УДК 537.311.33

СПЕКТР ПЛАНАРНОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА

Н. М. Вильданов[1], А. П. Силин

В двухзонном приближении рассчитана зависимость энергетических уровней планарной узкощелевой полупроводниковой квантовой точки от ее радиуса, энергетической щели и высоты потенциального барьера. На основании полученных результатов проведено детальное исследование энергетического спектра планарной квантовой точки на основе графена.

Графен, представляющий собой одноатомный слой атомов углерода, образующих правильную гексагональную решетку, был открыт в 2004 году [1]. С тех пор он интенсивно исследовался во всех направлениях, и теперь имеется обширная литература, посвященная этому удивительному материалу (см., например, [2]). Электроника на основе графена привлекает внимание благодаря высокой подвижности носителей тока [3]. Однако "стандартный" графен, осажденный на окись кремния, является бесщелевым полупроводником, поэтому он неприменим для создания таких полупроводниковых приборов, как диоды и транзисторы. Для открытия в бесщелевом графене регулируемой энергетической щели необходимо ввести пространственные ограничения, создавая планарные квантовые ямы (нанополоски) или планарные квантовые точки [4]. В качестве барьеров можно использовать узкощелевые полупроводники или щелевые модификации графена. Щелевые модификации графена возникают при нанесении его на подложки из специальных материалов, например, нитрида бора BN [5] (энергетическая щель 0.23 эВ), или карбида кремния SiC [3] (энергетическая щель 53 мэВ). Если подложка из BN помещена на поверхность металла, возникает графен n-типа с щелью 0.5 эВ [5].

[1] Московский физико-технический институт.

За последние несколько лет выполнено огромное количество работ по исследованию электронных свойств нанополосок графена. Энергетический спектр такой полоски зависит от природы ее краев (зигзаг или "armchair") [6–8].

В настоящей работе для исследования энергетического спектра планарной квантовой точки на основе графена рассматривается более общая задача планарных узкощелевых полупроводниковых квантовых точек в двухзонном приближении. В этом случае носители тока описываются двумерным уравнением Дирака [9] с соответствующими граничными условиями [10]

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = \left(\nu\hat{\alpha}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\beta}\Delta + V\right)\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \tag{1}$$

Здесь и далее $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ – матрицы Дирака, $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$ (для простоты считаем $\hbar = 1$), $\Psi(\mathbf{r})$ – огибающая волновой функции электрона, ν – кейновский матричный элемент скорости (квазискорость света), $\Delta = E_g/2$ – полуширина запрещенной зоны, V – работа выхода, которые могут изменяться на границах гетероструктуры. Мы будем считать, что квантовая точка имеет форму бесконечной тонкой полупроводниковой шайбы радиуса a с параметрами ν_0, Δ_0, $V_0 = 0$, заключенной в другом полупроводнике с параметрами ν, Δ, V. Частный случай планарной квантовой точки с $\Delta = \infty$ был рассмотрен в работе [11]. Частный случай планарной квантовой точки на основе графена с $\nu_0 = \nu, \Delta_0 = \Delta$ был недавно рассмотрен в работе [12].

Воспользуемся стандартным представлением для матриц Дирака (см., например, [13]):

$$\hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \tag{2}$$

$\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, 0)$, σ_x, σ_y – матрицы Паули. Тогда уравнение (1) распадается на два уравнения для спиноров ϕ и χ

$$\nu(\vec{\sigma}\hat{\mathbf{p}})\chi = (E - V - \Delta)\phi, \tag{3}$$

$$\nu(\vec{\sigma}\hat{\mathbf{p}})\phi = (E - V + \Delta)\chi. \tag{4}$$

Переходя от декартовых координат (x, y) к цилиндрическим (ρ, φ) по формулам

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos\varphi\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\sin\varphi}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{5}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\cos\varphi}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{6}$$

перепишем $(\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}})$ в следующем виде:

$$(\vec{\sigma}\hat{\mathbf{p}}) = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi}\left(-i\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ e^{i\varphi}\left(-i\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) & 0 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Если положить $\phi = \begin{pmatrix} e^{iM\varphi}u(\rho) \\ e^{i(M+1)\varphi}v(\rho) \end{pmatrix}$, $\chi = \begin{pmatrix} e^{iM\varphi}\tilde{u}(\rho) \\ e^{i(M+1)\varphi}\tilde{v}(\rho) \end{pmatrix}$, $M = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots$, то каждое из уравнений (3) и (4) распадается на два уравнения, и в итоге получаем систему:

$$\nu\left(\frac{d}{d\rho} + \frac{M+1}{\rho}\right)\tilde{v} = i(E - V - \Delta)u, \quad (8)$$

$$\nu\left(\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{M}{\rho}\right)\tilde{u} = i(E - V - \Delta)v, \quad (9)$$

$$\nu\left(\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{M+1}{\rho}\right)v = i(E - V + \Delta)\tilde{u}, \quad (10)$$

$$\nu\left(\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{M}{\rho}\right)u = i(E - V + \Delta)\tilde{v}, \quad (11)$$

которая распадается на две независимые системы для функций $u, \tilde{v}$ и $v, \tilde{u}$. Эти две системы эквивалентны при замене M на $-M-1$, поэтому мы ограничимся решением только для для одной пары. Легко получить уравнения, которым удовлетворяют u и $\tilde{v}$:

$$u'' + \frac{u'}{\rho} - \frac{M^2}{\rho^2}u + \frac{(E-V)^2 - \Delta^2}{\nu^2}u = 0, \quad (12)$$

$$\tilde{v}'' + \frac{\tilde{v}'}{\rho} - \frac{(M+1)^2}{\rho^2}\tilde{v} + \frac{(E-V)^2 - \Delta^2}{\nu^2}\tilde{v} = 0. \quad (13)$$

Решение этих уравнений для $\rho < a$ имеет вид:

$$u(\rho) = N_0 J_M(k_0\rho), \quad (14)$$

$$\tilde{v}(\rho) = \alpha_0 N_0 J_{M+1}(k_0\rho), \quad (15)$$

где $k_0 = \sqrt{E^2 - \Delta_0^2}/\nu_0$, и для $\rho > a$

$$u(\rho) = N K_M(k\rho), \quad (16)$$

$$\tilde{v}(\rho) = \alpha N K_{M+1}(k\rho), \quad (17)$$

где $k = \sqrt{(E-V)^2 - \Delta^2}/\nu$. Здесь $J_M(x)$ и $K_M(x)$ – функции Бесселя и Макдональда порядка M, через α, α_0, N, N_0 обозначены неизвестные константы, которые надлежащим выбором фазового множителя могут быть сделаны вещественными. Они определяются из нормировки и сшивания волновых функций на границе квантовой точки при $\rho = a$. Сшивание [10] решений (14) и (15) с (16) и (17) приводит к трансцендентному уравнению, определяющему зависимость энергетических уровней планарной полупроводниковой квантовой точки от параметров ν, Δ, V, а также от M

$$\frac{k\nu}{E-V+\Delta} - \frac{k_0\nu_0}{E+\Delta_0}\frac{J_{M+1}(k_0a)K_M(ka)}{J_M(k_0a)K_{M+1}(ka)} = 0. \tag{18}$$

В дальнейшем в этой работе нас будет интересовать только самый интересный с практической точки зрения случай планарной квантовой точки из бесщелевого графена, окруженной щелевой модификацией графена, когда $\Delta_0 = 0$, $V = 0$ и $\nu_0 = \nu$. Тогда уравнение (18) запишется в виде

$$\sqrt{\frac{\Delta - E}{\Delta + E}} = \frac{J_{M+1}(Ea/\nu)K_M(\sqrt{\Delta^2 - E^2}a/\nu)}{J_M(Ea/\nu)K_{M+1}(\sqrt{\Delta^2 - E^2}a/\nu)}. \tag{19}$$

Ввиду симметрии рассматриваемой квантовой точки относительно замены E на $-E$, мы рассматриваем только электронный спектр $E > 0$, дырочный спектр $E < 0$ получается заменой E на $-E$.

Введя безразмерные параметры $x = Ea/\nu$, $y = \Delta a/\nu$, перепишем (19) в виде

$$\sqrt{\frac{y-x}{y+x}} = \frac{J_{M+1}(x)K_M(\sqrt{y^2-x^2})}{J_M(x)K_{M+1}(\sqrt{y^2-x^2})}. \tag{20}$$

Выясним при каких значениях параметров в квантовой точке впервые возникает связанное состояние. Рассмотрим состояния с отрицательными M. Связанное состояние возникает при $E = \Delta$, откуда получаем, что $y = \mu_1$, где μ_1 – первый корень функции Бесселя порядка $M+1$. Проверим, что это действительно так для $M = -1$. Пусть $x = y - \varepsilon$, $\varepsilon > 0$ и $y = \mu_1 + \alpha$, $\alpha > 0$, $\alpha, \varepsilon \ll 1$,тогда, воспользовавшись известными асимптотиками функции Макдональда

$$K_0(z) \approx \ln\frac{1}{z}, \quad K_1 \approx \frac{1}{z}, \quad z \ll 1, \tag{21}$$

и соотношением $J_0(x)/J_1(x) \approx -(\alpha - \varepsilon)$, из уравнения (20) с $M = -1$ получим

$$\varepsilon \approx \frac{2\alpha}{\ln\frac{1}{\alpha}} \to 0 \text{ при } \alpha \to 0, \tag{22}$$

что доказывает сделанное предположение. Аналогичный анализ можно провести и для $M < -1$.

Таблица 1

Результаты анализа решений уравнения (20)

	$y_{\min}$	x_{M1}	x_{M2}	x_{M3}
$M = -2$	3.8	4.5	7.7	1.8
$M = -1$	2.4	3.1	6,2	9.4
$M = 0$	0	1.4 (основное состояние)	4.7	7.8
$M = 1$	1.8	2.6	6.1	2.3
$M = 2$	3	3.8	7.4	10.6

$y_{\min}$ соответствует энергетической щели, при которой впервые появляется связанное состояние, при заданном a; x_{M1}, x_{M2}, x_{M3} вычислены при $y \gg 1$

При $M \geq 1$ можно получить, что связанное состояние возникает при y, удовлетворяющем уравнению $yJ_{M+1}(y) = MJ_M(y)$. Для ветви $M = 0$ (основное состояние) при любом y имеется уровень, причем при малых $y \ll 1$ имеем $x = y - \delta$ с $\delta \simeq \frac{1}{y}\, e^{-\frac{2}{y^2}}$. Численный анализ уравнения (19) подтверждает это.

Исследуем теперь энергетический спектр планарных квантовых точек на основе графена при достаточно высоких барьерах $y \gg 1$. Нас будут интересовать только низколежащие состояния спектра, т.е. в уравнении (20) должно быть $x \ll y$. Воспользовавшись асимптотикой функции Макдональда

$$K_M(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}}e^{-z}, \quad x \to \infty, \tag{23}$$

получаем

$$J_M(x) = J_{M+1}(x). \tag{24}$$

В частности, для основного состояния $x_{01} = \lambda_1$, где $\lambda_1 \approx 1.4$ – первый корень уравнения $J_0(x) = J_1(x)$.

Легко найти также и число уровней при данном Δ. Например, при $\lambda_n < y < \lambda_{n+1}$, где λ_n – n-й корень уравнения $xJ_1(x) = J_0(x)$, число уровней с $M = 0$ будет равно n, а при $y < \lambda_1$ будет 1 корень.

Оценим, каким должен быть радиус a_R планарной квантовой точки на основе графена, чтобы ее можно было использовать для создания транзистора, работающего при комнатной температуре. Для этого величина энергетической щели, открывшейся в бесщелевом графене, должна быть порядка $T_к = 300$ К. Щель для графена на BN подложке равна $2\Delta = 0.5$ эВ [5], $\nu = 10^6$ м/с. Легко убедиться, что при этом $\Delta a/\nu \simeq 7 \gg 1$, поэтому, воспользовавшись таблицей, находим, что $a_R = 1.4\nu\hbar/k_B T_к \simeq 30$ нм.

ЛИТЕРАТУРА

[1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, et al., Science **306**, 666 (2004).

[2] A. H. Castro Neto, F. Guiena, N. M. R. Peres, et al., arXiv:0709.1163 (2007).

[3] X. Wang, Y. Ouyang, X. Li, et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 206803 (2008).

[4] L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, et al., Science **320**, 356 (2008).

[5] Y. H. Lu, P. M. He, and Y. P. Feng, arXiv:0712.4008.

[6] П. В. Ратников, А. П. Силин, Краткие сообщения по физике ФИАН, **36**(2), 11 (2009).

[7] L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006).

[8] L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **75**, 125434 (2007).

[9] В. А. Волков, В. Г. Идлис, М. Ш. Усманов, УФН **165**, 799 (1995).

[10] А. П. Силин, С. В. Шубенков, ФТТ **40**, 1345 (1998).

[11] M. V. Berry and R. J. Mondragon, Proc. R. Soc. London A **412**, 53 (1987).

[12] P. Recher, J. Nilsson, G. Burkard, and B. Trauzettel, arXiv:0810.0419v1.

[13] В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика* (М., Наука 1989).

Поступила в редакцию 17 декабря 2008 г.