



ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЁТ ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУМЕРНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Хазанова С.В., Савельев В.В.

Графен, в силу особенности своей структуры, обладает уникальными свойствами. Особый интерес для современной нанoeлектроники представляет возможность создания в нём запрещённой зоны. Наличие и величина энергетической щели во многом зависят от степени неоднородности как потенциала подложки, так и самих графеновых структур.

Метод расчёта.

Метод матрицы переноса, записанной для структуры, описываемой уравнением Дирака:

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

связывает волновые функции до и после прохождения структуры

$$\psi_1(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{ik_x x}, \psi_2(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{-ik_x x}, \text{ где}$$

$$k_x = \sqrt{(\varepsilon - U(x))^2 - k_y^2} \quad s = \text{Sign}(\varepsilon - U(x)) \quad \text{Tg}(\phi) = k_y / k_x$$

Угол падения волны θ отсчитывается от нормали.

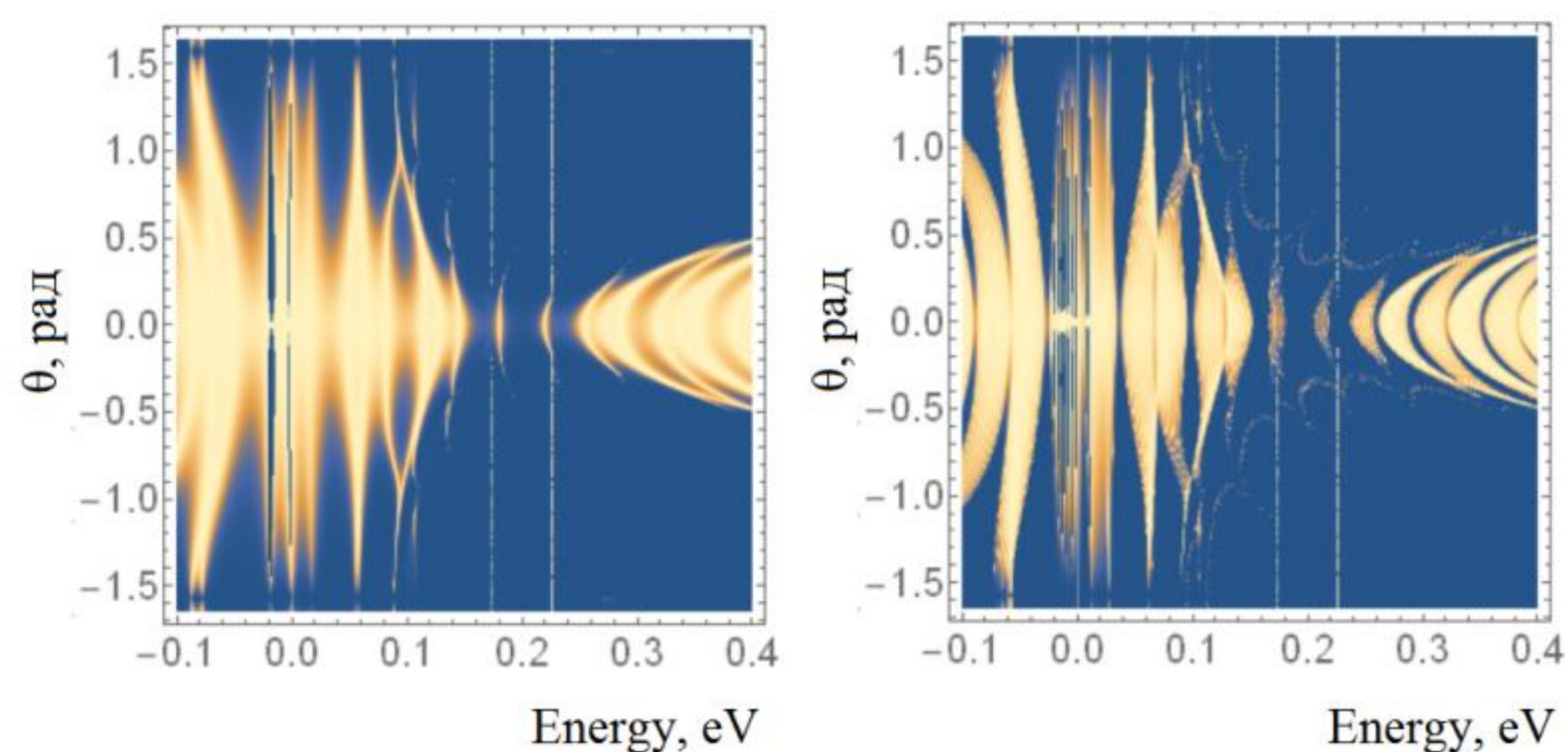
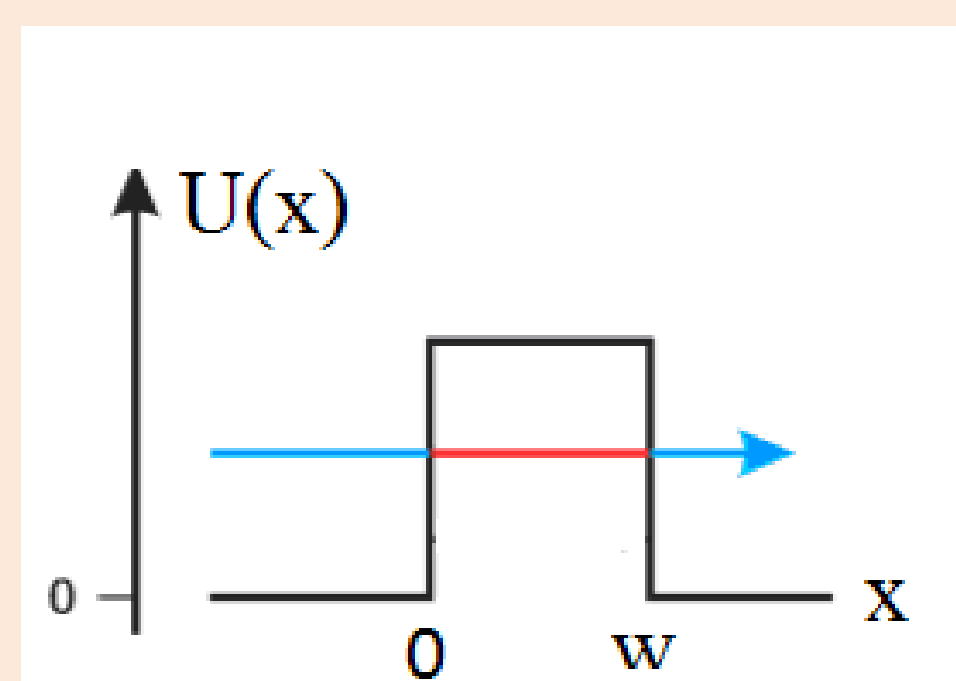


Рис. 1. Коэффициент прохождения от энергии и угла, $w=30$ нм, $V_b=0,2$ эВ, а-2 барьера, б-10 барьеров

Матрицы, записанные для описания поведения волновых функций внутри и на границе барьера:

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ se^{i\phi} & -se^{-i\phi} \end{pmatrix}, T(x) = \begin{pmatrix} e^{ik_x x} & 1 \\ 1 & e^{-ik_x x} \end{pmatrix}$$

используются для составления матрицы прохождения через единичный барьер: $S = G_b T_b^{-1} G_b^{-1}$

Тогда матрица прохождения через всю структуру: $N = G^{-1} \left(\prod_n S_n \right) G$

Вольт-амперная характеристика рассчитывалась по формуле:

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

$E' = E + eV_b$, ток дан в единицах $\frac{e}{4\pi^3 \hbar}$

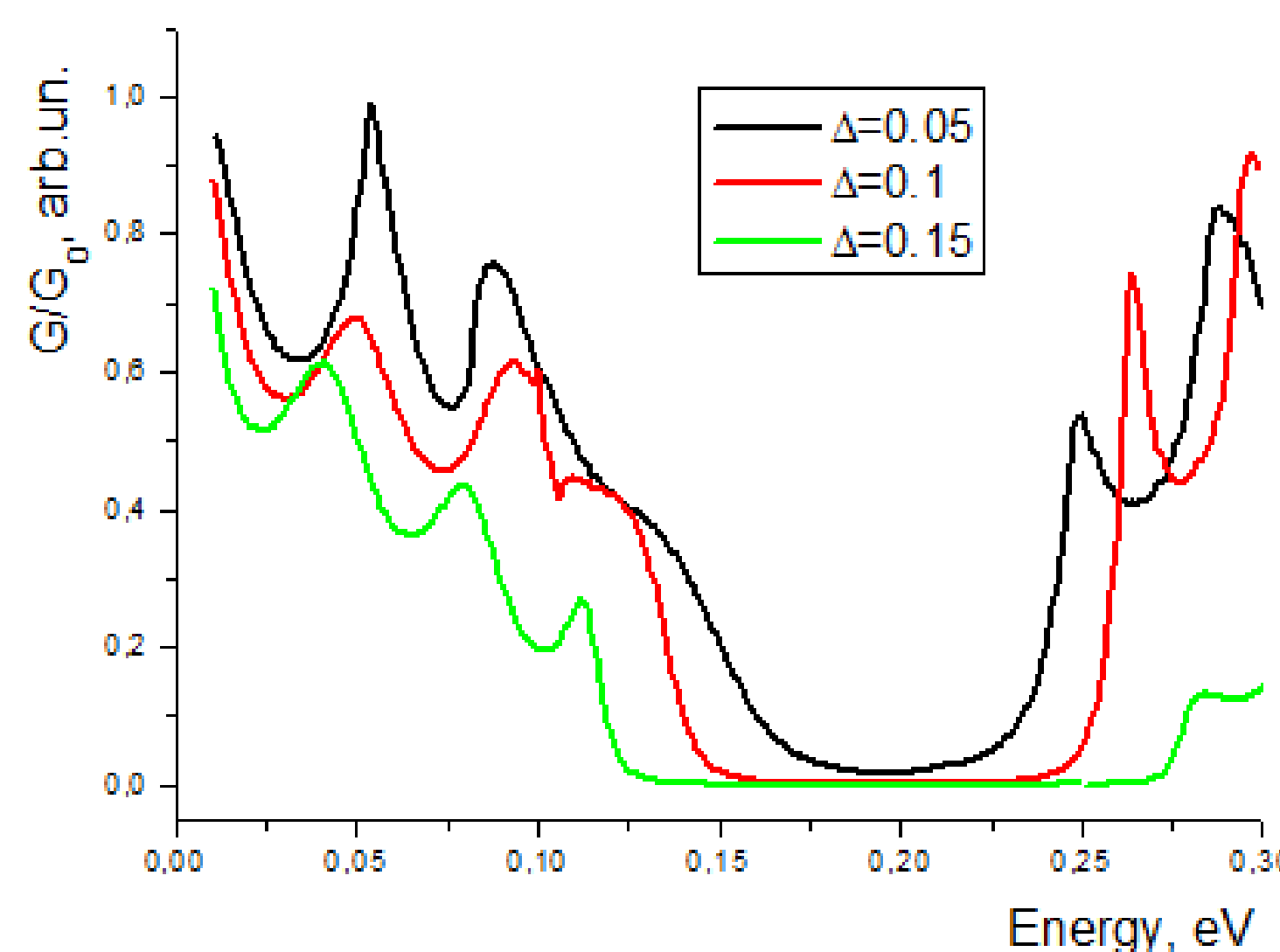


Рис. 2. Зависимость проводимости от энергии для структур с 10 барьерами при разных Δ , $w=3$ нм, $V_b=0,4$ эВ.

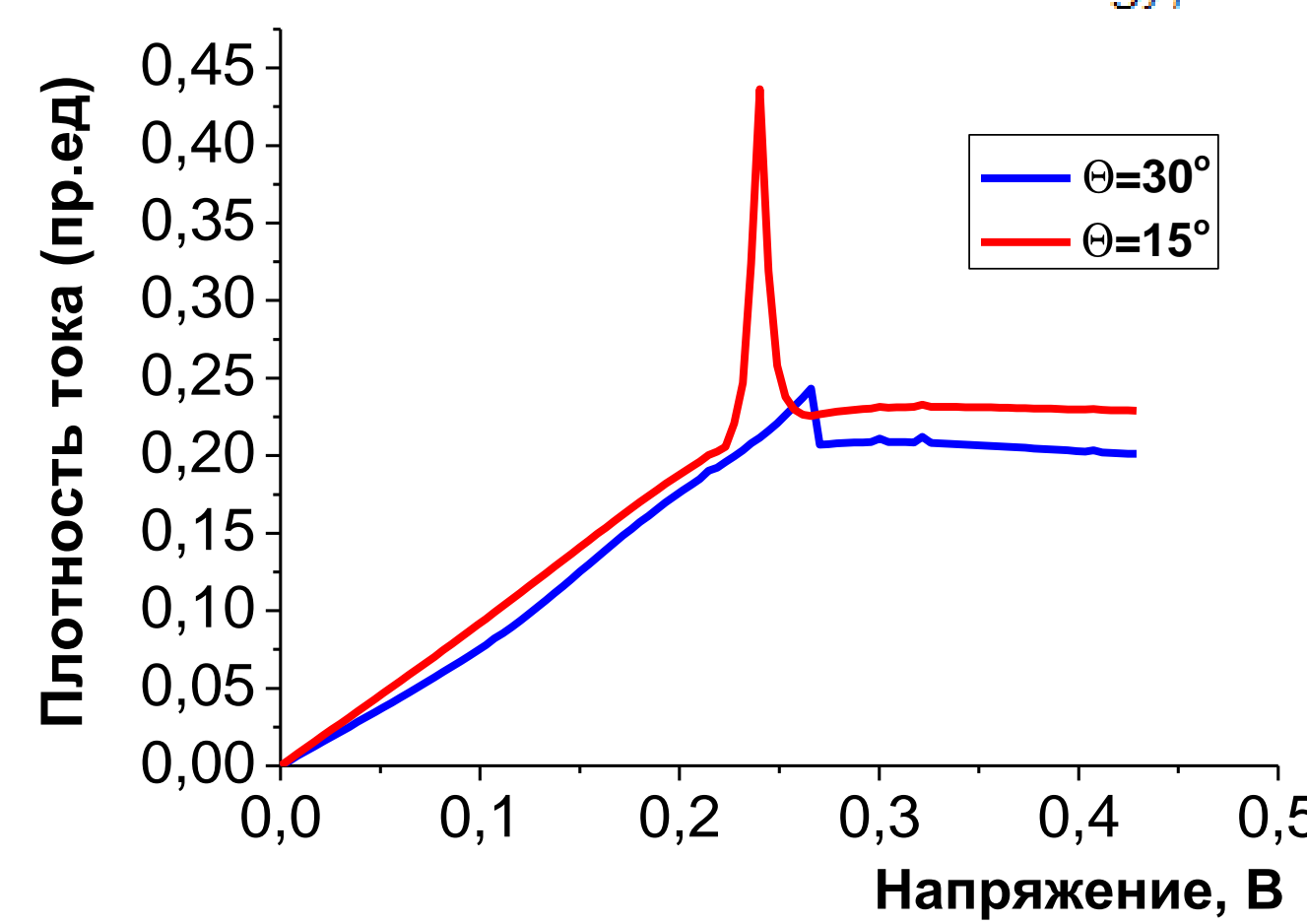


Рис. 3. Вольт-амперная характеристика для структур с 6 барьерами при разных углах падения, $w=0,43$ нм, $V_b=3$ эВ.

Результаты и выводы.

В данной работе численно получены транспортные характеристики для графеновых периодических структур. Рассчитан коэффициент прохождения в зависимости от угла падения и энергии, с увеличением количества барьеров зависимость коэффициента прохождения от энергии становится более дискретной (рис. 1). В структурах в зависимости от параметра Δ наблюдается зона, ширина которой коррелирует с этим параметром (рис. 2). В ВАХ имеется участок обратного дифференциального сопротивления, причём в зависимости от угла падения электронной волны меняются его параметры.

Литература

1. Ferrari and other, Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems, *Nanoscale*, 7, 4598–4810, 2015.
2. Vitaly V. Porsev and other, Expanded hexagonal nanohelicenes of zigzag morphology under elastic strain: A quantum chemical study, *Carbon*, 152, P. 755-765, 2019.
3. S. Dubey [et al], Tunable Superlattice in Graphene To Control the Number of Dirac Points, *Nano Letters*. – 2013. – Vol. 13, № 9. – P. 3990–3995.