготовление гетероструктур с заданным энергетическим спектром (зонной структурой), что даёт более широкие возможности для применения графена и материалов на его основе.

Использование двумерных материалов таких, как бесщелевой графен и его щелевые модификации, особенно привлекательно для наноэлектроники. Наиболее естественным кажется развитие *планарной технологии* на основе графена для интегральных схем (ИС) нового поколения. В этом ключевую роль могут сыграть создание и экспериментальное изучение планарных гетероструктур на основе графена, теоретическое исследование которых проведено в настоящей диссертации.

## **Цели и задачи работы:**

- 1) Главной целью данного диссертационного исследования было изучение электронных свойств планарных гетероструктур на основе графена, разработка теоретических моделей для описания как одночастичных, так и многочастичных электронных свойств, проведение соответствующих аналитических и численных расчётов.
- 2) Исследование аномального прохождения носителей тока через области щелевой модификации графена (потенциальные барьераы), а также через области наложения магнитного поля (магнитные барьераы).
- 3) Исследование приграничных состояний как в отдельном гетеропереходе, так и в квантовой яме на основе графена и его щелевых модификаций.
- 4) Нахождение энергии связи экситона в планарной квантовой яме на основе графена. Нахождение поправок к ней за счёт приложенного внешнего электрического поля.
- 5) Получение дисперсионного соотношения для носителей тока в различных планарных сверхрешётках (СР) на основе графена. Исследование таммовских минизон в них.
- 6) Исследование коллективных возбуждений — плазмонов и магнитоплазмонов — в СР. Получение дисперсионной зависимости для них.

## **Положения, выносимые на защиту:**

- 1) Если скорость Ферми в щелевой модификации графена больше, чем скорость Ферми в бесщелевом графене, то возникает *эффект фильтрования* носителей тока по углу падения — носители тока проходят над потенциальным барьером с вероятностью, близкой к единице вблизи нормального падения, но при углах падения, больших определённого значения, вероятность туннелирования экспоненциально мала. Этот эффект также проявляется и в случае двух одинаковых барьёров. Решена задача о прохождении носителей тока в планарной гетероструктуре с двумя потенциальными барьёрами, один из которых — запрещённая зона щелевой модификации графена, а второй — магнитный.

- 2) В одиночном планарном гетеропереходе между областями бесщелевого графена и его щелевой модификации могут возникать приграничные состояния носителей тока. Условием их возникновения является пересечение дисперсионных кривых. Имеется «*долинная поляризация*» приграничных состояний: электроны, движущиеся вдоль границы гетероперехода с  $k_y > 0$  (ось  $y$  направлена вдоль границ раздела), находятся в окрестности  $K$ -точки, а электроны с  $k_y < 0$  — в окрестности  $K'$ -точки, и наоборот для дырок.
- 3) В несимметричной квантовой яме, составленной из различных модификаций графена, энергетический спектр носителей тока *расщеплён по псевдоспину*: экстремумы дисперсионных кривых смещаются от дираковских точек в разных долинах в разные стороны. В симметричной квантовой яме такого эффекта нет.
- 4) Получено *дисперсионное соотношение* как для планарной СР с одномерной модуляцией энергетической щели, так и для СР с одномерной модуляцией скорости Ферми. В последней эффективным квантовым барьером является область с большей скоростью Ферми.
- 5) В политипных планарных СР, сверхъячейки которых представляют собой несимметричные квантовые ямы, возникает *псевдоспиновое расщепление энергетического спектра*.
- 6) Получен в аналитическом виде *закон дисперсии* плазмонов в планарных СР. Для магнитоплазмонов в планарных СР получено *дисперсионное соотношение*, учитывающее помимо вклада внутризонных виртуальных переходов носителей тока вклад межзонных виртуальных переходов.

**Научная значимость** работы состоит в разработке моделей для описания электронных свойств планарных гетероструктур на основе графена. Расчётами с использованием этих моделей удалось предсказать ряд новых эффектов, указанных выше. Опираясь на полученные результаты, можно решить серию задач физической кинетики.

**Практическая значимость** работы связана с перспективами применения исследованных планарных гетероструктур на основе графена для разработки приборов нового поколения, использующих, в частности, долинные

свойства графена. Это позволит создать принципиально новые ИС, что открывает широкие перспективы для применения полученных в диссертации результатов на практике.

**Достоверность результатов** диссертации определяется строгостью вывода эффективного уравнения на огибающую волновую функцию носителей тока в графене. Граничные условия сформулированы в наиболее простом виде и обеспечивают непрерывность потока частиц через границы раздела.

### **Апробация результатов и публикации**

Представленные в диссертации результаты докладывались на 4 научных конференциях и 2 научных школах: 51 научной конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук» (ФИАН, Москва, ноябрь 2008), XII Школе молодых учёных «Актуальные проблемы физики» (ФИАН, Звенигород, ноябрь 2008), Одиннадцатой всероссийской молодёжной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковых опто- иnanoэлектронике (ФТИ, Санкт-Петербург, декабрь 2009), The 6th Windsor Summer School ‘Low-Dimensional Materials, Strong Correlations, and Quantum Technologies’ (Windsor, UK, August 2012), Graphene Conference: From Research to Application (NPL, London, UK, October 2012), VI Всероссийской молодёжной конференции по фундаментальным и инновационным вопросам современной физики (ФИАН, Москва, ноябрь 2015).

Результаты диссертации содержатся в 17 публикациях, из которых 5 написаны единолично автором диссертации, а остальные — в соавторстве с научным руководителем. Личный вклад соискателя во все работы, выполненные в соавторстве, был существенным, а во многих случаях — основным. 10 статей напечатаны в журналах, входящих в перечень ВАК на момент публикации. Написана глава в коллективной монографии.

### **Структура и объём диссертации**

Диссертация состоит из 6 глав, а также введения, заключения, благодарностей, двух приложений, списка работ автора диссертации и списка цитированной литературы, содержащего 212 наименований. В работе содержится 41 рисунок, 1 вкладка и 1 таблица. Общий объём диссертации составляет 193 страницы.

# СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** кратко изложена история создания ИС и основных электронных и опто-электронных приборов. Отмечен переход от микроэлектроники к наноэлектронике в последние годы. Подчёркнута важность появления нового плоского (двумерного) углеродного материала — графена. Указаны некоторые возможные пути развития наноэлектроники при использовании графена. Приведены достижения в области создания устройств наноэлектроники на основе графена. Таким образом показана *актуальность* темы диссертации. Завершается введение кратким изложением основных результатов диссертации.

**Глава 1** является обзорной. В ней излагается теоретическая база, необходимая для объяснения и обоснования предлагаемых затем моделей для описания планарных гетероструктур на основе графена. Вначале описывается кристаллическая решётка и зонная структура бесщелевого графена. Затем излагается математический формализм описания носителей тока в бесщелевом графене: модель сильной связи, приближение эффективной массы, обращение времени и оператор спиральности, топологическая сингулярность и фаза Берри, введение магнитного поля, оператор псевдоchётности. В конце главы 1 приводится вывод уравнения на огибающую волновую функцию для щелевой модификации графена.

В **главе 2** исследовано надбарьерное прохождение носителей тока в планарных гетероструктурах на основе графена. Рассмотрена гетероструктура с одним или с двумя потенциальными барьерами. Решена задача о прохождении носителей тока в планарной гетероструктуре с двумя потенциальными барьерами, один из которых — запрещённая зона щелевой модификации графена, а второй — магнитный.

В **главе 3** рассмотрены приграничные состояния в одиночном гетеропереходе на основе графена. Формулируется условие возникновения таких состояний. Анализ решений для приграничных состояний показал, что в случае электронов ( $E_\lambda > 0$ ) должно выполняться неравенство  $\lambda k_y > 0$  ( $\lambda = \pm 1$  — псевдоchётность,  $k_y$  — компонента квазимпульса вдоль гетероперехода), а в случае дырок ( $E_\lambda < 0$ ) должно выполняться неравенство  $\lambda k_y < 0$ . Откуда следует, что приграничные состояния по псевдоchётности не вырождены. Учитывая, что псевдоchётность определяет принадлежность носителей тока к одной из двух долин (см. ниже), указанное выше обстоятельство также означает, что

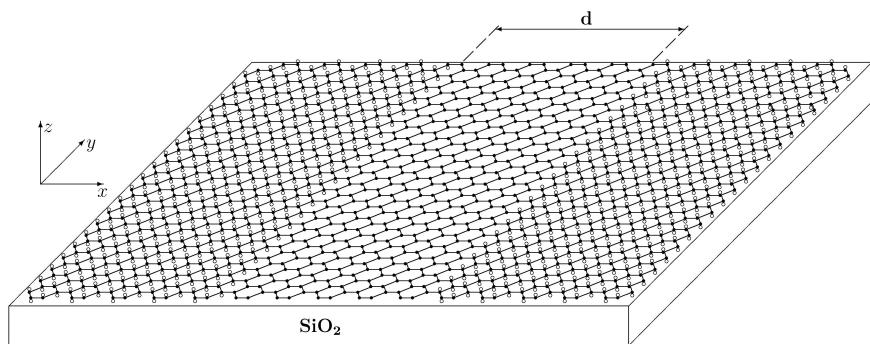
имеется «долинная» поляризация приграничных состояний: электроны, движущиеся вдоль границы гетероперехода с  $k_y > 0$ , находятся в окрестности  $K$ -точки, а электроны с  $k_y < 0$  — в окрестности  $K'$ -точки, и наоборот для дырок. Вследствие этого ток, пропускаемый вдоль границы гетероперехода, будет долиннополяризованным.

В главе 4 исследуются свойства одиночной планарной квантовой ямы, в которой потенциальными барьерами являются запрещённые зоны щелевых модификаций графена (см. рис. 1).

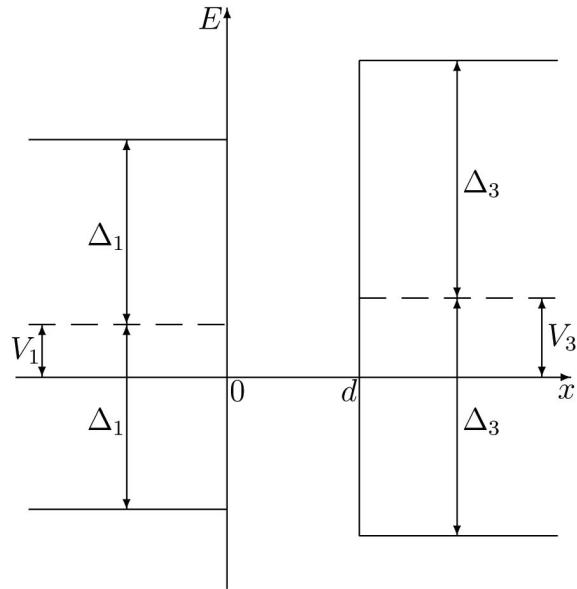
Решена задача о размерном квантовании в ней с учётом собственного числа оператора псевдохётности:  $\lambda = +1$  характеризует носители тока в окрестности  $K$ -точки,  $\lambda = -1$  — носители тока в окрестности  $K'$ -точки. Уравнение на огибающую волновую функцию имеет вид (ось  $x$  направлена перпендикулярно границам раздела, а вдоль оси  $y$  осуществляется свободное движение носителей тока — переменная  $y$  уже отделена):

$$\left( -iv_{Fj}\sigma_x \frac{d}{dx} + \lambda v_{Fj}k_y\sigma_y + \Delta_j\sigma_z + V_j \right) \psi_\lambda(x) = E_\lambda \psi_\lambda(x), \quad (1)$$

где  $\Delta_j = E_{gj}/2$  ( $j = 1, 2, 3$  нумерует области гетероструктуры) — полуширины запрещённой зоны,  $\Delta_1 \neq 0$ ,  $\Delta_3 \neq 0$  (в областях 1 и 3),  $\Delta_2 = 0$  (в области 2);  $V_1$  и  $V_3$  — работы выхода материалов в областях 1 и 3 (они определяют положение середин запрещённых зон этих материалов по отношению к дираковским точкам в графене, для начала отсчёта выберем  $V_2 = 0$  — см. рис. 2);  $v_{Fj}$  — значение скорости Ферми в  $j$ -й области (скорости Ферми во всех трёх областях



**Рис. 1.** Вариант рассматриваемой системы: неоднородно гидрогенизированный графен на подложке из  $\text{SiO}_2$  ( $d$  — ширина негидрогенизированной нанополоски графена), где незакрашенные кружки — атомы водорода.



**Рис. 2.** Энергетическая схема рассматриваемой квантовой ямы.

считываются различными). Матрицы Паули  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  и  $\sigma_z$  действуют в пространстве двух подрешёток. Уравнение (1) определяет связь компонент огибающей волновой функции  $\psi_\lambda(x)$  с параметрами данной области.

Границные условия формулируются в виде равенства [7, 8]

$$\sqrt{v_F^{(-)}}\psi^{(-)} = \sqrt{v_F^{(+)}}\psi^{(+)}, \quad (2)$$

где знаком « $-$ » помечены величины, относящиеся к материалу, обходящемуся слева от границы раздела, знаком « $+$ » — справа от границы. Это граничное условие обеспечивает непрерывность нормальной компоненты тока через границу раздела.

С использованием граничных условий (2) находится дисперсионное соотношение для носителей тока.

В несимметричной квантовой яме сохраняется явная зависимость в дисперсионном соотношении от  $\lambda$ , что обуславливает зависимость от  $\lambda$  энергии  $E_\lambda$ : дисперсионные кривые с различными  $\lambda$  «раздвигаются» симметрично относительно  $k_y = 0$ , причём для каждого значения  $\lambda$  электронная дисперсионная кривая смещается в одну сторону, а дырочная дисперсионная кривая — в другую. Для различных  $\lambda$  знак этих сдвигов различен. Это и есть псевдоспиновое расщепление. Эффект получил своё название по аналогии с эффектом спинового расщепления энергетических спектров носителей тока в узкощелевых полупроводниковых гетероструктурах [9–12].

Для симметричной квантовой яме пропадает зависимость от  $\lambda$  в дисперсионном соотношении. Указанный выше эффект для неё отсутствует.

Далее рассмотрены приграничные состояния. Расчётами было показано, что выбором параметров можно добиться наличия приграничных состояний только одной псевдоэффициентности для электронов с  $\lambda = +1$  и для дырок с  $\lambda = -1$  — эффекта «долинной» поляризации, аналогичного таковому в одиночном гетероконтакте, рассмотренному в главе 3. Причём такие приграничные состояния возникают в ограниченном интервале квазимпульсов.

Затем исследован экситон в планарной квантовой яме на основе графена. При достаточно малой ширине нанополоски  $d$  уравнение на двухчастичную волновую функцию, зависящую от координаты электрона  $y_-$  и дырки  $y_+$ , является одномерным уравнением Шредингера с кулоновским потенциалом:

$$\left( -\frac{1}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial y_-^2} - \frac{1}{2m_h^*} \frac{\partial^2}{\partial y_+^2} - \frac{\tilde{e}^2}{|y_- - y_+|} \right) \phi(y_-, y_+) = E' \phi(y_-, y_+), \quad (3)$$

где  $E' = E - E_g^{eff}$ ,  $\tilde{e}^2 \equiv e^2/\varepsilon_{eff}$  и  $\varepsilon_{eff} = (\varepsilon + \varepsilon')/2$  — эффективная диэлектрическая проницаемость графена, определяемая диэлектрическими проницаемостями  $\varepsilon$  и  $\varepsilon'$  сред, окружающих графен, например, материал подложки и вакуум, и может изменяться в широких пределах [13];  $m_e^*$  и  $m_h^*$  — эффективные массы электрона и дырки, соответственно.

Возбуждённые энергетические уровни экситона ( $n = 1, 2, \dots$ ) есть [14]

$$E_n = -\frac{\mu^* \tilde{e}^4}{2n^2}$$

с боровскими радиусами

$$a_n = \frac{n}{\mu^* \tilde{e}^2},$$

где  $\mu^* = m_e^* m_h^* / (m_e^* + m_h^*)$  — приведённая масса электрона и дырки.

Для основного состояния  $n = 0$  в одномерном случае энергия кулоновского взаимодействия логарифмически расходится на малых расстояниях, что качественно выражается в таком явлении, как падение на центр [14]. В таком случае проводится вариационный расчёт, учитывающий конечность ширины квантовой ямы. Результаты получаются с логарифмической точностью.

Затем исследовано влияние электрического поля на энергетический спектр экситона в квантовой яме. Рассмотрены два случая: 1) электрическое поле

направлено перпендикулярно границам нанополоски графена в плоскости гетероструктуры; 2) электрическое поле направлено параллельно границам полоски графена. Во втором случае имеется квадратичный эффект Штарка и в вычислениях использована теория возмущений Далгарно-Льюиса [15].

В завершение главы 4 приведены возможные экспериментальные исследования квантовой ямы на предмет обнаружения указанных выше явлений. Псевдоспиновое расщепление энергетического спектра можно наблюдать с помощью рамановской спектроскопии (расщепление  $D'$  пика). Положение линий люминесценции, соответствующих уровням экситона, получаются из оптических экспериментов.

**Глава 5** посвящена изучению энергетического (одночастичного) спектра СР на основе графена.

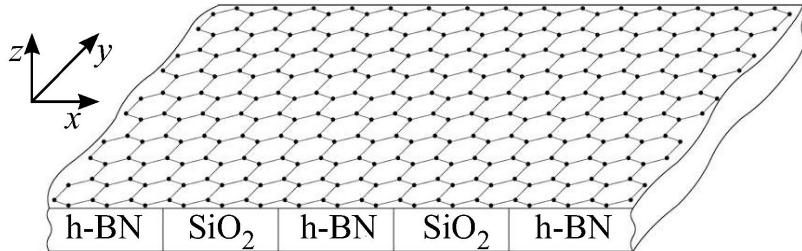
Сформулирована модель для описания планарной СР на основе графена с одномерной модуляцией запрещённой зоны — полоски бесщелевого графена чередуются с полосками его щелевой модификации (пример такой СР представлен на рис. 3).

СР описывается уравнением Дирака (ось  $x$  направлена перпендикулярно границам раздела полосок, а ось  $y$  — параллельно им, см. рис. 3):

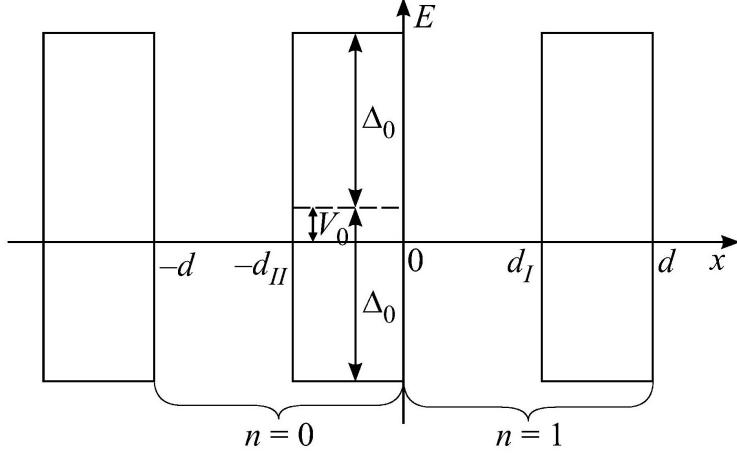
$$(v_F \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} + \Delta \sigma_z + V) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y), \quad (4)$$

где  $v_F \approx 10^8$  см/с — скорость Ферми;  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  и  $\sigma_z$  — матрицы Паули;  $\hat{\mathbf{p}} = -i\boldsymbol{\nabla}$  — оператор импульса (используется система единиц с  $\hbar = 1$ ). Полуширина запрещённой зоны периодически модулирована:

$$\Delta = \begin{cases} 0, & d(n-1) < x < -d_{II} + dn, \\ \Delta_0, & -d_{II} + dn < x < dn, \end{cases}$$



**Рис. 3.** Рассматриваемая система — лист графена на слоистой подложке из периодически чередующихся полосок SiO<sub>2</sub> и h-BN.



**Рис. 4.** Одномерный периодический потенциал СР, показанной на предыдущем рисунке: периодически чередующиеся щелевая модификация графена на h-BN с энергетической щелью  $2\Delta_0 = 53$  мэВ и бесщелевой графен на  $\text{SiO}_2$ .

где  $n$  — целое число, нумерующее сверхъячейки СР;  $d_I$  и  $d_{II}$  — ширины полосок  $\text{SiO}_2$  и h-BN соответственно, а  $d = d_I + d_{II}$  — период СР (размер сверхъячейки по оси  $x$ ). Вводим периодический скалярный потенциал  $V$ , который может возникнуть за счёт несовпадения положения по энергии середины запрещённой зоны щелевой модификации графена и положения конусных точек зоны Бриллюэна бесщелевого графена (рис. 4):

$$V = \begin{cases} 0, & d(n-1) < x < -d_{II} + dn, \\ V_0, & -d_{II} + dn < x < dn. \end{cases}$$

Для вывода дисперсионного соотношения используется метод матрицы переноса ( $T$ -матрицы).  $T$ -матрица связывает значения компонент спинора для  $n$ -й сверхъячейки с компонентами спинора того же типа решения для  $(n+1)$ -й сверхъячейки.

Дисперсионное соотношение для носителей тока в СР есть

$$\text{Tr } T = 2 \cos(k_x d). \quad (5)$$

Дисперсионное соотношение (5) приводит к уравнению:

$$\frac{v_F^2 k_2^2 - v_F^2 k_1^2 + V_0^2 - \Delta_0^2}{2v_F^2 k_1 k_2} \text{sh}(k_2 d_{II}) \sin(k_1 d_I) + \text{ch}(k_2 d_{II}) \cos(k_1 d_I) = \cos(k_x d), \quad (6)$$

где  $k_1 = \sqrt{E^2/v_F^2 - k_y^2}$  и  $k_2 = \frac{1}{v_F} \sqrt{\Delta_0^2 + v_F^2 k_y^2 - (E - V_0)^2}$ .

Для таммовских минизон делается замена  $k_1 \rightarrow i\kappa_1 = i\sqrt{k_y^2 - E^2/v_F^2}$

$$\frac{v_F^2 k_2^2 + v_F^2 \kappa_1^2 + V_0^2 - \Delta_0^2}{2v_F^2 \kappa_1 k_2} \operatorname{sh}(k_2 d_{II}) \operatorname{sh}(\kappa_1 d_I) + \operatorname{ch}(k_2 d_{II}) \operatorname{ch}(\kappa_1 d_I) = \cos(k_x d). \quad (7)$$

Уравнение (7) имеет решение в случае выполнения неравенства:

$$v_F^2 k_y^2 - E^2 < -EV_0.$$

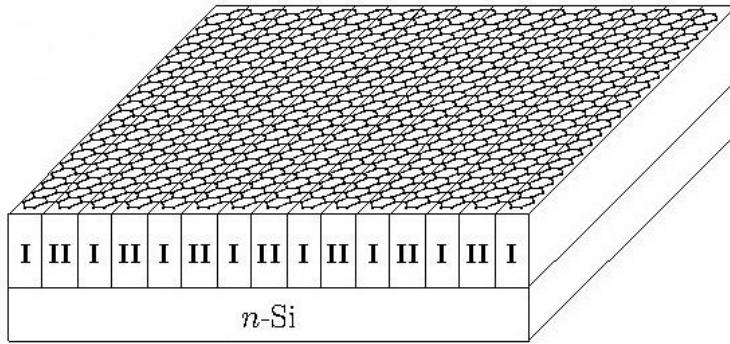
Нетрудно показать, что это неравенство справедливо при условии [16]

$$v_F^2 k_y^2 < \frac{\Delta_0^2(\Delta_0^2 - V_0^2)}{V_0^2}.$$

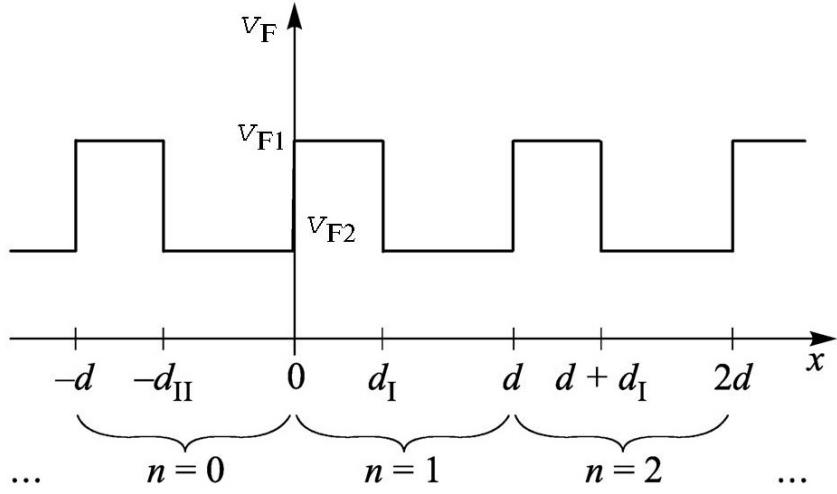
Формально это условие совпадает с критерием существования приграничных состояний при пересечении дисперсионных кривых [17].

Далее рассмотрена СР с чередующейся скоростью Ферми. Предложены три варианта такой СР: (а) лист графена на полосчатой подложке из материалов с существенно различными диэлектрическими проницаемостями, например,  $\text{SiO}_2$  с  $\epsilon=3,9$  (**I**) и  $\text{HfO}_2$  с  $\epsilon=25$  (**II**) (рис. 5); (б) лист графена на подложке  $\text{HfO}_2$  с периодическими бороздками; (в) лист графена на периодически расположенных металлических полосках. В качестве затвора используется пластинка сильно легированного кремния.

Модель для описания предлагаемой СР аналогична модели, которая описана выше. Теперь меняется скорость Ферми, а запрещённая зона и работа выхода равны нулю (бесщелевой графен).



**Рис. 5.** Один из вариантов СР с чередованием скорости Ферми.



**Рис. 6.** Профиль скорости Ферми в рассматриваемой СР ( $v_{F1} > v_{F2}$ ).

Будем считать профиль скорости Ферми резким (см. рис. 6). В таком случае огибающая волновой функции носителей тока  $\Psi(x, y)$  удовлетворяет уравнению Дирака с кусочно-постоянной скоростью Ферми в каждой области СР:

$$v_F \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \Psi(x, y) = E \Psi(x, y), \quad (8)$$

$$v_F = \begin{cases} v_{F1}, & d(n-1) < x < -d_{II} + dn, \\ v_{F2}, & -d_{II} + dn < x < dn. \end{cases}$$

Целые числа  $n$  нумеруют сверхъячейки, как показано на рис. 6.

Используя метод  $T$ -матрицы, находится дисперсионное соотношение для носителей тока в рассматриваемой СР:

$$\frac{v_{F1}v_{F2}k_y^2 - E^2}{v_{F1}v_{F2}k_1k_2} \sin(k_1d_I) \sin(k_2d_{II}) + \cos(k_1d_I) \cos(k_2d_{II}) = \cos(k_x d), \quad (9)$$

где  $k_j = \sqrt{E^2/v_{Fj}^2 - k_y^2}$  ( $j = 1, 2$ ).

Численными расчётами было подтверждено, что в случае  $k_y=0$  фермиевская скорость электронов (дырок) постоянна и не обращается в нуль вплоть до границы минизон (это верно для всех минизон). В этом смысле частицы не «чувствуют» границ минизон. В случае  $k_y \neq 0$  скорость частиц всегда обращается в нуль на границах минизон.

Качественно рассмотрена вольт-амперная характеристика (ВАХ). В достаточно сильном электрическом поле  $\mathcal{E}_x$  движение носителей заряда является

финитным — они совершают колебания со штартковской частотой  $\Omega = e\mathcal{E}_x d$ . Этим обусловлена нелинейность ВАХ. В ней появляется участок с отрицательной дифференциальной проводимостью при наличии электрического поля  $\mathcal{E}_y$ .

В заключительном разделе главы 5 рассмотрен пример политипной СР — трёхтипная СР вида А–В–С, где А и С — щелевые модификации графена с разными энергетическими щелями, В — бесщелевой графен.

В качестве реализации трёхтипной СР на основе графена предлагаем комбинированный вариант, в котором используются щелевые модификации, получаемые как за счёт взаимодействия листа графена с материалом подложки (h-BN), так и за счёт нанесения на его поверхность атомов или молекул (например, CrO<sub>3</sub>).

Пусть областью I будет область щелевой модификации графена с полушириной энергетической щели  $\Delta_I$  и работой выхода  $V_I$  и ширина этой области равна  $d_I$ ; областью II — область бесщелевого графена шириной  $d_{II}$  (работа выхода равна нулю); областью III — область щелевой модификации графена с полушириной энергетической щели  $\Delta_{III}$  и работой выхода  $V_{III}$  шириной  $d_{III}$ . Период СР равен  $d = d_I + d_{II} + d_{III}$ .

Уравнение на огибающую волновую функцию есть уравнение (1) с периодически меняющимися полушириной энергетической щели и работой выхода:

$$\Delta, V = \begin{cases} \Delta_I, V_I & (n-1)d < x < (n-1)d + d_I, \\ 0, & (n-1)d + d_I < x < nd - d_{III}, \\ \Delta_{III}, V_{III} & nd - d_{III} < x < nd; \end{cases}$$

Во всех областях СР скорость Ферми  $v_F$  одинакова.

Методом матрицы переноса было получено дисперсионное соотношение, анализ которого показывает, что появляется зависимость энергии от псевдо-чётности  $\lambda$ . Имеется псевдоспиновое расщепление энергетического спектра мизон. Достаточным условием существования псевдоспинового расщепления энергетического спектра СР является условие:

$$\Delta_I V_{III} \neq \Delta_{III} V_I.$$

**Глава 6** посвящена исследованию коллективных возбуждений в планарных СР на основе графена с одномерной периодической модуляцией энергетической щели. Исследование выполнено в рамках приближения хаотических фаз (ПХФ).

Сначала исследуются плазмоны в планарной СР. Вводится эффективное модельное описание СР. Выделены два случая: 1) уровень Ферми попадает в одну из минищелей, 2) уровень Ферми лежит в одной из минизон.

В первом случае все минизоны, лежащие ниже уровня Ферми, полностью заполнены и колебания электронной (дырочной) плотности в них осуществляются только вдоль направления свободного движения носителей заряда (перпендикулярно направлению приложения потенциала СР). Это квазиодномерное движение.

Во втором случае одна минизона, в которую попадает уровень Ферми, частично заполнена, а все ниже лежащие (если таковые имеются) полностью заполнены. В частично заполненной минизоне также возможны колебания электронной (дырочной) плотности вдоль направления приложения потенциала СР. В ней осуществляется квазидвумерное движение.

Далее для простоты будем рассматривать вариант с заполнением (полным или частичным) только одной нижней электронной минизоны или верхней дырочной минизоны. Они лежат по энергии в квантовых ямах.

Дисперсия плазмонов в рамках ПХФ определяется уравнением

$$1 - V(\mathbf{k})\Pi(\mathbf{k}, \omega) = 0,$$

$V(\mathbf{k})$  — кулоновское взаимодействие,  $\Pi(\mathbf{k}, \omega)$  — поляризационный оператор.

На границе плазменной зоны в случае близко расположенных полосок бесщелевого графена получается характерный для двумерных систем корневой закон дисперсии плазмонов [18]

$$\omega_{pl}^{(1D)}(k_y) = v_F \sqrt{\frac{2\pi n_{2D} \tilde{e}^2}{|\tilde{\mu}|} |k_y|}, \quad (10)$$

где  $n_{2D}$  — двумерная концентрация носителей тока,  $\tilde{\mu}$  — химпотенциал, отсчитанный от середины минищели между рассматриваемыми минизонами.

Однако, практически для всей плазменной зоны закон дисперсии плазмона остаётся акустическим ( $\theta = k_x d$ )

$$\omega_{pl}^{(1D)}(k_y, \theta) = v_F |k_y| \sqrt{\frac{2g\tilde{e}^2 p_F}{\pi |\tilde{\mu}|} f(\theta)}, \quad (11)$$

где введена функция [19]

$$f(\theta) = \ln \frac{d}{\pi d_I} - \gamma - \psi \left( \frac{\theta}{2\pi} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \operatorname{tg} \frac{\theta}{2},$$

$\gamma$  — постоянная Эйлера,  $\psi(x)$  —  $\psi$ -функция Эйлера.

Далее исследуются магнитоплазмоны в планарной СР.

Эффективный гамильтониан для носителей тока в долине  $K$ -точки есть

$$\hat{H}_{eff}^K = v_\perp \sigma_x \hat{\pi}_x + v_\parallel \sigma_y \hat{\pi}_y - \sigma_z \Delta_{eff} + V_{eff},$$

где оператор  $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ ,  $e$  — заряд частиц,  $c$  — скорость света в вакууме,  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал магнитного поля  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ ,  $\hat{\mathbf{p}} = -i\boldsymbol{\nabla}$  — оператор импульса; скорости  $v_\perp$  и  $v_\parallel$  характеризуют движения носителей тока соответственно поперёк и вдоль направления приложения потенциала СР, причём  $v_\perp \ll v_\parallel$ , а  $v_\parallel \simeq v_F$ .

Эффективный гамильтониан для носителей тока в долине  $K'$ -точки есть

$$\hat{H}_{eff}^{K'} = v_\perp \sigma_x \hat{\pi}_x - v_\parallel \sigma_y \hat{\pi}_y + \sigma_z \Delta_{eff} + V_{eff}.$$

Гамильтонианы  $\hat{H}_{eff}^K$  и  $\hat{H}_{eff}^{K'}$  унитарно эквивалентны:

$$\hat{H}_{eff}^{K'} = U \hat{H}_{eff}^K U^\dagger, \quad U = \sigma_x.$$

Откуда следует, что их энергетические спектры одинаковы. Хотя долинное вырождение может быть снято за счёт, например, одноосной деформации в плоскости графена [20].

Затем находятся собственные волновые функции и собственные значения гамильтонианов  $\hat{H}_{eff}^K$  и  $\hat{H}_{eff}^{K'}$

$$E_{N_L}^{e,h} = V_{eff} \pm \epsilon_{N_L}, \quad (12)$$

где плюс для электронов, минус для дырок,  $N_L$  — номер уровня Ландау,

$$\epsilon_{N_L} = \sqrt{\Delta_{eff}^2 + 2v_\perp v_\parallel \frac{|e|}{c} BN_L}. \quad (13)$$

В случае заполнения только нулевого уровня Ландау поляризационный оператор можно записать в импульсном представлении. В этом случае было получено дисперсионное соотношение для магнитоплазмонов в рамках ПХФ, в котором явно учтён вклад в дисперсию магнитоплазмонов межминизонных виртуальных переходов. Магнитоплазмоны являются незатухающими коллективными возбуждениями за исключением дискретного набора резонансных частот. Эти частоты соответствуют переходам между уровнями Ландау.

## ОБЩИЕ ВЫВОДЫ ПО РАБОТЕ

1. Метод огибающих волновых функций пригоден для описания электронных свойств планарных гетероструктур на основе графена. С помощью этого метода были разработаны модели, позволившие сделать ряд теоретических предсказаний: эффект фильтрования в гетероструктуре с одним или несколькими потенциальными барьерами, «долинная» поляризация приграничных состояний в одиночном гетероконтакте, псевдоспиновое расщепление спектра носителей тока в несимметричной квантовой яме и в политипных СР. Надёжность и достоверность результатов работы обеспечены строгостью и логичностью проведённых выкладок. Выполненные численные расчёты подтверждают правильность аналитических результатов.
2. Наиболее общий и хорошо обоснованный метод функций Грина позволил исследовать коллективные электронные свойства гетероструктур. Здесь СР выбрана как наиболее интересный вариант.
3. Полученные результаты важны для дальнейших исследований планарных гетероструктур на основе графена. Эти результаты могут быть использованы при решении научно-практических задач для разработки новых электронных приборов.
4. Гетероструктуры являются составной частью ИС. Плоская геометрия веществ с поперечным размером в один атом, представителем которых является графен, позволяет добиться прогресса в области планарной технологии для изготовления ИС. Исследованные в работе планарные гетероструктуры на основе графена могут рассматриваться как «строительные блоки» будущей наноэлектроники.

# Литература

- [1] Wallace P. R. The band theory of graphite // Phys. Rev. 1947. V. 71. P. 622–634.
- [2] McClure J. W. Band structure of graphite and de Haas-van Alphen effect // Phys. Rev. 1957. V. 108. P. 612–618.
- [3] Sloczewski J. C., Weiss P. R. Band structure of graphite // Phys. Rev. 1958. V. 109. P. 272–279.
- [4] Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films // Science. 2004. V. 306. P. 666–669.
- [5] Novoselov K. S., Jiang D., Schedin F. et al. Two-dimensional atomic crystals // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2005. V. 102. P. 10451–10453.
- [6] Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V. et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene // Nature. 2005. V. 438. P. 197–200.
- [7] Колесников А. В., Силин А. П. Энергетический спектр узкощелевых полупроводниковых гетероструктур нового типа // ЖЭТФ. 1996. Т. 109. С. 2125–2129.
- [8] Силин А. П., Шубенков С. В. Границные условия для узкощелевых гетероструктур, описываемых уравнением Дирака // ФТТ. 1998. Т. 40. С. 1345–1346.
- [9] Kolesnikov A. V., Silin A. P. The energy spectra of narrow-gap semiconductor heterostructures: spin splitting in the case of asymmetry // J. Phys.: Condens. Matter. 1997. V. 9. P. 10929–10939.

- [10] Андрюшин Е. А., Верещагин С. А., Силин А. П. Спиновое расщепление энергетических уровней в несимметричных узкощелевых полупроводниковых гетероструктурах // Краткие сообщения по физике ФИАН. 1999. №6. С. 21–27.
- [11] Andryushin E. A., Silin A. P., Vereshchagin S. A. Spin splitting of energy levels in asymmetric narrow-gap semiconductor heterostructures // Phys. Low-Dim. Struct. 2000. V. 3/4. P. 85–90.
- [12] Андрюшин Е. А., Нуцалов Ш. У., Силин А. П. Энергетический спектр асимметричных варионных узкощелевых полупроводниковых гетероструктур // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2001. №3. С. 3–10.
- [13] Келдыш Л. В. Кулоновское взаимодействие в тонких плёнках полупроводников и полуметаллов // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т. 29. С. 716–719.
- [14] Loudon R. One-dimensional hydrogen atom // Am. J. Phys. 1959. V. 27. P. 649–655.
- [15] Dalgarno A., Lewis J. T. The exact calculation of long-range forces between atoms by perturbation theory // Proc. R. Soc. A. 1955. V. 233. P. 70–74.
- [16] Maksimova G. M., Azarova E. S., Telezhnikov A. V., Burdov V. A. Graphene superlattice with periodically modulated Dirac gap // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. 205422.
- [17] Kolesnikov A. V., Lipperheide R., Silin A. P., Wille V. Interface states in junctions of two semiconductors with intersecting dispersion curves // Europhys. Letters. 1998. V. 43. P. 331–335.
- [18] Kotov V. N., Uchoa B., Pereira V. M. Electron-electron interactions in graphene: Current status and perspectives // Rev. Mod. Phys. 2012. V. 84. P. 1067–1125.
- [19] Андрюшин Е. А., Силин А. П. О плазменных возбуждениях в низкоразмерных системах // ФТТ. 1993. Т. 35. С. 324–329.
- [20] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках // Наука. М. 1972.

# Список работ автора по теме диссертации

## I. Публикации в журналах из перечня ВАК

1. Ратников П. В. Переход в полуметаллическое состояние графена на подложке // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 87. С. 343–349.
2. Ратников П. В., Силин А. П. Планарная гетероструктура графен–узкощелевой полупроводник–графен // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2008. №11, С. 10–20.
3. Ратников П. В., Силин А. П. Квантовая яма на основе графена и узкощелевых полупроводников // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2009. №2. С. 11–25.
4. Ратников П. В. Сверхрешётка на основе графена на полосчатой подложке // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 90. С. 515–520.
5. Ратников П. В., Силин А. П. Приграничные состояния в графеновых гетеропереходах // ФТТ. 2010. Т. 52. С. 1639–1643.
6. Ратников П. В., Силин А. П. Размерное квантование в графеновых планарных гетероструктурах: псевдоспиновое расщепление энергетического спектра, приграничные состояния и экситоны // ЖЭТФ. 2012. Т. 141. С. 582–601.
7. Ратников П. В., Силин А. П. Сверхрешётка нового типа на основе бесщелевого графена с чередующейся скоростью Ферми // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. С. 349–356.
8. Ratnikov P. V., Silin A. P. Pseudospin splitting of the energy spectrum of planar polytype graphene-based superlattices // Phys. Wave Phenom. 2015. V. 23. P. 180–185.
9. Ратников П. В., Силин А. П. Плазмоны в планарной сверхрешётке на основе графена // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 102. С. 823–829.
10. Ратников П. В. О дисперсионной зависимости магнитоплазмонов в планарной сверхрешётке на основе графена // Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 103. С. 872–877.

## **II. Труды конференций**

1. Ратников П. В., Силин А. П. Водородоподобные связанные состояния электронов и дырок в планарной квантовой яме на основе графена // Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук : Тр. 51-й науч. конф. МФТИ / Моск. физ.-тех. ин-т (гос. ун-т). М. ; Долгопрудный, 2008. Ч. 2 : Общая и прикладная физика. С. 31–34.
2. Ратников П. В., Силин А. П. Эффект фильтрования в планарной гетероструктуре на основе графена и узкощелевого полупроводника // Актуальные проблемы физики : Тр. XII Школы молодых учёных. М. 2008. С. 67–68.
3. Ратников П. В., Силин А. П. Энергетический спектр экситона в планарной квантовой яме на основе графена // Одиннадцатая всероссийская молодёжная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковых опто- и наноэлектронике. Тезисы докл. С.-Петербург. 2009. С. 49.
4. Ratnikov P. V., Silin A. P. Planar heterojunctions, quantum wells, and superlattices based on graphene // Low-Dimensional Materials, Strong Correlations, and Quantum Technologies : the 6th Windsor Summer School. Windsor. UK. 2012. P. 14.
5. Ratnikov P. V. Concept for planar graphene integrated circuits // Graphene Conference: From Research to Application. NPL. London. UK. 2012.
6. Ратников П. В. Плазмоны в планарной графеновой сверхрешётке // VI Всероссийская молодёжная конференция по фундаментальным и инновационным вопросам современной физики : Программа и тезисы докладов. М. 2015. С. 90.

## **III. Участие в написании коллективной монографии**

Ratnikov P. V., Silin A. P. Planar Heterostructures Based on Graphene // The chapter 7 in *Graphene – New Trends and Developments* ed. by F. Ebrahimi. ISBN: 978-953-51-2220-3. InTech. 2015. P. 179–239.