

МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ СОЦИАЛЬНО-
ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»



На правах рукописи

Подгорная Иоланта Александровна

**ПРОВОДИМОСТЬ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР С ПРИМЕСЯМИ В СИЛЬНЫХ
ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ**

1.3.5 – Физическая электроника

Диссертация

на соискание ученой степени кандидата

физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук, доцент
Глазов Сергей Юрьевич

Волгоград – 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
ГЛАВА 1. ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА (ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ).....	9
1.1 УГЛЕРОДНЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ СТРУКТУРЫ.....	9
1.2 КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ПРОВОДИМОСТИ	23
ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 1	32
ГЛАВА 2. ПРОВОДИМОСТЬ ПРИМЕСНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТИПА	33
2.1 ИОНИЗАЦИЯ ПРИМЕСЕЙ СТАТИЧЕСКИМ И ПЕРЕМЕННЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ПОЛЯМИ В ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТИПА	33
2.2 ПРОВОДИМОСТЬ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТИПА С УЧЕТОМ ИОНИЗАЦИИ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ	45
2.3 ПРОВОДИМОСТЬ МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТИПА	53
ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 2	60
ГЛАВА 3. ПРОВОДИМОСТЬ ДВУМЕРНОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА .	61
3.1 УПРАВЛЕНИЕ ПРОВОДИМОСТЬЮ ДВУМЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ ПОПЕРЕЧНЫМИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ПОЛЯМИ	61
3.2 ОСОБЕННОСТИ ПРОВОДИМОСТИ ДВУМЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ В СИЛЬНЫХ ВНЕШНИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ С УЧЕТОМ ИОНИЗАЦИИ ПРИМЕСИ	69
3.3. ВЗАИМОСВЯЗЬ НАПРАВЛЕНИЙ ВЕКТОРА НАПРЯЖЕННОСТИ ПОСТОЯННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ, ВЕКТОРА ПОЛЯРИЗАЦИИ ПЕРЕМЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ И ВЕКТОРА ПЛОТНОСТИ ТОКА В ДВУМЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ	75
ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 3	86
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	87

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования

Интенсивное развитие полупроводниковых технологий стимулирует изучение новых физических явлений в полупроводниковых материалах, в первую очередь для создания полупроводниковых устройств нового поколения, в частности высокоскоростной электроники на основе углеродных структур. Эти материалы обладают уникальными электронными свойствами, которые делают их перспективными для применения в высокочастотной электронике, оптоэлектронике и квантовых устройствах.

Проводимость низкоразмерных полупроводниковых углеродных структур, таких как графен, углеродные нанотрубки и сверхрешетки на основе графена, является одной из ключевых тем современной наноэлектроники. Электрические свойства полупроводниковых низкоразмерных структур в значительной степени определяются наличием в них примесей. Вследствие этого теоретическое исследование кинетических явлений, происходящих в полупроводниковых структурах на основе графена с примесными центрами в условиях воздействия внешних электрических полей различных конфигураций, представляется актуальным.

Степень разработанности проблемы

Исследованию проводимости углеродных нанотрубок и сверхрешеток на основе графена посвящено большое количество работ [1-25], поскольку установление транспортных характеристик, определяющих особенности переноса заряда и тепла, позволяет рассчитать рабочие параметры наноэлектронных устройств на их основе. Множество работ посвящено изучению нелинейного отклика графена, углеродных нанотрубок и сверхрешеток на основе графена на действие внешних электромагнитных полей [26-43].

В качестве **объектов** исследования выбраны

- 1) углеродные нанотрубки полупроводникового типа;

2) сверхрешетка на основе графена, помещенного на подложку, состоящую из чередующихся в шахматном порядке областей щелевого и бесщелевого графена.

Цель работы заключалась в теоретическом изучении проводимости наноструктур на основе графена с примесями при воздействии сильных электрических полей.

В соответствии с поставленной целью решались следующие **задачи**:

1. вычислить вероятность ионизации примесей статическим и переменным электрическими полями в углеродных нанотрубках полупроводникового типа с использованием метода мнимого времени;
2. вычислить постоянную составляющую плотности тока в углеродных нанотрубках полупроводникового типа с учетом ионизации примесных центров;
3. изучить зависимость постоянной составляющей плотности тока в многослойных углеродных нанотрубках полупроводникового типа от характеристик приложенных электрических полей с учетом ионизации примесей;
4. изучить зависимость постоянной составляющей плотности тока в двумерной графеновой сверхрешетке от характеристик приложенных электрических полей с учетом ионизации примесей;
5. изучить взаимосвязь направлений вектора напряженности постоянного электрического поля, вектора поляризации переменного электрического поля и вектора плотности тока в двумерной графеновой сверхрешетке.

Научная новизна проведенного исследования состоит в том, что в ходе проделанной работы впервые были получены и численно проанализированы в рамках квазиклассического приближения:

1. аналитическое выражение с экспоненциальной точностью для вероятности ионизации примесей в углеродных нанотрубках полупроводникового типа,

находящихся в постоянном электрическом поле. В случае воздействия переменного электрического поля получены аналитические выражения для вероятности ионизации примесей в предельных случаях;

2. аналитическое выражение для постоянной составляющей плотности тока в углеродных нанотрубках полупроводникового типа при воздействия постоянного и переменного электрических полей, поляризованных вдоль оси углеродной нанотрубки, с учетом ионизации примесных центров;
3. аналитическое выражение для постоянной составляющей плотности тока в двумерной графеновой сверхрешетке при воздействии постоянного и переменного электрических полей с учетом ионизации примесных центров;
4. аналитическое выражение для угла отклонения постоянной составляющей вектора плотности тока от направления вектора напряженности постоянного электрического поля в двумерной графеновой сверхрешетке в условиях воздействия постоянного и переменного электрических полей.

Методология и методы исследования

В данной работе результаты были получены на основе решения кинетического уравнения Больцмана (в приближении постоянного времени релаксации и с модельным интегралом столкновений Батнагара-Гросса-Крука при учете темпа генерации и рекомбинации), квазиклассического подхода, метода мнимого времени и методов компьютерного моделирования.

Теоретическая и практическая ценность результатов исследования состоит в том, что полученные выводы вносят вклад в современную теорию проводимости углеродных нанотрубок и сверхрешеток на основе графена. Основные положения исследования могут служить основой для дальнейших разработок в данной области. Выявленные зависимости могут быть использованы как в устройствах детектирования электромагнитного излучения, так и для уточнения глубины залегания примесных центров в структурах на основе графена, а также для управления проводимостью в таких структурах.

На защиту выносятся следующие положения:

1. При увеличении радиуса углеродной нанотрубки полупроводникового типа при одинаковой глубине залегания примесных центров и параметров приложенных полей возрастает вероятность ионизации примесей.
2. Сравнительный анализ экспериментальных и теоретических зависимостей силы тока от характеристик внешних статического и переменного электрических полей позволяет определить параметры углеродных нанотрубок полупроводникового типа.
3. В двумерной квадратной графеновой сверхрешетке, находящейся под совместным воздействием постоянного и переменного электрических полей, при равенстве продольной и поперечной составляющей переменного электрического поля и фиксированной частоте наблюдается наибольшее различие между возможными значениями плотности тока.
4. Векторы напряженности сильного постоянного электрического поля и плотности тока в двумерной квадратной графеновой сверхрешетке совпадают при ориентации поля вдоль осей сверхрешетки, вдоль биссекторного направления и в еще двух направлениях, симметричных относительно биссекторного.

Достоверность результатов исследования обеспечивалась выбором адекватных физических моделей, а также использованием в работе современных, хорошо апробированных методов компьютерного моделирования и теоретической физики; строгим соблюдением пределов применимости используемых подходов, моделей и приближений; непротиворечивостью выводов исследования основным физическим закономерностям, а также предельным переходом обобщающих результатов к ранее известным результатам.

Апробация результатов

1. XXXII Всероссийская школа-семинар «Волновые явления: физика и применения» имени профессора А. П. Сухорукова («Волны-2021») (г. Москва, 6-11 июня 2021 г.);
2. XXVI Международный симпозиум «Наноп физика и наноэлектроника» (г. Нижний Новгород, 14–17 марта 2022 г.);
3. XXXIII Всероссийская школа-семинар «Волновые явления: физика и применения» (г. Москва, 5-10 июня 2022 г.);
4. XVII Всероссийская молодежная научно-инновационной школа «Математика и математическое моделирование» (г. Саров, 5-7 апреля 2023 г.);
5. XXXV Всероссийская школа-семинар «Волновые явления: физика и применения» (г. Москва, 26-31 мая 2024 г.);
6. I Международная научная конференция «Актуальные вопросы математики и физики» ФГБОУ ВО «ВГСПУ» (г. Волгоград, 4-6 июня 2024 г.);
7. Международная математическая конференция «Современные математические модели в энергетике» (г. Обнинск, 25-26 октября 2024 г.);
8. XV Международная научно-техническая конференция «Информатика, управляющие системы, математическое и компьютерное моделирование (ИУСМКМ-2024)» в рамках X Международного Научного форума Донецкой Народной Республики (г. Донецк, 29-30 мая 2024.);
9. XXXVI Всероссийская школа-семинар «Волновые явления: физика и применения» (г. Москва, 1-6 июня 2025 г.).
10. XVII Международная научная конференция «Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании» (г. Саранск, 29-31 июля 2025 г.).
11. II Международная научная конференция «Актуальные вопросы математики и физики» ФГБОУ ВО «ВГСПУ» (г. Волгоград, 22-24 сентября 2025 г.);

Публикации

По результатам диссертационного исследования опубликовано 13 работ, в том числе 3 статьи в изданиях из списков Scopus / RSCI, а также 2 статьи в научных журналах из списка ВАК Минобрнауки: «Известия РАН: Серия Физическая», «Ученые записки физического факультета Московского университета», «Журнал радиоэлектроники».

Личный вклад автора

Основные положения диссертации опубликованы в соавторстве с научным руководителем, доктором физико-математических наук, доцентом Глазовым С.Ю. Совместно с научным руководителем сформулированы задачи исследования и проанализированы результаты вычислительного моделирования. Автор принимал активное участие в проведении теоретических расчетов, проработке и анализе литературы по теме диссертации, написании статей.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Общий объем составляет 144 страниц, включая 40 рисунков и графиков. Список литературы содержит 145 наименований цитируемых работ отечественных и зарубежных авторов.

ГЛАВА 1. ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА (ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ)

1.1 УГЛЕРОДНЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ СТРУКТУРЫ

Графен, представляющий собой одноатомный слой углерода, обладает уникальными электронными, механическими и оптическими свойствами, такими как высокая электро- и теплопроводность, зависимость электронных характеристик от наличия на поверхности графена присоединенных радикалов различной природы, регулируемая ширина запрещенной зоны, квантовый эффект Холла, чрезвычайно высокая подвижность носителей, высокая упругость и хорошие электромеханические характеристики. Вышеперечисленные свойства позволяют рассматривать графен в качестве перспективного материала для применения в различных областях [44-49], в частности, как возможную основу наноэлектроники. Углеродные полупроводниковые структуры на основе графена — это одна из самых перспективных областей исследований в современной науке и технологиях.

Теоретическое исследование свойств этого материала началось значительно раньше успешного получения экспериментальных образцов. Графен, представляющий собой моноатомный слой углерода, рассматривался как ключевой структурный элемент для формирования трехмерной кристаллической решетки графита. Графит является полуметаллом, и, как было показано [50] в 1947 году Ф. Уоллесом, в зонной структуре графена также отсутствует запрещенная зона, причём в точках соприкосновения валентной зоны и зоны проводимости энергетический спектр электронов и дырок линеен как функция волнового вектора.

В 2004 году графен был экспериментально получен с помощью микромеханического расщепления графита А. Геймом и К. Новосёловым [51]. При этом получить стабильную двумерную пленку удалось за счет связи с тонким слоем диэлектрика SiO_2 простым отшелушиванием от графита при помощи

обыкновенного скотча. Данный способ является довольно простым, поскольку позволяет работать со всеми слоистыми кристаллами, то есть теми материалами, которые представляются как слабосвязанные слои двумерных кристаллов. Затем были предложены и другие способы его получения [52-54]: термическим разложением карбида кремния, химическим расслоением графита под действием серной или соляной кислот, в растворе аммиака и т. п.

Графен интересен не только с точки зрения возможных приложений, но и с фундаментальной точки зрения – вследствие своих уникальных электронных свойств [55]. Уникальность электронных свойств объясняется расположением атомов углерода в графене [5] (рис. 1.).

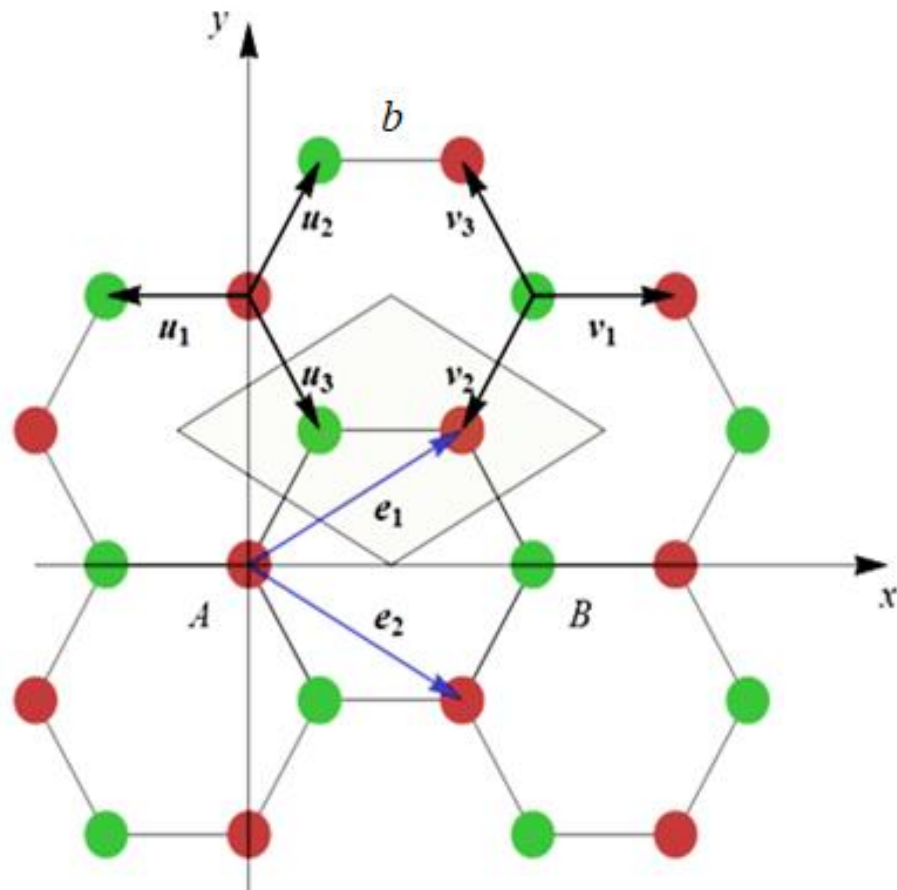


Рисунок 1.1 – Сотовая решетчатая структура графена, состоящая из двух подрешеток из атомов

В элементарной ячейке кристалла находятся два атома, обозначенные А и В. Каждый из этих атомов при сдвиге на вектора трансляций (любой вектор вида

$\mathbf{r}_a = m\mathbf{e}_1 + n\mathbf{e}_2$, где m и n – любые целые числа) образует подрешётку из эквивалентных ему атомов, расположенных в эквивалентных узлах кристалла. Расстояние между ближайшими атомами углерода в шестиугольниках, обозначенное b составляет 0,142 нм. [56].

Вблизи уровня Ферми электроны в графене обладают линейным законом дисперсии, а энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости отсутствует. Это приводит к тому, что динамика носителей заряда в графене аналогична поведению ультрарелятивистских частиц, движущихся с фермиевской скоростью $v_F \approx 10^8 \text{ см/с}$ [32]. На рисунке 1.2 приведено схематическое представление зонной структуры графена вблизи дираковской точки.

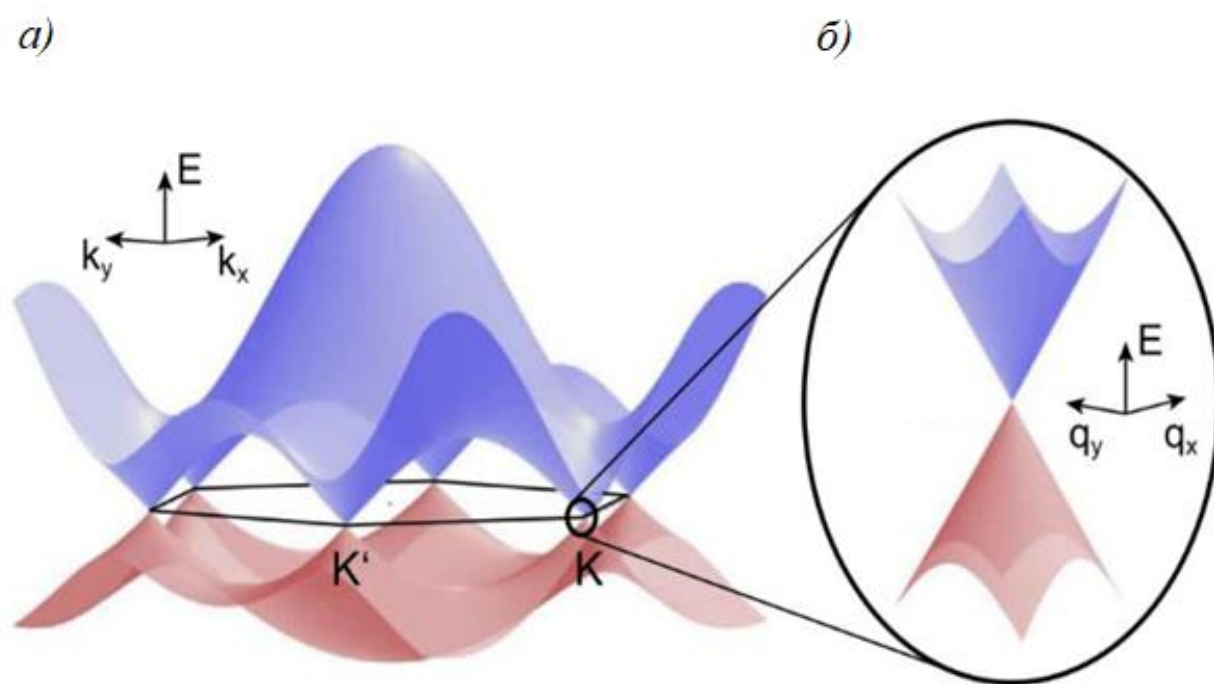


Рисунок 1.2 – а) схематическое представление зонной структуры графена в первой зоне Бриллюэна; б) увеличенное изображение дисперсии в области точки К, где валентная зона и зона проводимости соприкасаются на уровне Ферми [57]

Поскольку закон дисперсии для носителей зарядов в графене идентичен закону дисперсии для безмассовых частиц, на примере этой системы фактически можно изучать новый вид частиц – безмассовые заряженные квазичастицы [58]. Носители заряда в графене описываются не уравнением Шредингера, а

релятивистским уравнением Дирака, в котором произведена замена скорости света (c) на скорость на поверхности Ферми (v_F).

Непараболичность и неаддитивность электронного спектра графена дает возможность для проявления ряда нелинейных кинетических и электродинамических эффектов в этом материале. В частности, в [7, 29, 59] нелинейный ЭМ отклик в графене исследован в рамках квазиклассического подхода.

Однако по своим электронным свойствам графен является полуметаллом с нулевой запрещённой зоной, что ограничивает его применение в устройствах полупроводниковой электроники, поэтому одной из основных задач является создание в графене энергетической щели [60, 61]. Для создания полупроводниковых структур на основе графена используются различные методы, которые позволяют модифицировать его свойства и получить запрещённую зону.

Графен со щелью (или графен с запрещённой зоной) — это модифицированный графен, в котором искусственно создана запрещённая зона между валентной зоной и зоной проводимости. Величина запрещённой зоны может варьироваться от нескольких мэВ до нескольких эВ в зависимости от метода создания. Причинами возникновения щели могут быть: влияние подложки, спин-орбитальное взаимодействие, сильное электрон-фононное взаимодействие, наличие примесных центров и их ионизация. Запрещённая зона может быть создана путём формирования графеновых нанолент или квантовых точек (узкие полосы графена могут проявлять полупроводниковые свойства в зависимости от их ширины и типа края) или с помощью химического легирования: введение атомов других элементов (например, азота или бора) в структуру графена может изменить его электронные свойства и создать запрещённую зону. Запрещённая зона может возникать в графене, помещенном на подложку. Например, в монослойном графене на подложке из гексагонального нитрида бора h-BN запрещённая зона составляет около 53 мэВ [62], на подложке из карбида кремния SiC - примерно 0.26 эВ [63].

Углеродная нанотрубка (УНТ) – это одна из самых интересных и многообещающих форм углеродных материалов. Экспериментальным путем УНТ были обнаружены в 1991 г. японскими учеными Ичихаши и Сумио Ииджима [64]. Идеальные УНТ – это протяженные структуры в виде полого цилиндра, состоящие из одного или нескольких свернутых в трубку графитовых слоев с гексагональной организацией углеродных атомов, ограниченные с двух сторон полусферическими шапочками, которые могут рассматриваться как половина молекулы фуллерена (рис. 1.3).

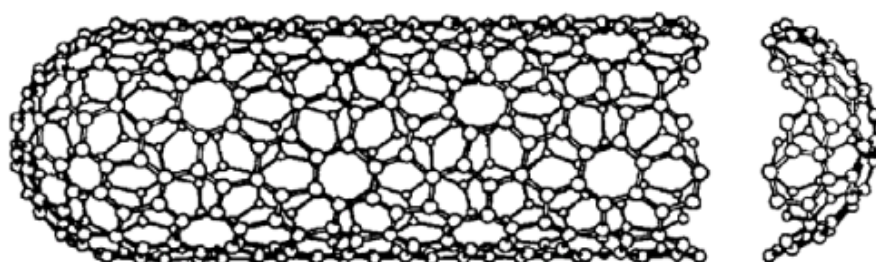


Рисунок 1.3 – Модель идеальной однослойной углеродной нанотрубки [65]

Первые открытые трубки были многослойными и представляли собой концентрические цилиндры, которые удерживаются вместе слабыми межмолекулярными силами. Для однослойных нанотрубок одним из важных параметров характеризующий структуру нанотрубки является вектор хиральности, то есть направление, вдоль которого происходит сворачивание графенового листа (рис. 1.4).

В зависимости от вектора хиральности УНТ подразделяют на: 1) УНТ типа «кресло» («armchair»), когда две стороны каждого шестиугольника ориентированы перпендикулярно оси нанотрубки, 2) ахиральные УНТ типа «зигзаг» («zigzag»), когда две стороны каждого шестиугольника ориентированы параллельно оси нанотрубки, 3) хиральные (спиралевидные) УНТ, когда каждая пара сторон шестиугольника расположена к оси нанотрубки под углом, отличным от 0° и 90° . Угол ориентации графеновой плоскости относительно оси нанотрубки задаёт

хиральность нанотрубки, которая определяет, в частности, её электрические характеристики [66]. В зависимости от их хиральности (способа сворачивания графенового листа), нанотрубки могут быть либо металлическими, либо полупроводниковыми.

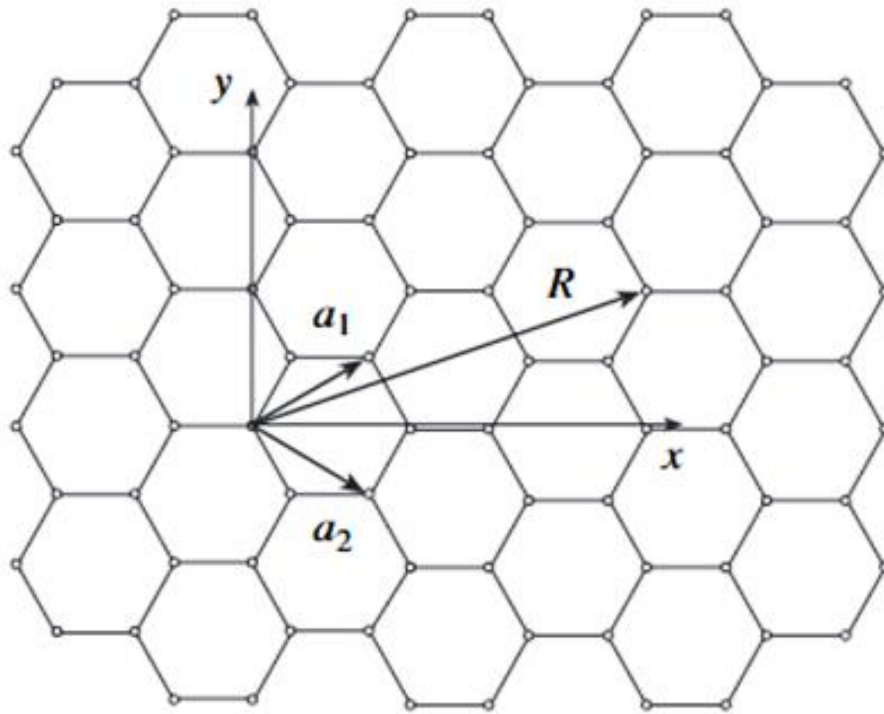


Рисунок 1.4 – Схематическая конфигурация кристаллической решетки графена, где $\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$ – вектор хиральности [67]

Диаметр УНТ колеблется от одного до нескольких десятков нанометров, а длина измеряется десятками микрон и постоянно увеличивается по мере усовершенствования технологии их получения [68].

УНТ имеют очень высокую электрическую проводимость, во много раз превышающую проводимость, например, серебра или меди. Как показали многочисленные исследования, углеродные нанотрубки проявляют большую энергетическую стабильность, чем фуллерены или графеновые пленки. Вместе с возможностью регулировать проводимость нанотрубки путем изменения ее структуры это позволяет уже сейчас применять эти материалы в различных лабораторных устройствах [3].

Радиус нанотрубки и угол хиральности выражаются равенствами [67]:

$$R_n = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} b \sqrt{m^2 + mn + n^2}, \quad \text{tg}\Theta = \frac{\sqrt{3}n}{2m + n} \quad (1.1)$$

Тип проводимости нанотрубок зависит от их хиральности, т.е. от группы симметрии, к которой принадлежит конкретная нанотрубка: если индексы нанотрубки (m, n) равны между собой или их разность делится на 3, она является полуметаллом, в любом другом случае нанотрубки проявляют полупроводниковые свойства.

Многостенные (multi-walled) нанотрубки (МУНТ) — это цилиндрические структуры, состоящие из нескольких слоёв графена, свёрнутых в концентрические трубки (рис. 1.5).

Слои могут быть устроены по-разному: один слой вложен в другой («матрешка») или графеновый лист свёрнут в спираль («свиток»). Расстояния между соседними графеновыми слоями близко к величине 0,34 нм, присущей расстоянию между соседними плоскостями кристаллического графита [69].

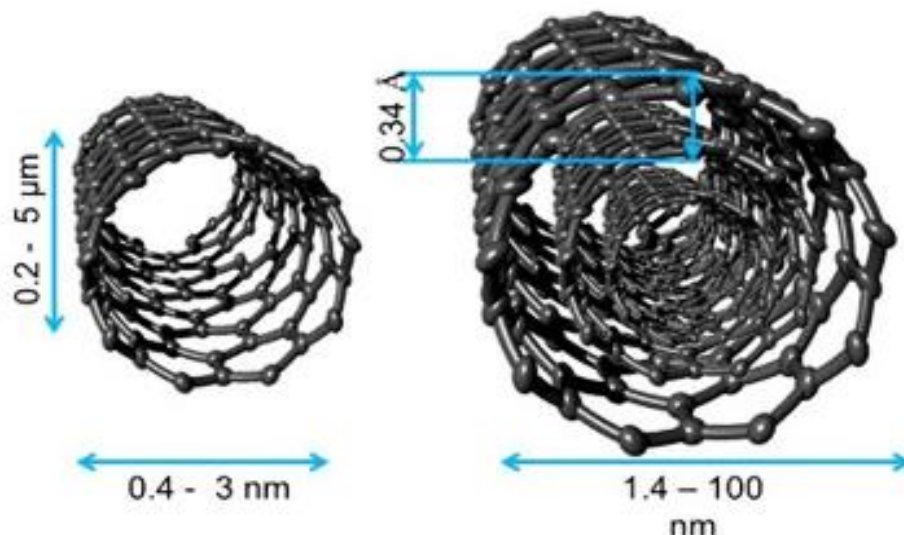


Рисунок 1.5 – Одностенные и многостенные углеродные нанотрубки [70]

Полупроводниковые УНТ обладают уникальными свойствами, которые делают их перспективными для применения в нанoeлектронике, оптоэлектронике и других областях. Полупроводниковые УНТ используются для создания полевых

транзисторов (CNTFET), которые превосходят традиционные кремниевые транзисторы по быстродействию и энергоэффективности. Благодаря своей способности поглощать и излучать свет в широком спектральном диапазоне, полупроводниковые УНТ применяются в фотодетекторах, светодиодах и солнечных элементах. Высокая чувствительность полупроводниковых УНТ к изменениям окружающей среды делает их идеальными для создания газовых, биологических и химических сенсоров. УНТ могут быть интегрированы в гибкие подложки, что открывает возможности для создания гибких дисплеев, носимой электроники и других устройств.

Для синтеза УНТ применяются три основных метода, каждый из которых имеет свои преимущества и ограничения [2]. С помощью традиционных методов, таких как лазерная абляция и дуговой разряд, получают многостенные и одностенные УНТ. Химическое осаждение из паровой фазы (CVD) также позволяет синтезировать многостенные и одностенные УНТ, вертикально ориентированные массивы. Преимуществами метода CVD являются высокая производительность, возможность контроля диаметра и ориентации трубок, что делает его экономически выгодным для крупномасштабного производства УНТ и их интеграции в различные устройства.

Следующий тип полупроводниковой углеродной структуры, рассматриваемый в данной работе – сверхрешетки на основе графена (ГСР) [8, 27, 71-80]. Сверхрешётка – это искусственно созданная периодическая структура, состоящая из чередующихся слоёв или полосок различных материалов с разными свойствами (например, полупроводников с разной шириной запрещённой зоны).

Интенсивное исследование электрических и оптических свойств ГСР объясняется различными возможными экспериментальными и технологическими приложениями этих материалов [31].

Существуют различные способы создания ГСР: применение электростатических и магнитных барьеров, использование графеновых нанолент, осаждение графена на подложке, содержащей периодически расположенные слои разных диэлектриков, а также чередование слоёв графена с различным углом

поворота друг относительно друга.

В работе Ратникова П.В. [73] была предложена модель сверхрешетки на основе графена, помещенного на подложку, состоящую из чередующихся полос диоксида кремния (не влияющего на зонную структуру графена) и гексагонального нитрида бора. Модель такой сверхрешетки представлена на рисунке 1.6.

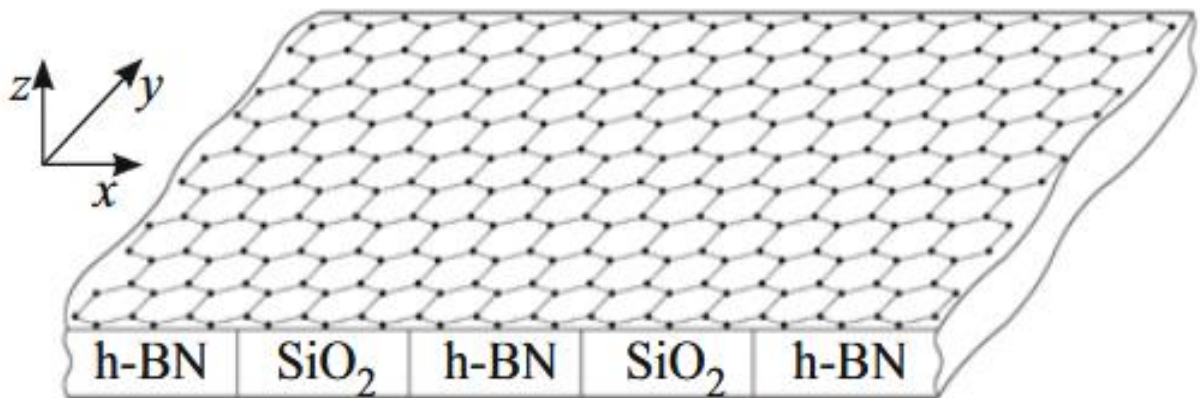


Рисунок 1.6 – Лист графена на полосчатой подложке из периодически чередующихся полосок SiO₂ и h-BN [73]

Слои h-BN расположены так, что его гексагональная кристаллическая решетка находится под гексагональной кристаллической решеткой графена. Благодаря такому расположению в зонной структуре графена появляется запрещенная зона шириной $2\Delta_0 = 53$ мэВ. Для предложенной ГСР выведено дисперсионное соотношение.

В [25] исследовано влияние структурных параметров, таких как толщина барьера/ямы и высота барьера, на транспортные характеристики ГСР. Графеновый лист состоит из *p*- и *n*-легированной области в качестве периодического барьера и ям. Предложенное модельное устройство основано на одномерном электростатическом потенциале типа Кронига-Пенни в монослойном графене, нанесенном на подложку, где напряжение смещения прикладывается двумя электродами слева и справа. Вид устройства представлен на рисунке 1.7.

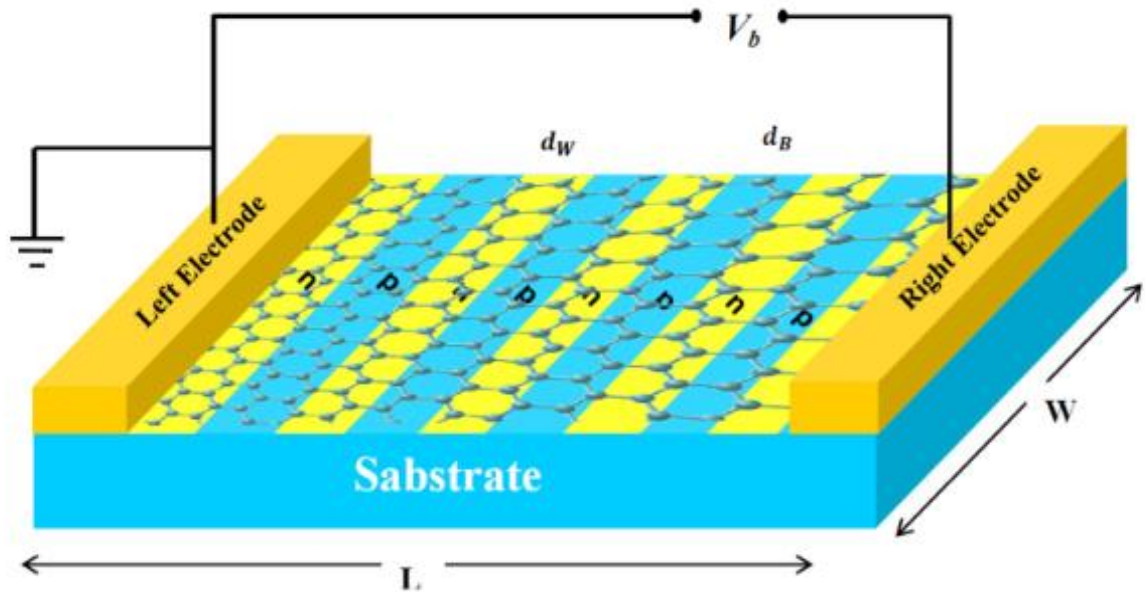


Рисунок 1.7 – Схематическое изображение сверхрешетки, в которой графеновые листы нанесены на подложку, где V_b — это напряжение смещения между левым и правым электродами.

В [8] рассмотрена модель сверхрешетки на основе графена, осажденного на подложку из периодически чередующихся полосок, например диоксида кремния SiO_2 и карбида кремния SiC . Материал SiO_2 не влияет на зонную структуру графена, в то время как SiC способствует возникновению запрещенной зоны в спектре графена, т.е. образованию щелевой модификации графена. Слои SiC расположены таким образом, что его гексагональная кристаллическая решетка располагается под гексагональной решеткой графена. При этом в областях графенового слоя над слоями SiC образуется энергетическая щель в зонной структуре графена, равная 0,26 эВ. Работа [8] положила основу для теоретического изучения различного рода процессов и явлений в такой структуре [28, 81-83].

В работе [83] изучается новый тип сверхрешеток на основе графена, образованных за счет периодической модуляции поверхности Ферми. Такая модуляция возможна для графена, нанесенного на полосчатую подложку из

материалов с существенно разными значениями диэлектрической проницаемости. Аналогичные сверхрешетки возникают также в листах графена, нанесенных на подложки с периодическим массивом параллельных канавок.

Изучение двумерных (2D) ГСР вызывает повышенный интерес исследователей в связи с необычностью их свойств, в том числе и электронных, что связано с особенностями энергетического спектра графена и структур на его основе. В двумерных сверхрешётках электроны могут двигаться в двух направлениях, что приводит к более сложной и богатой зонной структуре. Это позволяет создавать материалы с уникальными электронными свойствами, такими как анизотропная проводимость или экзотические топологические состояния. В двумерных сверхрешётках можно более гибко управлять шириной запрещённой зоны, изменяя параметры решётки (например, толщину слоёв или период). Это важно для создания материалов с заданными оптическими и электронными свойствами. 2D сверхрешётки используются в транзисторах, лазерах, фотодетекторах и других устройствах, где требуется сложное управление электронными и оптическими свойствами.

В [84] сообщается о новом подходе к изготовлению 2D ГСР, в котором сверхрешеточный потенциал модулируется путем интеграции поверхностного диэлектрического рисунка с монослоем графена. Схема структуры представлена на рисунке 1.8.

На поверхности SiO_2 , которая термически выращивается на пластине из высоколегированного кремния, вытравливается периодический ряд отверстий. Затем графеновая структура, инкапсулированная в h-BN, механически собирается и переносится на матрицу отверстий.

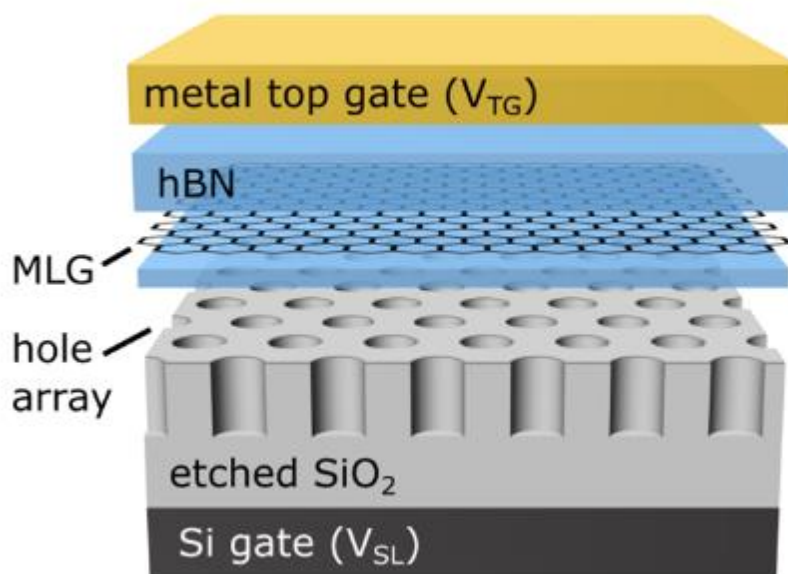


Рисунок 1.8 – Схема структуры устройства сверхрешетки на подложке с периодическими наноотверстиями [84]

На рисунке 1.9 представлена 2D ГСР, получаемая в результате осаждения графена на подложку из металлических наносфер. Наносферы SiO_2 (NS) диаметром 20 нм собраны на подложке $\text{SiO}_2/\text{n++ Si}$ толщиной 300 нм. Такая структура позволяет экспериментально наблюдать эффекты минизон сверхрешетки[85].

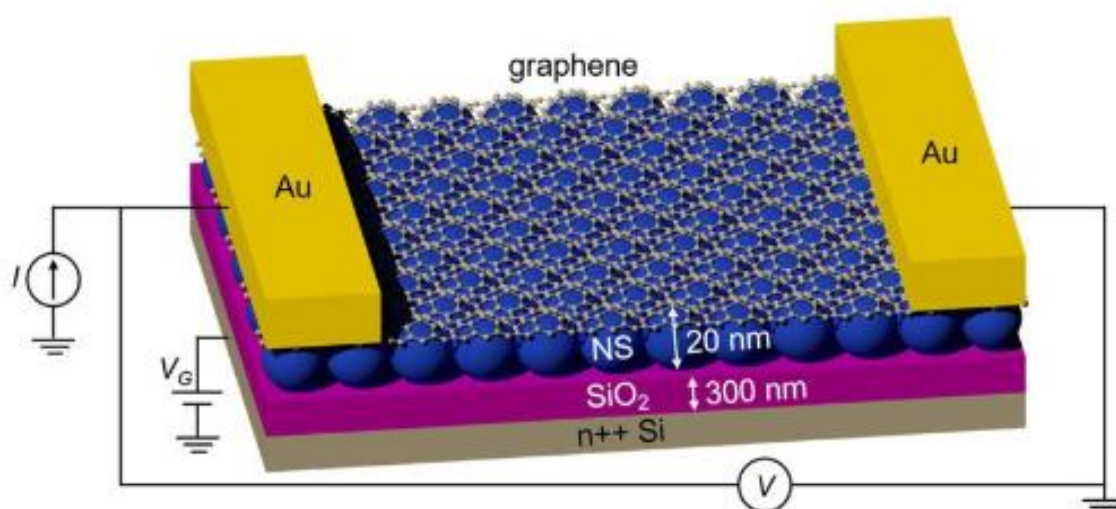


Рисунок 1.9 – Схема структуры устройства сверхрешетки. Графен уложен поверх NS и контактирует с 1 нм Cr/110 нм Au [85]

Вызывает значительный интерес модель 2D ГСР, в которой графен осажден на подложку из периодически чередующихся в шахматном порядке прямоугольных ячеек, например диоксида и карбида кремния (SiO_2 и SiC), предложенная в работе Крючкова С. В. [86] (рис. 1.10).

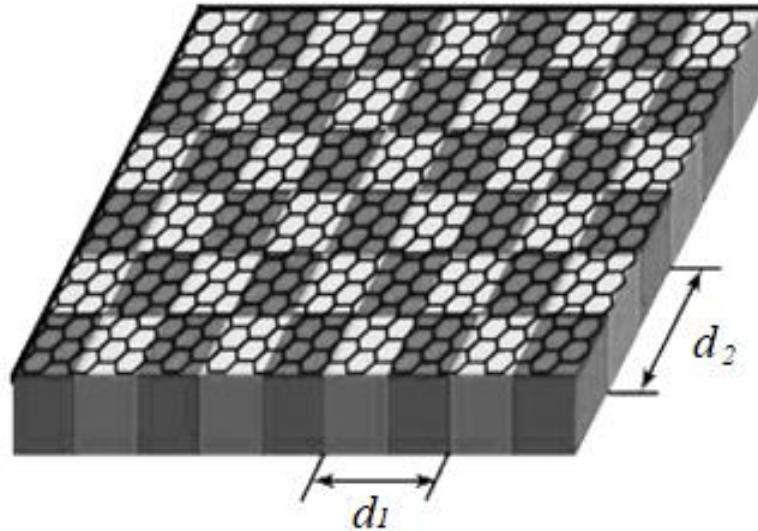


Рисунок 1.10 – Схема структуры устройства сверхрешетки, $d_i = a_i + b_i$ – период 2D ГСР, a_i и b_i – ширины ячеек бесщелевого и щелевого графена [86]

В результате взаимодействия графена с подложкой из SiC в энергетическом спектре носителей заряда появляется запрещенная зона (щель), а подложка из SiO_2 не вызывает изменение спектра графена (щель отсутствует). Чередование в шахматном порядке таких ячеек приводит к образованию 2D сверхрешеточного минизонного спектра Работа [86] является развитием идеи получения одномерной ГСР, предложенной ранее в [8], на двумерный случай.

Для 2D ГСР с такой структурой в работах [86, 87] исследовано влияние внешних постоянного и переменного электрических полей на транспортные свойства. Показано, что наличие постоянного поперечного электрического поля приводит к появлению дополнительного пика в вольт-амперных характеристиках. Кроме того, исследован коэффициент поглощения электромагнитной волны в присутствии постоянного электрического поля для случая квазиклассически

сильных электрических полей [88], выявлено влияние неаддитивности спектра 2D ГСР на распространение уединённого электромагнитного импульса вдоль произвольных направлений образца, а также показана возможность управления амплитудами высших гармоник поперечными электрическими полями [89, 90].

1.2 КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ПРОВОДИМОСТИ

Квазиклассическая теория проводимости – это подход, который позволяет описать транспорт электронов в твёрдых телах, используя классические представления, но с учётом квантовых эффектов. Этот метод особенно полезен для описания электронных свойств металлов и полупроводников в условиях, когда квантовые эффекты важны, но полное квантовомеханическое рассмотрение слишком сложно. Основная идея заключается в том, чтобы рассматривать электроны как классические частицы, но учитывать их волновую природу через такие понятия, как волновой вектор и энергетические зоны. В квазиклассическом приближении движение электрона проводимости описывается уравнениями, аналогичными классическим, но с учётом эффективной массы. В реальных материалах электроны сталкиваются с дефектами, фононами и другими неоднородностями. Это учитывается через время релаксации, которое характеризует среднее время между столкновениями. В полупроводниках квазиклассическая теория позволяет описать движение электронов проводимости в зоне проводимости и дырок в валентной зоне, а также такие явления, как диффузия, дрейф и генерация носителей заряда.

Поведение электрона в среде описывается с помощью закона дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$, представляющего собой зависимость энергии носителей заряда от модуля квазиимпульса, где $\varepsilon(\mathbf{p})$ – энергия носителя заряда, $\mathbf{p}$ – вектор квазиимпульса носителя заряда. Энергия $\varepsilon(\mathbf{p})$ является периодической функцией от квазиимпульса с периодом обратной решетки. Знание закона дисперсии является ключевым для понимания электронных, оптических и транспортных свойств полупроводниковых структур.

Рассмотрим, как вычислить постоянную составляющую плотности тока j_x , текущего вдоль некоторого направления рассматриваемой структуры (ось x), используя квазиклассический подход. Выражение для плотности тока может быть записано с помощью функции распределения следующим образом

$$j_x = e \sum_{\mathbf{p}} v_x(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}), \quad (1.1)$$

где e – заряд электрона, $\mathbf{p}$ – вектор квазиимпульса носителя заряда, $f(\mathbf{p})$ – неравновесная функция распределения носителей, $v_x(\mathbf{p}) = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}$ – скорость движения электронов вдоль оси нанотрубки.

Применив переход от суммирования по дискретным компонентам квазиимпульса к интегрированию по трехмерному $\mathbf{p}$ -пространству, формулу (1.1) можно переписать в виде [91]:

$$j_x = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbf{p}} v_x(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p}. \quad (1.2)$$

В случае рассмотрения одномерной или двумерной структуры, надо заменить тройной интеграл на одномерный или двойной соответственно.

Для нахождения функции распределения носителей используется классическое уравнение Больцмана с модельным интегралом столкновений в приближении постоянного времени релаксации:

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial t} + e\mathbf{E} \frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f(\mathbf{p}, t) - f_0(\mathbf{p})}{\tau}, \quad (1.3)$$

где $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля, $f_0(\mathbf{p}, t)$ – равновесная функция распределения, $f(\mathbf{p}, t)$ – неравновесная функция распределения.

Уравнение решается методом характеристик. Решение уравнения (1.3) имеет следующий вид:

$$f(\mathbf{p}, t) = f_0\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}(t)\right) \exp(-\nu t) + \nu \int_{-\infty}^t \exp(\nu(t' - t)) f_0\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}(\mathbf{A}(t) - \mathbf{A}(t'))\right) dt', \quad (1.4)$$

где второе слагаемое существенно превышает первое при условии $\nu t \gg 1$, поэтому на временах, превышающих время релаксации, первым слагаемым в (1.4) пренебрегают ввиду его малости.

Вектор-потенциал $\mathbf{A}(t)$ и поле $\mathbf{E}$ связаны следующим соотношением:

$$\mathbf{E} = -\partial \mathbf{A} / c dt, \quad (1.5)$$

где c – скорость света в вакууме.

Применяя стандартную замену переменных $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c}(\mathbf{A}(t) - \mathbf{A}(t'))$,

получаем выражение для плотности тока в виде:

$$j_x = \frac{2e\nu}{(2\pi\hbar)^2} \int \int_{\mathbf{p}-\infty}^t v_x \left[\mathbf{p} + \frac{e}{c}(\mathbf{A}(t) - \mathbf{A}(t')) \right] \exp(\nu(t' - t)) f_0(p_x, p_y) dt' d^2\mathbf{p}. \quad (1.6)$$

Функцию $f_0(\mathbf{p})$ выбираем в больцмановском виде:

$$f_0(p) \sim \exp(-\varepsilon(\mathbf{p})/k_B T), \quad (1.7)$$

где T – температура, k_B – постоянная Больцмана.

С целью упрощения расчетов скорость носителей v_x раскладывается в ряд Фурье. Интеграл по времени в формуле (1.5) можно взять, воспользовавшись следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \sin(x \sin \varphi) &= 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(x) \sin((2n-1)\varphi), \\ \cos(x \sin \varphi) &= J_0(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(x) \cos(2n\varphi). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Проводимость полупроводниковых структур в значительной степени определяется наличием в них примесей. Для описания процесса ионизации примесных центров в кристаллах полупроводников используются различные математические методы, такие как метод Монте-Карло, теория возмущений, метод функционала плотности (DFT) и др. Эти методы позволяют рассчитать вероятность ионизации, концентрацию свободных носителей заряда и их зависимость от температуры, электрического поля и других факторов.

Одним из методов изучения электронных свойств примесных углеродных структур, является так называемое квазиклассическое приближение, при помощи которого можно рассматривать эффекты, проявляющиеся в области квазиклассических сильных полей [92, 93].

Применение квазиклассического приближения накладывает определённые ограничения на температуру и внешние поля. Для применения квазиклассического

метода электронный газ должен быть невырожденным, то есть:

$$k_B T \gg E_F, \quad (1.9)$$

где E_F – энергия Ферми, k_B – постоянная Больцмана.

При высоких температурах распределение электронов приближается к классическому (Максвелла-Больцмана), а квантовые эффекты становятся несущественными.

Кроме того, квазиклассическое описание работает, если приложенное электрическое поле не вызывает межзонных переходов:

$$eEa_0 \ll \Delta_e, \quad (1.10)$$

где Δ_e – ширина разрешенной зоны, a_0 – период решётки.

В данном разделе представлен обзор результатов исследований в квазиклассической теории проводимости для углеродных полупроводниковых структур, в частности, рассмотрены полупроводниковые УНТ типа zigzag и двумерные сверхрешетки на основе графена.

Квазиклассическая теория ионизации атомов под действием внешних электрических полей построена в работах [92-97]. Основные результаты этих работ были получены с помощью метода мнимого времени, предложенный для моделирования вероятности многофотонной ионизации атомов сильным световым полем [95]. В данном методе для описания туннелирования используется классическое уравнение движения, но с чисто мнимым «временем». Метод мнимого времени основан на замене реального времени t на мнимое время $i\tau$ системы. В комплексной плоскости переменной t подбарьерное движение носителей заряда для экстремальной траектории происходит вниз по мнимой оси от $t_0 = i\tau_0$ до 0. Подбарьерная траектория описывается классическим уравнением движения. После выхода из-под барьера движение продолжается вдоль вещественной оси.

Во всех перечисленных работах энергетический спектр носителей заряда в рассматриваемых структурах считался квадратичным. Развитие такого подхода

для полупроводниковых структур с неквадратичным энергетическим спектром выполнено в [88, 98-101].

Графен демонстрирует уникальные транспортные свойства благодаря особой дираковской структуре гамильтониана, описывающего динамику электронов. Однако, графен, будучи полуметаллом без запрещенной зоны, не может использоваться в исходном виде для приложений наноэлектроники. Следовательно, возникает необходимость создания щели в энергетическом спектре образца. Для решения этой проблемы проводятся обширные теоретические и экспериментальные исследования. Так, например, запрещенную зону можно получить в графене, помещенном на подложку или в графене с примесями. В графене на подложке из гексагонального нитрида бора наблюдается небольшая щель (~ 100 мэВ), для подложки из карбида кремния – 260 мэВ [102-104]. Ширина запрещенной зоны в несколько эВ может быть получена в графене и фторографене путем химической модификации системы водородом и фтором соответственно. Ширина запрещенной зоны 5.56 эВ наблюдается экспериментально в монослойных системах гексагонального нитрида бора. В [105] дан подробный обзор доступных в настоящее время технологий и потенциальных возможностей графеновой электроники.

В работе [106] исследовано влияние переменного электрического поля на проводимость и генерацию высших гармоник тока вертикально выровненного массива однослойных УНТ полупроводникового типа, находящегося в постоянном электрическом поле, и выявлен эффект абсолютной отрицательной проводимости. Особый интерес вызывают структуры с контролируруемыми примесями, в которых появляется возможность, задавая параметры примесей (концентрацию, глубину залегания), изменять характеристики таких структур [88, 90, 100, 101].

Проводимость нанотрубок в продольном магнитном поле рассмотрена в [107]. В [108] описаны изучение проводимости углеродных нанотрубок различных типов в присутствии постоянного электрического поля, полученные вольтамперные характеристики, выявленные участки дифференциальной отрицательной проводимости. Работа [68] содержит обзор электронных свойств нанотрубок, в

частности приводятся результаты по исследованию проводимости под действием электрического поля бегущей волны: в случае слабых полей интеграл столкновения был выбран в τ - приближении, в случае сильных полей – принимался равным нулю. В [68] также приведена зависимость аксиальной проводимости нанотрубок металлического типа от частоты переменного поля, изучена проводимость УНТ различных типов в присутствии постоянного электрического поля, получены вольт-амперные характеристики, выявлены участки дифференциальной отрицательной проводимости.

В названных выше работах исследовались транспортные свойства УНТ под действием только либо постоянного электрического поля, либо электромагнитного поля волны, в то время как известно, что в нелинейных системах возможны эффекты при совместном воздействии постоянных и переменных полей (например, отрицательная дифференциальная проводимость в сверхрешетках) [109]. В [110] отмечается возможность разогрева электронного газа углеродных нанотрубок электрическим полем, что приводит к инверсии заселенности электронных подзон и к излучению электромагнитных волн терагерцового диапазона.

Широкий обзор основных электронных свойств двумерных графеновых структур представлен в [111]. В [86, 87] исследуется влияние внешних электрических полей на транспортные свойства 2D ГСР. Возможность управления проводимостью 2D ГСР поперечными постоянным и переменным электрическими полями, обусловленная неаддитивностью ее энергетического спектра исследована в [112]. Задача о зависимости амплитуд высших гармоник плотности тока в 2D ГСР от характеристик приложенных к системе постоянного и переменного электрических полей с учетом ионизации примесных центров рассмотрена в [90]. В отличие от работ [86, 87] в настоящей работе используется методика, развитая для щелевого графена [101], позволяющая с достаточной точностью описывать проводимость графеновой сверхрешетки в широком диапазоне параметров с одновременным учетом ионизации примесных центров.

В ГСР электрическое поле, приложенное поперек оси сверхрешетки, способно модифицировать продольную вольт-амперную характеристику этого

материала [7, 26, 70, 80, 82, 113, 114]. В [26] вычислена плотность тока, возникающего вдоль оси ГСР в присутствии переменного и постоянного электрических полей. Показано, что постоянная составляющая плотности тока испытывает осцилляции с изменением амплитуды переменного тока, продольная вольт-амперная характеристика содержит участок отрицательной дифференциальной проводимости. Было установлено, что наличие постоянного поперечного электрического поля приводит к появлению дополнительного пика в вольт-амперных характеристиках.

Для 2D ГСР исследован коэффициент поглощения электромагнитной волны в присутствии постоянного электрического поля для случая квазиклассически сильных электрических полей [88], выявлено влияние неаддитивности спектра 2D ГСР на распространение уединённого электромагнитного импульса вдоль произвольных направлений образца, получено уравнение, описывающее распространение электромагнитной волны в бесстолкновительном приближении [89], а также показана возможность управления амплитудами высших гармоник поперечными электрическими полями [90]. В работе [115] исследован транспорт и разогрев электронов в 2D полупроводниковой сверхрешетке при произвольной ориентации поля относительно ее кристаллографических осей.

В последнее время в ряде теоретических исследований обращается внимание на необычные явления, связанные с неаддитивностью энергетического спектра изучаемых графеновых структур. Задача о взаимном влиянии на носители тока в щелевом графене двух электромагнитных волн разной частоты со взаимно перпендикулярными векторами напряженности обсуждается в [7]. Неаддитивность энергетического спектра структур на основе графена, и, в частности, 2D ГСР, приводит к существенному отличию кинетических явлений в таких электронных системах от структур с аддитивным спектром. По сравнению с щелевым графеном [114], энергетический спектр 2D ГСР обладает более слабой неаддитивностью и значительно меньшей шириной зон (минизон) проводимости, что и определяет ее отклик на внешние электрические поля. Использование квазиклассического подхода для нахождения плотности тока в условиях

воздействия произвольно поляризованных статического и переменного электрических полей позволяет получить аналитическую зависимость плотности тока от параметров полей.

Присутствие примесей и дефектов может сильно повлиять на электрические свойства графеновых структур, включая их проводимость, подвижность носителей заряда и механизмы рассеяния, поскольку наличие примесных уровней в запрещенной зоне, с которых электроны могут переходить в зону проводимости, например, под воздействием внешних электрических полей, приводит к увеличению концентрации носителей заряда в зоне проводимости. Особенно актуальной такая ситуация представляется в сильных электрических полях, которые могут приводить к существенной модификации примесных состояний и тем самым динамически изменять концентрацию носителей в зоне проводимости.

Исследования проводимости в графеновых полупроводниковых структурах с учётом влияния примесей активно проводятся с момента открытия графена в 2004 году. Например, в работе Т. Ando [6] была разработана теория рассеяния на примесях в УНТ. В [116, 117] исследовано рассеяние электронов на примесях в углеродной нанотрубке в приближении сильной связи, в [118] проведено исследование многостенных углеродных нанотрубок, допированных азотом. Влияние многоуровневой примеси на туннельный и баллистический ток, протекающий в контакте графеновой наноленты, рассмотрено в [119]. Изучено влияние изоморфных примесей на эластопроводимость хиральных углеродных нанотрубок в рамках модели Хаббарда и Андерсона [120].

В работе [121] рассчитан ток, протекающий вдоль цилиндрической квантовой нити со сверхсеткой при одновременном приложении постоянного и переменного электрических полей. Предполагается, что нить содержит примесные центры, ионизация которых приводит к генерации неравновесных носителей в зоне проводимости. В [122] рассмотрены физико-химические свойства боросодержащих УНТ, проведен модельный эксперимент, показавший, что между шириной запрещенной зоны и количеством примесных атомов бора в УНТ присутствует прямая зависимость.

В [123] изучалось влияние примеси на проводимость изначально чистого графена путем осаждения атомов калия на его поверхность в сверхвысоком вакууме. В [88] рассмотрена задача об одновременном влиянии постоянного и переменного квазиклассически сильных электрических полей на ионизацию примесей в 2D ГСР, выявлена анизотропия коэффициента поглощения электромагнитной волны при разной ориентации вектора напряженности постоянного и вектора поляризации переменного электрических полей.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 1

1. Проведенный анализ литературных источников показывает, что полупроводниковые структуры на основе графена обладают уникальными электронными, механическими и оптическими свойствами, которые делают их крайне перспективными для применения в различных областях науки и техники.
2. Исследование электрических свойств полупроводниковых структур на основе графена представляет интерес как с точки зрения развития теории физической электроники, так и с точки зрения перспектив применения их в микро- и наноэлектронике.
3. Несмотря на значительные результаты теоретических и экспериментальных исследований проводимости углеродных полупроводниковых структур, недостаточное внимание, на наш взгляд, уделено двумерным сверхрешеткам на основе графена.
4. Проводимость углеродных полупроводниковых структур на основе графена существенно зависит от наличия примесей, влияние которых можно исследовать, используя квазиклассический подход.

ГЛАВА 2. ПРОВОДИМОСТЬ ПРИМЕСНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТИПА

Электрические свойства УНТ существенно различаются в зависимости от их структуры, условий синтеза, наличия примесей и дефектов. Первоначальные эксперименты проводились над образцами, содержащими хаотично расположенные нанотрубки разных типов, что затрудняло теоретическое описание полученных результатов. Экспериментальные значения данных свойств, например, электрического сопротивления, теплопроводности, варьируются в пределах нескольких порядков величины [1, 3]. В настоящее время большее внимание уделяется исследованию одиночных углеродных нанотрубок или систем, содержащих нанотрубки одного типа (например, вертикально выровненные массивы углеродных нанотрубок), поскольку в этом случае появляется возможность для теоретического предсказания и практического получения структур с заданными свойствами. В экспериментальных работах исследуются легированные примесью азота и бора одиночные ОУНТ и МУНТ [124, 125].

После синтеза УНТ проводят очистку от примесей (аморфного углерода, фуллеренов и частиц катализатора). Современные технологии позволяют получать «чистые» УНТ, практически без примесей [126-128]. Для очистки УНТ применяют различные методы, например: микрофльтрация, ультразвуковая обработка, растворы окислителей.

2.1 ИОНИЗАЦИЯ ПРИМЕСЕЙ СТАТИЧЕСКИМ И ПЕРЕМЕННЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ПОЛЯМИ В ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТИПА

Квазиклассический метод мнимого времени представляет собой эффективный подход для моделирования ионизации атомов под действием внешних электрических полей. Изначально разработанный для систем с

квадратичным законом дисперсии [92, 93, 95], данный метод был успешно адаптирован для анализа узкозонных полупроводниковых материалов [98, 99]. В настоящее время он находит широкое применение при исследовании современных низкоразмерных структур [88, 90, 100, 101].

Электронная структура УНТ описывается, как правило, в рамках анализа динамики π -электронов в приближении сильной связи, учитывающем взаимодействие лишь трех соседних атомов в гексагональной структуре. В рамках данной модели закон дисперсии, описывающий свойства УНТ типа zigzag ($m,0$), имеет вид [68]

$$\varepsilon = \gamma \sqrt{1 + 4 \cos y (\cos x + \cos y)}, \quad (2.1)$$

где $\gamma \approx 2.7$ эВ – интеграл перескока электронов между соседними узлами кристаллической решетки, $x = p_x a / \hbar$, $y = \pi s / m$, $s = 1, 2 \dots m$, m – индекс хиральности, $a = 3b/2$, $b = 0.142$ нм – расстояние между соседними атомами углерода в графене, $\mathbf{p} = (p_x, s)$ – квазиимпульс электрона, p_x – компонента квазиимпульса электрона вдоль оси УНТ. Закон дисперсии (2.1) можно получить из хорошо известного энергетического спектра неограниченной графитовой плоскости (графена) [53], накладывая периодические граничные условия, из-за которых поперечная составляющая квазиимпульса электрона принимает лишь набор дискретных значений. Продольная компонента квазиимпульса при этом остается непрерывной.

Областью определения квазиимпульса $\mathbf{p}$, т.е. первой зоной Бриллюэна для графена, является шестиугольник, показанный на рис. 2.1 для безразмерных компонент квазиимпульса (x, y) . Как следует из (2.1) первая зона Бриллюэна в нанотрубках уже не является шестиугольником, а представляет собой семейство одномерных зон – отрезков прямых линий внутри шестиугольника. На рис. 2.1 построен энергетический спектр для УНТ типа zigzag (14,0) при $x \in (-\pi, \pi)$ и $s = 1, 2 \dots 14$, и показана эквивалентность использования этого диапазона параметров с первой зоной Бриллюэна.

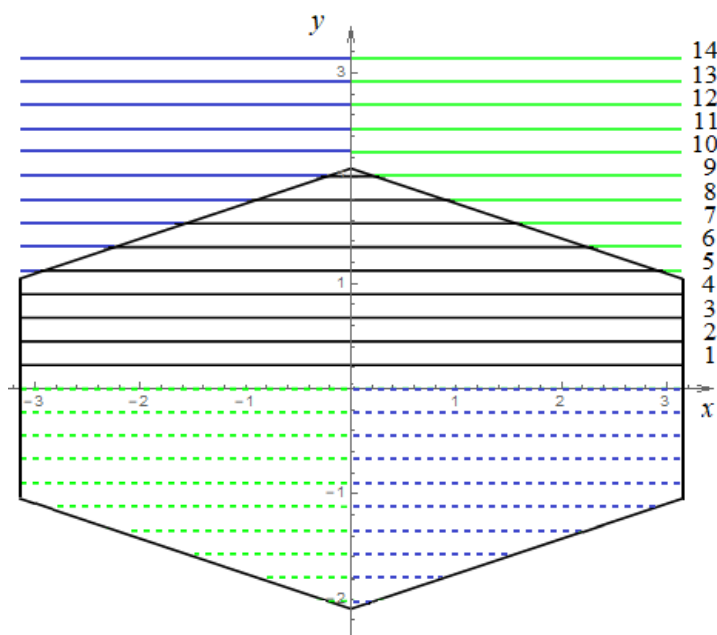


Рисунок 2.1 – Первая зона Бриллюэна графена (шестиугольник) и УНТ типа zigzag (14,0) (цветные линии)

Энергетический спектр электронов в нанотрубке представляет собой совокупность электронных подзон $\varepsilon_s(x)$, нумеруемых целым числом s . На рис. 2.2 представлен график энергетического спектра УНТ типа zigzag (14,0).

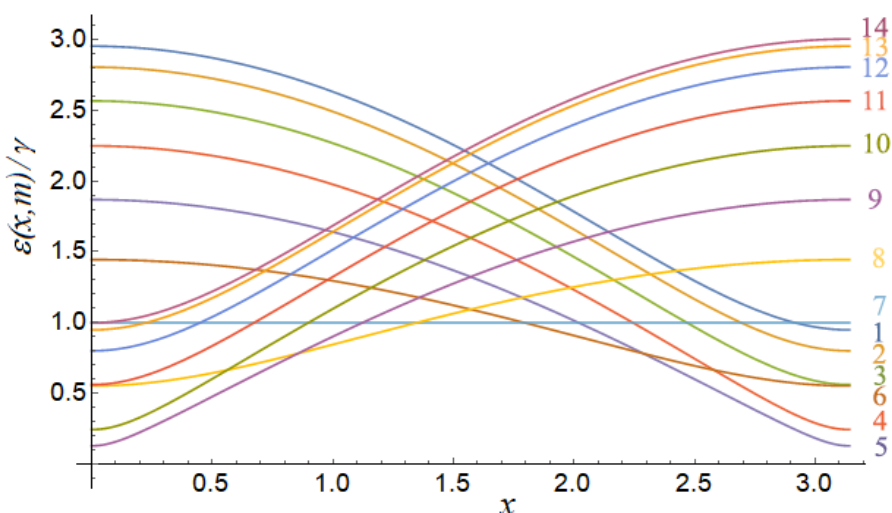


Рисунок 2.2 – Энергетический спектр УНТ типа zigzag (14,0)

В этом приближении zigzag-нанотрубки с индексами $(3p-1, 0)$ и $(3p+1, 0)$ являются одномерными полупроводниками с шириной запрещенной зоны $E_g = \gamma b/R$

(R – радиус трубки), в то время как нанотрубки ($3p, 0$) обладают металлической проводимостью (p – натуральное число). Эффекты искривления в трубках малого диаметра могут сильно влиять на электрические свойства. Так в работе [129] расчет методом линеаризованных присоединенных цилиндрических волн показал, что на интервале $m = 5-15$ среди УНТ типа zigzag ($m, 0$) лишь две трубки – ($5, 0$) и ($6, 0$) – обладают металлическими свойствами. Все остальные являются прямозонными полупроводниками с узкой шириной запрещенной зоны, меньшей 1 эВ. Для сверхмалых диаметров обнаружено вырождение зонной структуры полупроводниковых трубок, приводящее к металлическим свойствам и нарушению правила $3p$ классификации УНТ по электрофизическим свойствам.

Процесс перехода электрона с примесного уровня в зону проводимости представляет собой туннелирование электрона через потенциальный барьер и может носить квазиклассический характер [92]. При этом вероятность перехода (ионизации), согласно [96], с точностью до предэкспоненциального множителя P описывается выражением вида

$$W = P \exp\left(-\frac{2\text{Im}(S)}{\hbar}\right), \quad (2.2)$$

где S – классическое действие, которое набирает частица при подбарьерном движении, определяемое формулой

$$S = \int_0^{t_0} [\varepsilon(\mathbf{p}) - V] dt, \quad (2.3)$$

где $\mathbf{p}$ – импульс электрона, определяемый из классического уравнения движения, t_0 – время начала туннелирования, V – энергия залегания примеси. Предполагаем, что примеси находятся в УНТ на заданной глубине υ . На рис. 2.3. уровень энергии примеси обозначен штриховой линией. Начало отсчёта энергии выбираем посередине запрещённой зоны.

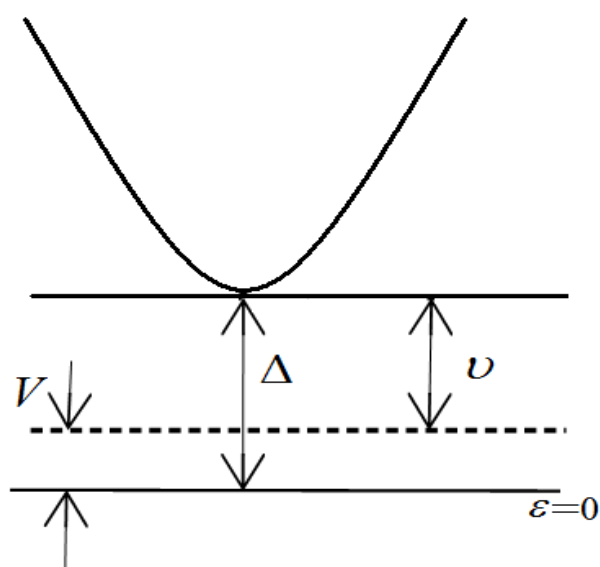


Рисунок 2.3 – Энергетическая диаграмма примеси. V – энергия залегания примеси, v – глубина залегания примеси, Δ – полуширина запрещенной зоны

Пусть электрические поля $\mathbf{E} = \{E_1 + E_0 \cos \omega t, 0\}$ поляризованы вдоль оси x нанотрубки, E_1 – модуль напряженности постоянного электрического поля, E_0 и ω – амплитуда и частота переменного электрического поля (рис. 2.4).

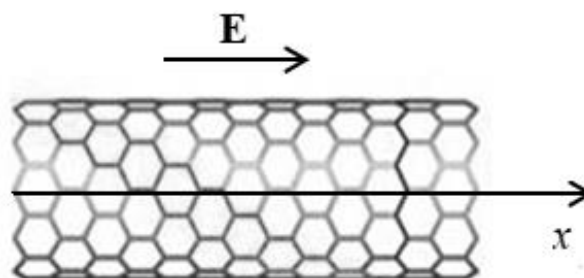


Рисунок 2.4 – Геометрия задачи

Характеристики электрических полей выбираются такие, чтобы выполнялось условие применимости квазиклассического метода

$$\text{Im}(S) \gg \hbar. \quad (2.4)$$

Для нахождения момента начала туннелирования t_0 воспользуемся условием минимума мнимой части действия

$$\left. \frac{\partial \text{Im}(S(t))}{\partial t} \right|_{t_0} = 0, \quad (2.5)$$

что соответствует условию

$$\varepsilon(t_0) = V. \quad (2.6)$$

Для нахождения $\varepsilon(t_0)$ достаточно рассмотреть классическое уравнение движения

$$\frac{dp_x}{dt} = eE_x, \quad (2.7)$$

с начальным условием $p_x(0) = p_{0x}$, $s(0) = s_0$, что соответствует попаданию электрона в зону проводимости в состояние с минимальной энергией. Решение (2.7) имеет вид:

$$p_x = p_{0x} + eE_1 t + \frac{eE_0}{\omega} \sin \omega t. \quad (2.8)$$

Подставив (2.8) в (2.6), получаем:

$$\varepsilon(t_0) = V = \Delta - \nu = \gamma \sqrt{1 + 4 \cos(x_0 + \alpha_1 t_0 + \alpha_0 \sin \omega t_0) \cos y_0 + 4 \cos^2 y_0}, \quad (2.9)$$

где $x_0 = p_{0x} a / \hbar$, $\alpha_1 = eE_1 a / \hbar$, $\alpha_0 = eE_0 a / \omega \hbar$.

Отсюда:

$$\cos(x_0 + \alpha_1 t_0 + \alpha_0 \sin \omega t_0) = \frac{(\tilde{\Delta} - \tilde{\nu})^2 - (1 + 4 \cos^2 y_0)}{4 \cos y_0}, \quad (2.10)$$

где $\tilde{\Delta} = \Delta / \gamma$, $\tilde{\nu} = \nu / \gamma$.

При переходе к мнимому времени $t_0 = i \tau_0$ выражение в правой части (2.10) принимает вид:

$$\begin{aligned} \cos(x_0 + i \alpha_1 \tau_0 + i \alpha_0 \text{sh} \omega \tau_0) = \\ = \cos x_0 \text{ch}(\alpha_1 \tau_0 + \alpha_0 \text{sh} \omega \tau_0) - i \sin x_0 \text{sh}(\alpha_1 \tau_0 + \alpha_0 \text{sh} \omega \tau_0). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Приравнивая мнимую часть к нулю, получим трансцендентное уравнение для нахождения момента начала туннелирования, корень которого чисто мнимый.

$$\cos x_0 \text{ch}(\alpha_1 \tau_0 + \alpha_0 \text{sh} \omega \tau_0) = \frac{(\tilde{\Delta} - \tilde{\nu})^2 - (1 + 4 \cos^2 y_0)}{4 \cos y_0 \cos x_0}. \quad (2.12)$$

После перехода к безразмерным единицам уравнение (2.12) можно записать иначе:

$$F_1 \tilde{\tau}_0 + \frac{F_0}{w} sh(w \tilde{\tau}_0) = \beta, \quad (2.13)$$

где $\beta = arch\left(\{(\tilde{\Delta} - \tilde{\nu})^2 - 1 - 4\cos^2(y_0)\} / \{4\cos(x_0)\cos(y_0)\}\right)$, $\tilde{\Delta} = \Delta / \gamma$, $\tilde{\nu} = \nu / \gamma$, $w = \hbar\omega / \gamma$, $\tilde{\tau}_0 = \gamma\tau_0 / \hbar$, $F_1 = aeE_1 / \gamma$, $F_0 = aeE_0 / \gamma$, Δ – полуширина запрещённой зоны.

Отметим, что при выводе формулы (2.13) можно конкретизировать значения x_0 и y_0 , для УНТ определенного радиуса [68]

$$R = \frac{\sqrt{3}b}{2\pi} m. \quad (2.14)$$

Например, для УНТ типа zigzag (14,0) для самых низших подзон ($s = 5$ и $s = 9$) имеются эквивалентные точки с безразмерной компонентой квазиимпульса $(0, 9\pi/14)$, $(\pi, 5\pi/14)$ и $(-\pi, 5\pi/14)$. Отметим, что для всех подзон $\sin(x_0) = 0$, и это будет учтено в дальнейших формулах.

По формуле (2.3) проведен расчет классического действия, с момента времени начала туннелирования t_0 до момента выхода частицы из-под барьера при $t = 0$. Подставляя в (2.3) решение уравнения (2.13), находим мнимую часть действия в виде интеграла

$$\text{Im } S = \hbar \int_0^{\tilde{\tau}_0} \left\{ \sqrt{1 + 4ch\left(F_1 t + \frac{F_0}{w} sh(wt)\right) \cos x_0 \cos y_0 + 4\cos^2 y_0 + (\tilde{\nu} - \tilde{\Delta})} \right\} dt, \quad (2.15)$$

который не выражается через элементарные функции, поэтому берется численно.

Отметим, что мнимая часть действия в (2.15) зависит от начальных условий, т.е. от того, в какую подзону совершается переход.

Рассмотрим случай действия только постоянного электрического поля $\mathbf{E} = \{E_1, 0\}$, ориентированного вдоль оси нанотрубки.

Для момента времени начала туннелирования $t_0 = i\hbar\tilde{\tau}_0 / \gamma$ из (2.13) получен аналитический результат ($F_0 = 0$)

$$\tilde{\tau}_0 = \frac{\beta}{F_1}. \quad (2.16)$$

По формуле (2.3) проведен расчет классического действия, набираемого частицей при подбарьерном движении с момента времени начала туннелирования t_0 до момента выхода частицы из-под барьера при $t = 0$:

$$S = \frac{\hbar}{F_1} \left\{ 2\delta E\left(i\frac{\beta}{2}; k\right) + i(\tilde{\nu} - \tilde{\Delta})\beta \right\}, \quad (2.17)$$

где $\delta = \sqrt{1 + 4\cos(y_0)(\cos(x_0) + \cos(y_0))}$, $k = 8\cos(x_0)\cos(y_0)/\delta^2$.

Выделив мнимую часть действия [130], получим

$$\begin{aligned} \text{Im } S = \frac{\hbar}{F_1} \left\{ 2\delta \left[-E(\text{arctg}(\xi); 1-k) + F(\text{arctg}(\xi); 1-k) + \xi \sqrt{\frac{1+k\xi^2}{1+\xi^2}} \right] + \right. \\ \left. + (\tilde{\nu} - \tilde{\Delta})\beta \right\}, \quad (2.18) \end{aligned}$$

где $\xi = sh(\beta/2)$, $F(x, k)$ и $E(x, k)$ – эллиптические интегралы I и II рода соответственно.

Мнимая часть действия, как видно из формулы (2.18), обратно пропорциональна напряженности постоянного электрического поля, что является характерной особенностью полупроводниковых структур в квазиклассически сильных электрических полях [91, 95, 96, 98, 100, 101]. Коэффициент в фигурных скобках содержит информацию о параметрах примеси и исследуемой структуры.

Рассмотрим случай действия только переменного электрического поля $\mathbf{E} = \{E_0 \cos \omega t, 0\}$ поляризованного вдоль оси нанотрубки.

Время начала туннелирования $\tilde{\tau}_0$ можно получить из (2.13), учитывая, что $F_1 = 0$:

$$\tilde{\tau}_0 = \frac{1}{w} \text{arsh}\left(\frac{w\beta}{F_0}\right). \quad (2.19)$$

Аналогично предыдущему случаю воздействия на систему только постоянного электрического поля, используя формулу (2.3), получим выражение для действия

$$\text{Im } S = \hbar \int_0^{\tilde{\tau}_0} \sqrt{1 + 4 \cos x_0 \cos y_0 \text{ch}\left(\frac{F_0}{w} \text{sh}(wt)\right) + 4 \cos^2 y_0} dt + (\tilde{v} - \tilde{\Delta}) \tilde{\tau}_0 \quad (2.20)$$

Интеграл в (2.20) не выражается в элементарных функциях, поэтому для получения аналитического результата рассмотрим несколько частных случаев.

Рассмотрим случай $F_0/w \ll 1$. Ограничившись первым членом разложения гиперболического косинуса в ряд Тейлора

$$\text{ch}(F_0 \text{sh}(wt)/w) \approx 1 + \frac{(F_0 \text{sh}(wt)/w)^2}{2}, \quad (2.21)$$

после преобразования и выделения мнимой части действия, имеем

$$\begin{aligned} \text{Im } S = \frac{\hbar}{w} \left\{ \delta \left[-E(\text{arctg}(\varsigma), 1 - k') + F(\text{arctg}(\varsigma), 1 - k') + \xi \sqrt{\frac{1 + k' \varsigma^2}{1 + \varsigma^2}} \right] + \right. \\ \left. + (\tilde{v} - \tilde{\Delta}) \text{arsh}(\varsigma) \right\} \end{aligned} \quad (2.22)$$

где $\varsigma = w\beta / F_0$, $k' = 2 \cos x_0 \cos y_0 (F_0 / w)^2 / \delta^2$.

В противоположном предельном случае $F_0/w \gg 1$ после преобразования получаем выражение для мнимой части действия

$$\begin{aligned} \text{Im } S = \frac{\hbar}{w} \text{arsh}\left(\frac{w\beta}{F_0}\right) \left\{ \frac{2\delta}{\beta} \left[-E(\text{arctg}(\xi), 1 - k) + \right. \right. \\ \left. \left. + F(\text{arctg}(\xi), 1 - k) + \xi \sqrt{\frac{1 + k \xi^2}{1 + \xi^2}} \right] + (\tilde{v} - \tilde{\Delta}) \right\}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

На рис. 2.5-2.7 приведены характерные зависимости мнимой части действия от параметров приложенных постоянного (рис. 2.5) и переменного (рис. 2.6) электрических полей в безразмерных единицах для УНТ типа zigzag (13,0) и (14,0), рассчитанные по формуле (2.15).

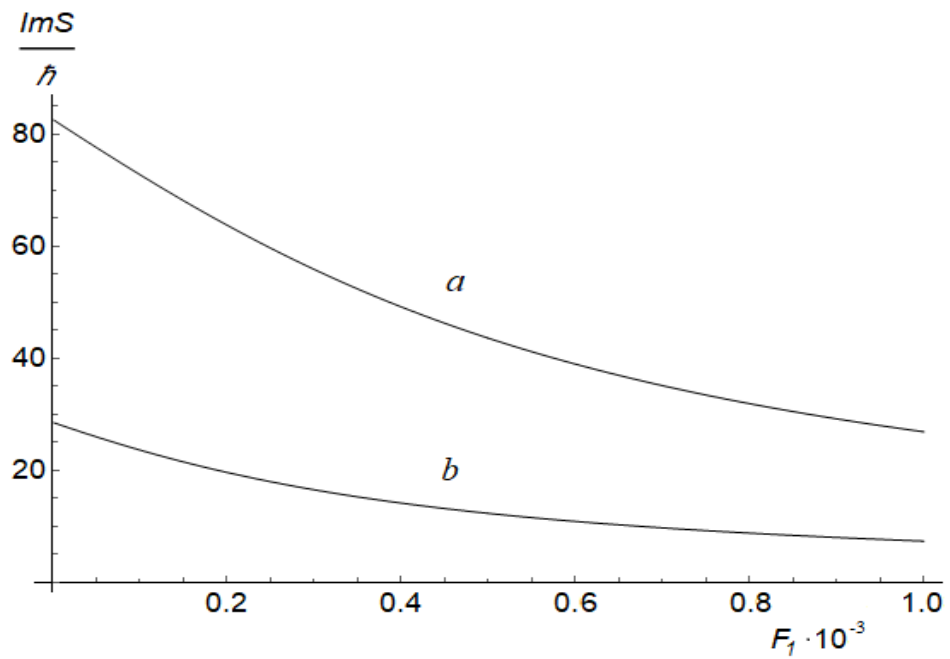


Рисунок 2.5 – Зависимость мнимой части действия S от напряженности постоянного электрического поля в безразмерных единицах при $F_0 = 0.0002$; $w = 0.005$; а) $m = 13$; б) $m = 14$

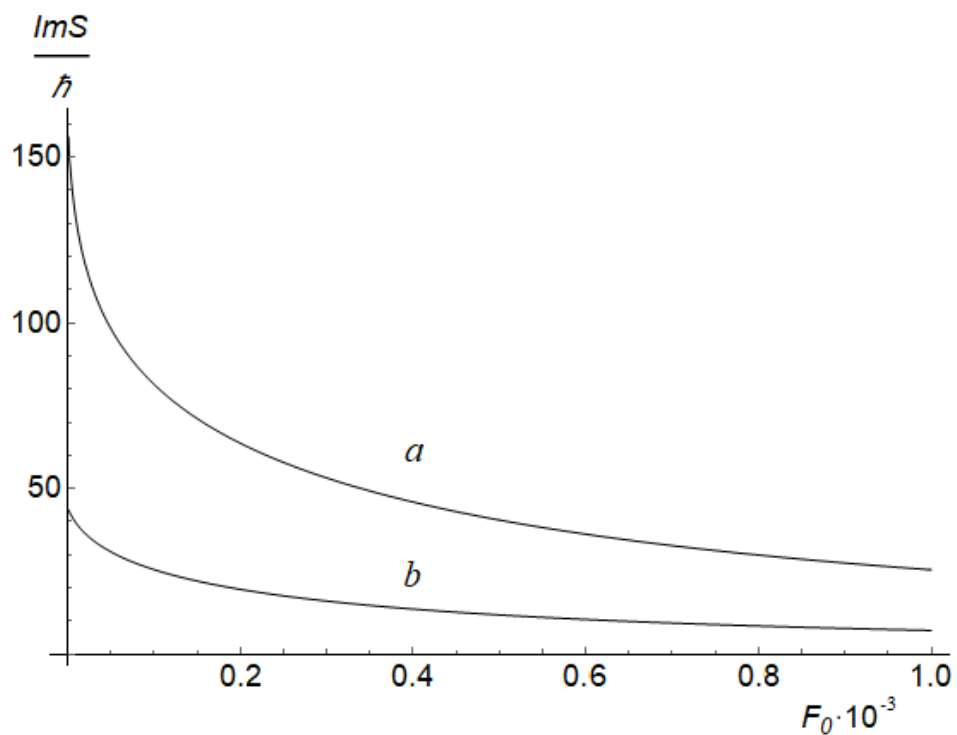


Рисунок 2.6 – Зависимость мнимой части действия S от амплитуды переменного электрического поля в безразмерных единицах при $F_1 = 0.0002$; $w = 0.005$; а) $m = 13$; б) $m = 14$

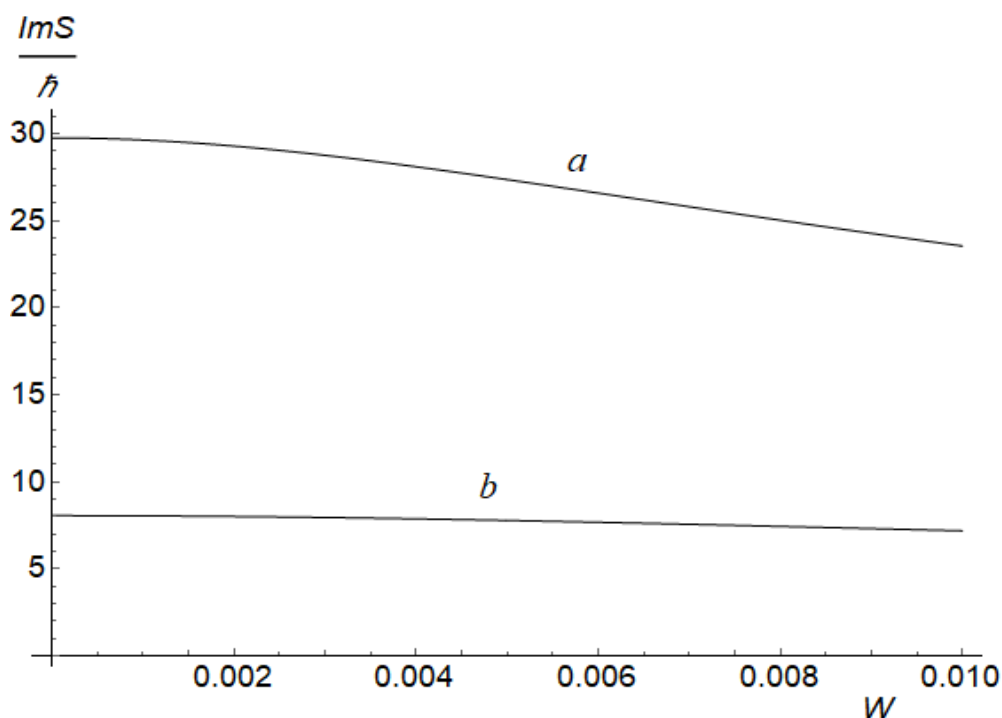


Рисунок 2.7 – Зависимость мнимой части действия S от частоты переменного электрического поля в безразмерных единицах при $F_1 = 0.0001$; $F_0 = 0.001$;
 а) $m = 13$; б) $m = 14$

С ростом частоты, амплитуды переменного и напряженности постоянного электрического поля вероятность ионизации примесей в УНТ увеличивается, что согласуется с результатами работ [88, 90, 101, 102] и более ранних работ, посвященных узкозонным полупроводникам и сверхрешеткам [99, 100]. Увеличение числа подзон соответствует увеличению радиуса нанотрубки. Таким образом, при увеличении радиуса УНТ мнимая часть действия уменьшается, при этом вероятность ионизации возрастает. Отметим также, что при увеличении радиуса УНТ уменьшается запрещенная зона и уменьшается ширина разрешенных подзон.

Сделаем численные оценки параметров, используемых при построении графиков на рис. 2.5-2.7: значениям безразмерных напряженностей $F_{0,1} = 10^{-3}$ соответствуют $E_{0,1} \approx 10^5 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$, а безразмерной частоте $w = 0.01$ соответствует $\omega \approx 4 \cdot 10^{13} \text{ Гц}$. Для УНТ типа zigzag (13,0) для подзон $s = 4$ и $s = 9$ ширина подзоны

проводимости и полуширина запрещенной зоны соответственно равны $\Delta_e \approx 2.0\gamma = 5.40$ эВ и $\Delta \approx 0.136\gamma = 0.367$ эВ. Для УНТ типа zigzag (14,0) для подзон $s = 5$ и $s = 9$ эти значения равны: $\Delta_e \approx 1.74\gamma = 4.70$ эВ, $\Delta \approx 0.132\gamma = 0.356$ эВ.

При решении задачи пренебрегалось межзонными переходами, что соответствует выполнению условия $\hbar\omega \ll 2\Delta$ ($\omega \ll 10^{15}$ с⁻¹), и тепловыми забросами электронов с примеси в подзоны – $k_B T \ll \nu$ ($T \ll 2 \cdot 10^3$ К).

2.2 ПРОВОДИМОСТЬ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТИПА С УЧЕТОМ ИОНИЗАЦИИ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ

Особый интерес вызывают структуры с контролируемыми примесями, в которых появляется возможность, задавая параметры примесей (концентрацию, глубину залегания), управлять их характеристиками. Транспортные свойства УНТ существенно различаются в зависимости от структуры и условий синтеза (наличия примесей и дефектов), поэтому экспериментальные значения данных свойств варьируются в больших пределах [1, 3]. Развитие наноинженерии открывает возможность создания УНТ с определенными примесями, вплоть до «чистых» образцов [126,128].

В данном разделе представим результаты исследования зависимости плотности тока в однослойных УНТ от характеристик приложенных статического и переменного электрических полей с учетом ионизации примесных центров.

Скорость движения электронов проводимости вдоль оси x нанотрубки определяется по формуле:

$$v_x(p_x, s) = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} = \gamma \frac{2a \sin\left(\frac{ap_x}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{\pi s}{m}\right)}{\sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{ap_x}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{\pi s}{m}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi s}{m}\right)}}. \quad (2.24)$$

Постоянное и переменное электрические поля поляризованы вдоль оси нанотрубки $\mathbf{E} = \{E_1 + E_0 \cos \omega t, 0\}$ – суммарная напряженность электрического поля.

Плотность тока j_x , текущего вдоль оси x определяется по формуле (1.1). Применив переход от суммирования по дискретным компонентам квазиимпульса к интегрированию, формулу (1.1) перепишем в виде:

$$j_x = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^2} \int_{\mathbf{p}} v_x(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}) d^2 \mathbf{p}. \quad (2.25)$$

Для нахождения функции распределения носителей использовано классическое уравнение Больцмана с модельным интегралом столкновений Батнагара-Гросса-Крука при учете темпа генерации и рекомбинации, позволяющее адекватно учесть ионизацию примесей на проводимость УНТ [131, 132]. В данном виде интеграл столкновений остается простым по форме и корректно учитывает в зоне проводимости сохранение числа носителей тока.

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial t} + e\mathbf{E} \frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = -(\nu + \nu_r) f(\mathbf{p}, t) + \left(\nu \frac{n}{n_0} + \nu_r \right) f_0(\mathbf{p}) + G(\mathbf{p}), \quad (2.26)$$

где $G(\mathbf{p}) = (N + n_0 - n) \frac{\exp(-2\text{Im}(S)/\hbar)}{\text{Im}\tau} \delta(\mathbf{p})$ — член генерации носителей тока,

образующихся в единице объема вещества в единицу времени в результате ионизации, n_0 — концентрация электронов в зоне проводимости, N — концентрация примесей в УНТ, $\delta(\mathbf{p})$ — дельта-функция Дирака. Концентрацию n можно

выразить через $G(\mathbf{p})$ следующим образом: $n = n_0 + \frac{1}{\nu_r} \sum_{\mathbf{p}} G(\mathbf{p})$. Будем считать

электронный газ невырожденным и пользоваться статистикой Больцмана. Для этого необходимо выполнение условия [133]:

$$\frac{k_B T \Delta}{n_0 \hbar^2 v_F^2} \gg 1. \quad (2.27)$$

Функцию $f_0(\mathbf{p})$ выбираем в больцмановском виде:

$$f_0(p) \sim \exp(-\varepsilon(p)/k_B T), \quad (2.28)$$

где $\varepsilon(\mathbf{p})$ задается формулой (2.1).

Для удобства дальнейших вычислений разложим скорость носителей $v_x(x, s)$ в ряд Фурье [134]:

$$v_x(x, s) = \sum_l a_{ls} \sin(lx), \quad a_{ls} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} v_x(x, s) \sin(lx) dx. \quad (2.29)$$

Следует отметить, что коэффициенты a_{ls} быстро убывают с ростом номера l , поэтому можно ограничиться только первыми значимыми слагаемыми, обеспечивающими достаточную степень точности (до 5 знаков после запятой).

После разложения скорости носителей в ряд Фурье по p_x , и с учетом найденной неравновесной функции распределения, после усреднения по времени определяем постоянную составляющую плотности тока.

$$j_x = j_0 B_{ion} \sum_{s=1}^m \sum_{n=1}^{\infty} A_{sn} C_{sn} \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k^2(n\alpha) \sin \varphi_{kn} \cos \varphi_{kn}, \quad (2.30)$$

где $j_0 = ean_0\gamma/\hbar$, $B_{ion} = 1 + \frac{N}{n_0 \nu_r} \frac{\exp(-2\text{Im}S/\hbar)}{\text{Im}t_0 + \exp(-2\text{Im}S/\hbar)}$, S – классическое действие,

набираемое электроном при подбарьерном движении, t_0 – время начала туннелирования, ν – характерная частота релаксации, ν_r – частота рекомбинации,

$J_n(x)$ – функция Бесселя 1-го рода n -го порядка, $\sin \varphi_{kn} = \frac{\nu}{\sqrt{\nu^2 + (n\Omega + k\omega)^2}}$,

$x = p_x a / \hbar$, $\delta = \gamma / k_B T$, $\Omega = eE_1 a / \hbar$, $\alpha = eE_0 a / \hbar \omega$,

$$A_{sn} = \frac{2}{\pi C} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin x \cos(\pi s / m) \sin(nx)}{\sqrt{1 + 4 \cos x \cos(\pi s / m) + 4 \cos^2(\pi s / m)}} dx,$$

$$C_{sn} = \int_{-\pi}^{\pi} \cos(nx) \exp(-\delta \sqrt{1 + 4 \cos x \cos(\pi s / m) + 4 \cos^2(\pi s / m)}) dx,$$

$$C = \sum_s \int_{-\pi}^{\pi} \exp[-\delta \sqrt{1 + 4 \cos x \cos(\pi s / m) + 4 \cos^2(\pi s / m)}] dx.$$

В случае динамического равновесия концентрация носителей в зоне проводимости в присутствии внешних электрических полей равна $n_0 B_{ion}$ и определяется через вероятность ионизации примесей, рассчитанной с использованием метода мнимого времени [114]. Ионизация приводит к росту концентрации носителей заряда в минизоне проводимости и соответственно, к увеличению плотности тока.

В случае совместного влияния статического и переменного электрических полей, поляризованных вдоль оси нанотрубки, выражение для мнимой части классического действия, которое набирает частица при подбарьерном движении, задается формулой

$$\text{Im}S = \int_0^{\tau_0} \left\{ \sqrt{1 + 4ch(\Omega t + \alpha \cdot sh(\omega t)) \cos x_0 \cos y_0 + 4 \cos^2 y_0} + (\nu - \Delta) \right\} dt, \quad (2.31)$$

где υ - глубина залегания примеси, Δ - полуширина запрещённой зоны, x_0 и y_0 – безразмерные компоненты квазиимпульса электрона, которые соответствуют минимальной энергии в зоне проводимости, а мнимая часть времени начала туннелирования τ_0 определяется уравнением

$$\Omega\tau_0 + \alpha \cdot \text{sh}(\omega\tau_0) = \beta, \quad (2.32)$$

где $\beta = \text{arch}\left(\left\{\left(\Delta - \upsilon\right)^2 / \gamma^2 - 1 - 4\cos^2 y_0\right\} / \left\{4\cos x_0 \cos y_0\right\}\right)$

Анализ формулы (2.29), ввиду ее сложности, проводился численно.

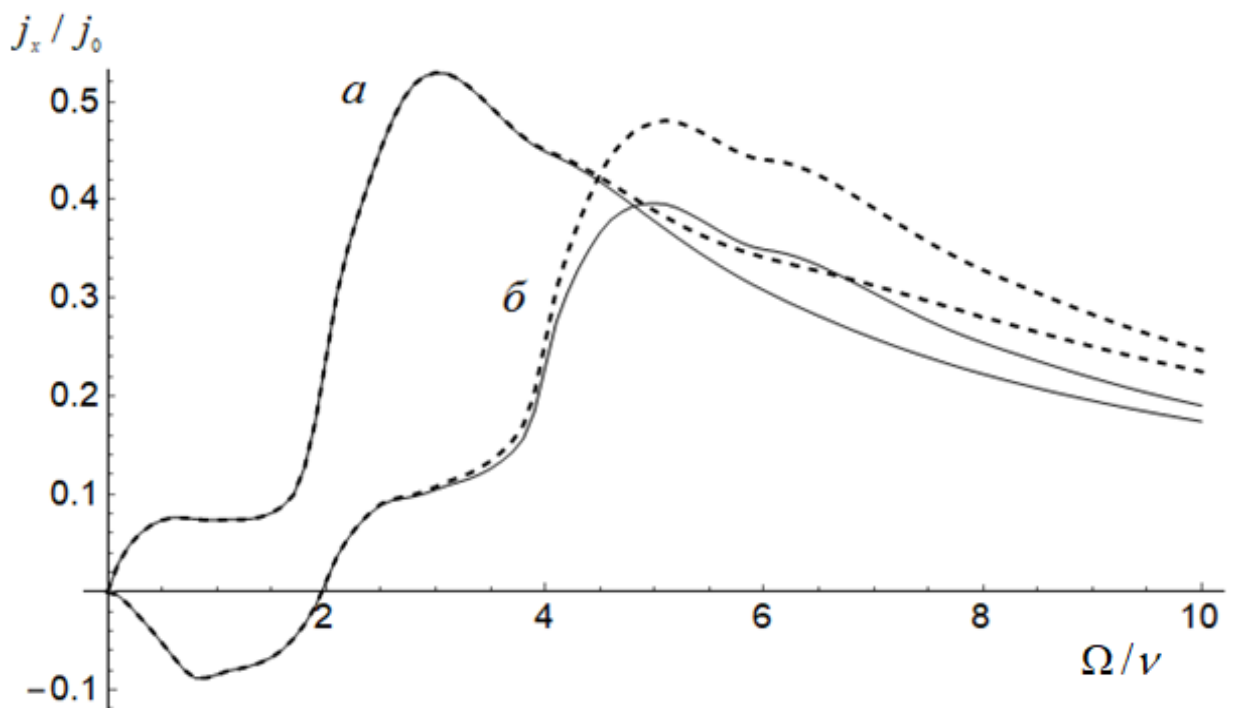


Рисунок 2.8 – Зависимости постоянной составляющей плотности тока от напряженности постоянного электрического поля при $\omega/\nu = 2$; $\upsilon = 0.3\Delta$;

а) $\alpha = 3$; б) $\alpha = 5$

На рисунке 2.8 показана зависимость постоянной составляющей плотности тока от напряженности постоянного электрического поля при фиксированных значениях частоты и амплитуды переменного электрического поля. Сплошной линией представлен график, соответствующий «чистым» УНТ, пунктирной – с учетом ионизации примеси.

Зависимость плотности тока от напряженности электрического поля имеет максимум, определяемый характерной частотой релаксации, участки с отрицательной дифференциальной проводимостью и абсолютной отрицательной проводимостью [90, 134]. Эффекты отрицательной дифференциальной проводимости, абсолютной отрицательной проводимости и самоиндуцированной прозрачности хорошо известны в теории узкозонных полупроводниковых структур и квантовых полупроводниковых сверхрешеток [109]. Известно, что абсолютная отрицательная проводимость характерна для существенно неравновесных систем. Система с абсолютной отрицательной проводимостью является неустойчивой и может быть использована при создании усилителей и генераторов [135]. Обзор и анализ теоретических и экспериментальных работ по явлению абсолютной отрицательной проводимости приведен в [136].

Отклонение графика постоянной составляющей плотности тока для примесных УНТ от аналогичного графика для идеальных беспримесных начинается с некоторого значения напряженности постоянного электрического поля, когда возникает существенное увеличение концентрации носителей за счет ионизации примесных центров.

Зависимость постоянной составляющей плотности тока от амплитуды переменного электрического поля при его фиксированных значениях частоты и напряженности постоянного поля представлена на рисунке 2.9. Зависимость имеет осциллирующий характер, на графиках также видны участки с отрицательной дифференциальной и абсолютной отрицательной проводимостью. Начиная с некоторого значения амплитуды напряженности переменного электрического поля, которое определяется напряженностью постоянного поля, частотой переменного поля, параметрами УНТ и примеси, происходит увеличение постоянной составляющей плотности тока в примесных по сравнению с «чистыми» УНТ.

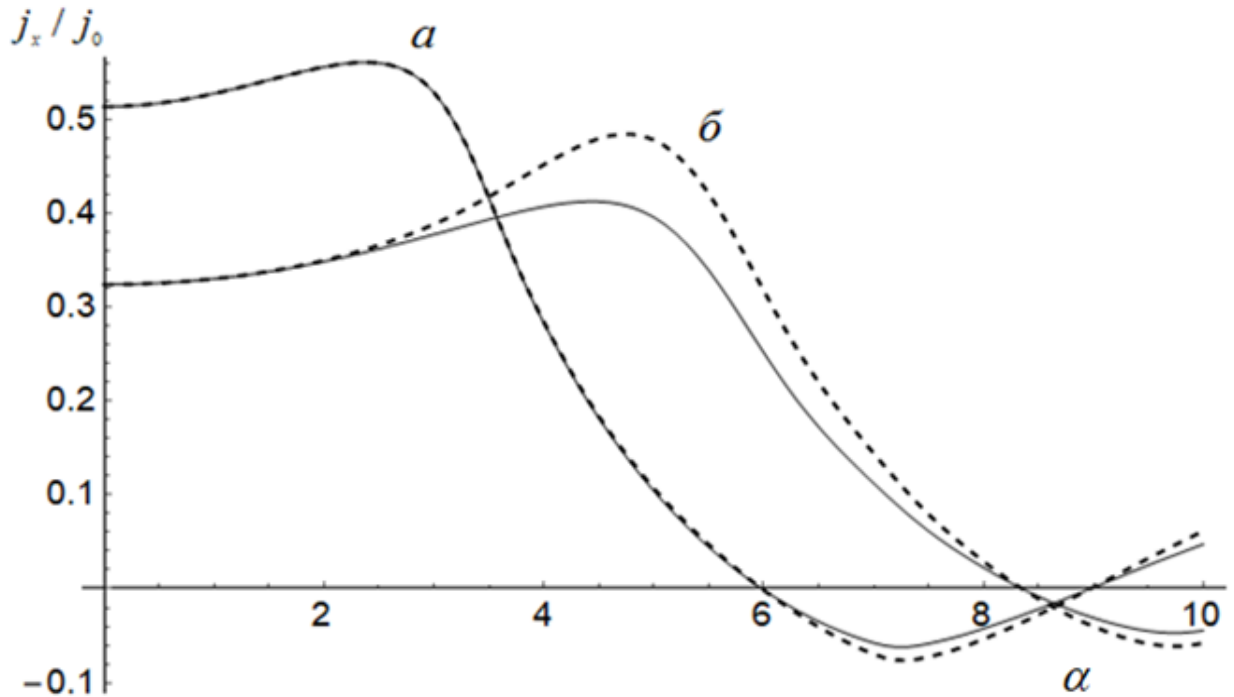


Рисунок 2.9 – Зависимости постоянной составляющей плотности тока от амплитуды переменного электрического поля при $\omega/\nu = 2$; $\nu = 0.3\Delta$;

a) $\Omega/\nu = 3$; *б)* $\Omega/\nu = 5$

На рисунке 2.10 представлена зависимость постоянной составляющей плотности тока от напряженности постоянного электрического поля при заданной частоте, амплитуде переменного электрического поля и разных значениях глубины залегания примесей.

Начало роста тока и длительность процесса установления насыщения ионизации определяются глубиной залегания примеси и ее концентрацией. Подбор примеси заданной глубины приводит к возможности задания нужных проводящих свойств УНТ.

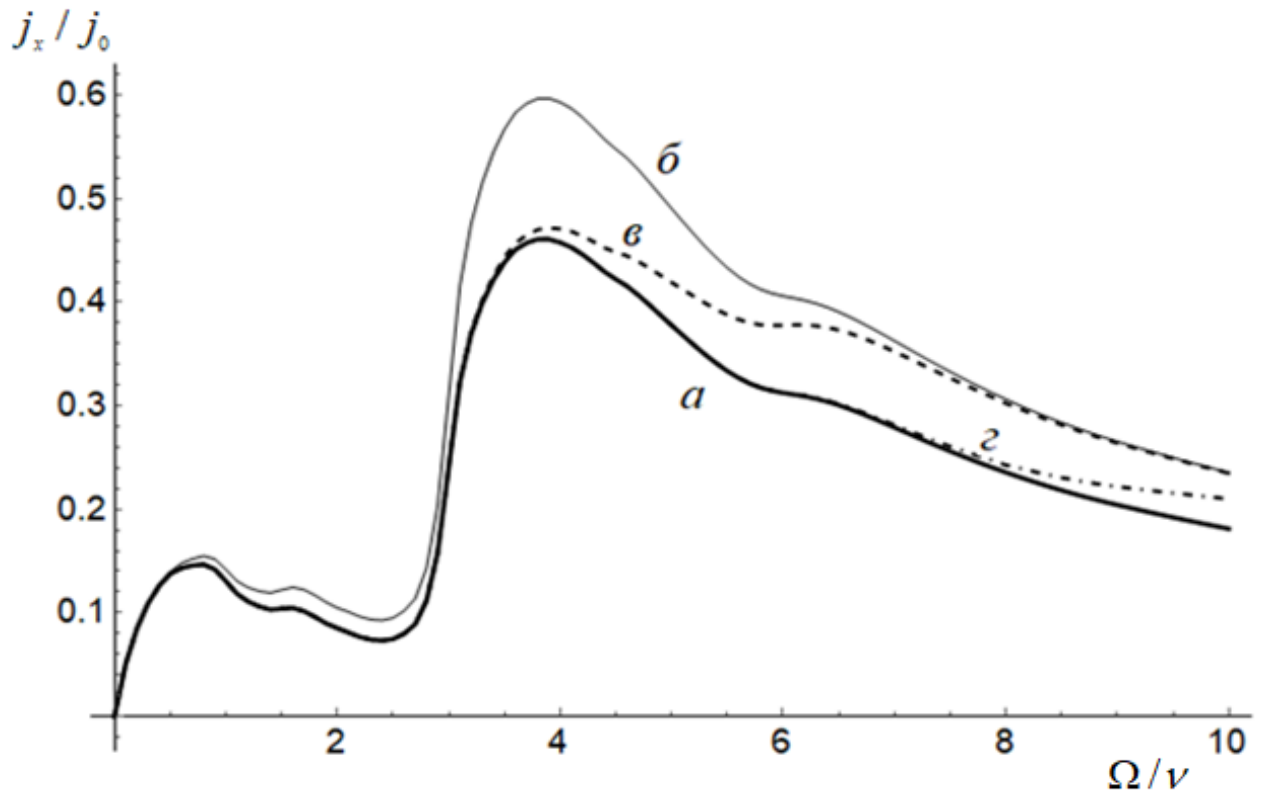


Рисунок 2.10 – Зависимости постоянной составляющей плотности тока от напряженности постоянного электрического поля при $\omega/\nu = 3$; $\alpha = 4$; а) без примесей; б) $\nu = 0.2\Delta$; в) $\nu = 0.3\Delta$; з) $\nu = 0.4\Delta$

Полученные результаты находят косвенное подтверждение в экспериментальном исследовании [137]. В этой работе для объяснения зависимости проводимости композитного полимера, модифицированного углеродными нанотрубками, от частоты и разности потенциалов использована соответствующая зависимость плотности тока углеродной нанотрубки, находящейся в постоянном и переменном электрических полях.

При решении задачи пренебрегалось межзонными переходами, что соответствует выполнению условия $\hbar\omega \ll 2\Delta$ ($\omega \ll 10^{15} \text{ с}^{-1}$), и тепловыми забросами электронов с примеси в подзоны – $k_B T \ll \nu$ ($T \ll 2 \cdot 10^3 \text{ К}$).

Сделаем численные оценки параметров, используемых при построении графиков на рис. 2.8-2.10: значения безразмерных напряженностей E при $aeE/\hbar\nu = 1$ составляет $10^4 \text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$, время релаксации $\tau = \nu^{-1} = 3 \cdot 10^{-12} \text{ с}$,

концентрация примесей $N = 3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, частота рекомбинации $\nu_r = 10^8 \text{ с}^{-1}$, $n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $T = 100 \text{ К}$. Представленные результаты приведены для УНТ типа zigzag (14,0), для которой $\Delta \approx 0.132\gamma = 0.356 \text{ эВ}$.

2.3 ПРОВОДИМОСТЬ МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ТИПА

В силу того, что транспортные свойства нанотрубок существенно различаются в зависимости от структуры и условий синтеза (наличия примесей и дефектов), экспериментальные значения данных свойств, например, электрического сопротивления, теплопроводности, варьируются в пределах нескольких порядков величины.

Несмотря на то, что современные технологии позволяют получать УНТ практически без примесей [126,127], так называемые «чистые» нанотрубки, до сих пор достаточно сложно технологически получить нанообъекты с заранее определенными электрическими характеристиками. В связи с этим возникает потребность в разработке методов для идентификации и уточнения структуры УНТ.

Многослойные УНТ (МУНТ) состоят из нескольких коаксиальных графеновых монослоев. Исследования многослойных нанотрубок показали, что в высококачественных МУНТ межслоевое расстояние может меняться от 0.334 нм до 0.390 нм в зависимости от диаметра, причем меньшему диаметру соответствует большее расстояние [138]. Такое расстояние между слоями позволяет пренебречь межслоевым взаимодействием, поскольку электронный спектр каждой трубки меняется незначительно, что подтверждается результатами численных расчетов электронного спектра двух- и трехслойных трубок с учетом межслоевого взаимодействия [138-141]. Это позволяет распространить теоретические результаты, первоначально полученные для ОУНТ, на многослойные УНТ.

Эффекты искривления в трубках малого диаметра могут сильно влиять на электрические свойства и приводить к нарушению правила $3r$ классификации ОУНТ по электрофизическим свойствам [129]. В данной работе численный анализ проведен для полупроводникового нанотрубок типа zigzag $(m,0)$ с индексами хиральности $m_1 = 14$, $m_2 = 23$ и $m_3 = 32$, которым соответствуют радиусы $R =$

0.5480, 0.9003 и 1.2526 нм. Расстояния между такими УНТ входят в интервал, в котором изменяется межслоевое расстояние в МУНТ (0.3523 нм).

Ранее в работе [142] было получено выражение для постоянной составляющей плотности тока для ОУНТ с учетом ионизации примесей (формула (2.30)).

Многослойные УНТ (МУНТ) состоят из нескольких коаксиальных графеновых монослоев, расстояние между которыми составляет около 0,34 нм. Будем пренебрегать межслоевым взаимодействием. В данной работе рассматривается контакт микроэлектродов с МУНТ так, как показано на рисунке 2.11.

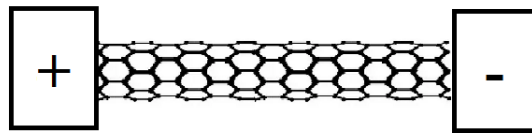


Рисунок 2.11 – Геометрия задачи (контакт микроэлектродов с МУНТ)

Для сравнительного анализа проводимости МУНТ удобнее рассматривать зависимости силы тока от напряженности постоянного и переменного электрических полей. Это связано с тем, что в отличие от плотности тока, сила тока является аддитивной величиной. Совместный ток для МУНТ находится как сумма токов в каждом слое. Связь между плотностью тока и силой тока в УНТ устанавливается соотношением

$$I = 2\pi R \cdot j_x. \quad (2.33)$$

На рисунке 2.12 показаны зависимости силы тока для МУНТ, состоящей из трех слоев в безразмерных единицах.

Знание поведения зависимости силы тока от напряженности приложенного поля для МУНТ и отдельных одиночных УНТ, из которых состоит МУНТ, позволяет разработать методику определения параметров МУНТ (количество слоев, их радиусы) и параметров примесей (глубины залегания, концентрацию) на

основе сравнения экспериментальных зависимостей и теоретических, варьируя структурные параметры МУНТ.

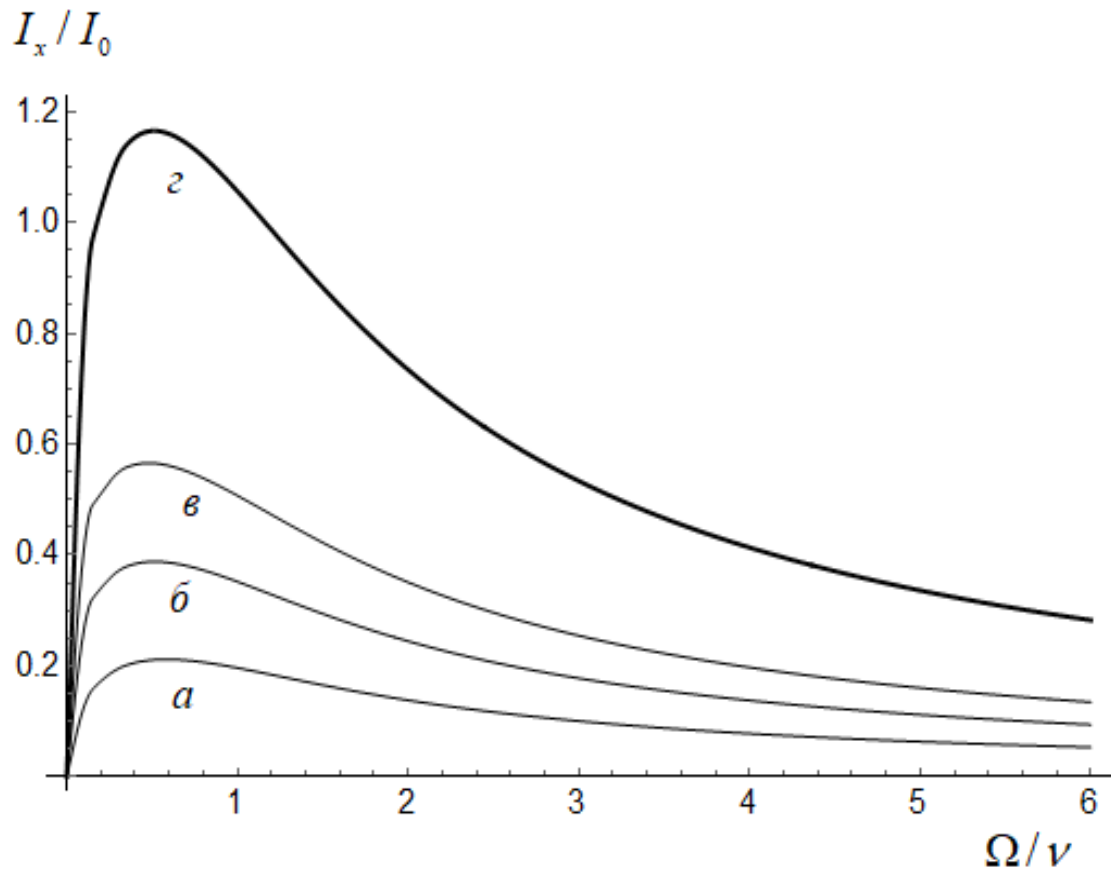


Рисунок 2.12 – Зависимости силы тока от напряженности постоянного электрического поля: а) $m = 14$; б) $m = 23$; в) $m = 32$; з) МУНТ

Сначала рассмотрим методику определения количества слоев в идеальной МУНТ без примесей. Внешний радиус нанотрубки легко определить, например, оптическим методом. Для определения количества и радиусов внутренних слоев в данном случае достаточно знания силы тока, протекающего по ОУНТ, находящиеся под действием постоянного электрического поля. Для определенного значения напряженности E_1 по формуле (2.33) рассчитана сила тока для различных радиусов. Выбор значения E_1 (или соответствующего ему значения напряжения на УНТ) лучше осуществить вблизи максимума тока.

Поскольку для однослойной УНТ определенного радиуса сила тока будет меньше, чем для многослойной с таким же радиусом внешнего слоя, для

исследуемой нанотрубки необходимо сопоставить зависимость значения силы тока от напряженности поля, полученную экспериментальным путем, со значениями силы, рассчитанными для разных комбинаций слоев. Отклонение экспериментально полученных значений тока от табличных позволяет судить о качестве синтезированных МУНТ, позволит отбирать образцы с фиксированными параметрами с нужной точностью.

При рассмотрении беспримесных УНТ, достаточно знать только одно значение силы тока, соответствующее заданным параметрам: значению поля и радиусу. Однако если УНТ содержит примеси, то наличие примесных центров увеличивает значение силы тока, начиная лишь с некоторого значения поля, поэтому необходимо знать зависимость силы тока в определённом диапазоне полей в пределах используемых приближений.

На рисунке 2.13 показаны зависимости силы тока от напряженности постоянного электрического поля E_1 в безразмерных единицах, построенные для разных значений индекса m .

Сплошной линией представлен график, соответствующий «чистым» (без примесей) УНТ, пунктирной – с учетом ионизации примесей (Δ_0 – полуширина запрещенной зоны для УНТ меньшего радиуса).

Для оценки индивидуального влияния на величину результирующего тока каждого из слоев, содержащих примеси, используется следующая схема: сначала анализируются зависимости, когда примеси находятся только на одном слое – УНТ (23,0) (рис. 2.13 в, линия 1), затем только на другом слое – УНТ (32,0) (рис. 2.13 в, линия 2). Верхняя кривая (рис. 2.13 в, линия 3) показывает влияние ионизации примесей в обоих слоях. Учитывая ионизацию попеременно на разных слоях, определяем слой, на котором находятся примеси.

Затем рассмотрим МУНТ, находящуюся под одновременным влиянием постоянного и переменного электрических полей. На рисунке 2.14 показана зависимость силы тока от напряженности постоянного электрического поля при фиксированных значениях частоты ω и амплитуды переменного электрического поля E_0 . В этом случае эффект увеличения силы тока, обусловленный ионизацией

примесных центров, начинается для меньших значений полей по сравнению со случаем, когда на систему действует только постоянное электрическое поле.

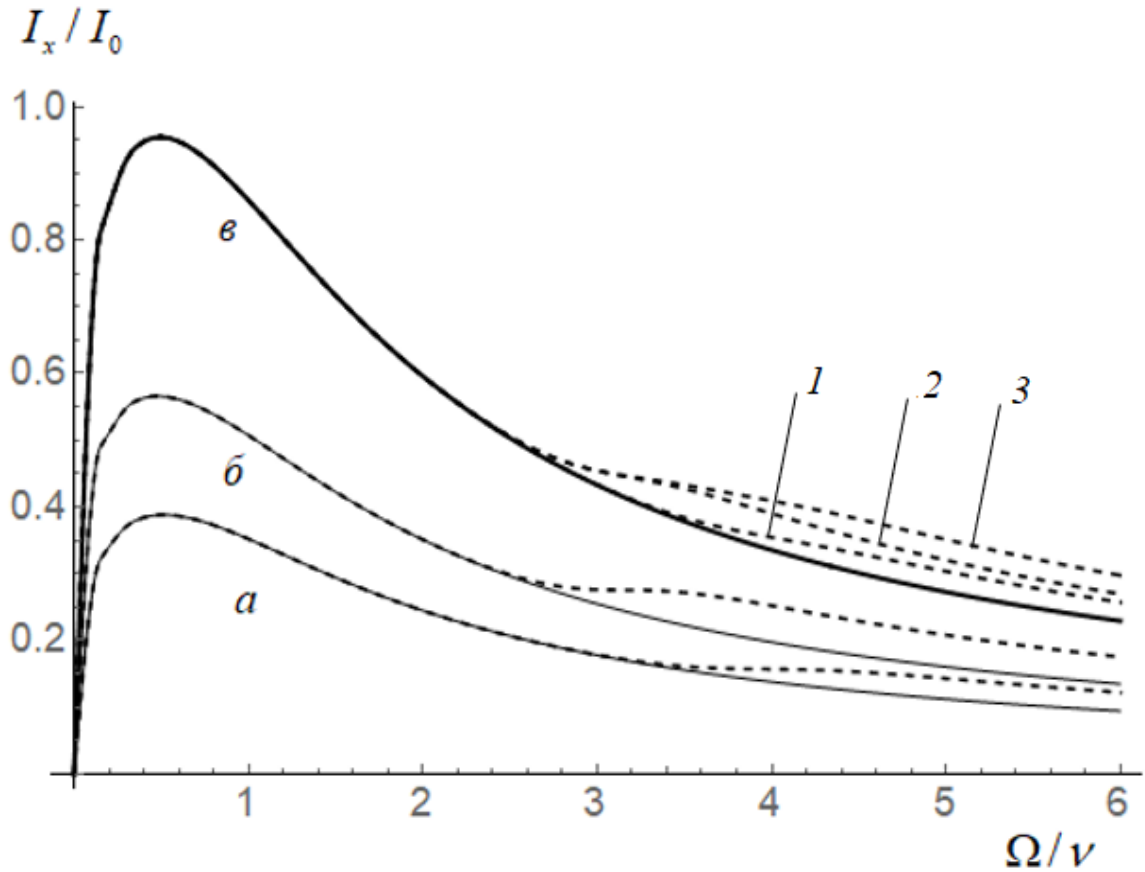


Рисунок 2.13 – Зависимости силы тока от напряженности постоянного электрического поля, $\nu = 0.3\Delta_0$: а) $m = 23$; б) $m = 32$; в) МУНТ

Приведем численные оценки параметров, используемых при построении графиков на рис. 2.12-2.14. Численный анализ проведен для нанотрубок типа zigzag ($m,0$) полупроводникового типа при $m_0 = 14$, $m_1 = 23$ и $m_2 = 32$. Индексы m выбираются таким образом, чтобы расстояния между соседними слоями составляли около 0,34 нм, что соответствует расстоянию между соседними плоскостями кристаллического графита. Концентрация примесей $N = 3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, частота релаксации $\nu = 2 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$, частота рекомбинации $\nu_r = 10^8 \text{ с}^{-1}$, $n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Значению безразмерной напряженности E при $aeE_1 / \hbar \nu = 1$ соответствует $10^4 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$, а безразмерной частоте $\omega / \nu = 1$ соответствует $\omega \approx 10^{12} \text{ с}^{-1}$, температура

$T = 100$ К. Для УНТ типа (14,0), (23,0) и (32,0) значения полуширины запрещенной зоны соответственно равны $\Delta_0 \approx 0.130\gamma = 0.351$ эВ, $\Delta_1 \approx 0.079\gamma = 0.213$ эВ и $\Delta_2 \approx 0.057\gamma = 0.154$ эВ. Глубина залегания примеси в каждой трубке $\upsilon = 0.3\Delta_0 = 0.105$ эВ.

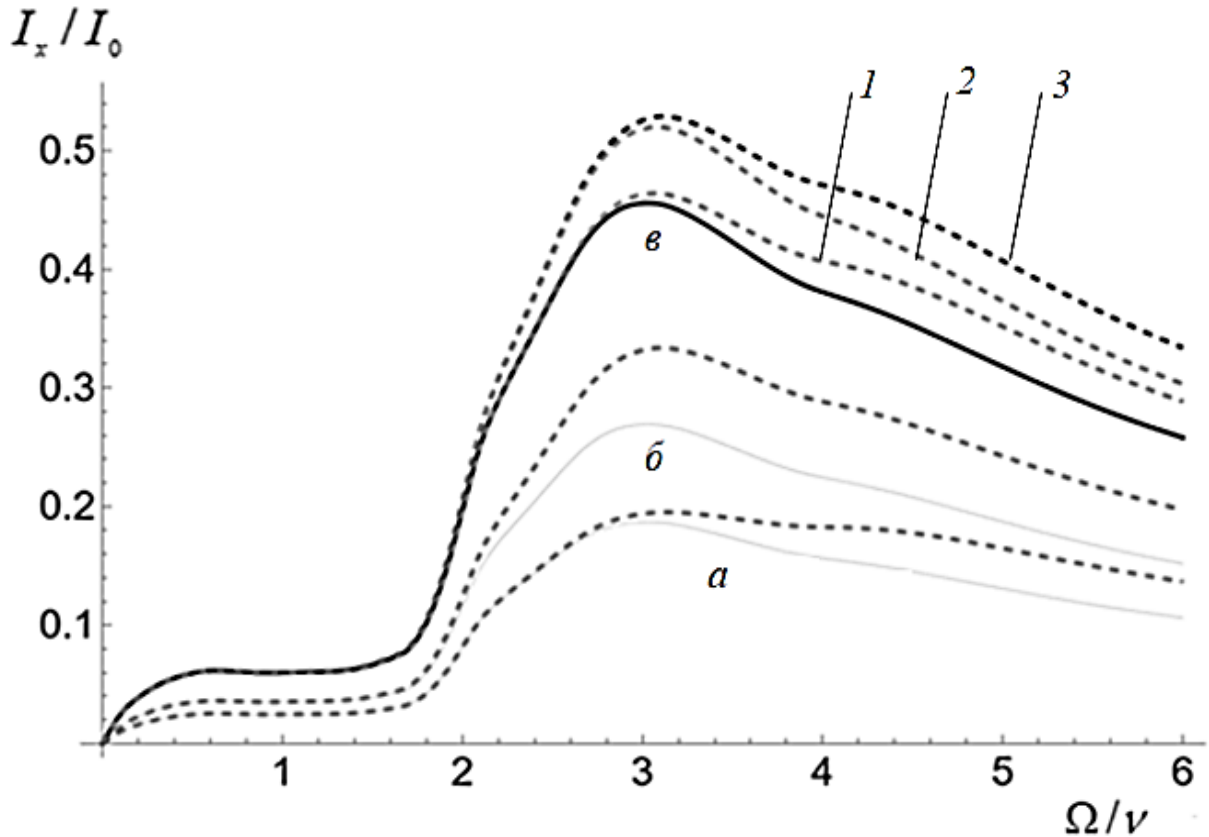


Рисунок 2.14 – Зависимости силы тока от напряженности постоянного электрического поля в безразмерных единицах при $\omega/\nu = 2$; $\alpha = 3$, $\upsilon = 0.3\Delta_0$:

а) $m = 23$; б) $m = 32$; в) МУНТ

При решении задачи применялся квазиклассический подход, при котором использовался закон дисперсии носителей, полученный в результате квантово-механического расчета, а вычисление электрического тока производилось с помощью классического кинетического уравнения. Такой подход правомерен в случае, когда какая-либо характеристика электрического поля размерности частоты (частота переменного электрического поля, штарковские частоты, соответствующие напряженностям постоянного и переменного полей) много

меньше ширины разрешенной зоны, деленной на $\hbar$ [109]. Даже в случае сильного квантующего электрического поля $aeE_1/\hbar\nu \gg 1$ при выполнении условия $aeE_1 \ll \Delta_e$, где Δ_e – минимальная ширина разрешенной подзоны, на ширине зоны укладывается много уровней и ситуация квазиклассична.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 2

1. Получено аналитическое выражение с экспоненциальной точностью для вероятности ионизации примесей в однослойных УНТ полупроводникового типа, находящихся в постоянном электрическом поле. В случае воздействия переменного электрического поля получены аналитические выражения для вероятности ионизации примесей в предельных случаях.
2. Выполнено численное исследование вероятности ионизации примесей в зависимости от параметров приложенных полей.
3. Проведено теоретическое исследование проводимости примесных МУНТ, состоящих из полупроводниковых ОУНТ типа zigzag в рамках квазиклассического приближения, пренебрегая межслоевым взаимодействием.
4. Предложена методика определения параметров нанотрубки на основе численного анализа зависимости силы тока в УНТ от величины внешних приложенных полей и от глубины залегания примесей.

ГЛАВА 3. ПРОВОДИМОСТЬ ДВУМЕРНОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА

3.1 УПРАВЛЕНИЕ ПРОВОДИМОСТЬЮ ДВУМЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ ПОПЕРЕЧНЫМИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ПОЛЯМИ

В данном разделе исследована возможность управления проводимостью двумерной 2D ГСР поперечными электрическими полями. 2D ГСР образована из периодически чередующихся областей в шахматном порядке областей щелевого и бесщелевого графена. В результате взаимодействия графена с подложкой из SiC в энергетическом спектре носителей заряда появляется запрещенная зона (щель), а подложка из SiO₂ не вызывает изменение спектра графена (щель отсутствует). Энергетический спектр электронов в 2D ГСР в одноминизонном приближении выбран в модельном виде [86]

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2(1 - \cos(p_x d_1 / \hbar)) + \Delta_2^2(1 - \cos(p_y d_2 / \hbar))}, \quad (3.1)$$

где $\mathbf{p}$ – квазиимпульс электрона, $d_i = a_i + b_i$ – период ГСР, a_i и b_i – ширины ячеек бесщелевого и щелевого графена. Энергетический спектр (3.1), применявшийся для моделирования носителей заряда в графеновых сверхрешётках [8, 81], ранее был предложен для описания электронных состояний в узкозонных полупроводниках и квантовых полупроводниковых сверхрешётках [98].

Из анализа формулы (3.1) видно, что полная энергия электронов не может быть представлена алгебраической суммой ее компонент по двум взаимно перпендикулярным направлениям. Это означает, что энергетический спектр 2D ГСР неаддитивен. Неаддитивность энергетического спектра сверхрешетки на основе графена приводит к взаимной зависимости движений носителей заряда вдоль перпендикулярных друг другу направлений, что приводит к дополнительной возможности управления током вдоль оси сверхрешетки приложением поперечного напряжения [114].

Компоненты скорости движения электрона минизоны в 2D ГСР

$\mathbf{v}(\mathbf{p}) = (v_x, v_y)$ имеют вид:

$$\begin{aligned} v_x(x, y) &= \frac{\Delta_1^2 d_1 \sin(x) / \hbar}{\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2 (1 - \cos(x)) + \Delta_2^2 (1 - \cos(y))}}, \\ v_y(x, y) &= \frac{\Delta_2^2 d_2 \sin(y) / \hbar}{\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2 (1 - \cos(x)) + \Delta_2^2 (1 - \cos(y))}}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

где $x = p_x d_1 / \hbar, y = p_y d_2 / \hbar$.

Плотность тока $\mathbf{j}$ определяется по формуле

$$\mathbf{j} = (j_x, j_y) = -e \left(\sum_{\mathbf{p}} v_x(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}), \sum_{\mathbf{p}} v_y(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}) \right), \quad (3.3)$$

где e – заряд электрона, $\mathbf{v}(\mathbf{p})$ – скорость электрона, $f(\mathbf{p})$ – неравновесная функция распределения носителей, которая находится с помощью решения кинетического уравнения Больцмана.

Для невырожденного электронного газа в работе [114] была получена постоянная составляющая плотности тока, текущего вдоль оси одной из осей 2D ГСР

$$j_x = j_0 \sum A_{nm} C_{nm} \sin \varphi_{knm} \cos \varphi_{knm} J_k^2(n\alpha_x + m\alpha_y), \quad (3.4)$$

где $j_0 = -ed_1 n_0 \Delta / 2\hbar$, Δ – полуширина запрещённой зоны щелевой модификации графена (для эпитаксиального графена на подложке карбида кремния $\Delta \approx 0.13$ эВ), n_0 – концентрация электронов в зоне проводимости, $J_n(x)$ – функция Бесселя 1-го рода n -го порядка, ν – частота столкновений, $\alpha_x = eE_{0x} d_1 / \hbar \omega$, $\alpha_y = eE_{0y} d_2 / \hbar \omega$, $\Omega_x = eE_{1x} d_1 / \hbar$, $\Omega_y = eE_{1y} d_2 / \hbar$,

$$\sin \varphi_{knm} = \frac{\nu}{\sqrt{\nu^2 + (m\Omega_x + n\Omega_y + k\omega)^2}},$$

$$A_{nm} = \Delta_0 \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos(y) \sin(x) \sin(mx) \cos(ny) dx dy}{\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2 (1 - \cos(x)) + \Delta_2^2 (1 - \cos(y))}},$$

$$A_{nm} = \Delta_0 \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos(y) \sin(x) \sin(mx) \cos(ny) dx dy}{\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2(1 - \cos(x)) + \Delta_2^2(1 - \cos(y))}},$$

$$C_{nm} = \frac{1}{C} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(mx) \cos(ny) \exp\left(-\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2(1 - \cos(x)) + \Delta_2^2(1 - \cos(y))} / k_B T\right) dx dy,$$

$$C = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp\left(-\sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_1^2(1 - \cos(x)) + \Delta_2^2(1 - \cos(y))} / k_B T\right) dx dy.$$

Вычисление плотности тока проведено с использованием решения кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации (1.3).

Для удобства вычислений скорость движения электронов $\mathbf{v}(\mathbf{p}) = (v_x, v_y)$ разложили в ряд Фурье по двум переменным. Учитываем, что $v_x(x, y)$ по переменной x нечетна, а по переменной y четна. Тогда:

$$v_x(x, y) = \sum_{m=1}^{\infty} b_m(y) \sin(mx), \quad (3.5)$$

где коэффициенты $b_m(y)$ имеют вид

$$b_m(y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} v_x(x, y) \sin(mx) dx, \quad (3.6)$$

Коэффициенты $b_m(y)$ также представляются в виде ряда

$$b_m(y) = \frac{a_{0m}}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_{nm} \cos(ny), \quad (3.7)$$

где коэффициенты a_{nm} имеют вид

$$a_{nm} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} b_m(y) \cos(ny) dy, \quad (3.8)$$

Подставляя (3.6) в (3.8), получаем окончательное выражение для коэффициентов a_{nm} :

$$a_{nm} = \frac{1}{\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} v_x(x, y) \sin(mx) \cos(ny) dx dy. \quad (3.9)$$

Таким образом,

$$v_x(x, y) = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} a_{0m} \sin(mx) + \sum_{n,m=1}^{\infty} a_{nm} \sin(mx) \cos(ny). \quad (3.10)$$

Из анализа формулы (3.4) можно увидеть, что вследствие неаддитивности энергетического спектра 2D ГСР, постоянная составляющая плотности тока, текущего вдоль оси x , зависит не только от полей, ориентированных вдоль этой оси (продольных), но и от полей, ориентированных перпендикулярно (поперечных).

Рассмотрим случай, когда в плоскости 2D ГСР приложено постоянное и переменное электрические поля $\mathbf{E} = \{E_{1x} + E_{0x} \cos \omega t, E_{1y} + E_{0y} \cos \omega t\}$, где E_0 и ω – амплитуда и частота переменного электрического поля, E_1 – модуль напряженности постоянного электрического поля. Выберем направление вектора напряженности постоянного электрического поля вдоль одной из осей ГСР, для определенности вдоль оси x , то есть $E_{1y} = 0$. Фиксируем частоту ω и амплитуду переменного электрического поля $\mathbf{E}_0 = \{E_{0x}, E_{0y}\}$, а направление вектора поляризации этого поля задается углом φ относительно оси x . На рисунке 3.1 приведена геометрия задачи.

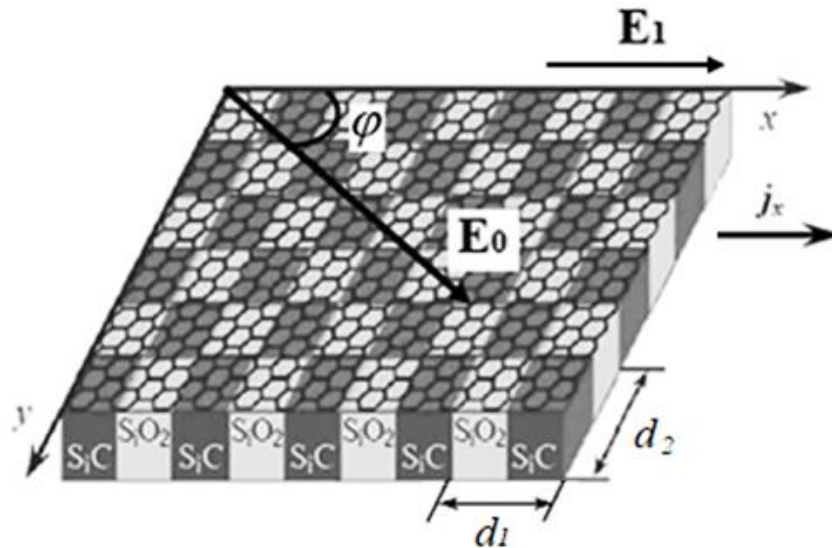


Рисунок 3.1 – Геометрия задачи

Для численного расчета так же, как и в [90], выбрана симметричная 2D ГСР ($d_1 = d_2 = d = 2 \cdot 10^{-6}$ см).

Зависимость плотности тока от угла поворота φ вектора поляризации переменного электрического поля, при фиксированных значениях параметров внешних электрических полей показана на рисунке 3.2.

Максимального значения плотность тока достигает, когда переменное поле поляризовано перпендикулярно оси 2D ГСР. С увеличением напряженности поля плотность тока, протекающего вдоль оси x , уменьшается. При сильных полях также можно наблюдать на графике смену знака тока, протекающего в продольном направлении (рис. 3.2 *а, б*), эффект абсолютной отрицательной проводимости [109]. Для значения угла $\varphi = \pi/2$ ярко прослеживается возможность управления проводимостью поперечными полями. Результаты данного исследования могут быть использованы для детектирования электромагнитного излучения, если, поворачивая образец с 2D ГСР, находящийся под воздействием постоянного электрического поля, измерять угол поворота и величину электрического тока.

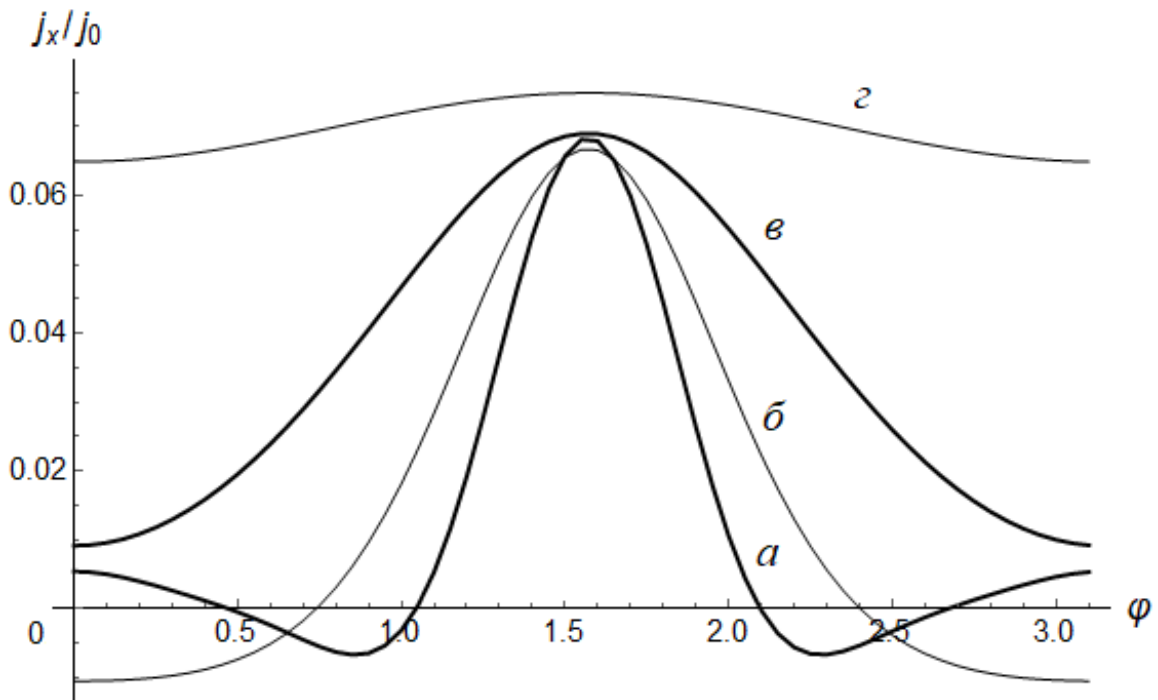


Рисунок 3.2 – Зависимость плотности тока от угла поворота φ переменного поля, когда $\Omega_x/\nu = 1.0$, $\omega/\nu = 2.0$: *а)* $\alpha = 7$; *б)* $\alpha = 5$; *в)* $\alpha = 3$; *г)* $\alpha = 1$

Следующей частью исследования являлось определение параметров внешних электрических полей, при которых будут наблюдаться наиболее

выраженные изменения плотности тока. В этом случае будем варьировать продольные и поперечные по отношению к исследуемому направлению тока компоненты электрических полей. На первом этапе численно определили диапазон возможных значений плотности тока (максимальное и минимальное значение) при фиксированной частоте и при изменении остальных параметров полей.

Обнаружено, что наибольшее различие между возможными значениями тока наблюдается при равенстве нулю поперечной составляющей постоянного поля ($E_{1y} = 0$).

Далее проводился численный анализ зависимости плотности тока от поперечной составляющей переменного поля α_y при фиксированной частоте ω и $E_{1y} = 0$. Результат такого расчета приведен на рисунке 3.3. Здесь наблюдается уменьшение диапазона изменения значений плотности тока при увеличении продольной составляющей постоянного электрического поля Ω_x/ν .

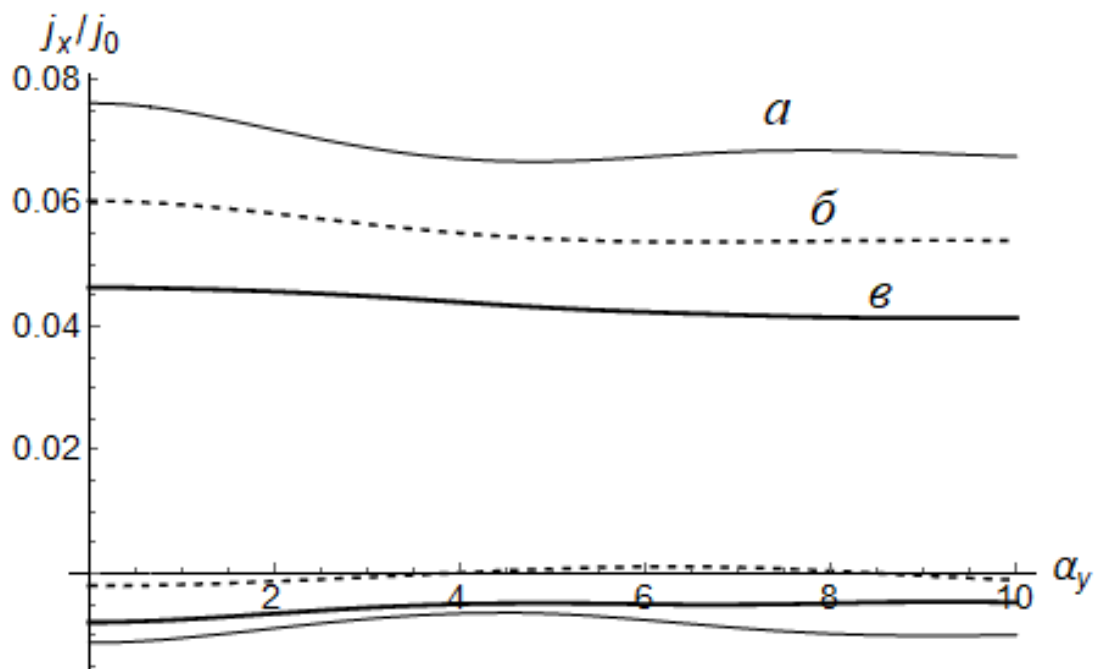


Рисунок 3.3 – Зависимость максимумов и минимумов плотности тока от поперечного переменного электрического поля при $\omega/\nu = 2.0$, $\Omega_y/\nu = 0$:

а) $\Omega_x/\nu = 1.0$; б) $\Omega_x/\nu = 2.0$; в) $\Omega_x/\nu = 3.0$

На следующем этапе было определено (рис. 3.4), что наибольший размах максимумов и минимумов плотности тока, то есть, наибольшее различие между возможными значениями плотности тока, проявляется при равных значениях продольной E_{0x} и поперечной E_{0y} ($\alpha_x = \alpha_y$) составляющих переменного электрического поля.

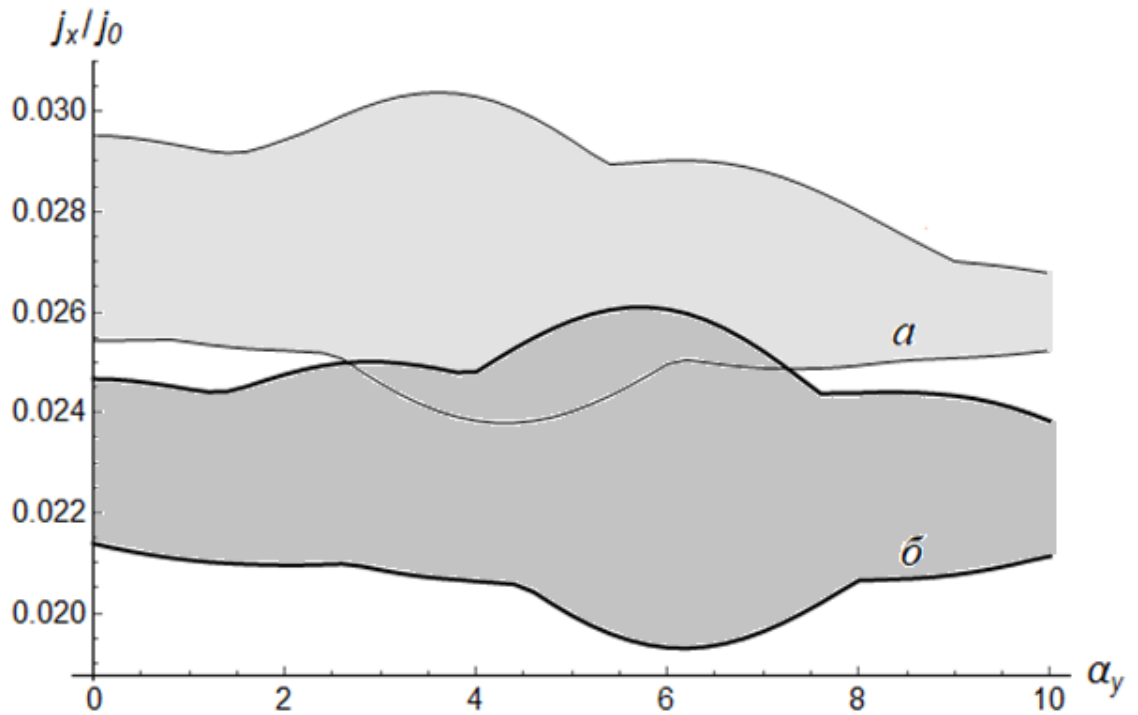


Рисунок 3.4 – Зависимость максимумов и минимумов плотности тока от поперечного переменного электрического поля при $\omega/\nu = 2.0$, $\Omega_y/\nu = 0$:

a) $\Omega_x/\nu = 3.0$, $\alpha_x = 4$; *б)* $\Omega_x/\nu = 5.0$, $\alpha_x = 6$

Предложенная в работе методика численного определения диапазона значений плотности тока интересна тем, что, варьируя сразу несколько параметров, можно выяснить, в каких границах может изменяться исследуемая величина.

В рассматриваемом в работе частном случае энергетический спектр обладает слабой неаддитивностью, что и проявляется в слабой зависимости плотности тока от поперечного электрического поля. Отметим, что при уменьшении периода 2D ГСР возможность управления проводимостью

поперечными электрическими полями увеличивается, поскольку с уменьшением периода увеличивается неаддитивность энергетического спектра [90].

Приведем оценку параметров рассматриваемой системы в связи с использованными моделями и приближениями. В работе пренебрегалось межминизонными переходами, выбрано одноминизонное приближение, что соответствует выполнению условий: $\hbar\omega \ll 2\Delta$ ($\omega \ll 10^{15} \text{ с}^{-1}$), $k_B T \ll 2\Delta$ ($T \ll 10^3 \text{ К}$).

При расчете плотности тока использован квазиклассический подход, приводящий к следующим условиям на параметры полей: $\omega < 10^{13} \text{ с}^{-1}$; $edE_1/\hbar\nu \ll 10^3$. Для численных расчетов использованы следующие параметры: $n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $\tau = \nu^{-1} \approx 10^{-11} \text{ с}$, $T = 70 \text{ К}$. Численная оценка величины поля E_1 при $edE_1/\hbar\nu = 1$ составляет $33 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$.

3.2 ОСОБЕННОСТИ ПРОВОДИМОСТИ ДВУМЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ В СИЛЬНЫХ ВНЕШНИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ С УЧЕТОМ ИОНИЗАЦИИ ПРИМЕСИ

Исследована постоянная составляющая плотности тока в 2D ГСР на подложке из периодически чередующихся областей бесщелевого и щелевого графена, находящейся под действием внешних электрических полей, с учетом ионизации примесей при различной ориентации векторов напряженности постоянного и переменного электрических полей. Энергетический спектр электронов в 2D ГСР в одноминизонном приближении был приведен выше (формула (3.1))

Для управления проводимостью 2D ГСР неаддитивность энергетического спектра рассматриваемой структуры является ключевой особенностью. Ранее в работе [112] была исследована возможность управления проводимостью 2D ГСР поперечными постоянными и переменными электрическими полями, обусловленная неаддитивностью ее энергетического спектра и была предложена методика выявления областей параметров приложенных электрических полей, в которых управление проводимостью наиболее эффективно. Однако, чтобы дать полную картину, стоит рассмотреть, как неаддитивность энергетического спектра 2D ГСР влияет на ионизацию.

Приложим в плоскости 2D ГСР постоянное и переменное электрические поля, $\mathbf{E} = \{E_{1x} + E_{0x} \cos \omega t, E_{1y} + E_{0y} \cos \omega t\}$ – суммарная напряженность электрического поля, где E_0 и ω – амплитуда и частота переменного электрического поля, $\mathbf{E}_1 = \{E_{1x}, E_{1y}\}$ – вектор напряженности постоянного электрического поля.

Для учета влияния ионизации примесей на проводимость 2D ГСР применялось кинетическое уравнение Больцмана с модельным интегралом столкновений Батнагара–Гросса–Крука при учете темпа генерации и рекомбинации (формула 2.26).

В случае динамического равновесия концентрация носителей в зоне проводимости в присутствии внешних электрических полей равна $n_0 B_{ion}$ и определяется через вероятность ионизации примесей, рассчитанной с использованием метода мнимого времени.

Для того чтобы найти постоянную составляющую плотности тока, текущего вдоль осей x 2D ГСР, скорость носителей заряда вдоль этой оси $v_x = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p}$ раскладываем в двойной ряд Фурье по двум переменным p_x и p_y . После математических преобразований и усреднения по времени определяем постоянную составляющую плотности тока, текущего вдоль оси x :

$$j_x = j_0 B_{ion} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{nm} C_{nm} \sin \varphi_{knm} \cos \varphi_{knm} J_k^2(n\alpha_x + m\alpha_y) \quad (3.11)$$

где $j_0 = -edn_0 \Delta / 2\hbar$, $B_{ion} = 1 + \frac{N}{n_0} \frac{\exp(-2 \operatorname{Im} S / \hbar)}{\nu_r \operatorname{Im} t_0 + \exp(-2 \operatorname{Im} S / \hbar)}$, n_0 – концентрация электронов в зоне проводимости, N – концентрация примесей в графене, S – классическое действие, набираемое электроном при подбарьерном движении, t_0 – время начала туннелирования. Аналогично определяется постоянная составляющая плотности тока вдоль оси y .

На рисунке 3.5 представлена зависимость постоянной составляющей плотности тока от напряженности поперечного постоянного электрического поля в отсутствие переменного поля. Пунктирным линиям соответствуют графики с учетом ионизации примесей. Наблюдается уменьшение амплитуды продольной плотности тока j_x при увеличении напряженности поперечного постоянного электрического поля E_{1y} . На графиках заметна точка перегиба при равенстве $\Omega_x = \Omega_y$, то есть, когда вектор $\mathbf{E}_1$ направлен под углом $\pi/4$ к оси 2D ГСР.

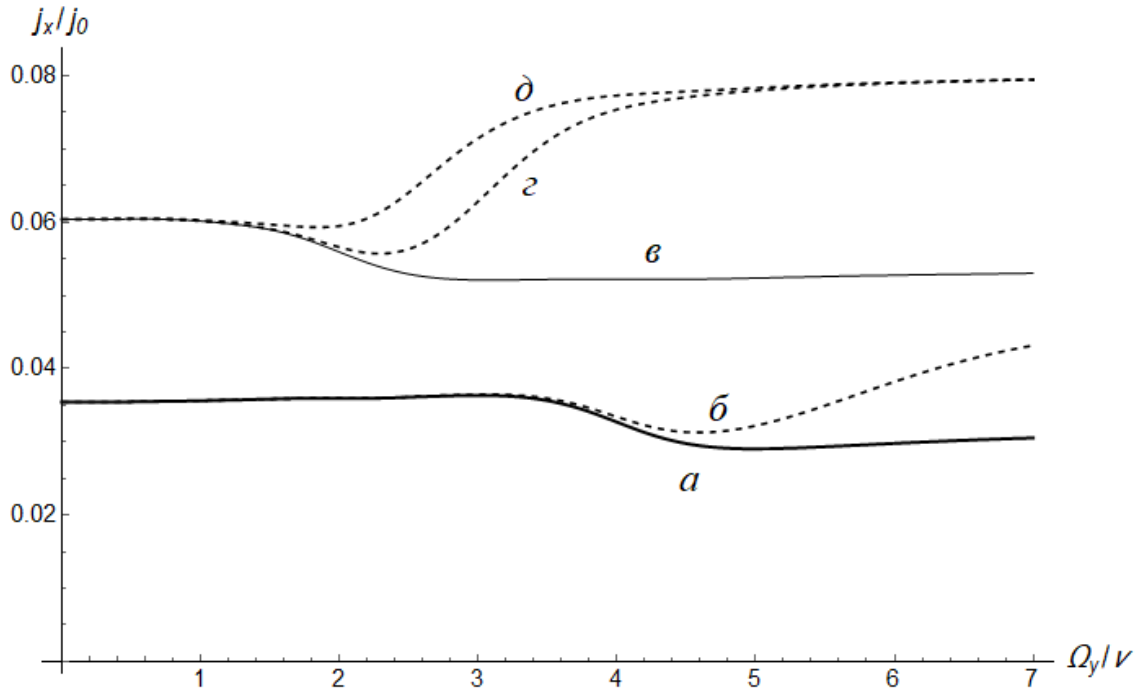


Рисунок 3.5 – Зависимость постоянной составляющей плотности тока от напряженности поперечной составляющей постоянного электрического поля, ν – глубина залегания примесей: а) $\Omega_x/\nu = 4.0$; б) $\Omega_x/\nu = 4.0$, $\nu = 0.095\Delta_0$; в) $\Omega_x/\nu = 2.0$; г) $\Omega_x/\nu = 2.0$, $\nu = 0.06\Delta_0$; д) $\Omega_x/\nu = 2.0$, $\nu = 0.055\Delta_0$ (пунктирная линия – с учетом ионизации примесей)

Ионизация примесных центров в квазиклассически сильных полях, учет которой проводился методом мнимого времени [88], приводит к росту концентрации носителей заряда в минизоне проводимости и соответственно, к увеличению плотности тока. Меняя уровень залегания примесей ν , можно управлять проводимостью, подбирая параметр ν , например, таким образом, чтобы ионизация примесей повышала плотность тока в момент его снижения (см. рис. 3.5 в, 3.5 г, 3.5 д).

На рисунке 3.6 показана зависимость коэффициента B_{ion} , отвечающего за увеличение числа носителей заряда в зоне проводимости, от угла поворота φ вектора поляризации переменного электрического поля относительно оси x .

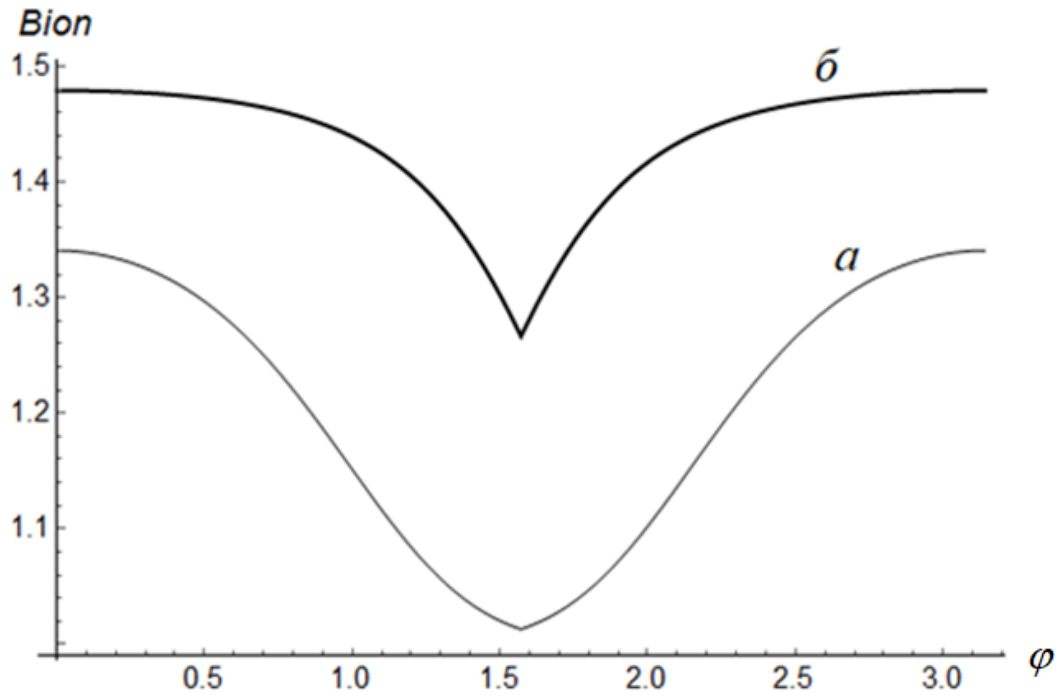


Рисунок 3.6 – Зависимость коэффициента B_{ion} от угла поворота φ переменного электрического поля, когда $\Omega_y/\nu = 0.0$, $\Omega_x/\nu = 3.0$, $\omega/\nu = 2.0$: а) $\alpha = 5$; б) $\alpha = 7$

По графику зависимости, представленном на рис. 3.6, видно, что с увеличением угла поворота φ до $\pi/2$ коэффициент ионизации примеси уменьшается и достигает минимального значения, если переменное электрическое поле направлено вдоль оси сверхрешетки, т.е. совпадает с направлением вектора напряженности постоянного. Затем, при дальнейшем увеличении угла φ коэффициент ионизации снова растет и достигается максимум ионизации при $\varphi = \pi$.

Эти результаты объясняются неаддитивностью спектра рассматриваемой структуры: на плотность тока вдоль оси ГСР оказывает влияние не только продольная, но также и поперечная составляющая переменного электрического поля. Таким образом, появляется возможность управления плотностью тока вдоль оси x , меняя угол поворота вектора поляризации переменного электрического поля при фиксированных значениях частоты и амплитуды этого поля.

Если рассматриваемая структура находится под одновременным воздействием постоянного и переменного электрических полей, то ионизация примесей начинается для меньших значений полей (рис. 3.7).

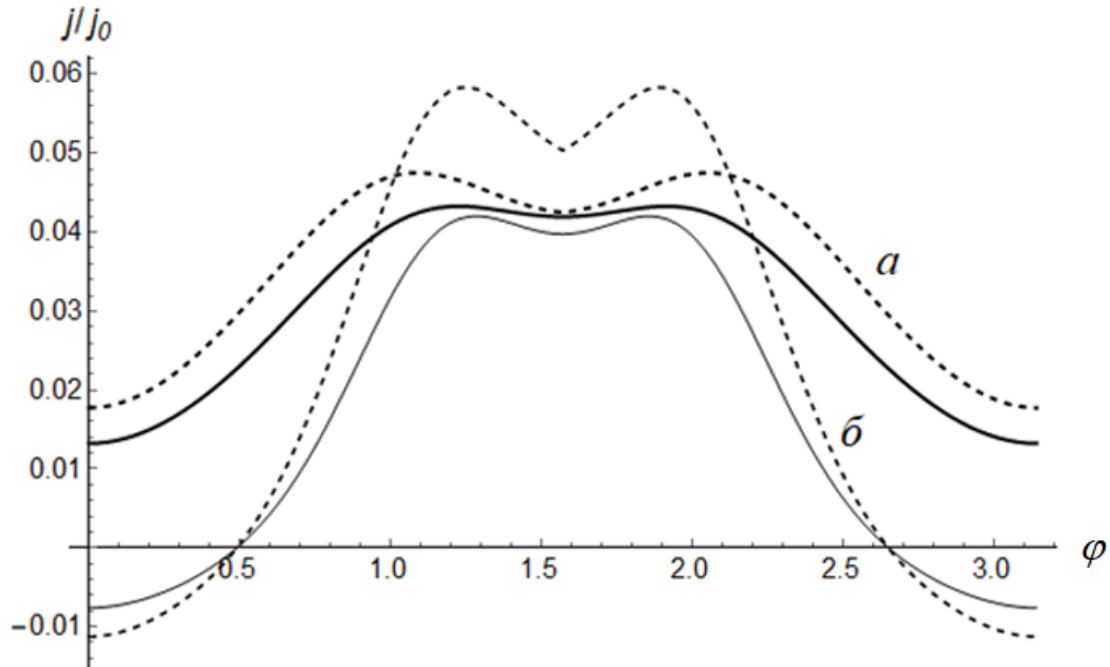


Рисунок 3.7 – Зависимость плотности тока от угла поворота φ переменного электрического поля, когда $\Omega_x/\nu = 3.0$, $\omega/\nu = 2.0$: а) $\alpha = 5$; б) $\alpha = 7$ (пунктирная линия – с учетом ионизации примесей, сплошная – без ионизации примесей).

Глубина залегания примесей $\upsilon = 0.1\Delta_0$

С увеличением напряженности поля плотность тока, протекающего вдоль оси x , уменьшается. В сильных полях наблюдается эффект абсолютной отрицательной проводимости (рис.3.7 б). Меняя амплитудное значение напряженности поперечного поля, можно менять знак тока, протекающего в продольном направлении.

В данной задаче использовалось одноминизонное приближение, поскольку в спектре рассматриваемой структуры имеется запрещённая зона, что соответствует выполнению условий: $k_B T \ll 2\Delta$, $\hbar\omega \ll 2\Delta$. Также применялся квазиклассический подход, при котором выбран закон дисперсии носителей, полученный в результате квантовомеханического расчета, а вычисление электрического тока проведено с

помощью классического кинетического уравнения. Такой подход правомерен, когда какая-либо характеристика электрического поля удовлетворяет условию $\hbar\omega$, eE_0d , $eE_1d \ll \Delta_e$ [109]. Это приводит к условиям на параметры: $T \ll 3 \cdot 10^3$ К, $\omega \ll 4 \cdot 10^{13}$ с⁻¹, E_0 , $E_1 \ll 10^4$ В·см⁻¹.

В представленной работе рассмотрен частный случай квадратной 2D ГСР: $d_1 = d_2 = d = 2 \cdot 10^{-6}$ см, $a_i = b_i$. Численный расчет для такой сверхрешетки [90] дает коэффициенты аппроксимации $\Delta_0 = 0.4217\Delta$, $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.3318\Delta$. При построении графиков были выбраны следующие параметры системы: $\nu \approx 10^{11}$ с⁻¹, $T = 70$ К, $n = 10^{10}$ см⁻². Численная оценка величины поля E при $eE_1d/\hbar\nu=1$ составляет 33 В·см⁻¹.

3.3. ВЗАИМОСВЯЗЬ НАПРАВЛЕНИЙ ВЕКТОРА НАПРЯЖЕННОСТИ ПОСТОЯННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ, ВЕКТОРА ПОЛЯРИЗАЦИИ ПЕРЕМЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ И ВЕКТОРА ПЛОТНОСТИ ТОКА В ДВУМЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ

Рассмотрим ситуацию, когда на 2D ГСР действует только постоянное электрическое поле. Изучим, как будет меняться направление вектора плотности тока при повороте вектора напряжённости постоянного электрического поля относительно одной из осей сверхрешетки (ось x). В общем случае в анизотропных нелинейных средах вектор напряженности электрического поля и вектор плотности электрического тока не сонаправлены, кроме тех случаев, когда поле приложено вдоль высокосимметричных направлений (для квадратной решетки $[10]$, $[01]$, $[11]$). Этот эффект известен как эффект Сасаки-Шибуйя. Наиболее чётко этот эффект выражен в многодолинных полупроводниках благодаря междолинному перераспределению носителей заряда, вызываемому их различным нагревом в разных долинах [143].

При повороте вектора напряжённости постоянного электрического поля на определённый угол θ относительно оси x , вектор плотности тока $\mathbf{j}$ также поворачивается на некоторый угол γ , который определяется по формуле

$$\gamma = \arctg\left(\frac{j_y}{j_x}\right). \quad (3.12)$$

Геометрия задачи представлена на рис. 3.8.

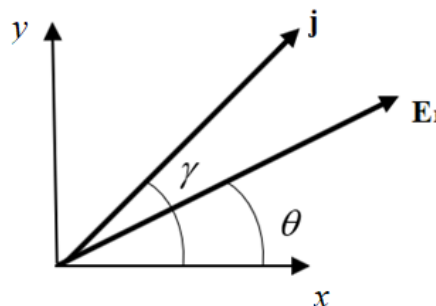


Рисунок 3.8 – Геометрия задачи

Разность между углами γ и θ обозначим ψ . На рисунке 3.9 приведен график зависимости угла ψ от угла θ при фиксированном значении напряженности постоянного электрического поля (в безразмерных величинах). Из графика видно, что направление вектора плотности тока не совпадает с направлением поля, кроме случаев $\theta = 0, \pi/4$ и $\pi/2$, то есть когда электрическое поле направлено вдоль осей 2D ГСР или вдоль биссекторного направления (высокосимметричные направления).

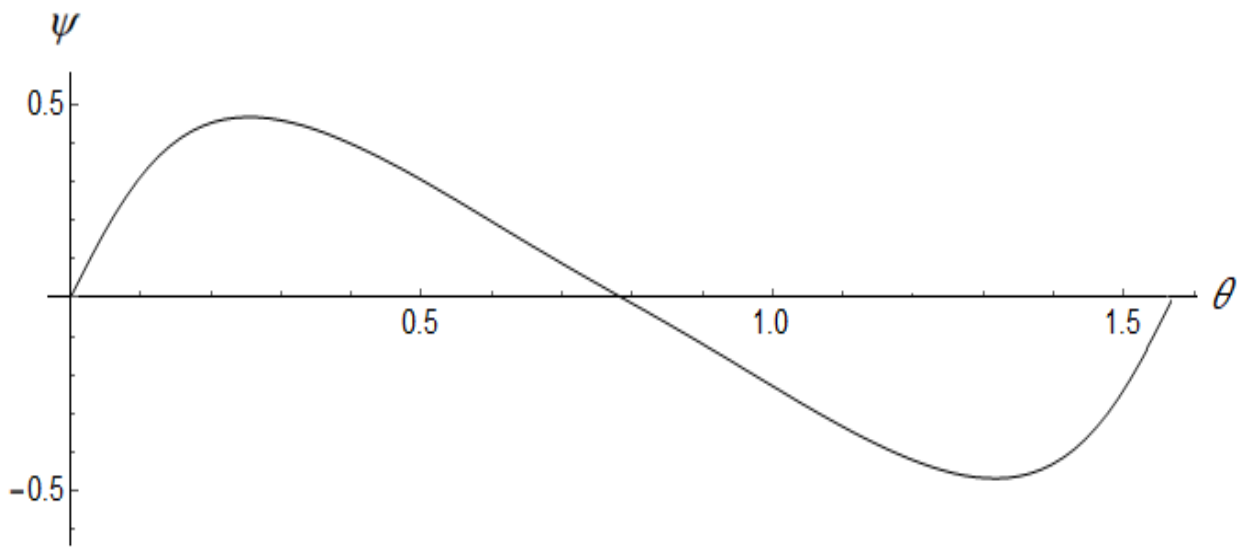


Рисунок 3.9 – Зависимость ψ от угла поворота вектора напряженности постоянного электрического поля при $\Omega/\nu = 2.0$

Максимум угла ψ нелинейно зависит от величины модуля напряженности постоянного электрического поля $E_1 = \sqrt{E_{1x}^2 + E_{1y}^2}$. На рисунке 3.10 показано, что с ростом значения величины E_1 максимум угла ψ увеличивается и достигается при меньших отклонениях угла θ от осей рассматриваемой сверхрешетки.

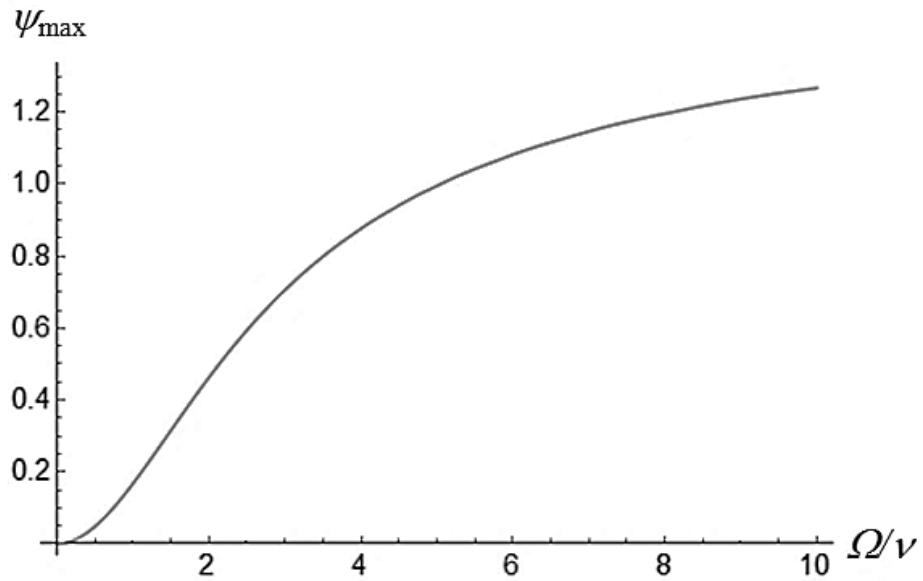


Рисунок 3.10 – Зависимость максимума угла ψ от величины напряженности постоянного электрического поля

Кроме того, в сильных полях с напряжённостью $E_1 = \sqrt{E_{1x}^2 + E_{1y}^2}$ свыше $150 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$, угол ψ равен нулю еще в двух точках, симметричных относительно биссекторного направления (рис. 3.11 в).

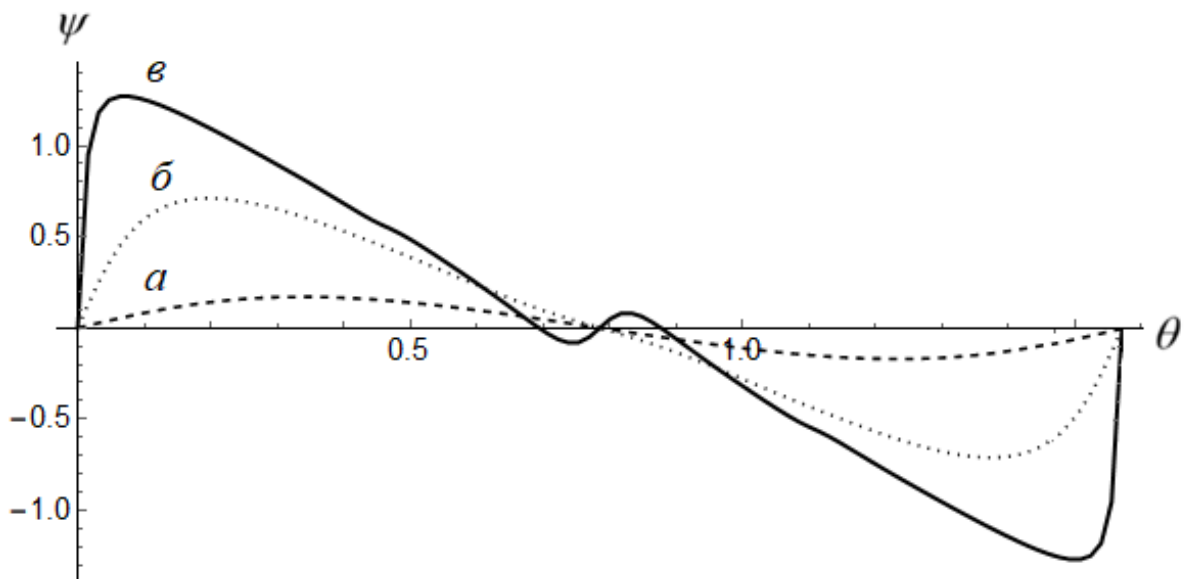


Рисунок 3.11 – Зависимость угла ψ от угла поворота вектора напряженности постоянного электрического поля: а) $\Omega/\nu = 1.0$; б) $\Omega/\nu = 3.0$; в) $\Omega/\nu = 10.0$

Этот эффект обусловлен неаддитивностью энергетического спектра 2D ГСР. Ранее в работе [115] был исследован угол между направлением вектора плотности тока и направлением электрического поля, однако спектр сверхрешетки в [115] был аддитивным, в отличие от рассматриваемой нами в данной работе структуры. В работах [24, 144, 145] показано, что отклонение закона дисперсии электронов в двумерной квантовой сверхрешетке от гармонического в сильных постоянном и переменном электрических полях оказывает заметное влияние на вид вольт-амперных характеристик двумерной квантовой сверхрешетки.

Изучим, как неаддитивность энергетического спектра 2D ГСР влияет на направление вектора плотности тока. Для этого раскладываем спектр (3.1) в ряд Фурье по двум переменным. Учитываем, что функция $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(x, y)$ четна и по переменной x , и по переменной y , где $x = p_x d / \hbar$, $y = p_y d_2 / \hbar$. Тогда

$$\begin{aligned}\varepsilon(x, y) &= \frac{a_0(y)}{2} + \sum_{m=1}^{\infty} a_m(y) \cos(mx), \quad a_m(y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon(x, y) \cos(mx) dx, \\ a_m(y) &= \frac{c_{n0}}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} c_{nm} \cos(ny), \quad c_{nm} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} a_m(y) \cos(ny) dy, \\ c_{nm} &= \frac{1}{\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon(x, y) \sin(mx) \cos(ny) dx dy, \\ \frac{a_0(y)}{2} &= \frac{1}{2} \left(\frac{c_{00}}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} c_{n0} \cos(ny) \right).\end{aligned}\tag{3.13}$$

Таким образом,

$$\varepsilon(x, y) = \frac{1}{4} c_{00} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} c_{n0} \cos(ny) + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} c_{n0} \cos(mx) + \sum_{n,m=1}^{\infty} c_{nm} \cos(mx) \cos(ny).\tag{3.14}$$

В случае слабой неаддитивности можно ограничиться первыми слагаемыми. Тогда энергетический спектр 2D ГСР запишется в форме:

$$\varepsilon(\vec{p}) = \Delta \left\{ g_0 - g_1 \cos\left(\frac{p_x d_1}{\hbar}\right) - g_2 \cos\left(\frac{p_y d_2}{\hbar}\right) - g_3 \cos\left(\frac{p_x d_1}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{p_y d_2}{\hbar}\right) \right\},\tag{3.15}$$

где

$$g_0 = c_{00} / 4\Delta = \frac{1}{\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon(x, y) dx dy / 4\Delta,$$

$$g_1 = g_2 = c_{10} / 2\Delta = \frac{1}{\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon(x, y) \cos(y) dx dy / 2\Delta,$$

$$g_3 = c_{11} / \Delta = \frac{1}{\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon(x, y) \cos(y) \cos(y) dx dy / \Delta.$$

Для рассматриваемого в работе частного случая симметричной сверхрешетки расчет дает следующие значения коэффициентов [89]: $g_0 = 0.6245$, $g_1 = g_2 = 0.0893$, $g_3 = 0.0131$.

Вычислим плотность тока вдоль оси x по формуле (2.25). Функцию распределения $f(\mathbf{p})$ находим из уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации, решение которого имеет следующий вид:

$$f(\mathbf{p}) = \nu \int_{-\infty}^t \exp(\nu(t' - t)) f_0(p_x + \frac{e}{c}(A_x(t) - A_x(t')), p_y + \frac{e}{c}(A_y(t) - A_y(t'))) dt'. \quad (3.16)$$

Равновесную функцию распределения $f_0(\mathbf{p})$ выбираем в больцмановском виде. Равновесная функция распределения нормирована условием:

$$n_0 = \frac{2C}{(2\pi\hbar)^2} \int_{\mathbf{p}} \exp(-\varepsilon(\mathbf{p}) / k_B T) d^2 \mathbf{p}, \quad (3.17)$$

где C – нормировочная постоянная.

Производим замену $p_x \rightarrow p_x + eE_{1x}(t - t')$, $p_y \rightarrow p_y + eE_{1y}(t - t')$ и выражение для плотности тока преобразуется к виду:

$$j_x = \frac{2e\nu}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{\Delta d_1}{\hbar} \int_{\mathbf{p}} \int_{-\infty}^t \exp(\nu(t' - t)) \left\{ g_1 \sin\left(\frac{p_x d_1}{\hbar} + \frac{eE_{1x} d_1}{\hbar}(t - t')\right) + \right. \\ \left. + g_3 \sin\left(\frac{p_x d_1}{\hbar} + \frac{eE_{1x} d_1}{\hbar}(t - t')\right) \cos\left(\frac{p_y d_2}{\hbar} + \frac{eE_{1y} d_2}{\hbar}(t - t')\right) \right\} \times \\ \times f_0(p_x, p_y) dt' dp_x dp_y. \quad (3.18)$$

С учетом обозначений $\tilde{g}_1 = \frac{\Delta g_1}{k_B T}$, $\tilde{g}_2 = \frac{\Delta g_2}{k_B T}$, $\tilde{g}_3 = \frac{\Delta g_3}{k_B T}$, после преобразований получаем:

$$\begin{aligned}
j_x = \frac{e v n_0}{C_0} \cdot \frac{\Delta d_1}{\hbar} \int_{\mathbf{p}=-\infty}^t dt' \exp(\nu(t' - t)) & \left\{ g_1 \sin(\Omega_x(t - t')) \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(x) \times \right. \\
& \times \exp(\tilde{g}_1 \cos(x) - \tilde{g}_2 \cos(y) - \tilde{g}_3 \cos(x) \cos(y)) dx dy + \\
& + g_3 \sin(\Omega_x(t - t')) \cos(\Omega_y(t - t')) \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(x) \cos(y) \times \\
& \times \exp(\tilde{g}_1 \cos(x) - \tilde{g}_2 \cos(y) - \tilde{g}_3 \cos(x) \cos(y)) dx dy \Big\}, \quad (3.20)
\end{aligned}$$

где $C_0 = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp(\tilde{g}_1 \cos(x) - \tilde{g}_2 \cos(y) - \tilde{g}_3 \cos(x) \cos(y)) dx dy$.

Постоянную составляющую плотности тока вдоль оси y вычисляем аналогично.

Окончательные выражения для постоянной составляющей плотности тока, текущей вдоль осей 2D ГСР, приобретают следующий вид:

$$j_x = j_1 \left\{ g_1 A \frac{\Omega_x / \nu}{1 + (\Omega_x / \nu)^2} + \frac{g_3}{2} B \left(\frac{(\Omega_x - \Omega_y) / \nu}{1 + [(\Omega_x - \Omega_y) / \nu]^2} + \frac{(\Omega_x + \Omega_y) / \nu}{1 + [(\Omega_x + \Omega_y) / \nu]^2} \right) \right\}, \quad (3.21)$$

и

$$j_y = j_2 \left\{ g_2 C \frac{\Omega_y / \nu}{1 + (\Omega_y / \nu)^2} + \frac{g_3}{2} D \left(\frac{(\Omega_y - \Omega_x) / \nu}{1 + [(\Omega_y - \Omega_x) / \nu]^2} + \frac{(\Omega_y + \Omega_x) / \nu}{1 + [(\Omega_y + \Omega_x) / \nu]^2} \right) \right\}, \quad (3.22)$$

где

$$j_1 = \frac{e n_0 \Delta d_1}{C_0 \hbar}, \quad j_2 = \frac{e n_0 \Delta d_2}{C_0 \hbar},$$

$$A = (2\pi)^2 \left\{ I_0(\tilde{g}_2) I_1(\tilde{g}_1) + \frac{\tilde{g}_3}{2} I_1(\tilde{g}_2) (I_0(\tilde{g}_1) + I_2(\tilde{g}_1)) \right\},$$

$$C = (2\pi)^2 \left\{ I_0(\tilde{g}_1) I_1(\tilde{g}_2) + \frac{\tilde{g}_3}{2} I_1(\tilde{g}_1) (I_0(\tilde{g}_2) + I_2(\tilde{g}_2)) \right\},$$

$$B = D = (2\pi)^2 \left\{ I_1(\tilde{g}_1) I_1(\tilde{g}_2) + \frac{\tilde{g}_3}{2} \left(\frac{1}{\tilde{g}_1} I_1(\tilde{g}_1) + I_2(\tilde{g}_1) \right) (I_0(\tilde{g}_2) + I_2(\tilde{g}_2)) \right\}.$$

При вычислении интегралов использовали следующие формулы и соотношения [130]:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp(z \cos x) dx = I_0(z), \quad \frac{d}{dx} I_0(z) = I_1(z), \quad \frac{d}{dx} I_1(z) = \frac{1}{2} (I_0(z) + I_2(z)), \quad (3.23)$$

где $I_n(z)$ – модифицированная функция Бесселя первого рода n -го порядка.

В случае, когда $g_3 = 0$, то есть, когда в выражениях для постоянной составляющей плотности тока отсутствует слагаемое, отвечающее за неаддитивность, получаем известную зависимость плотности тока от напряженности поля [9], характерную для полупроводниковых сверхрешеток: в слабых полях это линейная зависимость, в сильных полях плотность тока обратно пропорциональна напряженности поля.

На рисунке 3.12 приведены зависимости угла ψ от угла поворота вектора напряжённости постоянного электрического поля относительно оси x для разных значений величины E_1 , где для нахождения угла $\gamma = \arctg(j_y / j_x)$ использованы соотношения (3.21) и (3.22).

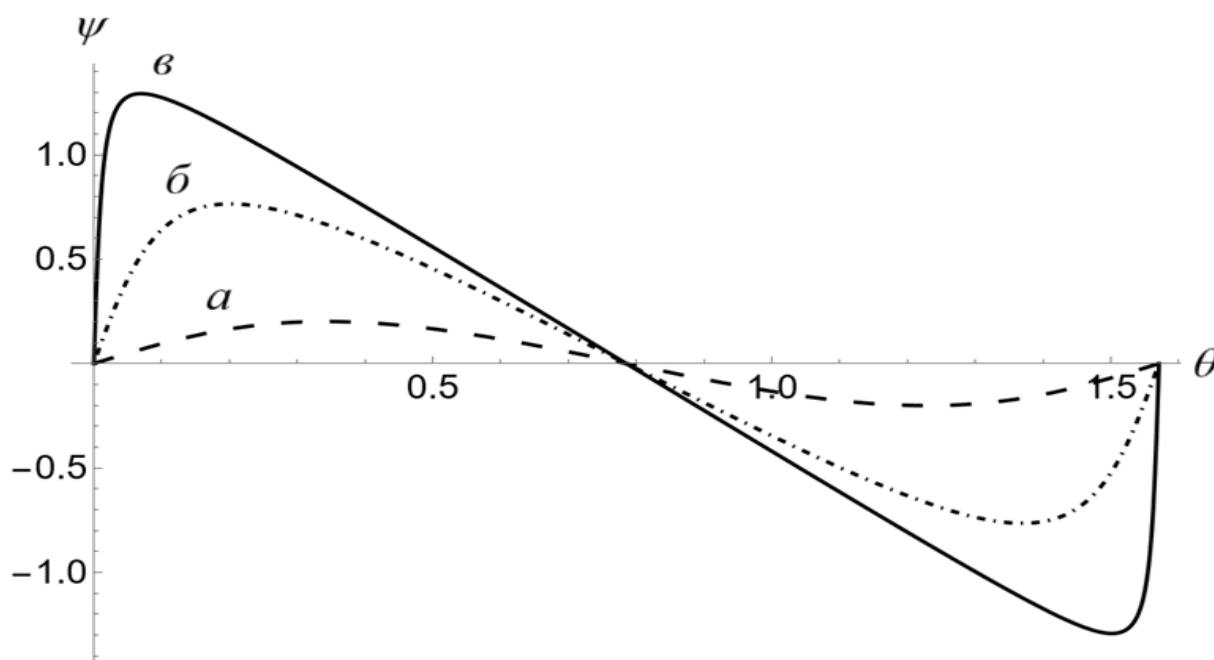


Рисунок 3.12 – Зависимость угла ψ от угла поворота вектора напряженности постоянного электрического поля при $g_3=0$: а) $\Omega/\nu = 1.0$; б) $\Omega/\nu = 3.0$; в) $\Omega/\nu = 10.0$

Если же коэффициент g_3 отличен от нуля, постоянная составляющая плотности тока, текущего вдоль оси x , зависит не только от полей, ориентированных вдоль этой оси, но и от полей, ориентированных перпендикулярно.

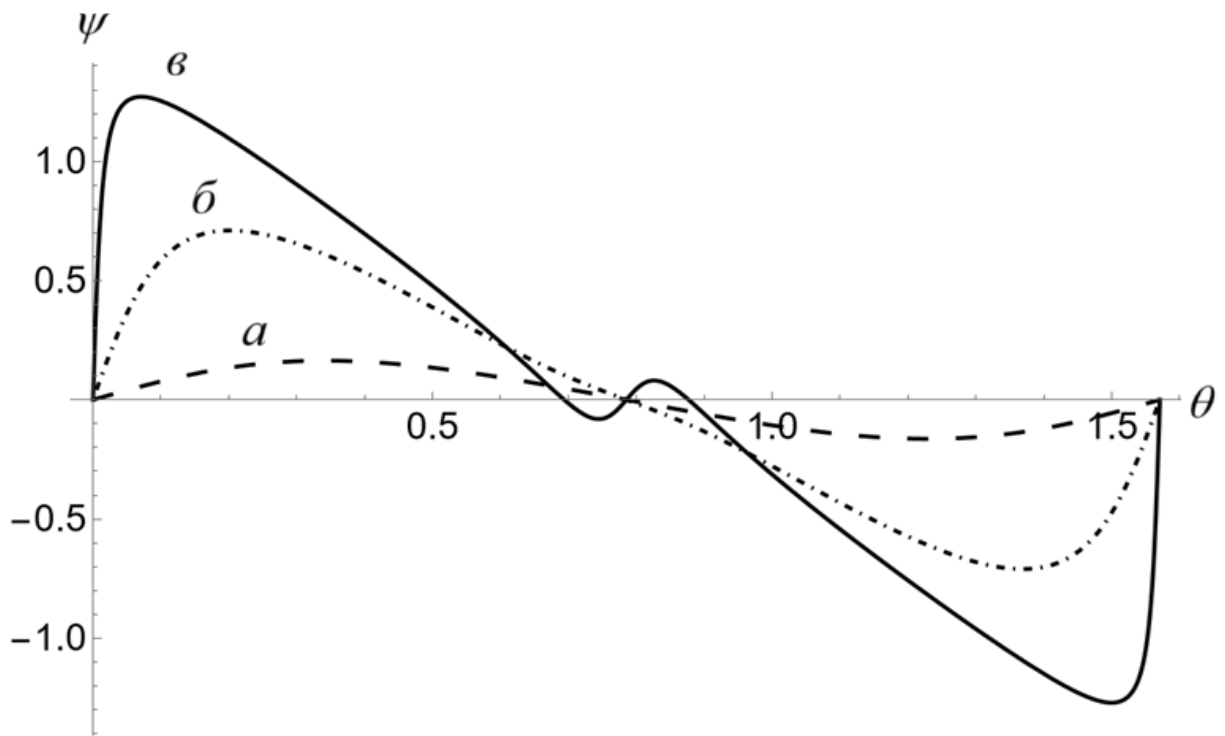


Рисунок 3.13 – Зависимость угла ψ от угла поворота вектора напряженности постоянного электрического поля при $g_3 \neq 0$: а) $\Omega/\nu = 1.0$; б) $\Omega/\nu = 3.0$; в) $\Omega/\nu = 10.0$

Таким образом, показано, что особенности энергетического спектра 2D ГСР, в частности, его неаддитивность, могут приводить к появлению дополнительных значений угла θ , при которых угол между направлениями векторов $\mathbf{E}_1$ и $\mathbf{j}$ равен нулю (рис. 3.13 в).

На рисунке 3.14 представлены зависимости углов θ и γ от поперечной составляющей постоянного электрического поля. На графиках четко видно, что эти углы совпадают при равенстве продольной и поперечной составляющей постоянного электрического поля, то есть, когда вектор напряженности постоянного электрического поля $\mathbf{E}_1$ направлен под углом $\theta = \pi/4$, а также когда вектор $\mathbf{E}_1$ сонаправлен с осью x сверхрешетки ($\theta = 0$). В сильных полях ($E_1 > 150 \text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$) появляются еще два значения угла θ , при которых, как уже было сказано ранее, направления вектора плотности тока и вектора напряжённости совпадают (рисунок 3.14 в, 3.14 г)

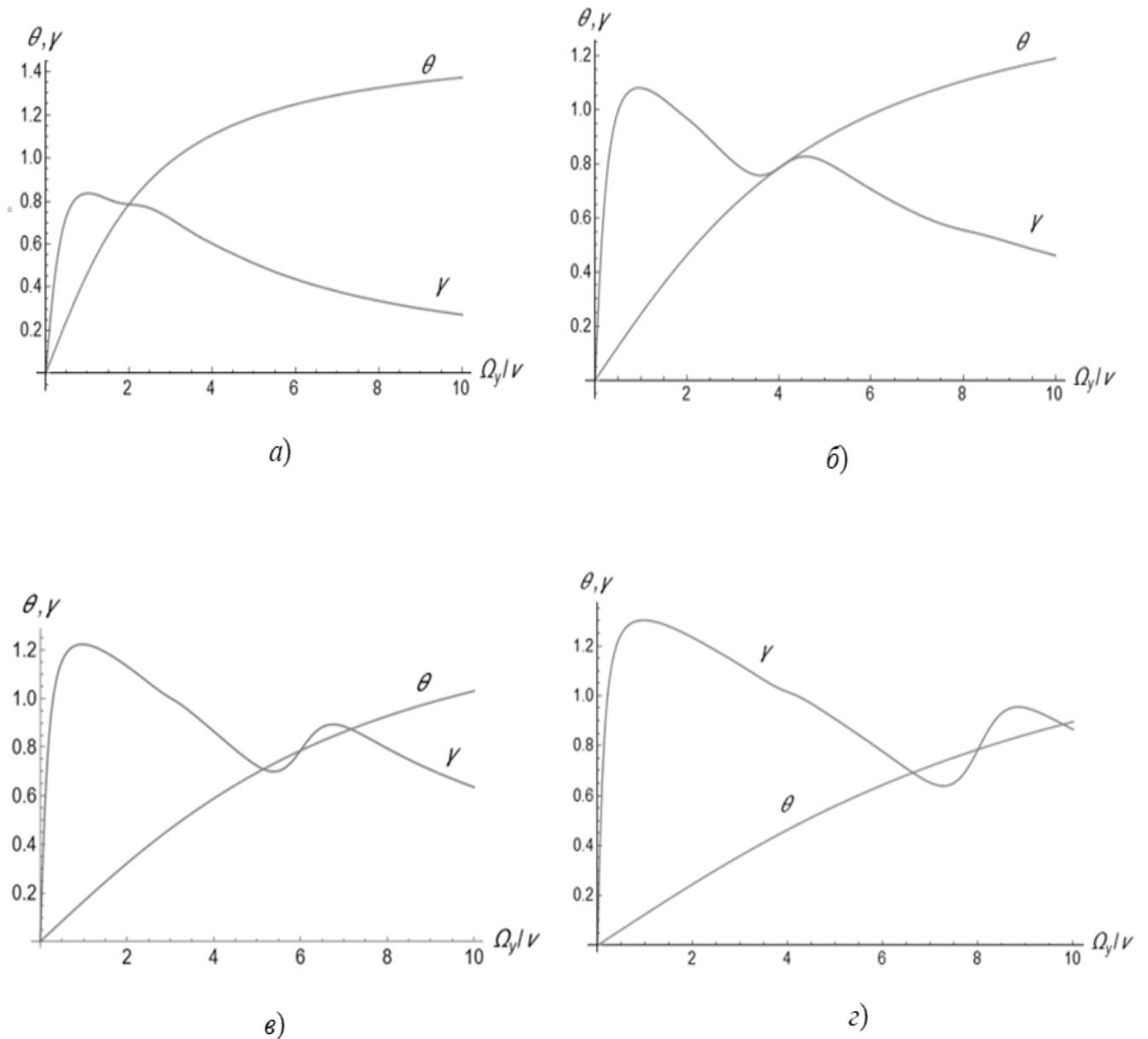


Рисунок 3.14 – Зависимость углов θ и γ от поперечной составляющей постоянного поля: а) $\Omega_x/\nu = 2.0$, б) $\Omega_x/\nu = 4.0$, в) $\Omega_x/\nu = 6.0$, г) $\Omega_x/\nu = 8.0$

Проанализируем, как меняется угол ψ , если на структуру дополнительно действует переменное электрическое поле, приложенное под определенным углом φ относительно оси x сверхрешетки. На рисунке 3.15 представлены зависимости угла ψ от угла поворота вектора $\mathbf{E}_1$ в отсутствие переменного электрического поля (рис. 3.15 а), и когда вектор поляризации приложенного переменного

электрического поля образует определенный угол φ с осью x сверхрешетки (рис. 3.15 б, в, г).

Если переменное поле приложено под углом $\varphi = \pi/4$, то направление вектора плотности тока $\mathbf{j}$ также совпадает с направлением вектора $\mathbf{E}_1$ при значениях угла $\theta = 0, \pi/4$ и $\pi/2$ (рис. 3.15 б). В противном случае точка пересечения графика с осью θ , в которой угол ψ принимает значение равное нулю, зависит от направления вектора поляризации переменного электрического поля (рис. 3.15 в, 3.15 г).

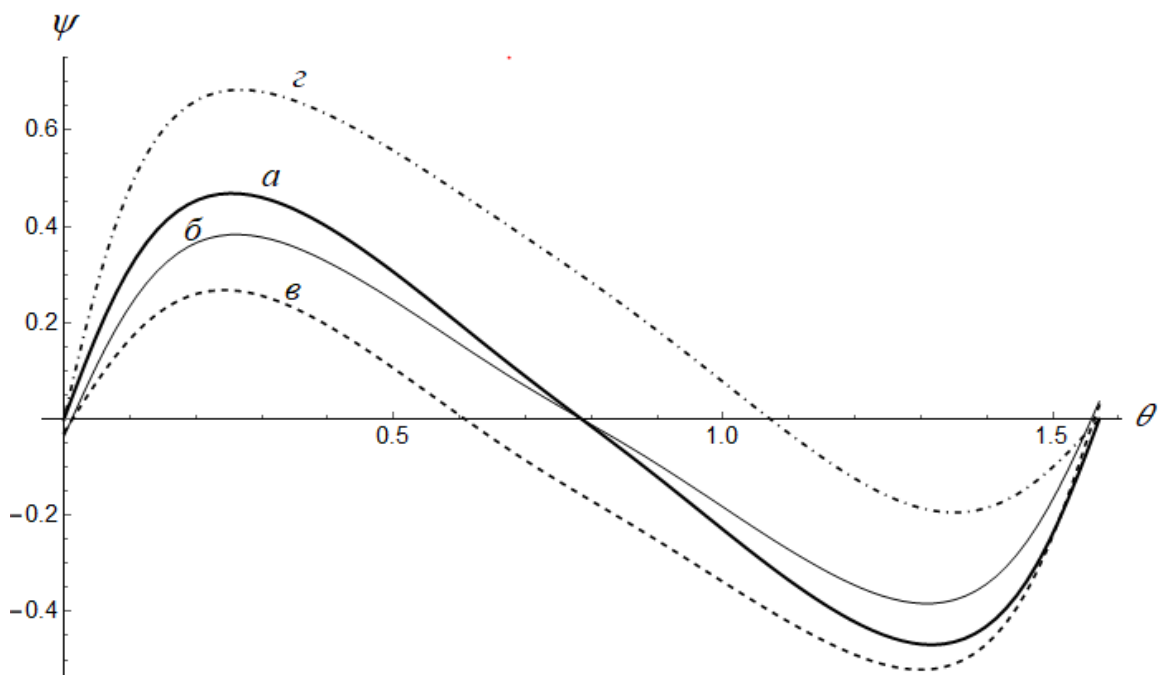


Рисунок 3.15 – Зависимость угла ψ от угла поворота вектора напряженности постоянного электрического поля при $\Omega/\nu = 2.0$: а) в отсутствии переменного поля; б) $\alpha = 2.0, \varphi = \pi/4$; в) $\alpha = 2.0, \varphi = \pi/3$; г) $\alpha = 2.0, \varphi = 0$

С возрастанием амплитуды переменного электрического поля зависимость угла ψ от угла поворота вектора $\mathbf{E}_1$ сохраняет симметрию только при значении угла $\varphi = \pi/4$ (рис. 3.16). Наблюдается увеличение числа точек по оси θ , в которых направления вектора напряженности постоянного электрического поля $\mathbf{E}_1$ и вектора плотности тока $\mathbf{j}$ совпадают (рис. 3.16 г).

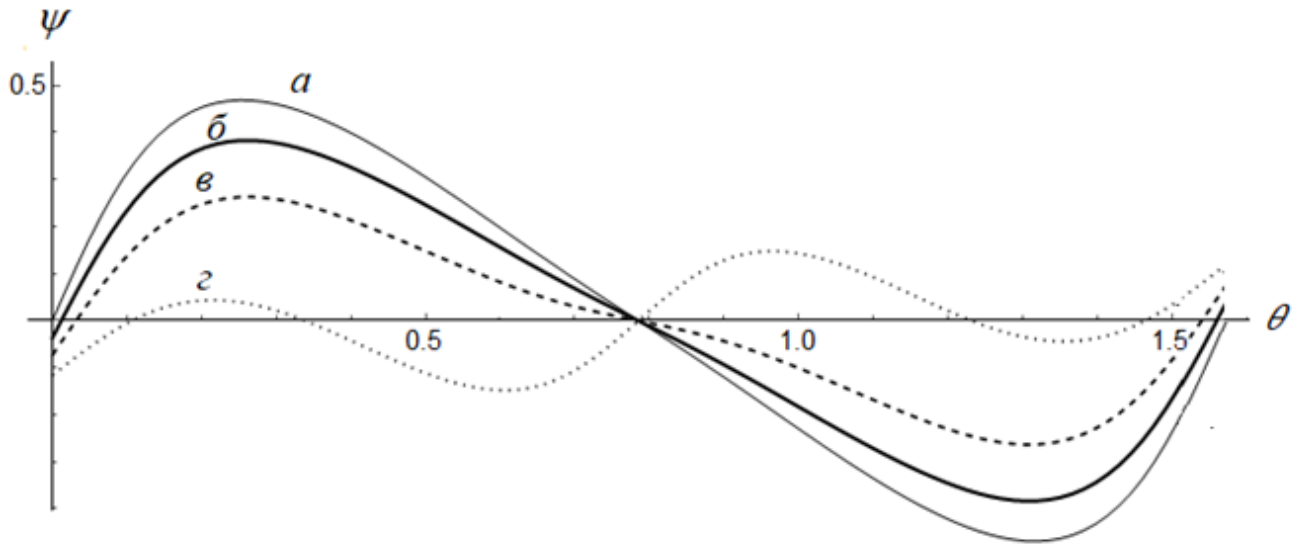


Рисунок 3.16 – Зависимость угла ψ от угла поворота вектора $\mathbf{E}_1$ при $\Omega/\nu = 2.0$:

- а) в отсутствии переменного поля; б) $\alpha = 2.0$, $\varphi = \pi/4$; в) $\alpha = 3.5$, $\varphi = \pi/4$;
г) $\alpha = 4.0$, $\varphi = \pi/4$

Таким образом, как показывает анализ, направление вектора плотности тока $\mathbf{j}$ в 2D ГСР зависит от параметров (амплитуды и направления) как постоянного, так и переменного электрических полей. Совпадение вектора плотности тока и вектора напряжённости постоянного электрического поля связано с симметрией структуры и с особенностями ее энергетического спектра.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 3

5. Неаддитивность энергетического спектра структур на основе графена, и, в частности, 2D ГСР, приводит к существенному отличию кинетических явлений в таких электронных системах от структур с аддитивным спектром. Использование квазиклассического подхода для нахождения плотности тока в условиях воздействия произвольно поляризованных статического и переменного электрических полей позволяет получить аналитическую зависимость плотности тока от параметров полей.
6. Проведено исследование зависимости плотности тока от параметров поперечно ориентированных электрических полей. Определены соотношения между параметрами приложенных полей, при которых наблюдается существенное различие между возможными значениями плотности тока, и, соответственно, управление проводимостью наиболее эффективно. Выявленные зависимости могут быть использованы для управления проводимостью в 2D ГСР и в устройствах детектирования электромагнитного излучения.
7. Показано, что векторы напряженности постоянного электрического поля и плотности тока в 2D ГСР совпадают только при ориентации поля вдоль характерных кристаллографических направлений. В сильных полях для квадратных 2D ГСР совпадение наблюдается также еще в двух направлениях, симметричных относительно биссекторного. Изучено поведение угла отклонения, когда 2D ГСР находится под совместным действием постоянного и переменного поля. Точка пересечения графика с осью θ , в которой угол ψ принимает значение равное нулю, зависит от направления вектора поляризации переменного электрического поля.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении сформулируем основные выводы из проделанной работы:

1. Получено аналитическое выражение с экспоненциальной точностью для вероятности ионизации примесей в однослойных УНТ полупроводникового типа, находящихся в постоянном электрическом поле. В случае воздействия переменного электрического поля получены аналитические выражения для вероятности ионизации примесей в предельных случаях. Выполнено численное исследование вероятности ионизации примесей в зависимости от параметров приложенных полей. Показано что, при увеличении радиуса УНТ мнимая часть действия уменьшается, при этом вероятность ионизации возрастает.
2. Численно проанализировано аналитическое выражение для постоянной составляющей тока в УНТ полупроводникового типа в условиях воздействия постоянного и переменного электрических полей, поляризованных вдоль оси УНТ с учетом ионизации примесных центров. Показано, что начало роста тока и длительность процесса установления насыщения ионизации определяются глубиной залегания примеси и ее концентрацией.
3. Показана принципиальная возможность определения параметров многослойных примесных УНТ полупроводникового типа: количество слоев, их радиусы, глубина залегания примесей и их концентрация на основе сравнения экспериментальных и теоретических зависимостей силы тока от характеристик внешних статического и переменного электрических полей.
4. Изучена зависимость плотности тока в 2D ГСР от параметров поперечно ориентированных электрических полей. Определены соотношения между параметрами приложенных полей, при которых наблюдается существенное (максимальное) различие между возможными значениями плотности тока, и, соответственно, управление проводимостью наиболее эффективно. Численно проанализировано аналитическое выражение для постоянной составляющей тока в 2D ГСР от напряженности поперечного постоянного электрического поля с

учетом ионизации примесей. Показано, что при увеличении напряженности поперечного постоянного электрического поля амплитуда продольной плотности тока уменьшается.

5. Изучена зависимость угла отклонения вектора плотности тока от направления вектора напряженности постоянного электрического поля, когда 2D ГСР находится под совместным действием постоянного и переменного электрических полей. В условиях воздействия постоянного электрического поля показано, что векторы напряженности постоянного электрического поля и плотности тока в двумерной квадратной графеновой сверхрешетке совпадают при ориентации поля вдоль осей сверхрешетки или вдоль биссекторного направления, а также в сильных полях еще в двух направлениях, симметричных относительно биссекторного. Если на структуру дополнительно действует переменное поле, приложенное вдоль высокосимметричных направлений, то векторы плотности тока и напряжённости постоянного электрического поля совпадают. При произвольной ориентации вектора поляризации переменного поля нулевое значение угла ψ зависит от параметров как постоянного, так и переменного электрических полей. Выявленные особенности ориентации векторов плотности тока и напряжённости приложенных электрических полей связаны с симметрией структуры и с нелинейностью и неаддитивностью ее энергетического спектра.

Установленные в исследовании закономерности содержат важные сведения о характерных электронных свойствах изучаемых полупроводниковых материалов в условиях воздействия внешних электрических полей, что может быть использовано в дальнейших теоретических и экспериментальных исследованиях, представляются ценными для теории твердого тела и физической электроники.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ И СОКРАЩЕНИЙ

УНТ – углеродные нанотрубки;

ОУНТ – однослойные (одностенные) углеродные нанотрубки;

ДУНТ – двуслойные (двустенные) углеродные нанотрубки;

МУНТ – многослойные (многостенные) углеродные нанотрубки;

ГСР – графеновая сверхрешетка;

2D ГСР – двумерная графеновая сверхрешетка;

e – заряд электрона;

m – индекс хиральности;

E_1 – модуль напряженности постоянного электрического поля;

E_0 – амплитуда переменного электрического поля;

c – скорость света в вакууме;

I – сила тока;

b – расстояние между соседними атомами углерода в графене;

ω – частота переменного электрического поля;

γ – интеграл перескока электронов между соседними узлами кристаллической решетки;

$\varepsilon(\mathbf{p})$ – закон дисперсии носителей заряда;

$\mathbf{p}$ – квазиимпульс электрона;

p_x – параллельная оси нанотрубки (ось x) компонента квазиимпульса;

W – вероятность ионизации;

S – классическое действие, набираемое электроном при подбарьерном движении;

V – энергия залегания примеси;

υ – глубина залегания примеси;

$\hbar$ – постоянная Планка;

ImS – мнимая часть действия;

t_0 – момент времени начала туннелирования;

R – радиус углеродной нанотрубки;

Δ – полуширина запрещённой зоны;

k_B – постоянная Больцмана;

j_x – плотность тока, текущего вдоль оси x ;

$f(\mathbf{p})$ – неравновесная функция распределения носителей;

$v_x(\mathbf{p})$ – скорость движения электронов вдоль оси нанотрубки;

v_F – скорость Ферми;

n_0 – концентрация электронов в зоне проводимости;

N – концентрация примесей в УНТ;

ν – частота релаксации;

ν_r – частота рекомбинации;

$J_n(x)$ – функция Бесселя 1-го рода n -го порядка;

$I_n(z)$ – модифицированная функция Бесселя первого рода n -го порядка.

$F(x, k)$ – эллиптический интеграл I рода;

$E(x, k)$ – эллиптический интеграл II рода;

$d_i = a_i + b_i$ – период графеновой сверхрешетки;

a_i и b_i – ширины ячеек бесщелевого и щелевого графена.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

1. Глазов, С. Ю. Особенности проводимости двумерной графеновой сверхрешетки в квазиклассически сильных внешних электрических полях с учетом ионизации примеси. / С. Ю. Глазов, И. А. Подгорная // Журнал радиоэлектроники. – 2025. – №. 1. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2025.1.8>.
2. Глазов, С. Ю. Определение параметров многослойных примесных углеродных нанотрубок полупроводникового типа на основе анализа проводимости в статическом и переменном электрических полях / С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова, И. А. Подгорная // Ученые записки физического факультета Московского университета. – 2024. – № 5. – С. 2450501.
3. Глазов, С. Ю. Управление проводимостью двумерной графеновой сверхрешетки поперечными электрическими полями / С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова, И. А. Подгорная // Известия РАН. Серия физическая. – 2023. – Т. 87, № 1. – С. 34-37. (версия на английском: Glazov, S. Yu. Controlling the Conductivity of a Two-Dimensional Graphene Superlattice by Means of Transverse Electric Fields / S.Yu. Glazov, N.E. Mescheryakova, I.A. Podgornaya // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2023. – Vol. 87, No. 1. – P. 26-29. – DOI 10.3103/s106287382270006x)
4. Глазов, С. Ю. Проводимость однослойных углеродных нанотрубок полупроводникового типа с учетом ионизации примесных центров / С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова, И. А. Подгорная // Известия РАН. Серия физическая. – 2022. – Т. 86, № 1. – С. 58-62. (версия на английском: Glazov, S. Y. Conductivity of Semiconductor Single-Walled Carbon Nanotubes with Allowance for the Ionization of Impurity Centers / S. Y. Glazov, I. A. Podgornaya, N. E. Mescheryakova // Bulletin of the Russian Academy of

Sciences: Physics. – 2022. – Vol. 86, No. 1. – P. 38-41. – DOI 10.3103/S1062873822010117)

5. Бабина, О. Ю. Ионизация примесей статическим и переменным электрическими полями в однослойных углеродных нанотрубках полупроводникового типа / О. Ю. Бабина, С. Ю. Глазов, И. А. Подгорная // Известия РАН. Серия физическая. – 2022. – Т. 86, № 1. – С. 53-57. (версия на английском: Babina, O. Y. Ionization of Impurities by Constant and Alternating Electric Fields in Semiconductor Single-Walled Carbon Nanotubes / O. Y. Babina, S. Y. Glazov, I. A. Podgornaya // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2022. – Vol. 86, No. 1. – P. 33-37. – DOI 10.3103/S1062873822010038. – EDN QZICKE.)
6. Глазов, С. Ю. Эффект Сасаки-Шибуйя в двумерной графеновой сверхрешетке / С. Ю. Глазов, И. А. Подгорная //: Сб. тезисов Международной математической конференции «Современные математические модели в энергетике», посвящённая памяти профессора, д.ф.-м.н. В. А. Тупчиева, Обнинск, 25–26 октября 2024 г. – С. 62-63.
7. Глазов, С. Ю. Проводимость многослойных примесных углеродных нанотрубок типа «zigzag» / С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова, И. А. Подгорная //: Сб. материалов XV Международной научно-технической конференции «Информатика, управляющие системы, математическое и компьютерное моделирование (ИУСМКМ-2024)» в рамках X Международного Научного форума Донецкой Народной Республики, Донецк, 29–30 мая 2024 года. – Донецк: Донецкий национальный технический университет, 2024. – С. 140-144.
8. Глазов, С. Ю. Проводимость многослойных примесных углеродных нанотрубок полупроводникового типа / С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова, И. А. Подгорная // Сб. материалов XXXV Всероссийской школы-семинара «Волновые явления: физика и применения» имени А. П. Сухорукова (Москва, 26-31 мая 2024 года), 2024. – С. 59-60.

9. Глазов, С. Ю. Особенности проводимости двумерной графеновой сверхрешетки в сильных внешних электрических полях / С. Ю. Глазов, И. А. Подгорная // Сб. материалов XVII Всероссийской молодежной научно-инновационной школы «Математика и математическое моделирование» (Саров, 5–7 апреля 2023 г.) – Саров: ООО «Интерконтакт», 2023. – С. 280-281.
10. Глазов, С. Ю. Управление проводимостью двумерной графеновой сверхрешетки поперечными электрическими полями / С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова, И. А. Подгорная // Сб. материалов XXXIII Всероссийской школы-семинара «Волновые явления: физика и применения» имени А. П. Сухорукова (Москва, 5-10 июня 2022 года), 2022. – С. 2-4.
11. Глазов, С. Ю. Проводимость двумерной сверхрешетки на основе графена в сильных внешних электрических полях с учетом ионизации примеси / С. Ю. Глазов, И. А. Подгорная // Сб.: Труды XXVI Международного симпозиума (Нижний Новгород, 14–17 марта 2022 г.), 2022. – Т 2. – С. 734-735.
12. Глазов, С. Ю. Влияние ионизации примесных центров на проводимость однослойных углеродных нанотрубок полупроводникового типа / С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова, И. А. Подгорная // Сб.: «Волны-2021»: материалы XXXII Всероссийской школы-семинара «Волновые явления: физика и применения» имени А. П. Сухорукова (Москва, 6-11 июня 2021 года), 2021. – С. 9-11.
13. Бабина, О. Ю. Вероятность ионизации примесей статическим и переменным электрическими полями в однослойных углеродных нанотрубках полупроводникового типа / О. Ю. Бабина, С. Ю. Глазов, И. А. Подгорная // Сб.: «Волны-2021»: материалы XXXII Всероссийской школы-семинара «Волновые явления: физика и применения» имени А.П. Сухорукова (Москва, 6-11 июня 2021 года), 2021. – С. 2-5.

ИСТОЧНИКИ

1. Electrical Conductivity of Individual Carbon Nanotubes / T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. Hiura [et al.] // *Nature*. – 1996. – Vol. 382. – P. 54–56.
2. Харрис, П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века / П. Харрис. – Москва: Техносфера. – 2003. – 336 с.
3. Елецкий, А. В. Транспортные свойства углеродных нанотрубок / А. В. Елецкий // *Успехи физических наук*. – 2009. – Т. 179, № 3. – С. 225–242. – Перевод изд.: Eletsii A. V. Transport properties of carbon nanotubes / A. V. Eletsii // *Physics-Uspekhi*. – 2009. – Vol. 52, № 3. – P. 209–224.
4. Electronic transport in two-dimensional graphene / S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang [et al.] // *Reviews of Modern Physics*. – 2011. – Vol. 83. – Is 2. – P. 407 – 470.
5. The electronic properties of graphene / A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres [et al.]. // *Reviews of Modern Physics*. – 2009. – Vol. 81. – P. 109 - 162.
6. Ando, T. Theory of electronic states and transport in carbon nanotubes / T. Ando // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 2005. – Vol. 74. – P. 777-817.
7. Завьялов, Д. В. Взаимное выпрямление переменных токов, индуцированных электромагнитными волнами в графене / Д. В. Завьялов, В. И. Конченков, С. В. Крючков // *Физика твердого тела*. – 2009. – Т. 51, № 10. – С. 2033-2035. – Перевод изд.: Zav'yalov, D. V. Mutual rectification of alternating currents induced by electromagnetic waves in grapheme / D. V. Zav'yalov, V. I. Konchenkov, S. V. Kryuchkov // *Physics of the Solid State*. – 2009. – Vol. 51, № 10. – P. 2157-2160.
8. Завьялов Д. В. Выпрямление поперечного тока в сверхрешетке на основе графена / Д. В. Завьялов, В. И. Конченков, С. В. Крючков // *Физика и техника полупроводников*. – 2012. – Т. 46, вып. 1. – С. 113-120. – Перевод изд.: Zavialov, D. V. Transverse current rectification in a graphene-based

- superlattice / D. V. Zavialov V. I. Konchenkov, S. V. Kruchkov // Semiconductors. – 2012. – Vol. 46, № 1. – P. 109–116.
9. Esaki, L. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors / L. Esaki, R. Tsu // IBM Journal of Research and Development. – 1970. – V. 14, №1. – P. 61–65.
 10. Иванченко, Г. С. Проводимость двухслойных углеродных нанотрубок в рамках модели Хаббарда / Г. С. Иванченко, Н. Г. Лебедев // Физика твердого тела. – 2007. – Т. 49, вып. 1. – С. 183-189. – Перевод изд.: Ivanchenko, G. S. Electrical conductivity of double-walled carbon nanotubes in the framework of the Hubbard model / G. S. Ivanchenko, N. G. Lebedev // Physics of the Solid State. – 2007. – Vol. 49, No. 1. – P. 189-196.
 11. Захарченко, А. А. Проводимость однослойных углеродных нанотрубок с металлическими свойствами в приближении свободных электронов / А. А. Захарченко, Б. К. Петров // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2009. – Т. 5, вып. 12. – С. 105-109.
 12. Иванченко, Г. С. Проводимость углеродных нанотрубок, обусловленная миграцией протонов по их поверхности / Г. С. Иванченко, Н. Г. Лебедев // Физика твердого тела. – 2009. – Т. 51, вып. 11. – С. 2281-2286. – Перевод изд.: Ivanchenko, G. S. Electrical conduction of carbon nanotubes due to the migration of protons over their surface / G. S. Ivanchenko, N. G. Lebedev // Physics of the Solid State. – 2009. – Vol. 51, No. 11. – P. 2421-2427.
 13. Булярский, С. В. Определение энергетических параметров электронных состояний в полупроводниковых углеродных нанотрубках / С. В. Булярский, Л. Н. Вострецова, М. С. Ермаков // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2012. – Т. 4, вып. 24. – С. 205-213.
 14. Гец, А. В. Проводимость одностенных углеродных нанотрубок / А. В. Гец, В. П. Крайнов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2016. – Т. 150, вып. 6. – С. 1246-1251. – Перевод изд.: Gets, A. V. Conductivity of single-walled carbon nanotubes / A. V. Gets, V. P. Krainov //

- Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2016. – Vol. 123, No. 6. – P. 1084-1089.
15. Колесников, Д. В. Влияние кривизны поверхности углеродных нанотрубок на их проводимость в рамках приближения Дирака / Д. В. Колесников, Г. С. Иванченко, Н. Г. Лебедев // Физика твердого тела. – 2016. – Т. 58, вып. 6. – С. 1168-1172. – Перевод изд.: Kolesnikov, D. V. Influence of the surface curvature of carbon nanotubes on their conductivity in the dirac approximation / D. V. Kolesnikov, G. S. Ivanchenko, N. G. Lebedev // Physics of the Solid State. – 2016. – Vol. 58, No. 6. – P. 1207-1212.
 16. Муравьев, В. В. Моделирование процессов переноса электронов в полупроводниковой структуре с использованием графена и нитрида бора / В. В. Муравьев, В. Н. Мищенко. – DOI 10.35596/1729-7648-2020-18-7-71-78 // Доклады Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники. – 2020. – Т. 18, вып. 7. – С. 71-78.
 17. Ratnikov, P. V. Two-dimensional graphene electronics: current status and prospects / P. V. Ratnikov, A. P. Silin. – DOI 10.3367/UFNr.2017.11.038231 // Uspekhi Fizicheskikh Nauk. – 2018. – Vol. 188, No. 12. – P. 1249-1287.
 18. Определение проводимости индивидуальных углеродных нанотрубок на основе анализа профиля изображений электростатической силовой микроскопии / Н. А. Давлеткильдеев, Д. В. Соколов, Е. Ю. Мосур [и др.] // Приборы и техника эксперимента. – 2019. – № 4. – С. 132-135. – DOI 10.1134/S0032816219040050.
 19. Электропроводность упорядоченных одностенных углеродных нанотрубок в постоянном электрическом поле / Н. В. Аунг, М. М. Тан, М. А. Пугачевский [и др.] // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. – 2020. – Т. 10, вып. 1. – С. 86–98.
 20. Electrical Conductivity of Multiwall Carbon Nanotube Bundles Contacting with Metal Electrodes by Nano Manipulators inside SEM / Q. Yang, L. Ma, S. Xiao

- [et al.]. – DOI 10.3390/nano11051290 // *Nanomaterials*. – 2021. – Vol. 11. – P. 1290.
21. Кинетические процессы в легированных полупроводниковых наноструктурах / А. Б. Дюбуа, А. Н. Конюхов, С. И. Кучерявый [и др.] // *Лазерные, плазменные исследования и технологии - ЛаПлаз-2018 : Сборник научных трудов IV Международной конференции, Москва, 30 января – 01 февраля 2018 года.* – Москва: Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ". – 2018. – С. 59-60.
 22. Charlier, J.-C. Tight-binding model for the electronic properties of simple hexagonal graphite / J.-C. Charlier, J.-P. Michenaud, X. Gonze, J.-P. Vigneron // *Phys. Rev. B*. – 1991. – V. 44. – P. 13237–13249.
 23. Грунин, А. Б. Особенности электропроводимости квантовых проволок, связанные с электростатической ионизацией D(–) -состояний / А. Б. Грунин, И. А. Кириллов. – DOI 10.21685/2072-3040-2016-4-10. // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки.* – 2016. – № 4 (40). – С. 114–126.
 24. Орлов, М. Л. Особенности транспорта электронов в двумерных квантовых сверхрешетках с неассоциативным законом дисперсии / М. Л. Орлов, Л. К. Орлов. – DOI 10.21883/FTR.2021.03.50602.9393 // *Физика и техника полупроводников.* – 2021. – Т. 55, вып. 3. – С. 241-250.
 25. Sattari-Esfahlan, S. M. Tunable negative differential resistance in planar graphene superlattice resonant tunneling diode / S. M. Sattari-Esfahlan, J. Fouladi-Oskuei, S. Shojaei // *Journal of Applied Physics*. – 2017. – Vol. 121(14). – P. 144506.
 26. Крючков, С. В., Кухарь Е. И. Влияние поперечного электрического поля на продольную вольт-амперную характеристику графеновой сверхрешетки / С.В. Крючков, Е. И. Кухарь // *Физика и техника полупроводников.* – 2016. – Т. 50, вып. 2. – С. 218-222.

27. Kryuchkov, S. V. Influence of the constant electric field on the mutual rectification of the electromagnetic waves in graphene superlattice / S. V. Kryuchkov, E. I. Kukhar' // *Physica E.* – 2012. – V. 46. – P. 25–29.
28. Kukhar', E. I. Dynamic conductivity of ac-dc-driven graphene superlattice / E. I. Kukhar', S. V. Kryuchkov, E. S. Ionkina // *Physica E.* – 2016. – V. 80. – P. 14–18.
29. Mikhailov, S.A. Nonlinear electromagnetic response of graphene: frequency multiplication and the self-consistent-field effects / S.A. Mikhailov, K. Ziegler // *Journal of Physics: Condensed Matter.* – 2008. – V. 20. – P. 384204.
30. Charlier, J.-C. Electronic and transport properties of nanotubes / J.-C. Charlier, X. Blase, S. Roche // *Reviews of Modern Physics.* – 2007. – Vol. 79(2). – P. 677–732.
31. Glazov, M. M. High frequency electric field induced nonlinear effects in graphene / M. M. Glazov, S. D. Ganichev // *Physics Reports.* – 2014. – V. 535. – P. 101–138.
32. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov [et al.] // *Nature.* - 2005. - V. 438. - P. 197-200.
33. Chen, S.-C. Electrostatic superlattices on scaled graphene lattices / S.-C. Chen, R. Kraft, R. Danneau, K. Richter. – DOI 10.1038/s42005-020-0335-1 // *Communications Physics.* – 2020. -Vol.3. – P. 71.
34. Guarochico-Moreira, V.H. Thermopower in hBN/graphene/hBN superlattices / V. H Guarochico-Moreira, C. R. Anderson, V. Fal'ko, I. V. Grigorieva. – DOI 10.1103/PhysRevB.108.115418 // *Phys. Rev. B.* – 2023. – V. 108. – P. 115418.
35. Lv, H. Functional nanoporous graphene superlattice / H. Lv, Y. Yao, M. Yuan, G. Chen. – DOI 10.1038/s41467-024-45503-9 // *Nat Commun.* – 2024. – V.15. – P.1295.
36. A Tunable Graphene Superlattice with Deformable Periodical Nano-Gating / B. Wei, H. Ying, J. Chen [et al.]. – DOI 10.3390/nano14121019 // *Nanomaterials.* – 2024. – V. 14(12). – P.1019.

37. Белоненко, М. Б. Абсолютная отрицательная проводимость в примесном графене в присутствии магнитного поля / Н. Г. Лебедев, Н. Н. Яньюшкина, М. М. Шакирзянов // Физика и техника полупроводников. – 2011. – Т. 45, вып. 5. – С. 639–643. Перевод изд.: Belonenko, M. B. Absolute negative conductivity of graphene with impurities in magnetic field / M. B. Belonenko, N. G. Lebedev, N. N. Yanyushkina, M. M. Shakirzyanov // Semiconductors. – 2011. – V. 45, № 5. – P. 628–632.
38. Eminov, P. A. Ionization induced by strong electromagnetic field in low dimensional systems bound by short range forces / P. A. Eminov // Physica B: Condensed Matter. – 2013. – Vol. 426. – P. 158-164.
39. Бадикова, П. В. Проводимость и высшие гармоники плотности тока щелевой модификации графена в присутствии постоянного и переменного электрических полей / П. В. Бадикова, С. Ю. Глазов // Известия РАН. Сер. физ. – 2015. – Т. 79, вып. 12. – С. 1650–1654. – Перевод изд.: Badicova, P. V. Conductivity and higher current density harmonics of a gap graphene modification in the presence of constant and alternating electric fields / P. V. Badicova, S. Yu. Glazov // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. – 2015. – V. 79, № 12. – P. 1443–1447. – URL: <https://doi.org/10.3103/S1062873815120060>.
40. Глазов, С. Ю. Плазменные волны в двумерной сверхрешетке с неаддитивным энергетическим спектром в присутствии сильного статического электрического поля / С. Ю. Глазов, А. А. Ковалев, С. В. Крючков. – DOI 10.31857/S036767652002012X // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2020. – Т. 84, вып. 2. – С. 254-257.
41. Glazov, S. Solitary waves in a two-dimensional graphene-based superlattice / S. Glazov, G. Syrodoev. – DOI 10.1088/1742-6596/1740/1/012062 // Journal of Physics: Conference Series : 4, Moscow, 12–16 октября 2020 года. – Moscow. – 2021. – P. 012062.
42. Распространение электромагнитного излучения в графеновых структурах / К. В. Бухенский, А. Б. Дюбуа, А. Н. Конюхов [и др.] // Ученые записки

- физического факультета Московского университета. – 2023. – № 1. – С. 2310301.
43. Glazov, S. Y. Generating high harmonics in a superlattice based on graphene in the presence of static and alternating electric fields / S. Y. Glazov, D. V. Martynov, N. E. Mescheryakova. – DOI 10.3103/S1062873812120143 // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2012. – Vol. 76, No. 12. – P. 1319-1322.
 44. Geim, A. K. The rise of graphene / A. K. Geim, K. S. Novoselov // Nat. Mater. – 2007. – Vol. 6. – № 3. – P. 183–191.
 45. Aoki, H. Physics of Graphene / H. Aoki, M.S. Dresselhaus. – Springer, 2014. – 356 p.
 46. Wong, H. -S. P. Carbon Nanotube and Graphene Device Physics / H. -S. P. Wong, D. Akinwande – Cambridge : Cambridge University Press, 2011. – 264 p.
 47. Saito, R. Physical properties of carbon nanotubes / R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus. – Imperial, London, 1998.
 48. Graphene based heterostructures / C. Dean, [et al.]. – DOI 10.1016/j.ssc.2012.04.021 // Solid State Communications. – 2012. – V. 152(15). – P.1275-1282.
 49. Dresselhaus, M. S. Science of fullerenes and carbon nanotubes / M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. C. Eklund. – San Diego: Academic Press, 1996. - 966 p.
 50. Wallace, P. R. The Band Theory of Graphite / P. R. Wallace // Physical Review. – 1947. – Vol. 71, № 9. – P. 622–634.
 51. Novoselov, K. S Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, Da Jiang. – DOI 10.1126/science.1102896 // Science. – 2004. – V. 306. – P. 666-669.
 52. Park, S. Chemical methods for the production of graphenes / S. Park, R. S. Ruoff // Nat. Nanotechnol. – 2009. – Vol. 4. — P. 217–224.
 53. Wintterlin, M.-L. Bocquet. Graphene on metal surfaces / M.-L. Bocquet Wintterlin, // Surf. Sci. — 2009. –Vol. 603. – P. 1841–1852.

54. Direct growth of few layer graphene on hexagonal boron nitride by chemical vapor deposition / D. Xuli, G. Ding, X. Xie [et al.] // Carbon. — 2011. — Vol. 49. — P. 2522–2525.
55. Avouris, P. Graphene: Electronic and photonic properties and devices / P. Avouris // Nano Letters. — 2010. — Vol. 10(11). — P. 4285–4294.
56. Rozhkov, A. V. Electronic properties of mesoscopic graphene structures: Charge confinement and control of spin and charge transport / A. V. Rozhkov, G. Giavaras, Y. P. Bliokh [et al.] // Physics Reports. - 2011. — Vol. 503. — Is. 2 – 3. — P. 77-114.
57. Transport through graphene quantum dots / J. Güttinger, F. Molitor, C. Stampfer [et al.] // Reports Prog. Phys. — 2012. — Т. 75. — № 12. — P. 126502.
58. Морозов, С. В. Электронный транспорт в графене / С. В. Морозов, К. С. Новоселов, А. К. Гейм // Успехи физических наук. — 2008. — Т. 178. — С. 776-780.
59. Завьялов, Д. В. Влияние магнитного поля на эффект взаимного выпрямления переменных токов, индуцированных электромагнитными волнами в графене / Д. В. Завьялов, В. И. Конченков, С. В. Крючков // Физика твердого тела. — 2010. — Т. 52, вып. 4. — С. 746–750. — Перевод изд.: Zav'yalov, D. V. Influence of a magnetic field on the mutual rectification of alternating currents induced by electromagnetic waves in graphene / D. V. Zav'yalov, V. I. Konchenkov, S. V. Kryuchkov // Physics of the Solid State. — 2010. — V. 52. — P. 800–804.
60. Сорокин, П. Б. Полупроводниковые наноструктуры на основе графена / П. Б. Сорокин, Л. А. Чернозатонский // Успехи физических наук. — 2013. — Т. 183, вып. 2. — С. 113-132. — Перевод изд.: Sorokin, P. B. Graphene-based semiconductor nanostructures / P. B. Sorokin, L. A. Chernozatonskii // Physics-Uspekhi. — 2013. — Vol. 56, No. 2. — P. 105-122.
61. Chalin, D. V. Band structure and inter-tube optical transitions in double-walled carbon nanotubes / D. V. Chalin, S. B Rochal // Physical Review. — 2020. — B 102, 115426.

62. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations / G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks [et al.] // *Physical Review B*. – 2007. – V. 76. – P. 073103(4).
63. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene / S. Y. Zhou, G. -H. Gweon, A. V. Fedorov [et al.] / - DOI 10.1038/nmat2003 // *Nature Materials*. – 2007. – V. 6. – P. 770-775.
64. Iijima, S. Helical microtubules of graphitic carbon / S. Iijima // *Nature*. – 1991. – Vol. 354. – P. 56.
65. Dresselhaus, M. Down the straight and narrow / M. Dresselhaus. – DOI 10.1038/358195a0 // *Nature*. – 1992. – Vol. 358. – P. 195–196.
66. Елецкий, А. В. Углеродные нанотрубки / А. В. Елецкий // *Успехи физических наук*. – 1997. – Т. 167, вып. 9. – С. 945–972. – Перевод изд.: Eletskiĭ, A. V. Carbon nanotubes / A. V. Eletskiĭ. – DOI 10.1070/PU1997v040n09ABEH000282 // *Physics-Uspekhi*. – 1997. – Vol. 40, No. 9. – P. 899-924.
67. Максименко, С. А. Электродинамика углеродных нанотрубок / С. А. Максименко, Г. Я. Слепян // *Радиотехника и электроника*. – 2002. – Т. 47, вып. 3. – С. 261-280. – Перевод изд.: Maksimenko, S. A. Electrodynamics of carbon nanotubes / S. A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan // *Journal of Communications Technology and Electronics*. – 2002. – Vol. 47, No. 3. – P. 235-252.
68. Суздалев, И. П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И. П. Суздалев. – Москва: КомКнига. – 2006. – 592 с.
69. Елецкий, А. В. Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства / А. В. Елецкий // *Успехи физических наук*. – 2001. – Т. 172, вып. 4. – С. 401.
70. Recent Progress in Carbon-Based Buffer Layers for Polymer Solar Cells / T.P. Nguyen, D.L. Nguyen, V.-H. Nguyen, T.-H. Le. – DOI 10.3390/polym11111858 // *Polymers*. – 2019. – Vol. 11(11). – P. 1858.

- 71.Сверхрешетки, состоящие из «линий» адсорбированных пар атомов водорода на графене / Л. А. Чернозатонский, П. Б. Сорокин, Б. Э. Белова [и др.] // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2007. – Т. 85, вып. 1-2. – С. 84-89. – Перевод изд.: Superlattices consisting of "lines" of adsorbed hydrogen atom pairs on graphene / L. A. Chernozatonskiĭ, P. B. Sorokin, E. É. Belova [et al.]. – DOI 10.1134/S002136400701016X // JETP Letters. – 2007. – Vol. 85, No. 1. – P. 77-81.
- 72.Ратников, П. В. Сверхрешетка на основе графена на полосчатой подложке / П. В Ратников // Письма в ЖЭТФ. – 2009. – Т. 90, вып. 6. – С. 515-520.
- 73.Bolmatov, D. Graphene-based modulation-doped superlattice structures / D. Bolmatov, C. -Y. Mou // JETP. – 2011. – Vol. 112. – P. 102–107.
- 74.Burset, P. Transport in superlattices on single layer graphene / P. Burset, A. L. Yeyati, L. Brey, H. A. Fertig // Physical Review B. – 2011. – Vol. 83. – P. 195434.
- 75.Wang, L.-G. Robust zero-averaged wave-number gap inside gapped graphene superlattices / L.-G. Wang, X. Chen // Journal of Applied Physics. – 2011. – Vol. 109. – P. 033710(8).
- 76.Король, А. Н. Энергетический спектр графеновой сверхрешетки Фибоначчи / А. Н. Король, В. Н. Исai // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55, вып. 12. – С. 2468–2473. – Перевод изд.: Korol, A. N. Energy spectrum of the graphene-based Fibonacci superlattice / A. N. Korol, V. N. Isai // Physics of the Solid State. – 2013. – V. 55, № 12. – P. 2596–2601.
- 77.Detecting topological currents in graphene superlattices / R. V. Gorbachev, J. C. W. Song, G. L. Yu [et al.]. // Science. – 2014. – Vol. 346. – P. 448–451.
- 78.Two-dimensional graphene superlattice made with partial hydrogenation / M. Yang, A. Nurbawono, C. Zhang [et al.]. – DOI 10.1063/1.3425664 // Applied Physics Letters. – 2010. – Vol. 96. – P.193115.
- 79.Ратников, П. В. Сверхрешетка нового типа на основе бесщелевого графена с чередующейся скоростью Ферми / П. В. Ратников, А. П. Силин // Письма в

Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2014. – Т. 100, вып. 5-6. – С. 349-356.

- 80.Крючков, С. В. Влияние бихроматического электрического поля на вольтамперную характеристику сверхрешетки на основе графена / С. В. Крючков, Е. И. Кухарь // Физика и техника полупроводников. – 2012. – Т. 46, вып. 5. – С. 684-690. – Перевод изд.: Kryuchkov, S. V. Effect of a bichromatic electric field on the current-voltage characteristic of a graphene-based superlattice / S. V. Kryuchkov, E. I. Kuhar. – DOI 10.1134/S1063782612050144 // Semiconductors. – 2012. – Vol. 46, No. 5. – P. 666-672.
- 81.Глазов, С. Ю. Генерация высших гармоник в сверхрешетке на основе графена в присутствии постоянного электрического поля / С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2012. – Т. 3, вып. 1. – С. 64–70.
- 82.Крючков, С. В. Взаимное выпрямление двух синусоидальных волн с ортогональными плоскостями поляризации в сверхрешетке на основе графена / С. В. Крючков, Е. И. Кухарь, В. А. Яковенко // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2010. – Т. 74, вып. 12. – С. 1749-1751. – Перевод изд.: Kryuchkov, S. V. Effect of the mutual rectification of two electromagnetic waves with perpendicular polarization planes in a superlattice based on graphene / S. V. Kryuchkov, E. I. Kukhar', V. A. Yakovenko. – DOI 10.3103/S1062873810120129// Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2010. – Vol. 74, No. 12. – P. 1679-1681.
- 83.Ratnikov, P. V. Novel type of superlattices based on gapless graphene with the alternating Fermi velocity / P. V. Ratnikov, A. P. Silin. – DOI: 10.1134/S0021364014170123 // JETP Letters. – 2014.-V. 100. – P. 311–318..
- 84.Band structure engineering of 2D materials using patterned dielectric superlattices/ C. Forsythe, X. Zhou, K. Watanabe [et al.] – DOI 10.1038/s41565-018-0138-7 // Nature Nanotech. – 2018.-V. 13. – P. 566-571.

85. Electronic transport in a two-dimensional superlattice engineered via self-assembled nanostructure / Y. Zhang, Y. Kim, M.J. Gilbert, N. Mason. – DOI 10.1038/s41699-018-0076-0 // npj 2D Materials and Applications. – 2018. V. 2. – Art. № 31.
86. Kryuchkov, S. V. Two-dimensional graphene superlattice: Energy spectrum and current-Voltage characteristics / S. V. Kryuchkov, C. A. Popov. – DOI 10.21272/jnep.9(2).02013 // Journal of Nano- and Electronic Physics. – 2017. – Vol. 9, No. 2. – P. 2013.
87. Kryuchkov, S. V. Transport properties of the two-dimensional graphene superlattice effect of the constant and alternating electric field / S. V. Kryuchkov, C. A. Popov. – DOI 10.1109/NAP.2017.8190221. // Proceedings of the 2017 IEEE 7th International Conference on Nanomaterials: Applications and Properties, NAP 2017. – 2017. – P. 03CBN09.
88. Бадикова, П. В. Особенности ионизации примесей в квазиклассически сильных постоянном и переменном электрических полях в двумерной сверхрешетке на основе графена / П. В. Бадикова, С. Ю. Глазов, Г. А. Сыродоев. – DOI 10.21883/FTR.2019.07.47869.9057.4 // Физика и техника полупроводников. – 2019. – Т. 53, вып. 7. – С. 927-934. – Перевод изд.: Badikova, P. V. Differences in the Impurity Ionization in Quasi-Classically Strong Constant and Alternating Electric Fields in a Two-Dimensional Superlattice Based on Graphene / P. V. Badikova, S. Y. Glazov, G. A. Syrodoev. – DOI 10.1134/S1063782619070042 // Semiconductors. – 2019. – Vol. 53, No. 7. – P. 911-918.
89. Глазов, С. Ю. Особенности распространения уединенной электромагнитной волны в двумерной сверхрешетке на основе графена / С. Ю. Глазов, Г. А. Сыродоев. – DOI 10.31857/S0367676520010135 // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2020. – Т. 84, вып. 1. – С. 128-131. – Перевод изд.: Glazov, S. Y. Features of the Propagation of a Solitary Electromagnetic Wave in a Two-Dimensional Graphene-Based Superlattice / S.

- Y. Glazov, G. A. Syrodov. – DOI 10.3103/S1062873820010128 // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2020. – Vol. 84, No. 1. – P. 98-101.
90. Бадикова, П. В. Высшие гармоники плотности тока в двумерной сверхрешетке на основе графена в условиях воздействия внешних электрических полей с учетом ионизации примеси / П. В. Бадикова, С. Ю. Глазов, Г. А. Сыродоев. – DOI 10.31857/S0367676520010068 // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2020. – Т. 84, вып. 1. – С. 38-42. – Перевод изд.: Badikova, P. V. Higher Harmonics of Current Density in a Two-Dimensional Graphene-Based Superlattice under the Effect of External Electric Fields, Allowing for the Ionization of Impurities / P. V. Badikova, S. Y. Glazov, G. A. Syrodov. – DOI 10.3103/S1062873820010062 // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2020. – Vol. 84, No. 1. – P. 30-34.
91. Бонч-Бруевич, В.Л. Физика полупроводников / В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. – Москва : Наука. 1977. – 678 с.
92. Базь, А.И. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике / А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов. – Москва : Наука. – 1989. – 544 с.
93. Карнаков, Б.М. Современное развитие теории нелинейной ионизации атомов и ионов / Б.М. Карнаков, В.Д. Мур, С.В. Попруженко, В.С. Попов // Успехи физических наук. – 2015. – Т.185, вып. 1. – С. 3–34.
94. Келдыш, Л. В. Ионизация в поле сильной электромагнитной волны / Л. В. Келдыш // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1964. – Т. 47, вып. 5. – С. 1945–1957.
95. Попов, В. С. Квазиклассическое приближение для нестационарных задач / В. С Попов, В. П. Кузнецов, А. М. Переломов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1967. – № 53. – С. 331.
96. Попов, В. С. Ионизация атомов в электрическом и магнитном полях и метод мнимого времени / В. С Попов, Б. М Карнаков, В. Д. Мур // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1998. – Т. 113., вып. 5. – С. 1579-1605.

97. Котова, Л.П. Квазиклассическое приближение в задачах ионизации / Л.П. Котова, А.М. Переломов, В.С. Попов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1968. – Т. 54, вып. 4. – С. 1151-1161.
98. Крючков, С. В. Эффект Франца-Келдыша в узкозонных полупроводниках в сильном переменном поле / С. В Крючков, Г. А Сыродоев // Известия вузов. Радиофизика. – 1990. – Т. 33, вып. 6. – С. 762-764.
99. Крючков, С. В. Ионизация примесных центров в узкозонных полупроводниках переменным электрическим полем / С. В Крючков, Г. А Сыродоев // Физика и техника полупроводников. – 1988. – Т. 22, вып. 9. – С. 1695-1697.
100. Бадикова, П. В. Ионизация примесей постоянным и переменным электрическими полями в щелевой модификации графена / П. В. Бадикова, С. Ю. Глазов // Известия РАН. Сер. физ. – 2018. – Т. 82, вып. 11. – С.1536–1539. – Перевод изд.: Badicova, P. V. Ionization of impurities by constant and alternating electric fields in a gap graphene modification / P. V. Badicova, S. Yu. Glazov. – DOI 10.3103/S1062873818110059 // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. – 2018. – V. 82, № 11. – P. 1399–1402.
101. Глазов, С. Ю. Ионизация примесей постоянным электрическим полем в графене с широкой запрещенной зоной / С. Ю. Глазов, П. В. Бадикова // Журнал нано- и электронной физики. – 2018. – Т. 10, вып. 2. – С. 02020(5). – Перевод изд.: Glazov, S. Yu. Ionization of impurities by a constant electric field in graphene with a wide forbidden band / S. Yu. Glazov, P. V. Badikova. – DOI 10.21272 / jnep.10(2).02020 // Journal of Nano- and Electronic Physics. – 2018. – V. 10, № 2. – P. 02020(5).
102. Chatterjee, S. Band gap opening in graphene: a short theoretical study / S. Chatterjee, G. C. Rout // Int Nano Lett. – 2017. – V.7. – P.81-89.
103. Band Gap Opening of Graphene by Forming Heterojunctions with the 2D Carbonitrides Nitrogenated Holey Graphene, g-C₃N₄, and g-CN: Electric Field Effect / X. Cao, J. Shi, M. Zhang [et al.] // The Journal of Physical Chemistry C. – 2016. - Vol. 120, № 20. – P. 11299-11305.

104. Nandee, R. Band gap formation of 2D material in graphene: Future prospect and challenges / R. Nandee, M.A. Chowdhury, A. Shahid [et al.] // *Results in Engineering*. – 2022. – V. 15. – P. 100474.
105. Chatterjee, S. Opening of Bandgap in Graphene: A Complete Overview to Unexplored Aspects / S. Chatterjee // *Advances in Materials Science Research*. – 2021. – Vol. 45. – Chapter 4.
106. Белоненко, М. Б. Влияние переменного электрического поля на проводимость однослойных углеродных нанотрубок полупроводникового типа / М. Б. Белоненко, С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова // *Физика и техника полупроводников*. – 2010. – Т. 44, № 9. – С. 1248-1253. – Перевод изд.: Belonenko, M. B. Electromagnetic solitons in bundles of zigzag carbon nanotubes / M. B. Belonenko, E. V. Demushkina, N. G. Lebedev // *Physics of the Solid State*. – 2008. – V. 50, № 2. – P. 383–389.
107. Островский, П. М. Проводимость углеродных нанотрубок в продольном магнитном поле / П. М. Островский // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2000. – Т. 72, вып. 8. – P. 600–604. – Перевод изд.: Ostrovsky, P. M. Conductivity of carbon nanotubes in a longitudinal magnetic field / P. M. Ostrovsky // *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. – 2000. – V. 72, № 8. – P. 419–421.
108. Maksimenko, S. A. Negative Differential Conductivity in Carbon Nanotubes / S. A. Maksimenko, G. Ya. Slepyan // *Physical Review Letters*. – 2000. – V. 84, № 2. – P. 362–365.
109. Басс, Ф. Г. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками / Ф. Г. Басс, А. А. Булгаков, А. П. Тетервов. – Москва: Наука. – 1989. – 288 с.
110. Кибис, О. В. Углеродные нанотрубки как терагерцовые излучатели нового типа / О. В. Кибис, М. Е. Портной // *Письма в Журнал технической физики*. – 2005. – Т. 31, вып. 15. – С. 85–89. – Перевод изд.: Kibis, O. V. Carbon nanotubes: A new type of emitter in the terahertz range / O. V. Kibis, M. E. Portnoi // *Technical Physics Letters*. – 2005. – V. 31, № 8. – P. 671–672.

111. Силин, А. П. Полупроводниковые сверхрешетки / А. П. Силин // Успехи физических наук. – 1985. – Т. 147, вып. 3. – С. 485–521. – Перевод изд.: Silin, A. P. Semiconductor superlattices / A. P. Silin // Soviet Physics Uspekhi. – 1985. – V. 28. – P. 972–993.
112. Глазов, С. Ю. Управление проводимостью двумерной графеновой сверхрешетки поперечными электрическими полями / С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова, И. А. Подгорная. – DOI 10.31857/S0367676522700065// Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2023. – Т. 87, вып. 1. – С. 34-37.
113. Кухарь, Е. И. Влияние постоянного электрического поля на высокочастотную проводимость графеновой сверхрешетки / Е. И. Кухарь, С. В. Крючков, Е. С. Ионкина. - DOI 10.7868/S036767651701015X // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2017. – Т. 81, вып. 1. – С. 55-58. – Перевод изд.: Kukhar', E. I. Effect of a dc electric field on the high-frequency conductivity of a graphene superlattice / E. I. Kukhar', S. V. Kryuchkov, E. S. Ionkina. - DOI 10.3103/S1062873817010154// Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2017. – Vol. 81, No. 1. – P. 47-50.
114. Глазов, С. Ю. Управление проводимостью графена поперечными статическим и переменным электрическими полями / С. Ю. Глазов // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2019. – Т. 83, вып. 1. – С. 19-23.
115. Романов, Ю. А. Нелинейная проводимость и вольт-амперные характеристики двумерных полупроводниковых сверхрешеток / Ю. А. Романов, Е. В. Демидов // Физика и техника полупроводников. – 1997. – Т. 31, вып. 3. – С. 308-310.
116. Chuburin, Y. P. Electron scattering by impurities in a carbon nanotube near boundary points of subbands / Y. P Chuburin // Physics Letters A. – 2016. – Vol. 380(1-2). – P. 242–247.
117. Морозова, Л. Е. Рассеяние электрона на примеси в углеродной нанотрубке / Л. Е. Морозова. – DOI 10.20537/vm160210 // Вестник

- Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. – 2016. – Т. 26, вып. 2. – С. 239-244.
118. Синтез и исследование многостенных углеродных нанотрубок, допированных азотом / А. Н. Субоч, Л. С. Кибис, О. А. Стонкус [и др.] // Химия в интересах устойчивого развития. – 2017. – Т. 25, вып. 1. – С. 85-91. – DOI 10.15372/KhUR20170112.
 119. Конобеева, Н. Н. Влияние многоуровневой примеси на туннельный и баллистический ток в графеновой наноленте / Н. Н. Конобеева, М. Б. Белоненко // Известия вузов. Физика. – 2017. – Т. 60, вып. 1. – С. 104-108. – Перевод изд.: Konobeeva, N. N. The Impact of Multilevel Impurity on the Tunnel and Ballistic Currents in a Graphene Nanoribbon / N. N. Konobeeva, M. B. Belonenko. – DOI 10.1007/s11182-017-1050-6 // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 60, No. 1. – P. 122-127.
 120. Лебедева, О. С. Влияние изоморфных примесей на эластопроводимость хиральных углеродных нанотрубок / О. С. Лебедева, Н. Г. Лебедев, И. А. Ляпкосова. – DOI 10.31857/S004445372008018X // Журнал физической химии. – 2020. – Т. 94, вып. 8. – С. 1232-1241. – Перевод изд.: Lebedeva, O. S. Effect of Isomorphic Impurities on the Elastic Conductivity of Chiral Carbon Nanotubes / O. S. Lebedeva, N. G. Lebedev, I. A. Lyapkosova. – DOI 10.1134/S003602442008018X // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2020. – Vol. 94, No. 8. – P. 1647-1656.
 121. Завьялов, Д. В. Влияние примесей на постоянную составляющую тока в квантовой нити в условиях совместного воздействия постоянного и переменного электрических полей / Д. В. Завьялов, С. В. Крючков // Физика и техника полупроводников. – 2008. – Т. 42, вып. 10. – С. 1223-1226. – Перевод изд.: Zav'yalov, D. V. Effect of impurities on the steady component of the current in a quantum wire under the joint action of ac and dc fields / D. V. Zav'yalov, S. V. Kryuchkov – DOI 10.1134/S1063782608100114 // Semiconductors. – 2008. – Vol. 42, No. 10. – P. 1204-1207.

122. Борознин, С. В. Углеродные наноструктуры, содержащие примесные атомы бора: особенности получения, физико-химические свойства и возможности применения / С. В. Борознин // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2022. – Т. 25, вып. 1. – С. 64-91. – DOI 10.17073/1609-3577-2022-1-64-91.
123. Charged-impurity scattering in graphene / J.-H. Chen, C. Jang, S. Adam [et al.]. – DOI 10.1038/nphys935 // Nature Physics. – 2008. – Vol. 4(5). – P. 377–381.
124. Соколов, Д. В. Применение методов сканирующей зондовой микроскопии для определения электрофизических параметров индивидуальных многостенных углеродных нанотрубок / Д. В. Соколов, Н. А. Давлеткильдеев, И. А. Лобов // Омский научный вестник. – 2018. – № 3(159). – С. 114-117. – DOI 10.25206/1813-8225-2018-159-114-117.
125. Theoretical and experimental investigations of enhanced carbon nanotube-gold interface conductivity through nitrogen doping / M. Rui, L. Yujian, W. Ruolan [et al.]. – DOI: 10.1039/D3NR04588A (Paper) // Nanoscale. – 2024. – Vol. 16. – P. 249-261
126. Zhukova, E. A. Longer carbon nanotubes with low impurity level / E. A. Zhukova, S. A. Urvanov, A. R. Karaeva [et al.]. – DOI 10.1016/j.matpr.2018.08.009 // Materials Today: Proceedings – 2028. – Vol. 5. – № 12. – P. 25948.
127. Лобач, А. С. Сравнительное изучение различных способов очистки одностенных углеродных нанотрубок / А. С. Лобач, Н. Г. Спицына, С. В. Терехов, Е. Д. Образцова // Физика твердого тела. – 2002. – Т. 44, вып. 3. – С. 457-459.
128. Агеева, Е. А. Изменение физических свойств сверхдлинных углеродных нанотрубок в результате их очистки различными методами / Е. А. Агеева, Е. А. Жукова, А. Р. Караева, В. З. Мордкович // Изв. вузов. Химия и хим. технология. – 2016. – Т. 59, вып. 9. – С. 74-79.

129. Сысоев, И. В. Электронная структура одностенных углеродных нанотрубок типа зигзаг / И. В. Сысоев, Н. С. Переславцева, О. И. Дубровский // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2014 – Т. 16, вып. 3. – С. 318.
130. Абрамовиц, М. Справочник по специальным функциям / М. Абрамовиц, И. Стиган. Москва: Наука. – 1979.
131. Завьялов, Д. В. Вольт-амперная характеристика полупроводника с узкой зоной проводимости с учетом ионизации примесей / Д. В. Завьялов, С. В. Крючков, Э. В. Марчук // Журнал технической физики. – 2008. – Т. 78, вып. 9. – С. 141-143. – Перевод изд.: Zav'yalov, D. V. Current-voltage characteristic of a narrow-band semiconductor taking into account ionization of impurities / D. V. Zav'yalov, S. V. Kryuchkov, E. V. Marchuk. – DOI 10.1134/S1063784208090193 // Technical Physics. – 2008. – Vol. 53, No. 9. – P. 1243-1246.
132. Bhatnagar, P. L. A Model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems / P.L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook. –DOI 10.1103/physrev.94.511 // Physical Review. – 1954. – Vol. 94(3), 511–525.
133. Ландау, Л.Д. Статистическая физика. Ч. 1. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – Москва, Физматлит. – 2002. – 616 с.
134. Белоненко, М. Б. Электромагнитные солитоны в пучках углеродных зигзагообразных нанотрубок / М. Б. Белоненко, Е. В. Демушкина, Н. Г. Лебедев // Физика твердого тела. – 2008. – Т. 50, вып. 2. – С. 368–374.
135. Carbon Nanotubes and Related Structures / S. A. Maksimenko, G. Yu. Slepyan, K. G. Batrakov [et al.] // Research Signpost Publisher. – 2008. – 147 p.
136. Елесин, В. Ф. Явления абсолютной отрицательной проводимости в неравновесных трехмерных полупроводниках / В. Ф. Елесин // Успехи физических наук. – 2005. – Т. 175, вып. 2. – С. 198–201. – Перевод изд.: Elesin, V. F. Absolute negative conductivity phenomena in non-equilibrium

- three-dimensional semiconductors / V. F. Elesin // *Physics-Uspekhi*. – 2005. – V. 48. – P. 183–187.
137. Запороцкова, И. В. Электрофизические исследования нанокомпозитов на основе полиметилметакрилата, допированного углеродными нанотрубками / И. В. Запороцкова, М. Б. Белоненко, Л. С. Элбакян // *Перспективные материалы*. – 2017. – № 4. – С. 16–22.
138. Домашнев, И. А. Межслоевые расстояния в многослойных углеродных нанотрубках / И. А. Домашнев, Б. П. Тарасов, А. М. Колесникова [и др.] // *Международный научный журнал Альтернативная энергетика и экология*. – 2002. – № 1. – С. 70.
139. Conduction properties of semiconductive multiwalled carbon nanotubes / M. Ahlskog, O. Herranen, J. Leppäniemi, D. Mtsuko. – DOI 10.1140/epjb/s10051-022-00392-z // *Eur. Phys. J. B*. – 2022. – Vol. 95. – P. 130.
140. Kotosonov, A. S. Electronic structure of carbon multilayer nanotubes / A. S. Kotosonov, V.V. Atrazhev // *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. – 2000. – Vol. 72(2). – P. 53–56.
141. Levshov, D. I. Photoluminescence from an individual double-walled carbon nanotube / D. I. Levshov, R. Parret, H.-N. Tran [et al.]. // *Phys. Rev.* – 2017. – B. 96. – P. 195410.
142. Глазов, С. Ю. Проводимость однослойных углеродных нанотрубок полупроводникового типа с учетом ионизации примесных центров / С. Ю. Глазов, Н. Е. Мещерякова, И. А. Подгорная. – DOI 10.31857/S0367676522010124 // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. – 2022. – Т. 86, вып. 1. – С. 58-62. – Перевод изд.: Glazov, S. Y. Conductivity of Semiconductor Single-Walled Carbon Nanotubes with Allowance for the Ionization of Impurity Centers / S. Y. Glazov, I. A. Podgornaya, N. E. Mescheryakova – DOI 10.3103/S1062873822010117 // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. – 2022. – Vol. 86, No. 1. – P. 38-41.

143. Зеегер, К. Физика полупроводников / К. Зеегер. – Москва: Мир. – 1977. – 615 с.
144. Орлов, Л. К. Высоочастотные свойства двумерной квантовой сверхрешетки в сильном однородном электрическом поле / Л. К. Орлов, Т.Э. Зедоми, А. С. Ивина, М. Л. Орлов, – DOI 0.61011/FTP.2024.02.57873.5592 // Физика и техника полупроводников. – 2024. – Т. 58, вып. 2. – С. 78-88.
145. M.L. Orlov et al. Anisotropy of the conductivity and high-frequency characteristics of two-dimensional quantum superlattices in a strong electric field / M.L. Orlov, Yu. A. Romanov, L.K. Orlov // Microelectronics Journal. – 2005. – Vol. 36. – P. 396–400.