

08

Переход заряда в вертикальных структурах, образованных двумерными слоями

© С.Ю. Давыдов¹, А.А. Лебедев¹, П.В. Булат²¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия² Севастопольский государственный университет, Севастополь, Россия

E-mail: Sergei_Davydov@mail.ru

Поступило в Редакцию 1 июня 2021 г.

В окончательной редакции 1 июня 2021 г.

Принято к публикации 5 июля 2021 г.

Методом функций Грина определены электронные структуры сверхрешеток и капсулированных слоев. Предложена простая схема оценки межслойного перехода заряда. В качестве примера рассмотрены слои графена и графеноподобных соединений.

Ключевые слова: 2D-структура, сверхрешетка, капсулированный слой.

DOI: 10.21883/PJTF.2021.20.51607.18896

Следствием возникновения графеновой тематики явился интенсивный поиск новых двумерных (2D) соединений и гетероструктур на их основе [1–3]. Сегодня известны сотни теоретически возможных 2D-материалов [4–6] и различные схемы формирования сверхрешеток (SL), образованных 2D-слоями (далее 2DSL) [7–9]. В [10] была предложена простая схема описания электронного спектра 2DSL, позволяющая учесть межслойное взаимодействие. Здесь мы используем результаты работы [10] для определения перехода заряда между образующими 2DSL слоями.

Рассмотрим вертикальную структуру, построенную из чередующихся листов 1 и 2, которые в изолированном виде описываются функциями Грина $G_{1,2}(\mathbf{\kappa}_{1,2}; \omega)$, где ω — энергетическая переменная, $\mathbf{\kappa}_{1,2}$ — волновые векторы для движения электронов в плоскости (x, y, pd) листа ($p = 0, 1, 2, \dots, N$; d — расстояние между слоями в 2DSL). Включим теперь межслойное взаимодействие V . В режиме слабой межплоскостной связи в диагональном приближении (см. [10]) функции Грина $\tilde{G}_{1,2}(\mathbf{\kappa}_{1,2}k_z; \omega)$ слоев 2DSL можно представить в виде

$$\tilde{G}_{1,2}^{-1}(\mathbf{\kappa}_{1,2}, k_z; \omega) = G_{1,2}^{-1}(\mathbf{\kappa}_{1,2}; \omega) - 4 \cos^2(k_z d) \Lambda_{2,1}(\omega) + i0^+, \quad (1)$$

где $\Lambda_{1,2}(\omega) = V^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{1,2}(\omega') (\omega - \omega')^{-1} d\omega'$ — функции сдвига зонных состояний слоя 2 (1) под воздействием слоя 1 (2) [10], $\rho_{1,2}(\omega) = \pi^{-1} N_{\mathbf{\kappa}_{1,2}}^{-1} \sum_{\mathbf{\kappa}_{1,2}} \text{Im} G(\mathbf{\kappa}_{1,2})$ — плотности состояний свободных слоев 1 и 2 ($N_{\mathbf{\kappa}_{1,2}}$ — числа состояний $\mathbf{\kappa}_{1,2}$), k_z — волновой вектор для движения электрона в вертикальном направлении (вдоль SL). Поскольку здесь мы не стремимся к получению точных результатов, а лишь проводим оценки межслойного перехода заряда, усредним выражение (1) по k_z . Тогда

вместо (1) получим

$$\langle \tilde{G}_{1,2}^{-1}(\mathbf{\kappa}_{1,2}, k_z; \omega) \rangle_{k_z} = \bar{G}_{1,2}^{-1}(\mathbf{\kappa}_{1,2}; \omega) = G_{1,2}^{-1}(\mathbf{\kappa}_{1,2}; \omega) - 2\Lambda_{2,1}(\omega) + i0^+. \quad (2)$$

Отметим, что сделанная замена обоснована в режиме слабой межслойной связи, так как z -зону можно считать узкой (бездисперсионной) по сравнению с 2D-зоной.

В качестве слоев, составляющих 2DSL, рассмотрим графен (Gr) и графеноподобные соединения (GLC). В низкоэнергетическом пределе плотность состояний свободного GLC и функция сдвига $\Lambda_{GLC}(\omega)$ равны соответственно

$$\rho_{GLC}(\Omega) = \begin{cases} 2|\Omega|/\xi^2, & \Delta \leq |\Omega| \leq R, \\ 0, & |\Omega| < \Delta, |\Omega| > R, \end{cases}$$

$$\Lambda_{GLC}(\Omega) = \frac{2V^2\Omega}{\xi^2} \ln \left| \frac{\Omega^2 - \Delta^2}{\Omega^2 - R^2} \right|, \quad (3)$$

где $\Omega = \omega - \varepsilon$, $\xi = \sqrt{2\pi\sqrt{3}t}$, $R = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}$, t — энергия перехода электрона между ближайшими атомами в слое, 2Δ — ширина запрещенной зоны свободного GLC, ε — энергия центра запрещенной зоны [11]. Положив $\Delta = 0$ и $\varepsilon = \varepsilon_D$, где ε_D — точка Дирака, получаем плотность состояний свободного графена $\rho_{Gr}(\omega)$. Будем считать, что плотность состояний решеточных слоев $\bar{\rho}_{GLC}$ определяется выражением (3), в котором Ω нужно заменить на $\bar{\Omega} = \omega - \bar{\varepsilon}$, где $\bar{\varepsilon} = \varepsilon + 2\Lambda_{n,n.l.}(\omega)$ и $\Lambda_{n,n.l.}(\omega)$ — сдвиг электронных состояний, вызванный ближайшим соседним слоем. Воспользуемся аппроксимацией, часто применяемой в теории адсорбции [12], и положим $\bar{\varepsilon} = \varepsilon + 2\Lambda_{n,n.l.}(\varepsilon)$. Числа заполнения атомов слоев при нулевой температуре равны $\bar{n}_{1,2} = 2 \int_{-\infty}^{\mu} \bar{\rho}_{1,2}(\omega) d\omega$, где μ — химический потенциал,

положение которого определяется из условия сохранения заряда $\bar{n}_1 + \bar{n}_2 = n_1 + n_2$, где $n_{1,2}$ — числа заполнения слоев в отсутствие взаимодействия. Межслойный переход заряда равен $\nu_{1,2} = \bar{n}_{1,2} - n_{1,2}$, откуда получаем $\nu_1 = -\nu_2$.

Начнем с решетки, образованной слоями Gr и GLC , и будем считать Gr и GLC недопированными, так что $n_1 = n_2 = 1$. Если $\bar{\epsilon}_D < \bar{\epsilon} - \Delta$, электроны переходят со слоев GLC на слой Gr . При этом $\nu_{Gr} = 2(\mu - \bar{\epsilon}_D)^2 / \xi_{Gr}^2$ и $\nu_{GLC} = -2(\mu - \bar{\epsilon})^2 / \xi_{GLC}^2$, откуда

$$\mu = \frac{\bar{\epsilon}_D \xi_{GLC} + \bar{\epsilon} \xi_{Gr}}{\xi_{Gr} + \xi_{GLC}},$$

$$\nu_{Gr} = 2 \frac{(\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}_D)^2}{(\xi_{Gr} + \xi_{GLC})^2}. \quad (4)$$

Если $\bar{\epsilon}_D > \bar{\epsilon} + \Delta$, электроны переходят со слоев Gr на слой GLC . Тогда $\nu_{Gr} = -2(\mu - \bar{\epsilon}_D)^2 / \xi_{Gr}^2$ и $\nu_{GLC} = 2(\mu - \bar{\epsilon})^2 / \xi_{GLC}^2$, откуда вновь получаем выражение (4) для μ , а для ν_{Gr} нужно заменить знак плюс на минус. В том случае, когда $\bar{\epsilon} - \Delta < \bar{\epsilon}_D < \bar{\epsilon} + \Delta$, перехода заряда не происходит. При $\epsilon = \epsilon_D$ (что приближенно соответствует графену и гексагональному нитриду бора [10]) межслойный переход заряда также отсутствует. Оценки значений t_{Gr} и t_{GLC} , Δ для 2D-соединений A_4B_4 и A_3B_5 приведены в [13], значения $-\epsilon$ и $-\epsilon_D$ относительно вакуума равны соответствующим работам выхода. Вследствие разнообразия параметров вывод о том, как именно учет межслойного взаимодействия влияет на переход заряда, можно сделать только для конкретных 2DSL.

Для 2DSL, состоящих из слоев $GLC1$ и $GLC2$, $\nu_{1,2} = \pm 2(\mu - \bar{\epsilon}_{1,2})^2 / \xi_{1,2}^2$, так что

$$\mu = \frac{\bar{\epsilon}_1 \xi_2 + \bar{\epsilon}_2 \xi_1}{\xi_1 + \xi_2},$$

$$\nu_1 = 2 \frac{(\bar{\epsilon}_1 - \bar{\epsilon}_2)^2}{(\xi_1 + \xi_2)^2}. \quad (5)$$

Если $\bar{\epsilon}_1 - \Delta_1 < \bar{\epsilon}_2 - \Delta_2$, электроны переходят со слоев $GLC2$ на слой $GLC1$, при $\bar{\epsilon}_1 + \Delta_1 > \bar{\epsilon}_2 + \Delta_2$ имеет место обратный процесс. При $\epsilon_1 = \epsilon_2$ (что приближенно справедливо для листов AlN и GaN [10]) переход заряда отсутствует.

Оценим теперь переход заряда в плоских капсулированных структурах. Для этого рассмотрим N вертикально расположенных произвольных 2D-слоев, заключенных между массивными верхней (top) и нижней (bottom) обкладками. Воспользовавшись результатами работы [14], для функций Грина слоев $g_p(\omega)$, где p — номер слоя, получим

$$g_N^{-1}(\omega) = \omega - \epsilon_N(\mathbf{\kappa}_N) - \Lambda_{top}(\omega) - \Lambda_{N-1}(\omega) + i0^+,$$

$$\dots$$

$$g_p^{-1}(\omega) = \omega - \epsilon_p(\mathbf{\kappa}_p) - \Lambda_{p+1}(\omega) - \Lambda_{p-1}(\omega) + i0^+,$$

$$1 \leq p \leq N - 1,$$

$$\dots$$

$$g_1^{-1}(\omega) = \omega - \epsilon_1(\mathbf{\kappa}_1) - \Lambda_2(\omega) - \Lambda_{bot}(\omega) + i0^+, \quad (6)$$

где $\Lambda_{top(bot)}(\omega)$ — сдвиг электронных состояний, введенный верхней (нижней) обкладкой. В качестве примера рассмотрим капсулированный слой графена, находящийся между верхней металлической обкладкой (контактной площадкой) и нижней обкладкой — подложкой, представляющей собой полупроводник (например, Si, SiC) или диэлектрик (например, BN, SiO₂). Для немагнитного переходного металла (TM) имеем

$$\rho_{TM}(\omega) = \begin{cases} 10/W_d, & |\Omega_m| \leq W_d/2, \\ 0, & |\Omega_m| > W_d/2, \end{cases}$$

$$\Lambda_{TM}(\omega) = (\Gamma_m/\pi) \ln \left| \frac{\Omega_m + W_d/2}{\Omega_m - W_d/2} \right|, \quad (7)$$

где $\Omega_m = \omega - \epsilon_m$; $\Gamma_m = 10\pi V_m^2/W_d$; ϵ_m — энергия центра d -зоны TM, ширина которой равна W_d ; V_m — матричный элемент взаимодействия металл–графен (модель Фриделя) [15]. Для полупроводника (диэлектрика) имеем

$$\rho_{SC}(\omega) = \begin{cases} \rho_s, & |\Omega_s| \geq E_g/2, \\ 0, & |\Omega_s| < E_g/2, \end{cases}$$

$$\Lambda_{SC}(\omega) = (\Gamma_s/\pi) \ln \left| \frac{\Omega_s - E_g/2}{\Omega_s + E_g/2} \right|, \quad (8)$$

где $\Omega_s = \omega - \epsilon_s$, $\Gamma_s = 4\pi V_s^2/W_s$; W_s — ширина зоны проводимости и валентной зоны; ϵ_s — энергия центра запрещенной зоны шириной E_g ; V_s — матричный элемент взаимодействия подложка–графен (модель Халдейна–Андерсона) [16]. Полагая $\bar{\epsilon}_D = \epsilon_D + \Lambda_{TM}(\epsilon_D) + \Lambda_{SC}(\epsilon_D)$, получим $|\nu_{Gr}| = 2(\mu - \bar{\epsilon}_D)^2 / \xi_{Gr}^2$, где положение μ задается обкладками. При $\mu < \bar{\epsilon}_D$ имеем $\nu_{Gr} < 0$, т.е. происходит отток электронов из графенового слоя; при $\mu > \bar{\epsilon}_D$ имеем $\nu_{Gr} > 0$, т.е. происходит приток электронов в графеновый слой. Возможен также случай, когда $\Lambda_{TM}(\epsilon_D) + \Lambda_{SC}(\epsilon_D) = 0$ и $\bar{\epsilon}_D = \epsilon_D$.

Итак, в работе предложена простая схема оценки перехода заряда, позволившая получить аналитические результаты. Режим слабого (ван-дер-ваальсова) взаимодействия рассматривался не только из соображений простоты, но и на том основании, что только в таком режиме Gr и GLC сохраняют свои оригинальные свойства.

Финансирование работы

А.А. Лебедев и В.П. Булат признательны финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в ходе реализации проекта „Фундаментальные основы механики, систем контроля и управления беспилотных авиационных систем с формообразующими конструкциями, глубоко интегрированными с силовыми установками, и уникальными свойствами, не применяемыми сегодня в пилотируемой авиации“ (№ FEFM-2020-0001).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.K. Geim, I.V. Grigorieva, *Nature*, **499**, 419 (2013). DOI: 10.1038/nature12385
- [2] И.В. Антонова, *ФТП*, **50** (1), 67 (2016). [I.V. Antonova, *Semiconductors*, **50** (1), 66 (2016). DOI: 10.1134/S106378261601005X].
- [3] K.S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, A.H. Castro Neto, *Science*, **353**, 9439 (2016). DOI: 10.1126/science.aac9439
- [4] S. Hastrup, M. Strange, M. Pandey, T. Deilmann, P.S. Schmidt, N.F. Hinsche, M.N. Gjerding, D. Torelli, P.M. Larsen, A.C. Riis-Jensen, J. Gath, K.W. Jacobsen, J.J. Mortensen, T. Olsen, K.S. Thygesen, *2D Mater.*, **5**, 042002 (2018). DOI: 10.1088/2053-1583/aacfc1
- [5] N. Briggs, S. Subramanian, Z. Lin, X. Li, X. Zhang, K. Zhang, K. Xiao, D. Geohegan, R. Wallace, L.-Q. Chen, M. Terrones, A. Ebrahimi, S. Das, J. Redwing, C. Hinkle, K. Momeni, A. van Duin, V. Crespi, S. Kar, J.A. Robinson, *2D Mater.*, **6**, 022001 (2019). DOI: 10.1088/2053-1583/aaf836
- [6] L. Vannucci, U. Petralanda, A. Rasmussen, T. Olsen, K.S. Thygesen, *J. Appl. Phys.*, **128**, 105101 (2020). DOI: 10.1063/5.0021237
- [7] C. Forsythe, X. Zhou, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Pasupathy, P. Moon, M. Koshino, P. Kim, C.R. Dean, *Nature Nanotechnol.*, **13**, 566 (2018). DOI: 10.1038/s41565-018-0138-7
- [8] P. Xiong, B. Sun, N. Sakai, R. Ma, T. Sasaki, S. Wang, J. Zhang, G. Wang, *Adv. Mater.*, **32**, 1902654 (2019). DOI: 10.1002/adma.201902654
- [9] S. Liu, K. Yang, W. Liu, E. Zhang, Z. Li, X. Zhang, Z. Liao, W. Zhang, J. Sun, Y. Yang, H. Gao, C. Huang, L. Ai, P.K.J. Wong, A.T.S. Wee, A.T. N'Diaye, S.A. Morton, X. Kou, J. Zou, Y. Xu, H. Wu, F. Xiu, *Natl. Sci. Rev.*, **7**, 745 (2020). DOI: 10.1093/nsr/nwz205
- [10] С.Ю. Давыдов, *ФТП*, в печати.
- [11] С.Ю. Давыдов, *ФТП*, **51** (2), 226 (2017). DOI: 10.21883/FTP.2017.02.44110.8336 [S.Yu. Davydov, *Semiconductors*, **51** (2), 217 (2017). DOI: 10.1134/S1063782617020051].
- [12] С.Ю. Давыдов, *Теория адсорбции: метод модельных гамма-функций* (Изд-во СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, СПб., 2013). twirpx.com/file/1596114/
- [13] С.Ю. Давыдов, *ФТТ*, **58** (4), 779 (2016). [S.Yu. Davydov, *Phys. Solid State*, **58** (4), 804 (2016). DOI: 10.1134/S1063783416040041].
- [14] С.Ю. Давыдов, *Письма в ЖТФ*, **47** (13), 52 (2021). DOI: 10.21883/PJTF.2021.13.51124.18749
- [15] С.Ю. Давыдов, *ФТТ*, **62** (2), 326 (2020). DOI: 10.21883/FTT.2020.02.48886.602 [S.Yu. Davydov, *Phys. Solid State*, **62** (2), 378 (2020). DOI: 10.1134/S1063783420020080].
- [16] С.Ю. Давыдов, *ФТП*, **47** (1), 97 (2013). [S.Yu. Davydov, *Semiconductors*, **47** (1), 95 (2013). DOI: 10.1134/S1063782613010090].