

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ»**

На правах рукописи

БАДИКОВА Полина Вячеславовна

**ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НЕКОТОРЫХ ТИПОВ
СВЕРХРЕШЕТОК НА ОСНОВЕ ДИРАКОВСКИХ
МАТЕРИАЛОВ**

1.3.5. Физическая электроника

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д-р. физ. – мат. наук, Завьялов Д.В.

Волгоград – 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	3
Глава 1. Общая характеристика сверхрешеток на основе графена (обзор)	8
1.1 Кристаллическая структура сверхрешеток на основе графена	8
1.2 Электронные свойства графеновых сверхрешеток	17
Выводы по главе 1	28
Глава 2. Аналитическое и численное исследование энергетического спектра сверхрешетки, состоящей из чередующихся областей однослойного и двухслойного графена	29
2.1 Получение энергетического спектра сверхрешетки, состоящей из чередующихся областей однослойного и двухслойного графена методом трансляционной матрицы	29
2.2 Квантовохимическое моделирование энергетического спектра	52
Выводы по главе 2	62
Глава 3. Электронные свойства графеновых сверхрешеток	64
3.1 Исследование межзонного поглощения света в сверхрешетке, состоящей из чередующихся областей однослойного и двухслойного графена	64
3.2 Генерация высших гармоник плотности тока с учётом ионизации примеси в сверхрешетке на основе графена	73
3.3 Циркулярный эффект холла в анизотропной графеновой сверхрешетке ..	83
Выводы по главе 3	91
Глава 4. Бризероэлектрический эффект в сверхрешетке на основе графена	93
Выводы по главе 4	103
Заключение	104
Список публикаций автора по теме диссертационного исследования	106
Источники	109
Приложение 1	125
Приложение 2	126
Приложение 3	127

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования

Сверхрешетки (СР) на основе диракоподобных материалов находятся в фокусе современных теоретических и экспериментальных исследований низкоразмерных полупроводниковых структур в силу ряда интересных эффектов, ожидаемых для таких сверхрешеток, а также в связи с перспективами создания на базе таких материалов устройств генерации и детектирования волн терагерцового диапазона. Поэтому представляется актуальным теоретическое исследование влияния магнитных и электрических полей на различные виды сверхрешеток и возникающие при этом кинетические явления.

В работе рассматриваются различные виды таких сверхрешеток и их электронные свойства.

Степень разработанности проблемы. На сегодняшний день существует множество вариантов сверхрешеток [1-100]. Их активно изучают для применения в оптоэлектронике, акустике, наноплазмонике и др.

Объект исследования – взаимодействие электромагнитных волн со сверхрешетками на основе диракоподобных материалов.

Предмет исследования – поглощение электромагнитных волн и увлечение носителей тока электромагнитными волнами в сверхрешетках на основе диракоподобных материалов.

Целью настоящей работы является теоретическое исследование поглощения электромагнитных волн и увлечения ими носителей тока в сверхрешетках на основе диракоподобных материалов.

Задачи

1. Получить энергетический спектр сверхрешетки, состоящей из чередующихся областей однослойного и двухслойного графена методом трансляционной матрицы.

2. Исследовать межзонное поглощение света в сверхрешетке, состоящей из чередующихся областей однослойного и двухслойного графена.

3. Изучить генерацию высших гармоник плотности тока с учётом ионизации примеси в графеновой сверхрешетке (ГСР).

4. Изучить циркулярный эффект Холла в анизотропной графеновой сверхрешетке.

5. Исследовать бризероэлектрический эффект в сверхрешетке на основе графена.

Научная новизна.

1. Установлено, что шириной запрещенной минизоны ГСР, состоящей из чередующихся областей однослойного и двухслойного графена, можно управлять поперечным электрическим полем.

2. Показано, что в анизотропной графеновой сверхрешетке циркулярный эффект Холла имеет немонотонный характер в зависимости от напряженности электрического поля.

3. Установлен вид аналитического выражения для заряда, переносимого через единицу площади поперечного сечения образца в результате прохождения бризера малой амплитуды.

Теоретическая и практическая значимость

Изученные в ходе выполнения работы эффекты, полученные под действием электромагнитных волн и увлечения ими носителей тока в сверхрешетках на основе диракоподобных материалов, позволяют пополнить сведения о методах исследования и характерных свойствах этих структур.

Исследование зависимости коэффициента поглощения позволяет при последующих экспериментах эффективно выбрать параметры исследуемого материала.

Влияние как постоянного, так и переменного поля на генерацию высших гармоник приводит к возникновению чётных гармоник плотности тока, что может быть использовано для проектирования детектора второй гармоники.

Кроме того исследование ионизации примеси может помочь при создании детекторов и изучения влияния подложки на материал.

Методология и методы исследования

Результаты были получены на основе решения кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации, метода мнимого времени, метода трансляционных матриц, а также с помощью численного моделирования методами теории функционала плотности.

Достоверность полученных результатов обеспечивается выбором адекватных физических моделей, а также использованием в работе современных, хорошо апробированных методов компьютерного моделирования и теоретической физики: метода кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации и приближении Бхатнагара-Гросса-Крука, метода мнимого времени; строгим соблюдением пределов применимости используемых подходов, моделей и приближений; непротиворечивостью выводов исследования основным физическим закономерностям, а также предельным переходом обобщающих результатов к ранее известным (частным) результатам и совпадением в отдельных случаях теоретических предсказаний с экспериментом.

На защиту выносятся следующие положения

1. Параметрами энергетического спектра сверхрешетки, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена, можно управлять, меняя напряженность внешнего электрического поля, перпендикулярного поверхности образца.

2. Энергетический спектр сверхрешетки, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена, имеет минизонный характер. Существует две группы дисперсионных поверхностей, соответствующие двум ветвям в энергетическом спектре двухслойного графена.

3. В сверхрешетке на основе графена при нормальном падении эллиптически поляризованной волны на образец, к которому в его плоскости

приложено постоянное электрическое поле, возникает поперечная к этому полю постоянная составляющая электрического тока, имеющая немонотонную зависимость от параметров приложенных полей.

4. Аналитическое выражение для заряда, переносимого через единицу площади поперечного сечения образца в результате прохождения бризера малой амплитуды

Апробация результатов

1. Всероссийская конференция-школа с международным участием «Электронные, спиновые и квантовые процессы в молекулярных и кристаллических системах», приуроченная к 25-летию Института физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН и 100-летию создания Уфимского физического института (1919–1937 гг.) (г. Уфа, 22 - 25 мая 2019 г.).

2. XVII Всероссийская школа-семинар «Физика и применение микроволн» имени профессора А.П. Сухорукова («Волны-2019») (г. Москва, 26–31 мая 2019 г.) .

3. 22-я Всероссийская молодежная научная школа-семинар «Актуальные проблемы физической и функциональной электроники» (г. Ульяновск, 22–24 октября 2019 г.).

4. XVII Всероссийская школа-семинар «Волновые явления в неоднородных средах» имени профессора А.П. Сухорукова («Волны-2020») (г. Москва, 23-28 августа 2020 г.).

5. XIX Международный симпозиум «Нанопроектирование, технология, компьютерное моделирование» – NDTCS-2021. (XIX International Workshop on New Approaches to High-Tech: Nano-Design, Technology, Computer Simulations) (Республика Беларусь, г. Минск, 28-29 октября 2021 г.).

6. XXXII Всероссийская школа-семинар «Волновые явления: физика и применения» имени профессора А. П. Сухорукова («Волны-2021») (г. Москва, 6-11 июня 2021 г.).

7. XXXIII Всероссийская школа-семинар «Волновые явления: физика и применения» имени профессора А. П. Сухорукова («Волны-2022») (г. Москва, 5-10 июня 2022 г.).

8. IX Международная молодежная научная конференция, посвящённая 100-летию со дня рождения профессора С. П. Распопина (г. Екатеринбург, 16-20 мая 2022 г.).

9. Международная конференция «Наноуглерод и алмаз» (НиА2024) (г. Санкт-Петербург, 1-5 июля 2024 г.)

Публикации

Результаты работы опубликованы в следующих рецензируемых журналах: «Известия РАН: Серия Физическая», «Физика и техника полупроводников», а также в сборниках тезисов всероссийских и международных конференций. 1 статья в научном журнале из списка ВАК Минобрнауки, 5 статей в изданиях из списков Scopus / RSCI.

Личный вклад автора

Данная работа является итогом исследований автора, проводившихся совместно с сотрудниками ВГСПУ и ВолгГТУ. Совместно с научным руководителем определялись цели работы, ставились задачи и обсуждались пути их решения и полученные результаты. Личный вклад автора состоит в выполнении аналитических и численных расчётов в рамках проводимых исследований, выполнении моделирования и обработки результатов моделирования. В опубликованных работах автору принадлежат результаты, изложенные в диссертации.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы и приложения. Общий объем составляет 129 страницы, включая 41 рисунок. Список литературы содержит 143 наименования цитируемых работ отечественных и зарубежных авторов.

ГЛАВА 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА СВЕРХРЕШЕТОК НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА (ОБЗОР)

1.1 КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА СВЕРХРЕШЕТОК НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА

Сверхрешетка — это периодическая структура, состоящая из слоев двух (или более) материалов. Обычно толщина одного слоя составляет несколько нанометров [1-3].

Примером успешного использования полупроводниковых сверхрешеток можно считать полупроводниковые лазеры на основе структур с двойными гетеро- и/или многоквантовыми ямами. В этих устройствах толщина слоя контролируется так, чтобы она была намного меньше средней длины свободного пробега и длины волны де Бройля легированных носителей. Это необходимо для того, чтобы сделать электронные состояния квазидвумерными, в которых уровни энергии квантуются вдоль направления поперечной плоскости. Одновременно трехмерная параболическая зона проводимости разделяется на подзоны, смещенные квантованными уровнями вдоль направления поперечной плоскости, что позволяет строго настраивать частоту излучения фотонов. Это называется квантовым ограничением. Хикс и Дрессельхаус теоретически предположили, что квантовое ограничение улучшает термоэлектрическую добротность, когда толщина слоя порядка нескольких нанометров [4].

Сверхрешетки на основе графена (ГСР) привлекают внимание исследователей благодаря уникальным физическим свойствам, возможностью проявления новых нелинейных эффектов и перспективой создания на их основе приборов микроэлектроники.

На рисунке 1.1 показано схематическое изображение типичных полупроводниковых и электростатических графеновых сверхрешеток [5]. Различие запрещенных зон материалов, а также сверхпериодичность структуры

превращаются в периодический профиль границы зоны барьеров и ям, что приводит к появлению разрешенных и запрещенных энергетических зон, обычно известных как энергетические минизоны и щели, соответственно (рисунок 1.1 (б)).

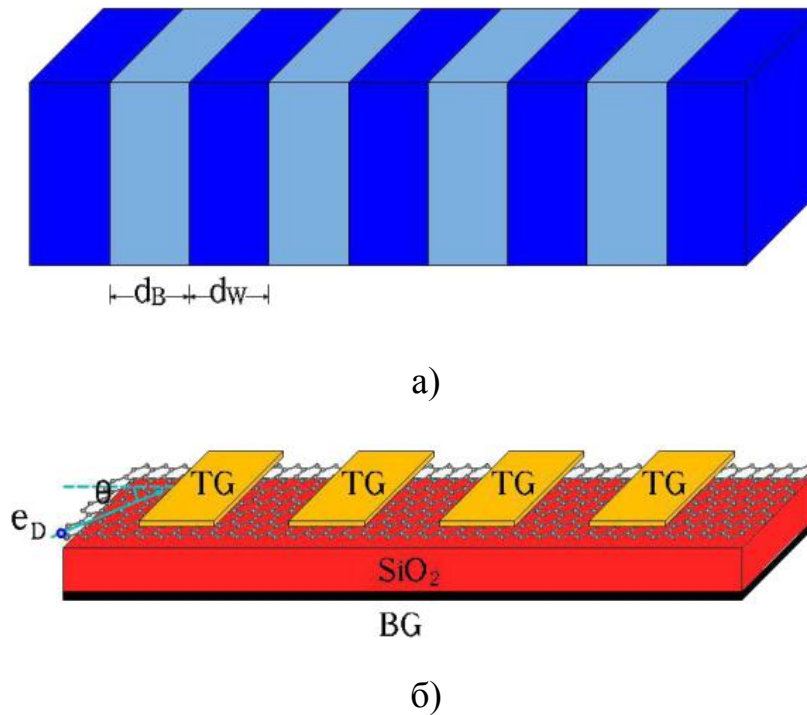


Рисунок 1.1 — Схематическое изображение типичных полупроводниковых и электростатических графеновых сверхрешеток [5]

Чаще всего при описании спектра сверхрешетки используют модель Кронига-Пенни. В работах Ратникова [6] предлагается описание структуры на основе графена помещенного на подложку, состоящую из чередующихся полос оксида кремния (SiO_2) и гексагонального нитрида бора (hBN) (рисунок 1.2).

Слои hBN 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.

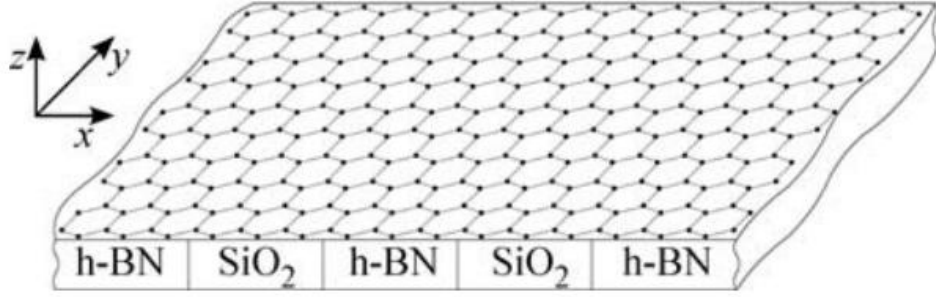


Рисунок 1.2 — Графен на подложке, состоящей из чередующихся полос SiO₂ и hBN [6].

Слои SiO₂, в свою очередь, не влияют на зонную структуру графена. Оси X и Y перпендикулярны, чередование полос hBN и SiO₂ идёт вдоль оси X (см. рисунок 1.2). Сверхрешетка описывается уравнением Дирака:

$$(v_F \boldsymbol{\sigma} \hat{p} + \Delta \sigma_z + V) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y) \quad (1.1)$$

где $v_F \approx 10^8$ см/с – скорость Ферми, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ и σ_z – матрицы Паули, а $\hat{p} = -i\nabla$ – оператор импульса (используется система единиц $\hbar = 1$). Полуширина запрещенной зоны периодически модулируется:

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

где n — целое число, нумерующее суперячейки сверхрешетки; d_I и d_{II} — ширина полос SiO₂ и hBN соответственно; $d = d_I + d_{II}$ — период сверхрешетки (размер суперячейки по оси X). Периодический скалярный потенциал V может возникать из-за разницы энергетических положений середины запрещенной зоны щелевой модификации графена и конических точек зоны Бриллюэна бесщелевого графена (рисунок 1.3):

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

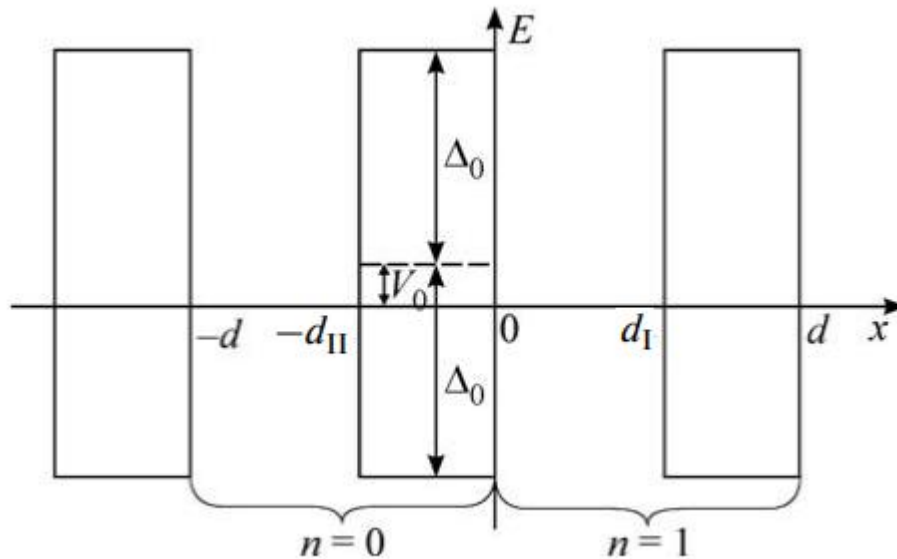


Рисунок 1.3 — Одномерный периодический потенциал Кронига–Пенни сверхрешетки, показанной на рисунке 1.2: периодически чередующаяся щелевая модификация графена на hBN с шириной запрещенной зоны $2\Delta_0 = 53$ мэВ и бесщелевой графен на SiO₂ [6].

Существует множество способов создания ГСР [7-15]: 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 [16] исследуют возможность настраивания электронной запрещенной зоны и режимы нулевой энергии в периодических сверхрешетках графена, индуцированных гетеросубстратом. Интересно, что существует приблизительная линейная связь между запрещенной зоной и долей неоднородной подложки (то есть процентами различных компонентов) в предлагаемой сверхрешетке, обсуждается влияние структурного беспорядка на эту связь. В неоднородной подложке с одинаковой шириной состояния нулевой энергии возникают в виде точек Дирака с использованием асимметричных потенциалов, а положения точек Дирака рассматриваются аналитически. Кроме

того, точка Дирака существует при $k = 0$ только для определенных потенциалов. Каждый раз, когда она появляется, групповая скорость исчезает в направлении k_y , и происходит резонанс. Для общих случаев неоднородной подложки с неравной шириной часть состояний нулевой энергии описываются аналитически, но они не всегда являются точками Дирака. Результаты, полученные в статье [16], могут быть реализованы на гетероподложке, такой как SiO_2/BN .

При помощи эффективного уравнения Дирака в работах [17-18] были теоретически изучены электронные и транспортные свойства сверхрешетки на основе графена. Сверхрешетка, формируемая периодическим потенциалом, приложенного к однослойному графену, нанесенному на подложку, который открывает энергетическую щель 2Δ в его электронной структуре представлена на рисунке 1.4.

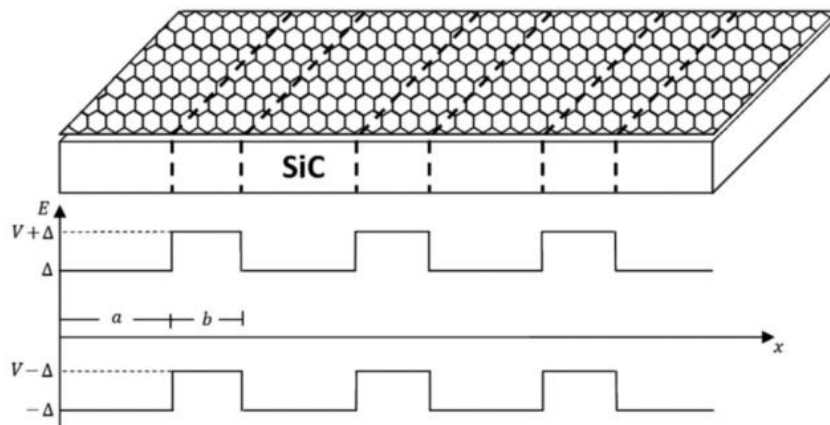


Рисунок 1.4 — Графеновый лист, нанесенный на подложку SiC с внешним периодическим потенциалом $V(x)$, имеющим период $a + b$. Подложка открывает щель 2Δ в электронной структуре графена [17].

При определенных условиях в электронной зонной структуре появляются дополнительные точки Дирака, поэтому можно закрыть щель между минизонами проводимости и валентной минизонной. Показано, что энергетическую щель E_g можно настраивать в диапазоне $0 < E_g < 2\Delta$ путем изменения периодического потенциала. После анализа низкоэнергетической

электронной структуры вокруг точек контакта обнаружено, что эффективная скорость Ферми анизотропна и зависит от ширины энергетической щели. Из чего был сделан вывод, что полученные в [17] дополнительные точки Дирака ведут себя иначе по сравнению с ранее изученными системами.

Как упоминалось ранее, ГСР обладают большим потенциалом в микроэлектронике и создании современных прибор. В настоящее время ведутся исследования не только теоретически, но и экспериментально. В [19] сообщается о новом подходе к изготовлению двумерной ГСР, в котором сверхрешеточный потенциал модулируется подложкой с периодическими нанотверстиями. В работе [20] исследуется двумерная СР, получаемая в результате осаждения графена на подложку из металлических наночастиц (рисунок 1.5).

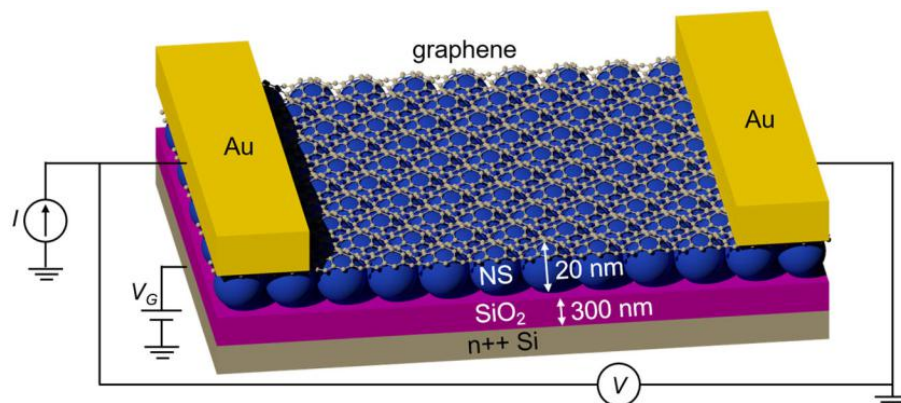


Рисунок 1.5 — Сверхрешетка на основе наносфер. Наносферы SiO_2 диаметром 20 нм собраны на подложке $\text{SiO}_2 / n^{++} \text{Si}$ толщиной 300 нм. Графен уложен поверх наносфер и контактирует с контактами на основе золота. Длина и ширина канала находятся в пределах 0,6–2,4 мкм во всех изготовленных устройствах [20].

Исследование электронного транспорта в графеновом полевом транзисторе с двойным затвором, размещенном на сложенном скрученном бислойе WSe_2 под углом закручивания $2,1^\circ$, представлено в [21]. В работе [21] наблюдается гистерезисные характеристики переноса и исследуется

неоднородность заряда с несколькими локальными точками Дирака по мере увеличения поля электрического смещения.

В работе [22] сообщается об эффективном методе создания двумерных сверхрешеток с настраиваемым затвором в графене с помощью комбинированного действия заднего затвора и нижнего затвора с несколькими слоями графена. Представленный в [22] метод расширяет и дополняет возможности уже существующих методов, применимых для создания двумерных ГСР. Затворы в описанном подходе могут быть легко изготовлены и реализованы в при помощи укладки Ван-дер-Ваальса, что позволяет формировать сверхрешетки с произвольной геометрией. При исследованиях электронного транспорта в ГСР с постоянной решетки $a = 40$ нм наблюдаются хорошо выраженные сателлитные точки Дирака и немонотонный квантовый отклик Холла. Эти экспериментальные результаты точно воспроизводятся в моделировании электронного транспорта и показывают хорошее согласие с особенностями в рассчитанной зонной структуре. В работе [22] отмечено появление минизон в энергетическом спектре и в эксперименте, и по результатам моделирования.

В работе [23] изучается новый тип сверхрешеток на основе графена, образованных за счет периодической модуляции поверхности Ферми. Такая модуляция возможна для графена, нанесенного на полосатую подложку из материалов с существенно разными значениями диэлектрической проницаемости. Аналогичные сверхрешетки возникают также в листах графена, нанесенных на подложки с периодическим массивом параллельных канавок. Предложена модель, описывающая такие сверхрешетки. В статье [23] при помощи матрицы переноса определяется дисперсионное соотношение и рассчитывается энергетический спектр этих сверхрешеток.

Широко исследуются муаровые сверхрешетки, периодический потенциал которых возникает за счет поворота слоев графена (или иного однослойного материала) друг относительно друга (рисунок 1.6) [24-30].

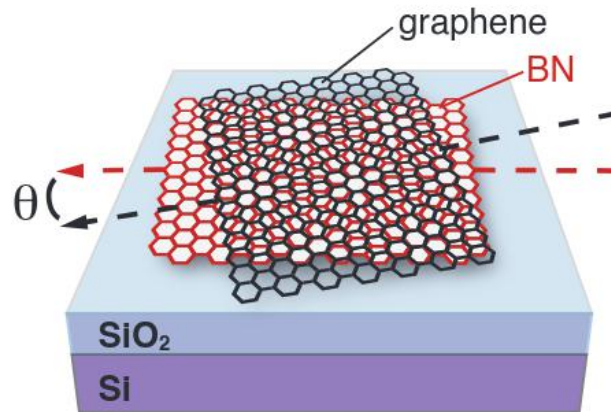


Рисунок 1.6 — Схема графена на hBN, показывающая возникновение муарового узора. Длина волны муара меняется в зависимости от угла несоответствия θ [29].

Муаровые узоры из двумерных (2D) гетероструктур графена, собранных с помощью взаимодействий Ван-дер-Ваальса, исследуются в работе [31]. Такие узоры возникают в двухслойной сверхрешетке гидрированный графен/графен, полученной в результате прямого одностороннего гидрирования двухслойного графена на подложке. По сравнению с чистым графеном, двухслойная сверхрешетка имеет рифленую поверхность. Эти муаровые узоры обнаруживаются с помощью атомно-силовой микроскопии и дополнительно подтверждаются анализом быстрого преобразования Фурье (БПФ). Высокая подвижность носителей заряда в муаровой сверхрешетке на основе графена и нарушение инверсионной симметрии гексагональным нитридом бора приводят к нелинейной проводимости [32]. Нелинейная проводимость сильно зависит от напряжения на затворе, а также от конфигурации упаковки, причем огромное усиление связано с муаровыми полосами.

Помимо классических сверхрешеток исследуются множество гетероструктур на основе графена [33]. В работе [34] изучается сегнетоэлектрический фотоэлектрический эффект, зависящий от толщины

сегнетоэлектрического слоя, в вертикальных многослойных гетероструктурах графен/ α - In_2Se_3 /графен. Показано, что фототок короткого замыкания антипараллелен поляризации сегнетоэлектрика и экспоненциально увеличивается с уменьшением толщины. Была исследована генерация фототока в туннельных структурах графен/hBN/графен с локализованными дефектными состояниями при освещении волнами среднего инфракрасного (ИК) диапазона [35]. Показано, что фототок в этих устройствах пропорционален второй производной туннельного тока по напряжению смещения, достигая максимума при туннелировании через примесный уровень hBN. Обнаружено, что причина генерации фототока заключается в изменении вероятности туннелирования при радиационном нагреве электронов в слоях графена.

Сверхрешетки на основе многослойного графена изучались в [9, 36-42]. В работе [38] на основе двухслойного графена в присутствии двумерного сверхрешеточного потенциала была создана установка, позволяющая регулировать параметры зонного спектра путём приложения электрического поля (рисунок 1.7).

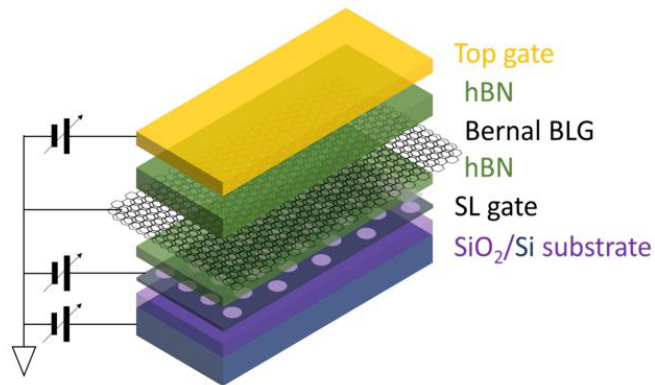


Рисунок 1.7 — Предлагаемая экспериментальная установка ГСР [38]

Можно получить сверхрешетку путём скручивания верхнего и нижнего слоя двухслойного графена. В подобной сверхрешетке могут возникать ранее не изученные электрические и оптические эффекты. Такая структура представлена в работе [43]. В работе [44] рассмотрена структура, подобная изученной в [38], и

исследуется возможность управления топологическими фазами в сверхрешетке на основе двухслойного графена при помощи внешнего электрического поля. ,

При помощи сверхрешеток на основе двумерных материалов можно существенно улучшать свойства этих материалов, превосходя их изначальные характеристики. Однако обычные методы синтеза ограничены чистыми 2D , подрешетками, что создает значительную практическую проблему, когда дело доходит до укладки химически модифицированных подрешеток. В работе [45] сообщается о методе химического синтеза, который преодолевает эту проблему путем создания 2D графеновой сверхрешетки путём укладывания графеновой подрешетки с монодисперсными, нанометровыми, квадратными порами и легированными элементами на краях пор. Полученная графеновая сверхрешетка демонстрирует хорошие корреляции между квантовыми фазами как на электронном, так и на фононном уровнях, что может быть применимо в разнообразных приложениях, таких как электромагнитное экранирование, сбор энергии, оптоэлектроника и термоэлектричество.

1.2 ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНОВЫХ СВЕРХРЕШЕТОК

Исследование электронной структуры материала, в том числе графеновой сверхрешетки, помогает лучше понять возможность дальнейшего применения данного материала [46-55].

В работе [56] изучаются электронные транспортные свойства безмассовых фермионов Дирака в симметричной графеновой сверхрешетке, ячейка которой состоит из трех областей, отличающихся высотой барьера. Сопоставляя волновые функции и используя метод матрицы переноса, явно определяется вероятность туннелирования электрона через барьеры, а также кондактанс и фактор Фано.

Нелинейный перенос заряда в сильно связанных полупроводниковых сверхрешетках описывается кинетическими уравнениями Вигнера-Пуассона,

включающими одну или две минизоны [57]. Электрон-электронные столкновения рассматриваются в приближении Хартри, тогда как другие неупругие столкновения описываются модифицированной моделью Бхатнагара-Гросса-Крука. Показано, что частоты столкновений имеют тот же порядок, что и блоховские частоты. В этом пределе пространственно нелокальные уравнения баланса дрейфа-диффузии для заселенностей минизон и электрического поля выводятся с помощью техники возмущений Чепмена-Энскогского.

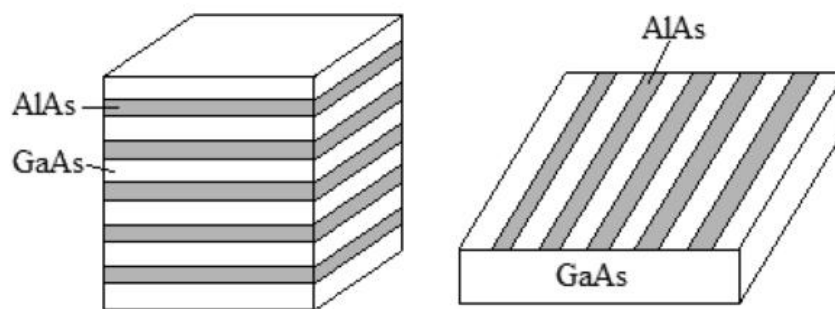


Рисунок 1.8 — а) Схематическое изображение сверхрешетки. б) Латеральная сверхрешетка [57].

На рисунке 1.8 показаны два возможных способа расположения слоёв в сверхрешетке. Для латеральной сверхрешетки (рисунок 1.8 (б)), со спин-орбитальным взаимодействием электроны со спином вверх или вниз имеют разные энергии, и их соответствующие уравнения дрейфа-диффузии могут быть использованы для расчета спин-поляризованных токов и спиновой поляризации электронов. Численные решения показывают устойчивые самоподдерживающиеся колебания тока и спиновой поляризации через смещенную напряжением боковую сверхрешетку, тем самым предоставляя пример спинового осциллятора сверхрешетки [57]. В зонной структуре сверхрешетки на основе графена образуются дополнительные точки Дирака, и их количество зависит от величины потенциала сверхрешетки. В [58] создали латеральную сверхрешетку (рисунок 1.8 (б)) с настраиваемой высотой барьера, используя комбинацию двух затворов. Использование латеральной

сверхрешетки для модификации зонной структуры графена, что приводит к появлению новых конусов Дирака. Эта контролируемая модификация зонной структуры сохраняется до температуры 100 К.

Графен обладает высокой собственной теплопроводностью и высокой подвижностью электронов. Теплопроводность графена может быть значительно снижена при смешивании различных изотопов углерода, что может повысить производительность термоэлектрических устройств. В работе [59] сравнивается теплопроводность случайных смесей изотопов $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ с изотопными сверхрешетками с периодами от 46 до 225 нм. Выполненные в [59] оптико-рамоновские измерения теплопроводности показывают примерно 50%-ное снижение теплопроводности по сравнению с чистым графеном ^{12}C . Это среднее снижение аналогично случайной смеси изотопов. Снижение теплопроводности в сверхрешетке хорошо описывается моделью чистого графена и дополнительным квазиодномерным периодическим интерфейсным тепловым сопротивлением. Наблюдаемое снижение теплопроводности может привести к интересным применениям термоэлектрических устройств, которым необходима высокая электропроводность при низкой теплопроводности.

В термодинамическом равновесии ток в металлических системах переносится электронными состояниями вблизи энергии Ферми, тогда как заполненные зоны под ними вносят небольшой вклад в проводимость. В работе [60] описывается совершенно другой режим, в котором распределение носителей в графене и его сверхрешетках смещено настолько далеко от равновесия, что заполненные зоны начинают играть существенную роль, что приводит к появлению критического тока. Критические состояния развиваются при достижении скоростью потока электронов скорости Ферми. Ключевыми признаками неравновесного состояния являются: вольт-амперные характеристики, напоминающие характеристики сверхпроводников, острые пики дифференциального сопротивления, изменение знака эффекта Холла и заметная аномалия, вызванная образованием горячей электронно-дырочной

Швингеровской плазмы. Ожидается, что наблюдаемое поведение будет общим для всех сверхрешеток на основе графена.

Термоэлектрические эффекты очень чувствительны к асимметрии в плотности состояний вокруг энергии Ферми и могут быть использованы в качестве зондов электронной структуры. В [61] экспериментально изучается термоЭДС в высококачественном монослое графена, в гетероструктурах, состоящих из полной инкапсуляции hBN и одномерных краевых контактов, где решетки графена и hBN выровнены. Когда графен выровнен с одним из слоев hBN, демонстрируется наличие дополнительных изменений знака в термоЭДС как функции плотности носителей, что напрямую свидетельствует о наличии муаровой сверхрешетки. Показано, что температурная зависимость термоЭДС позволяет оценить роль встроенного изменения деформации и особенностей Ван Хофа. Кроме того, она позволяет сделать предположение о наличии процессов переброса электрон-электронного рассеяния. Поскольку термоЭДС достигает пика около точки нейтральности, это позволяет исследовать вырождение энергетического спектра. Далее, когда графен дважды выровнен с верхним и нижним кристаллами hBN, термоЭДС демонстрирует особенности, свидетельствующие о множественных клонированных точках Дирака, вызванных дифференциальной супермуаровой решеткой. Для обоих случаев в работе [61] оценивается, насколько хорошо термоЭДС согласуется с уравнением Мотта. Одно и то же сверхрешеточное устройство может демонстрировать температурно-управляемое изменение термоЭДС с положительного на отрицательное и наоборот, контролируя плотность носителей. Изучение термоЭДС обеспечивает альтернативный подход к изучению электронной структуры двумерных сверхрешеток, одновременно предлагая возможности для проектирования термоэлектрического отклика на этих гетероструктурах.

В работе [62] рассмотрены динамические свойства квазичастиц в графеновых сверхрешетках с тремя типичными искажениями Кекуле (то есть Кекуле-О, Кекуле-У и Кекуле-М). Графен Кекуле [63] представляет собой

сверхрешеточный материал, образованный путем периодического манипулирования волнами плотности связей углерод-углерод (C-C) в гексагональной решетке атомов углерода. В связи с тем, что примитивная ячейка сверхрешетки графена Кекуле в три раза больше, чем у стандартного графена, объем зоны Бриллюэна такой системы уменьшается и составляет $1/3$ объема зоны Бриллюэна стандартного графена. Это «складывание» области Бриллюэна приводит к перекрытию точек высокой симметрии K'' , K , которые ранее имели противоположную хиральность в графене, так что могут быть получены квазичастицы с нарушением хиральной симметрии [62, 63-70]. Кекуле-О, Кекуле-У и Кекуле-М — три типа графена Кекуле, известные на сегодняшний день. В ходе исследования был численно визуализирован процесс эволюции квазичастиц Кекуле, а также аналитически получена траектория центроида квазичастиц. Полученные результаты хорошо согласуются друг с другом. В системах Кекуле можно наблюдать явление релятивистского *Zitterbewegung* (ZB). Посредством анализа частоты ZB можно провести связь между текстурами ZB и Кекуле, то есть частоты ZB квазичастиц Кекуле-О, Кекуле-У и Кекуле-М имеют одинарную, двойную и шесть частот соответственно. Предложена схема для различения различных текстур Кекуле с динамической точки зрения.

Исследование эффекта ZB фермионов, описываемых гауссовым волновым пакетом в сверхрешетке графена вблизи этих точек проводилось в работе [71]. *Zitterbewegung* вблизи различных точек Дирака, имеет схожие характеристики, в то время как фермионы вблизи новых точек имеют разные групповые скорости как в X -, так и в Y -направлении, что вызывает различные свойства ZB вблизи них. Однако, если точки Дирака находятся так далеко в импульсном пространстве, что все точки не могут находиться внутри волнового пакета, осцилляции ZB будут определяться в основном ближайшими точками Дирака. Для решения этой проблемы в [71] выбирается меньшая ширина волнового пакета, чтобы все точки Дирака оказались внутри него. Для получения ZB,

контролируемого всеми точками Дирака, необходимо провести настройку потенциала, чтобы зонная структура включала в себя близлежащие точки Дирака.

В [72] рассмотрена сверхрешетка, состоящая из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена, исследуются особенности энергетического спектра такой структуры, в том числе возникновение дополнительных Дираковских точек и открытие энергетической щели.

Электроны в графене описываются релятивистскими спинорами Дирака-Вейля с двухкомпонентным псевдоспином. Уникальная псевдоспиновая структура дираковских электронов приводит к появлению таких явлений, как безмассовый конус Дирака, аномальный квантовый эффект Холла и туннелирование Клейна в графене. Возможность манипулировать псевдоспином электронов необходима для новой графеновой электроники, и для различения двух подрешеток графена на атомном уровне, где требуется точный контроль.

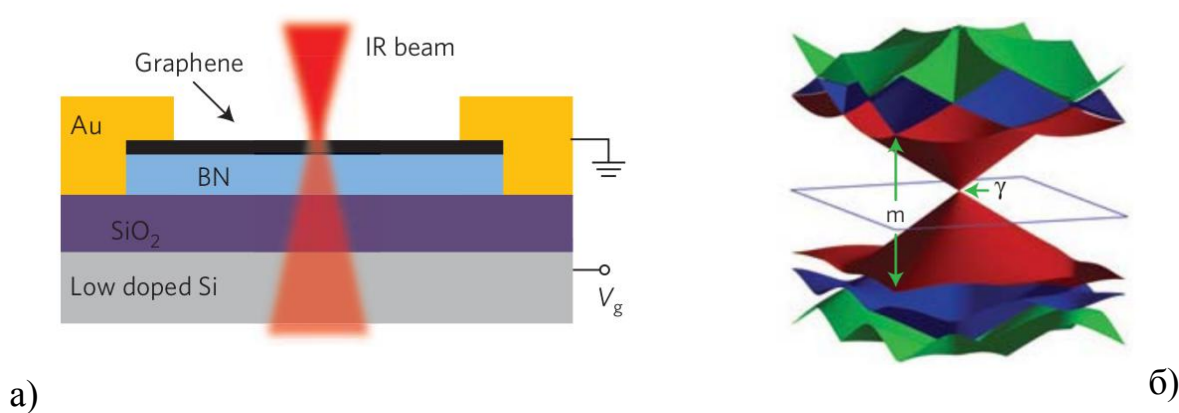


Рисунок 1.9 — Инфракрасная микроспектроскопия гетероструктуры графен/BN. а) Схематический рисунок экспериментальной установки. б) трехмерная минизонная структура зоны Бриллюэна сверхрешетки [73]

В [73] проводится микроинфракрасная спектроскопия на гетероструктуре графен/нитрид бора и демонстрируется, что потенциал муаровой сверхрешетки определяется компонентом смешивания псевдоспинов, аналогичным пространственно изменяющемуся псевдомагнитному полю (рисунок 1.9). Кроме

того, спинорный потенциал зависит от индуцированной затвором концентрации носителей в графене, что указывает на сильную перенормировку спинорного потенциала из-за электрон-электронных взаимодействий.

Плазменные волны в графене и в многослойных сверхрешетках теоретически исследованы достаточно подробно [74-82]. В [82] было показано, что зависимости закона дисперсии плазменных волн под действием сильного статического электрического поля в двумерной сверхрешетке с неаддитивным энергетическим спектром характерны для систем с искусственно созданным периодическим потенциалом.

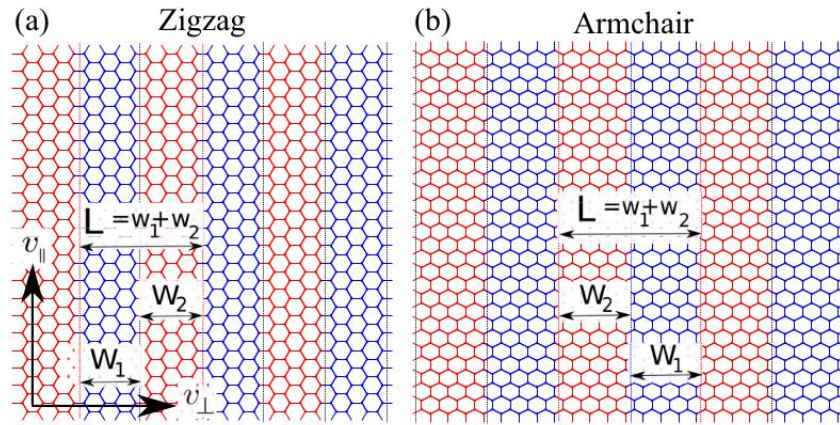


Рисунок 1.10 — Изображение графеновых СР с потенциалом, приложенным в (а) направлении zigzag и (б) направлении armchair а. Синие области содержат атомы с приложенным потенциалом ε_1 , которые образуют потенциальные барьеры шириной W_1 . Красные области образуют барьеры шириной W_2 и содержат атомы с приложенным потенциалом ε_2 . L — период [83].

Электронные свойства одномерных графеновых сверхрешеток сильно зависят от атомного размера и ориентации одномерного внешнего периодического потенциала. Используя подход сильной связи, в [83] показано, что направления armchair и zigzag (рисунок 1.10) в этих сверхрешетках оказывают различное влияние на перенормировку анизотропной скорости носителей заряда. Для симметричных потенциальных барьеров скорость,

перпендикулярная барьеру, модифицируется для направления armchair, оставаясь неизменной в случае zigzag. Для асимметричных барьеров начальная симметрия между прямым и обратным импульсом относительно симметрии конуса Дирака нарушается для скорости, перпендикулярной (случай armchair, рисунок 1.10 (б)) или параллельной (случай zigzag, рисунок 1.10 (а)) барьерам. Наконец, появление дополнительных конусов Дирака в точке нейтральности заряда происходит только для геометрии zigzag. Напротив, в электронной структуре графеновой сверхрешетки с барьером в направлении armchair возникают запрещенные зоны.

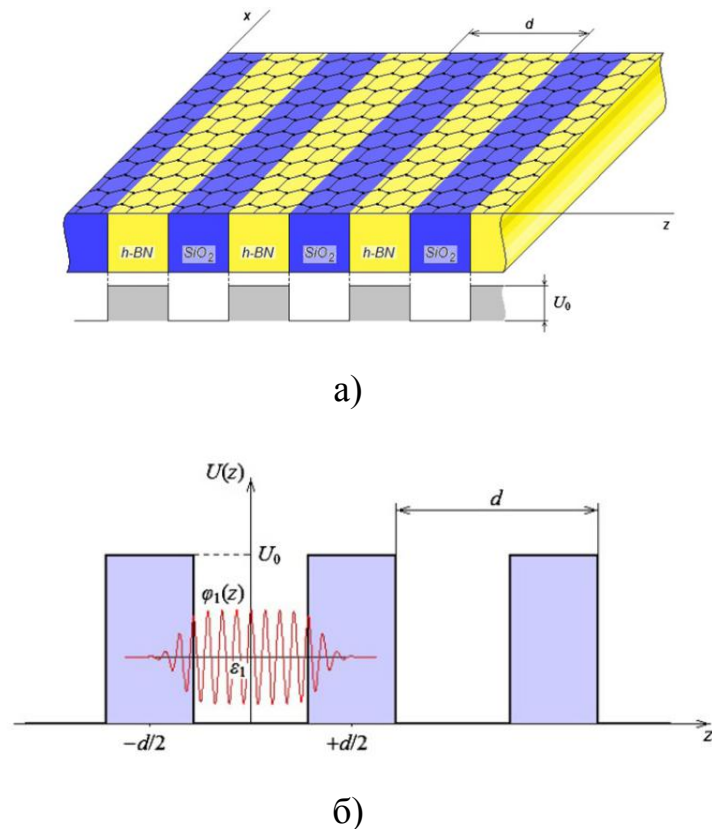


Рисунок 1.11 — а) Схема ГСР б) Схема периодической модуляции ширины запрещенной зоны [85]

Циклотронное движение носителей заряда в металлах и полупроводниках приводит к квантованию Ландау и магнито-колебательному поведению в их свойствах. Для наблюдения этих колебаний обычно требуются криогенные

температуры. В [84] показано, что графеновые сверхрешетки поддерживают другой тип квантовых колебаний, который не зависит от квантования Ландау. Колебания чрезвычайно устойчивы и сохраняются значительно выше комнатной температуры в магнитных полях всего в несколько Тесла.

Возможность использования сверхрешетки в качестве рабочей среды генераторов и усилителей терагерцовых (ТГц) электромагнитных (ЭМ) волн [86] побуждает к исследованию электронных и оптических свойств углеродных систем с дополнительным потенциалом СР [87-90]. Для изучения формы нелинейной электромагнитной волны в ГСР можно использовать эффект взаимного выпрямления волн. Поэтому в работе [85] исследуется поперечный постоянный ток, индуцированный кноидальными и синусоидальными волнами с ортогональными плоскостями поляризации под продольным постоянным электрическим полем (рисунок 1.11). Показано, что постоянный ток, индуцированный смешением этих волн, меняет свое направление, когда продольное электрическое поле меняет свое абсолютное значение.

На основе метода матрицы переноса в работе [91] исследовались спин-зависимые транспортные свойства магнитной графеновой сверхрешетки в присутствии спин-орбитального взаимодействия Рашбы. Показано, что угловой диапазон вероятности передачи спина через магнитную графеновую сверхрешетку может эффективно контролироваться числом барьеров. По мере увеличения числа магнитных барьеров угловой диапазон передачи через магнитную сверхрешетку уменьшается, зазоры в передаче и проводимости в зависимости от энергии становятся шире. Также обнаружено, что спиновые проводимости осциллируют с энергией Ферми и силой спин-орбитального взаимодействия Рашбы. В частности, при наличии магнитного поля можно наблюдать спиновую поляризацию, тогда как для спин-орбитального взаимодействия Рашбы она равна нулю. Ожидается применение такого явления для разработки спин-поляризованного электронного устройства на основе графенового материала.

Циркулярный фотогальванический эффект изучается в различных структурах. В [92] проведены расчеты при помощи теории функционала плотности и метода неравновесной функции Грина для исследования фотовольтаического эффекта монослойного латерального гетероперехода $\text{WSe}_2\text{-MoS}_2$ при вертикальном облучении.

Взаимодействие между светом с циркулярной поляризацией и квантовыми материалами усиливается в хиральных пространственных группах из-за структурной хиральности. В работе [93] исследуются перестраиваемые циркулярные фотоэлектрические отклики в двумерных полевых транзисторах на основе теллура (Te) с различной хиральностью, включая продольный циркулярный фотогальванический эффект, индуцированный радиальной спиновой текстурой (поляризация спина электрона параллельна направлению импульса электрона), и циркулярный термогальванический эффект, индуцированный хиральной кристаллической структурой (спиральные цепочки атомов Te). Циркулярные фотогальванические и фотоэлектрические эффекты сильно зависят от хиральности кристаллов Te, что делает двумерный теллур материалом для разработки оптоэлектронных устройств, зависящих от хиральности. В [94] развита общая теория слоевого циркулярного фотогальванического эффекта в квазидвумерных хиральных бислоях, которая относится к появлению зависящего от поляризации, внеплоскостного статического дипольного момента, индуцированного циркулярно поляризованным светом. В [94] был рассчитан слоевой циркулярный фотогальванический эффект в скрученном двухслойном графене и обнаружено, что он демонстрирует резонансный пик, частоту которого можно настраивать от видимой до инфракрасной при изменении угла скручивания. Таким образом, слоевой циркулярный фотогальванический эффект обеспечивает многообещающий путь к частотно-чувствительному обнаружению света с циркулярной поляризацией, особенно в инфракрасном диапазоне.

Циркулярный фотогальванический эффект полезен при изучении топологических полуметаллов. В [95,96] изучены мультипликативные полуметаллические зонные структуры Вейля и обнаружено, что мультипликативная структура сохраняет квантование циркулярного фотогальванического эффекта даже в случае нелинейной дисперсии. Кроме того, этот эффект можно использовать для выявления сложной топологии, отличая топологические вырождения мультипликативных топологических полуметаллов от якобы подобных топологических вырождений по степени вырождения и суммарному топологическому заряду, например, узлов Дирака.

В работе [97] исследуются фотогальванические эффекты в центросимметричных двумерных материалах, двухслойном графене, сложенном по типу AA и AB [98], путем приложения внешнего напряжения на затворе для нарушения инверсионной симметрии. С использованием приближения сильной связи для описания электронных состояний вычислены коэффициенты инжекции для циркулярного фотогальванического эффекта для обоих материалов с длинами волн от терагерцового до видимого диапазона. Показано, что фотогальванические эффекты, индуцированные напряжением затвора, могут быть очень значительными для двухслойного графена, сложенного по типу AB.

В статье [99] представлено исследование фотоэлектрического эффекта двойной гетероструктуры графен/MoS₂/Si, выращенной методом быстрого химического осаждения из паровой фазы. Было обнаружено, что двойные переходы графена/MoS₂-перехода Шоттки и гетероструктуры MoS₂/Si играют важную роль в повышении производительности устройства. Они позволили эффективно генерировать, разделять и собирать больше электронно-дырочных пар на двойном интерфейсе графен/MoS₂/Si.

В работе [100] исследовали фотосопротивление циклотронного резонанса в двумерных электронных системах на основе GaAs. Выявлена аномально низкая чувствительность к хиральности приходящего циркулярно

поляризованного терагерцового излучения. Обнаружено, что эта аномалия сильно зависит от интенсивности.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 1

1. В настоящее время существует большое количество способов создания графеновых сверхрешеток с многообразием возможностей применения в нано- и микроэлектронных устройствах.

2. При помощи эффективного уравнения Дирака можно изучать электронные и транспортные свойства сверхрешетки на основе графена.

3. Электронные свойства одномерных графеновых сверхрешеток сильно зависят от периода и ориентации одномерного внешнего периодического потенциала.

ГЛАВА 2. АНАЛИТИЧЕСКОЕ И ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА СВЕРХРЕШЕТКИ, СОСТОЯЩЕЙ ИЗ ЧЕРЕДУЮЩИХСЯ ОБЛАСТЕЙ ОДНОСЛОЙНОГО И ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА

2.1 ПОЛУЧЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА СВЕРХРЕШЕТКИ, СОСТОЯЩЕЙ ИЗ ЧЕРЕДУЮЩИХСЯ ОБЛАСТЕЙ ОДНОСЛОЙНОГО И ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА МЕТОДОМ ТРАНСЛЯЦИОННОЙ МАТРИЦЫ

Как отмечалось, графеновые сверхрешетки являются нелинейной средой и обладают неаддитивным энергетическим спектром. Один из эффектов, который может найти применение при детектировании кратных гармоник излучения – эффект взаимного выпрямления электромагнитных волн в нелинейных структурах (в частности, сверхрешетках). Подробный анализ подобных явлений в одномерных полупроводниковых сверхрешетках приведен в [101], работа [102] посвящена исследованию возникновения постоянного тока в графене в случае воздействия на образец двух электромагнитных волн со взаимно перпендикулярными плоскостями поляризации и отношением частот, равном двум, и постоянного магнитного поля, перпендикулярного поверхности графена. Возможность возникновения постоянного тока обусловлена взаимной зависимостью движений носителей тока в перпендикулярных друг другу направлениях, связанной с неаддитивностью энергетического спектра материала. В [103] исследована ситуация, когда на поверхность графеновой сверхрешетки, формируемой в однослойном графене при помещении его над подложкой, состоящей из чередующихся слоев различных диэлектриков, нормально падает эллиптически поляризованная электромагнитная волна и действует постоянное электрическое поле. Показано, что в такой конфигурации полей возникает постоянная составляющая электрического тока, перпендикулярная тянущему электрическому полю. Отклик в виде постоянного тока сравнительно прост для

измерения, поэтому такие эффекты могут служить основой как для анализа свойств излучения (интенсивность, сдвиг фаз между компонентами эллиптически поляризованной волны), так и для вычисления характеристик материала (например, среднее время релаксации импульсов).

В графеновых сверхрешетках, сформированных даже за счет одномерного потенциала, движения носителей тока в перпендикулярных друг другу направлениях взаимно зависимы. Интерес представляет сверхрешетка, состоящая из чередующихся в шахматном порядке прямоугольных фрагментов графена, отличающихся шириной запрещенной зоны [104]. Можно подобрать размеры участков различного типа и ширину запрещенной зоны щелевой модификации графена так, что в случае квадратных областей при повороте осей на 45 градусов по отношению к направлению чередования слоев энергетический спектр такой сверхрешетки будет иметь вид

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \Delta \left(1 - \cos \left(\frac{p_x d}{\hbar} \right) \cos \left(\frac{p_y d}{\hbar} \right) \right), \quad (2.1)$$

где p_x , p_y – компоненты квазиимпульса электрона, d – период СР (сторона квадрата), Δ – ширина минизоны. Этот спектр широко использовался ранее при исследовании так называемых поверхностных сверхрешеток [105], а также сверхрешеток на квантовых точках [106]. В [107] обсуждается возможность спонтанного возникновения поперечного электрического поля при изменении тянущего поля в случае, когда значения ширины минизоны в перпендикулярных друг другу направлениях несколько отличаются друг от друга. Записанный в форме (2.1) энергетический спектр неаддитивен и неквадратичен, поэтому можно ожидать проявления как взаимного влияния движений носителей тока в перпендикулярных друг другу направлениях, так и влияние конечной ширины минизоны проводимости на транспортные свойства образца.

В разделе 2.1 предпринята попытка аналитического рассмотрения электронных состояний в ГСР, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена, помещенной в постоянное электрическое

поле, перпендикулярное поверхности образца, в разделе 2.2 описаны результаты квантово-химического моделирования такой сверхрешетки с использованием методов теории функционала плотности. На рисунке 2.1(а) показано расположение дополнительных полосок графена, формирующих двухслойные области. Предполагается, что двухслойные области имеют тип АВ (так называемый Bernal stacking), расположение атомов второго слоя графена относительно первого слоя показано на рисунке. Энергетический спектр рассматриваемой ГСР исследован аналитически, а также с использованием квантовохимического моделирования методами теории функционала плотности.

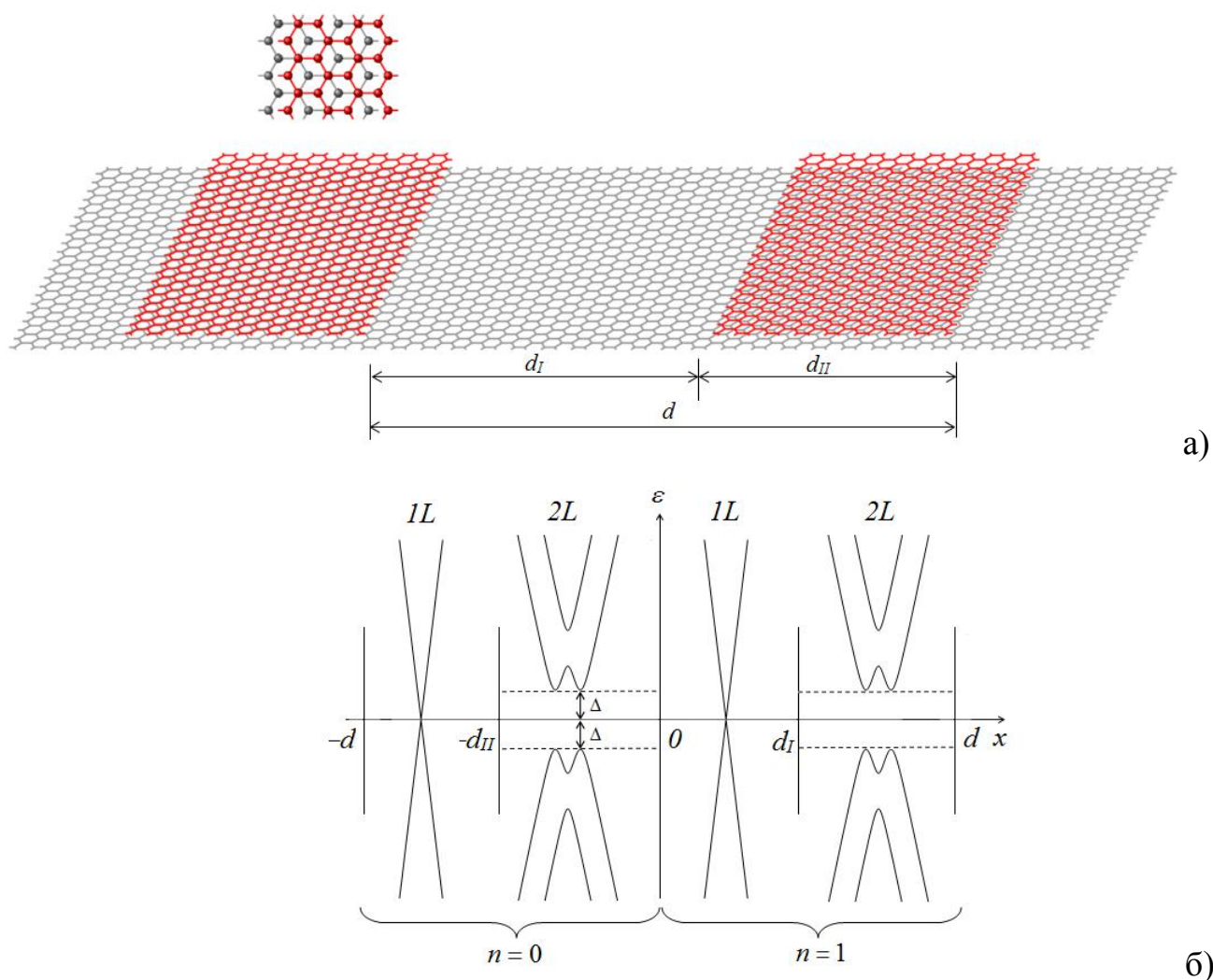


Рисунок 2.1 – Схема размещения полосок графена, формирующих двухслойные области, на основном графеновом листе (а) ;энергетическая структура рассматриваемой ГСР (б)

Будем рассматривать графеновую сверхрешетку, представляющую собой графеновый лист, над поверхностью которого периодически расположены полосы графена (рисунок 2.1). Энергетический спектр двухслойного графена, к которому приложено поперечное постоянное электрическое поле (так называемый bias bilayer graphene) определяется следующим выражением [98]:

$$\varepsilon_\alpha = \pm \sqrt{\Delta^2 + \hbar^2 v_F^2 k^2 + \frac{t_\perp^2}{2}} \pm \sqrt{\hbar^2 v_F^2 k^2 (4\Delta^2 + t_\perp^2) + \frac{t_\perp^4}{4}} \quad (2.2)$$

Здесь $v_F \sim 10^8$ см/с — скорость на поверхности Ферми в графене, $\hbar \mathbf{k}$ — квазиимпульс электрона, $t_\perp \approx 0.4$ эВ — интеграл перекрытия между слоями двухслойного графена, $\Delta \sim 0.1 \dots 0.3 t_\perp$ — параметр, определяющий ширину запрещенной зоны (полуширина запрещенной зоны $\Delta' = \Delta / \sqrt{4(\Delta/t_\perp)^2 + 1} \approx \Delta$). Величину Δ можно менять путем изменения внешнего поперечного поля, что дает возможность регулирования параметров структуры.

Для получения дисперсионного соотношения воспользуемся подходом, развитым в [6, 72], представляющим собой модифицированную модель Кронига-Пенни.

Гамильтониан двухслойного графена имеет вид:

$$H_{II} = \begin{pmatrix} \Delta & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) & t_\perp & 0 \\ \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) & \Delta & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & -\Delta & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ 0 & 0 & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) & -\Delta \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Решением уравнения Шредингера будет четырехкомпонентный спинор $\Psi^{II} = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)^T$. Компоненты ψ_1, ψ_2 соответствуют состояниям на

подрешетках A_1 и B_1 одного листа, а компоненты ψ_3, ψ_4 — состояниям на подрешетках A_2 и B_2 другого листа графена. В целом гамильтониан записан вблизи одной из дираковских точек. Поскольку для получения трансляционной матрицы необходимо потребовать выполнения условий сшивки волновой функции [6]:

$$\Psi_n^I(d_I - 0) = \Psi_n^{II}(d_I + 0), \Psi_n^{II}(d - 0) = \Psi_{n+1}^I(d + 0) \quad (2.4)$$

Необходимо записать гамильтониан однослойного графена также в виде матрицы размером 4×4 . Формально это можно сделать, положив в (2.3) $t_\perp = \Delta = 0$ — в этом случае собственные значения гамильтониана будут равны $E_I = \pm v_F \hbar \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, что соответствует спектру однослойного графена в низкоэнергетическом приближении (именно такой подход используется в [72], где рассмотрена ГСР, состоящая из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена (unbiased bilayer graphene), для которого полагают $\Delta=0$). С другой стороны, при таком подходе компоненты спинора, являющегося решением уравнения Шредингера $H_I \Psi^I = E_I \Psi^I$, имеют другой смысл: ψ_1, ψ_2 соответствуют состояниям на подрешетках A_1 и B_1 для электрона вблизи дираковской точки K_1 , ψ_3, ψ_4 — состояниям на тех же подрешетках, но соответствующим дираковской точке K_2 . В низкоэнергетическом приближении в отсутствии переброса электронов между долинами эти состояния независимы друг от друга. Именно независимость состояний позволяет отсчитывать значения квазиимпульса от ближайшей дираковской точки, что дает возможность расширить двухстрочную матрицу гамильтониана однослойного графена до четырехстрочной путем простой добавки комплексно сопряженной матрицы в качестве второго блока блочно-диагональной матрицы размером 4×4 . Итак, гамильтониан однослойного графена запишем в виде

$$H_I = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) & 0 & 0 \\ \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ 0 & 0 & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Следующим этапом будет вычисление волновой функции в области ямы.

Решение уравнения Шредингера в области ямы (1L на рисунке 2.1б) будем искать в виде:

$$\Psi^I = A \psi^I \exp(ik_y y) = A \left(\begin{pmatrix} \varphi_{1p} \\ \varphi_{2p} \\ \varphi_{3p} \\ \varphi_{4p} \end{pmatrix} \exp(ik_1 x) + \begin{pmatrix} \varphi_{1n} \\ \varphi_{2n} \\ \varphi_{3n} \\ \varphi_{4n} \end{pmatrix} \exp(-ik_1 x) \right) \exp(ik_y y) \quad (2.6)$$

Уравнение Шредингера представим в следующем виде:

$$(H_I - E) \Psi^I = 0 \quad (2.7)$$

Получаем:

$$\begin{pmatrix} -E & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) & 0 & 0 \\ \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) & -E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ 0 & 0 & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) & -E \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \varphi_{1p} e^{ik_1 x} e^{ik_y y} + \varphi_{1n} e^{-ik_1 x} e^{ik_y y} \\ \varphi_{2p} e^{ik_1 x} e^{ik_y y} + \varphi_{2n} e^{-ik_1 x} e^{ik_y y} \\ \varphi_{3p} e^{ik_1 x} e^{ik_y y} + \varphi_{3n} e^{-ik_1 x} e^{ik_y y} \\ \varphi_{4p} e^{ik_1 x} e^{ik_y y} + \varphi_{4n} e^{-ik_1 x} e^{ik_y y} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.8)$$

Выполняем перемножение матриц, группируем.

$$e^{ik_1x} \begin{pmatrix} -E\varphi_{1p} + \hbar v_F(k_1 - ik_y)\varphi_{2p} \\ \hbar v_F(k_1 + ik_y)\varphi_{1p} - E\varphi_{2p} \\ -E\varphi_{3p} + \hbar v_F(k_1 + ik_y)\varphi_{4p} \\ \hbar v_F(k_1 - ik_y)\varphi_{3p} - E\varphi_{4p} \end{pmatrix} + e^{-ik_1x} \begin{pmatrix} -E\varphi_{1n} - \hbar v_F(k_1 + ik_y)\varphi_{2n} \\ \hbar v_F(-k_1 + ik_y)\varphi_{1n} - E\varphi_{2n} \\ -E\varphi_{3n} + \hbar v_F(-k_1 + ik_y)\varphi_{4n} \\ -\hbar v_F(k_1 + ik_y)\varphi_{3n} - E\varphi_{4n} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.9)$$

Вводим обозначения

$$\lambda_{\pm} = \hbar v_F(k_1 \pm ik_y) \quad (2.10)$$

В соответствии с (2.10) выполняем подстановку:

$$e^{ik_1x} \begin{pmatrix} -E\varphi_{1p} + \lambda_{-}\varphi_{2p} \\ \lambda_{+}\varphi_{1p} - E\varphi_{2p} \\ -E\varphi_{3p} + \lambda_{+}\varphi_{4p} \\ \lambda_{-}\varphi_{3p} - E\varphi_{4p} \end{pmatrix} + e^{-ik_1x} \begin{pmatrix} -E\varphi_{1n} - \lambda_{+}\varphi_{2n} \\ -\lambda_{-}\varphi_{1n} - E\varphi_{2n} \\ -E\varphi_{3n} - \lambda_{-}\varphi_{4n} \\ -\lambda_{+}\varphi_{3n} - E\varphi_{4n} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.11)$$

Поскольку функции $\exp(ik_1x)$ и $\exp(-ik_1x)$ линейно независимы, равенство нулю возможно только в том случае, когда равны нулю коэффициенты при этих функциях. Выпишем получившуюся систему уравнений:

$$\begin{aligned} -E\varphi_{1p} + \lambda_{-}\varphi_{2p} &= 0, \\ -E\varphi_{1n} - \lambda_{+}\varphi_{2n} &= 0, \\ \lambda_{+}\varphi_{1p} - E\varphi_{2p} &= 0, \\ -\lambda_{-}\varphi_{1n} - E\varphi_{2n} &= 0, \\ -E\varphi_{3p} + \lambda_{+}\varphi_{4p} &= 0, \\ -E\varphi_{3n} - \lambda_{-}\varphi_{4n} &= 0, \\ \lambda_{-}\varphi_{3p} - E\varphi_{4p} &= 0, \\ -\lambda_{+}\varphi_{3n} - E\varphi_{4n} &= 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Видно, что (2.12) линейно зависима. Исключим из (2.12) компоненты $\varphi_{2n}, \varphi_{4n}, \varphi_{2p}, \varphi_{4p}$. Для этого решим первое, второе, пятое и шестое уравнения в (2.12) и подставим эти решения в (2.6):

$$\varphi_{2n} = -\frac{E}{\lambda_{+}}\varphi_{1n}, \quad \varphi_{2p} = \frac{E}{\lambda_{-}}\varphi_{1p}, \quad \varphi_{4n} = -\frac{E}{\lambda_{-}}\varphi_{3n}, \quad \varphi_{4p} = \frac{E}{\lambda_{+}}\varphi_{3p} \quad (2.13)$$

$$\psi^I = A \left(\begin{pmatrix} \varphi_{1p} \\ \frac{E}{\lambda_-} \varphi_{1p} \\ \varphi_{3p} \\ \frac{E}{\lambda_+} \varphi_{3p} \end{pmatrix} \exp(ik_1 x) + \begin{pmatrix} \varphi_{1n} \\ -\frac{E}{\lambda_+} \varphi_{1n} \\ \varphi_{3n} \\ -\frac{E}{\lambda_-} \varphi_{3n} \end{pmatrix} \exp(-ik_1 x) \right) \quad (2.14)$$

$$\psi^I = A \begin{pmatrix} \varphi_{1p} e^{ik_1 x} + \varphi_{1n} e^{-ik_1 x} \\ \frac{E}{\lambda_-} \varphi_{1p} e^{ik_1 x} - \frac{E}{\lambda_+} \varphi_{1n} e^{-ik_1 x} \\ \varphi_{3p} e^{ik_1 x} + \varphi_{3n} e^{-ik_1 x} \\ \frac{E}{\lambda_+} \varphi_{3p} e^{ik_1 x} - \frac{E}{\lambda_-} \varphi_{3n} e^{-ik_1 x} \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Выделим в отдельный столбец компоненты $\{\varphi_{1p}, \varphi_{1n}, \varphi_{3p}, \varphi_{3n}\}^T$.

Выражение (2.15) принимает вид:

$$\begin{aligned} \psi^I &= A \begin{pmatrix} \varphi_{1p} e^{ik_1 x} + \varphi_{1n} e^{-ik_1 x} \\ \frac{E}{\lambda_-} \varphi_{1p} e^{ik_1 x} - \frac{E}{\lambda_+} \varphi_{1n} e^{-ik_1 x} \\ \varphi_{3p} e^{ik_1 x} + \varphi_{3n} e^{-ik_1 x} \\ \frac{E}{\lambda_+} \varphi_{3p} e^{ik_1 x} - \frac{E}{\lambda_-} \varphi_{3n} e^{-ik_1 x} \end{pmatrix} = \\ &= A \begin{pmatrix} e^{ik_1 x} & e^{-ik_1 x} & 0 & 0 \\ \frac{E}{\lambda_-} e^{ik_1 x} - \frac{E}{\lambda_+} e^{-ik_1 x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1 x} & e^{-ik_1 x} \\ 0 & 0 & \frac{E}{\lambda_+} e^{ik_1 x} - \frac{E}{\lambda_-} e^{-ik_1 x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1p} \\ \varphi_{1n} \\ \varphi_{3p} \\ \varphi_{3n} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Таким образом, выражение для волновой функции принимает следующий вид:

$$\psi^I = A \begin{pmatrix} e^{ik_1 x} & e^{-ik_1 x} & 0 & 0 \\ \frac{e^{ik_1 x} E}{\lambda_-} - \frac{e^{-ik_1 x} E}{\lambda_+} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1 x} & e^{-ik_1 x} \\ 0 & 0 & \frac{e^{ik_1 x} E}{\lambda_+} - \frac{e^{-ik_1 x} E}{\lambda_-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1p} \\ \varphi_{1n} \\ \varphi_{3p} \\ \varphi_{3n} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

В выражении (2.17) имеет смысл вынести экспоненты в отдельную матрицу. Видно, что такой матрицей является

$$M = \begin{pmatrix} e^{ik_1x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_1x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_1x} \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Вычисляем матрицу, содержащую значения энергии. Для этого матрицу из (2.17) умножаем справа на матрицу, обратную (2.18):

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} e^{-ik_1x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{ik_1x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-ik_1x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik_1x} \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

Выражение (2.6) приобретает вид:

$$\psi^I = A \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{E}{\lambda_-} - \frac{E}{\lambda_+} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{E}{\lambda_+} - \frac{E}{\lambda_-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_1x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_1x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_1x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1p} \\ \varphi_{1n} \\ \varphi_{3p} \\ \varphi_{3n} \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Обратимся теперь к вычислению энергии. Разобьем систему (2.12) на две системы:

$$\begin{aligned} -E\varphi_{1n} - \lambda_+\varphi_{2n} &= 0, \\ -\lambda_-\varphi_{1n} - E\varphi_{2n} &= 0, \\ -E\varphi_{3n} - \lambda_-\varphi_{4n} &= 0, \\ -\lambda_+\varphi_{3n} - E\varphi_{4n} &= 0. \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} -E\varphi_{1p} + \lambda_-\varphi_{2p} &= 0, \\ \lambda_+\varphi_{1p} - E\varphi_{2p} &= 0, \\ -E\varphi_{3p} + \lambda_+\varphi_{4p} &= 0, \\ \lambda_-\varphi_{3p} - E\varphi_{4p} &= 0. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Перепишем эти системы в виде произведения матрицы на столбец неизвестных коэффициентов волновой функции. Системы (2.21) и (2.22) приобретают следующий вид:

$$\begin{pmatrix} -E - \lambda_+ & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda_- & -E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E - \lambda_- \\ 0 & 0 & -\lambda_+ & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1n} \\ \varphi_{2n} \\ \varphi_{3n} \\ \varphi_{4n} \end{pmatrix} = 0, \quad (2.23)$$

$$\begin{pmatrix} -E\lambda_- & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_+ & -E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E\lambda_+ \\ 0 & 0 & \lambda_- & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1p} \\ \varphi_{2p} \\ \varphi_{3p} \\ \varphi_{4p} \end{pmatrix} = 0. \quad (2.24)$$

Обе системы линейно зависимы, то есть решение возможно только в случае, когда определитель матрицы равен нулю. Вычисляем определитель и решаем получившееся уравнение. Получаем:

$$\lambda_+ \lambda_- = \hbar^2 v_F^2 (k_1 + ik_y)(k_1 - ik_y) = \hbar^2 v_F^2 (k_1^2 + k_y^2) = E^2 \quad (2.25)$$

Воспользовавшись (2.25), преобразуем (2.20). Окончательно, выражение для волновой функции в области, где справедлив гамильтониан однослойного графена, приобретает вид

$$\psi^I = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\lambda_+}{E} & -\frac{\lambda_-}{E} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{\lambda_-}{E} & -\frac{\lambda_+}{E} \end{pmatrix}}_G \begin{pmatrix} e^{ik_1 x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1 x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_1 x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1p} \\ \varphi_{1n} \\ \varphi_{3p} \\ \varphi_{3n} \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

$$E^2 = \hbar^2 v_F^2 (k_1^2 + k_y^2) \quad (2.27)$$

$$\lambda_{\pm} = \hbar v_F (k_1 \pm ik_y) \quad (2.28)$$

Из (2.26) видно, что пары компонент φ_{1p} , φ_{1n} и φ_{3p} , φ_{3n} независимы друг от друга.

Для вычисления волновой функции в области барьера нужно рассмотреть две ситуации: когда энергия электрона на границы ямы и барьера меньше Δ — в этом случае решение затухающее $\psi^II = B_1 \exp(k_2 x) + B_2 \exp(-k_2 x)$, и случай, когда энергия больше Δ — в этом решение осциллирующее: $\psi^II = C_1 \exp(ik_2 x) + C_2 \exp(-ik_2 x)$. Рассмотрим затухающее решение.

Ищем решение уравнение Шредингера с гамильтонианом (2.4) в виде:

$$\Psi^II = A \psi^II \exp(ik_y y) =$$

$$= A \left(\begin{pmatrix} \psi_{1p} \\ \psi_{2p} \\ \psi_{3p} \\ \psi_{4p} \end{pmatrix} \exp(k_2 x) + \begin{pmatrix} \psi_{1n} \\ \psi_{2n} \\ \psi_{3n} \\ \psi_{4n} \end{pmatrix} \exp(-k_2 x) \right) \exp(ik_y y) \quad (2.29)$$

Уравнение Шредингера, по аналогии с (2.8), запишем в виде:

$$\begin{pmatrix} \Delta - E & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) & t_{\perp} & 0 \\ \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) & \Delta - E & 0 & 0 \\ t_{\perp} & 0 & -\Delta - E & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ 0 & 0 & \hbar v_F \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) & -\Delta - E \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \psi_{1p} e^{k_2 x} e^{ik_y y} + \psi_{1n} e^{-k_2 x} e^{ik_y y} \\ \psi_{2p} e^{k_2 x} e^{ik_y y} + \psi_{2n} e^{-k_2 x} e^{ik_y y} \\ \psi_{3p} e^{k_2 x} e^{ik_y y} + \psi_{3n} e^{-k_2 x} e^{ik_y y} \\ \psi_{4p} e^{k_2 x} e^{ik_y y} + \psi_{4n} e^{-k_2 x} e^{ik_y y} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.30)$$

Выполняем перемножение матриц, группируем.

$$e^{k_2 x} \begin{pmatrix} (\Delta - E)\psi_{1p} - i\hbar v_F(k_2 + k_y)\psi_{2p} + t_{\perp}\psi_{3p} \\ -i\hbar v_F(k_2 - k_y)\psi_{1p} + (\Delta - E)\psi_{2p} \\ t_{\perp}\psi_{1p} - (\Delta + E)\psi_{3p} - i\hbar v_F(k_2 - k_y)\psi_{4p} \\ -i\hbar v_F(k_2 + k_y)\psi_{3p} - (\Delta + E)\psi_{4p} \end{pmatrix} +$$

$$+ e^{-k_2 x} \begin{pmatrix} (\Delta - E)\psi_{1n} + i\hbar v_F(k_2 - k_y)\psi_{2n} + t_{\perp}\psi_{3n} \\ i\hbar v_F(k_2 + k_y)\psi_{1n} + (\Delta - E)\psi_{2n} \\ t_{\perp}\psi_{1n} - (\Delta + E)\psi_{3n} + i\hbar v_F(k_2 + k_y)\psi_{4n} \\ i\hbar v_F(k_2 - k_y)\psi_{3n} - (\Delta + E)\psi_{4n} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.31)$$

Введем обозначения

$$\tilde{\lambda}_{\pm} = i\hbar v_F(k_2 \pm k_y). \quad (2.32)$$

Выполняем замену:

$$\begin{aligned}
& e^{k_2 x} \begin{pmatrix} (\Delta - E)\psi_{1p} - \tilde{\lambda}_+ \psi_{2p} + t_\perp \psi_{3p} \\ -\tilde{\lambda}_- \psi_{1p} + (\Delta - E)\psi_{2p} \\ t_\perp \psi_{1p} - (\Delta + E)\psi_{3p} - \tilde{\lambda}_- \psi_{4p} \\ -\tilde{\lambda}_+ \phi_{3p} - (\Delta + E)\phi_{4p} \end{pmatrix} + \\
& + e^{-k_2 x} \begin{pmatrix} (\Delta - E)\psi_{1n} + \tilde{\lambda}_- \psi_{2n} + t_\perp \psi_{3n} \\ \tilde{\lambda}_+ \psi_{1n} + (\Delta - E)\psi_{2n} \\ t_\perp \psi_{1n} - (\Delta + E)\psi_{3n} + \tilde{\lambda}_+ \psi_{4n} \\ \tilde{\lambda}_- \psi_{3n} - (\Delta + E)\psi_{4n} \end{pmatrix} = 0. \quad (2.33)
\end{aligned}$$

Поскольку функции $\exp(k_2 x)$ и $\exp(-k_2 x)$ линейно независимы, равенство нулю компонентов в (2.33) возможно только при равенстве нулю всех коэффициентов при $\exp(k_2 x)$ и $\exp(-k_2 x)$. Сгруппируем эти коэффициенты в две системы уравнений:

$$\begin{aligned}
(\Delta - E)\psi_{1n} + \tilde{\lambda}_- \psi_{2n} + t_\perp \psi_{3n} &= 0, \\
\tilde{\lambda}_+ \psi_{1n} + (\Delta - E)\psi_{2n} &= 0, \\
t_\perp \psi_{1n} - (\Delta + E)\psi_{3n} + \tilde{\lambda}_+ \psi_{4n} &= 0, \\
\tilde{\lambda}_- \psi_{3n} - (\Delta + E)\psi_{4n} &= 0. \quad (2.34)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\Delta - E)\psi_{1p} - \tilde{\lambda}_+ \psi_{2p} + t_\perp \psi_{3p} &= 0, \\
-\tilde{\lambda}_- \psi_{1p} + (\Delta - E)\psi_{2p} &= 0, \\
t_\perp \psi_{1p} - (\Delta + E)\psi_{3p} - \tilde{\lambda}_- \psi_{4p} &= 0, \\
-\tilde{\lambda}_+ \phi_{3p} - (\Delta + E)\phi_{4p} &= 0. \quad (2.35)
\end{aligned}$$

Обе эти системы линейно зависимы, то есть решение возможно только в том случае, если определитель равен нулю. Выделяем матрицы систем (2.34) и (2.35):

$$\begin{pmatrix} \Delta - E & \tilde{\lambda}_- & t_\perp & 0 \\ \tilde{\lambda}_+ & \Delta - E & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & -(\Delta + E) & \tilde{\lambda}_+ \\ 0 & 0 & \tilde{\lambda}_- & -(\Delta + E) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1n} \\ \psi_{2n} \\ \psi_{3n} \\ \psi_{4n} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.36)$$

$$\begin{pmatrix} (\Delta - E) & -\tilde{\lambda}_+ & t_\perp & 0 \\ -\tilde{\lambda}_- & (\Delta - E) & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & -(\Delta + E) & -\tilde{\lambda}_- \\ 0 & 0 & -\tilde{\lambda}_+ & -(\Delta + E) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1p} \\ \psi_{2p} \\ \psi_{3p} \\ \psi_{4p} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.37)$$

Вычисляем определители матриц (2.36) и (2.37) – эти матрицы, как и должно быть, имеют одинаковый определитель, приравниваем определитель к нулю, решаем получившееся уравнение относительно произведения $x = \tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- = -\hbar^2 v_F^2 (k_2^2 - k_y^2)$

$$(\Delta^2 - E^2)^2 + 2(\Delta^2 + E^2)\hbar^2 v_F^2 (k_2^2 - k_y^2) + \hbar^4 v_F^4 (k_2^2 - k_y^2)^2 + (\Delta^2 - E^2)t_\perp^2 = 0, \quad (2.38)$$

$$x^2 - 2(\Delta^2 + E^2)x + (\Delta^2 - E^2)(\Delta^2 - E^2 + t_\perp^2)^2 = 0 \quad (2.39)$$

Получаем:

$$x = \Delta^2 + E^2 \pm \sqrt{4\Delta^2 E^2 - \Delta^2 t_\perp^2 + E^2 t_\perp^2} \quad (2.40)$$

Таким образом,

$$\hbar^2 v_F^2 (-k_2^2 + k_y^2) = \Delta^2 + E^2 \pm \sqrt{4\Delta^2 E^2 - \Delta^2 t_\perp^2 + E^2 t_\perp^2}. \quad (2.41)$$

Поскольку получается затухающее решение, необходимо потребовать, чтобы k_2 был вещественным. То есть должно выполняться условие

$$4\Delta^2 E^2 - \Delta^2 t_\perp^2 + E^2 t_\perp^2 \geq 0, \quad (2.42)$$

а также условие

$$k_y^2 - \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{1}{\hbar^2 v_F^2} \sqrt{4\Delta^2 E^2 - \Delta^2 t_\perp^2 + E^2 t_\perp^2} \geq 0, \quad (2.43)$$

в этом случае

$$k_2 = \sqrt{k_y^2 - \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{1}{\hbar^2 v_F^2} \sqrt{4\Delta^2 E^2 - \Delta^2 t_\perp^2 + E^2 t_\perp^2}}, \quad (2.44)$$

или условие

$$k_y^2 - \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{1}{\hbar^2 v_F^2} \sqrt{4\Delta^2 E^2 - \Delta^2 t_\perp^2 + E^2 t_\perp^2} \geq 0, \quad (2.45)$$

в этом случае

$$k_2 = \sqrt{k_y^2 - \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} + \frac{1}{\hbar^2 v_F^2} \sqrt{4\Delta^2 E^2 - \Delta^2 t_\perp^2 + E^2 t_\perp^2}}. \quad (2.46)$$

Очевидно, что условия (2.43), (2.45) могут выполняться совместно.

Как и в случае однослойного образца, исключим часть коэффициентов волновой функции, воспользовавшись (2.34), (2.35). Из второго и четвертого уравнения систем (2.34), (2.35) получаем:

$$\begin{aligned}
\psi_{2n} &= -\frac{\tilde{\lambda}_+}{\Delta-E} \psi_{1n} \\
\psi_{4n} &= \frac{\tilde{\lambda}_-}{\Delta+E} \psi_{3n} \\
\psi_{2p} &= \frac{\tilde{\lambda}_-}{\Delta-E} \psi_{1p} \\
\psi_{4p} &= -\frac{\tilde{\lambda}_+}{\Delta+E} \psi_{3p}
\end{aligned} \tag{2.47}$$

Первые и третьи уравнения систем (2.34) и (2.35) приобретают вид:

$$\begin{aligned}
\left[(\Delta - E) - \frac{\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_-}{\Delta-E} \right] \psi_{1n} + t_{\perp} \psi_{3n} &= 0, \\
t_{\perp} \psi_{1n} - \left[(\Delta + E) - \frac{\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_-}{\Delta-E} \right] \psi_{3n} &= 0, \\
\left[(\Delta - E) - \frac{\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_-}{\Delta-E} \right] \psi_{1p} + t_{\perp} \psi_{3p} &= 0, \\
t_{\perp} \psi_{1p} - \left[(\Delta + E) - \frac{\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_-}{\Delta-E} \right] \psi_{3p} &= 0.
\end{aligned} \tag{2.48}$$

Воспользовавшись этими соотношениями, можно также исключить ψ_{3n}, ψ_{3p} :

$$\begin{aligned}
\psi_{3n} &= \frac{\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- - (\Delta-E)^2}{(\Delta-E)t_{\perp}} \psi_{1n} \\
\psi_{3p} &= \frac{\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- - (\Delta-E)^2}{(\Delta-E)t_{\perp}} \psi_{1p}
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Получаем следующие соотношения между коэффициентами:

$$\begin{aligned}
\psi_{2n} &= -\frac{\tilde{\lambda}_+}{\Delta-E} \psi_{1n} & \psi_{2p} &= \frac{\tilde{\lambda}_-}{\Delta-E} \psi_{1p} \\
\psi_{3n} &= \frac{\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- - (\Delta-E)^2}{(\Delta-E)t_{\perp}} \psi_{1n} & \psi_{3p} &= \frac{\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- - (\Delta-E)^2}{(\Delta-E)t_{\perp}} \psi_{1p} \\
\psi_{4n} &= \frac{\tilde{\lambda}_- (\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- - (\Delta-E)^2)}{(\Delta^2-E^2)t_{\perp}} \psi_{1n} & \psi_{4p} &= -\frac{\tilde{\lambda}_+ (\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- - (\Delta-E)^2)}{(\Delta^2-E^2)t_{\perp}} \psi_{1p}
\end{aligned} \tag{2.50}$$

Подставляем получившиеся выражения в (2.29), выделяем вектор-столбец $(\psi_{1p}, \psi_{1n}, \psi_{1p}, \psi_{1n})^T$, экспоненты собираем в отдельную матрицу по аналогии со случаем однослойного участка. Получаем следующее выражение для волновой функции:

$$\psi^{II} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\tilde{\lambda}_-}{\Delta - E} - \frac{\tilde{\lambda}_+}{\Delta - E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- - (\Delta - E)^2}{(\Delta - E)t_\perp} & \frac{\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- - (\Delta - E)^2}{(\Delta - E)t_\perp} \\ 0 & 0 & -\frac{\tilde{\lambda}_+(\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- - (\Delta - E)^2)}{(\Delta^2 - E^2)t_\perp} & \frac{\tilde{\lambda}_-(\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- - (\Delta - E)^2)}{(\Delta^2 - E^2)t_\perp} \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} e^{k_2 x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-k_2 x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_2 x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-k_2 x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1p} \\ \psi_{1n} \\ \psi_{1p} \\ \psi_{1n} \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

Введем обозначение

$$b = -\frac{(\Delta - E)^2 - \tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_-}{(\Delta - E)t_\perp} \quad (2.52)$$

Тогда (2.51) принимает вид:

$$\psi^{II} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\tilde{\lambda}_-}{\Delta - E} - \frac{\tilde{\lambda}_+}{\Delta - E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & b \\ 0 & 0 & -\frac{\tilde{\lambda}_+ b}{\Delta + E} & \frac{\tilde{\lambda}_- b}{\Delta + E} \end{pmatrix}}_J \begin{pmatrix} e^{k_2 x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-k_2 x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_2 x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-k_2 x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1p} \\ \psi_{1n} \\ \psi_{1p} \\ \psi_{1n} \end{pmatrix}. \quad (2.53)$$

Осциллирующее решение может быть получено из (2.53) путем формальной замены $k_2 \rightarrow ik_2$.

Для вывода дисперсионного соотношения воспользуемся методом матрицы переноса (Т-матрицы) [6, 72, 108]. Т-матрица связывает значения компонент спинора для n -й сверхъядчейки с компонентами спинора того же решения для $(n+1)$ -й сверхъядчейки, например, для решения в области квантовой ямы:

$$\begin{pmatrix} \varphi_{1p}(l+1) \\ \varphi_{1n}(l+1) \\ \varphi_{3p}(l+1) \\ \varphi_{3n}(l+1) \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \varphi_{1p}(l) \\ \varphi_{1n}(l) \\ \varphi_{3p}(l) \\ \varphi_{3n}(l) \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Чтобы найти Т-матрицу, запишем условие непрерывности решения уравнения Дирака:

$$\psi_I^n(d_I - 0) = \psi_{II}^n(d_I + 0), \quad (2.55)$$

$$\psi_{II}^n(d - 0) = \psi_I^{n+1}(+0). \quad (2.56)$$

Перепишем выражения для волновых функций (2.26) и (2.53):

$$\psi^I = G \begin{pmatrix} e^{ik_1x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_1x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_1x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1p} \\ \varphi_{1n} \\ \varphi_{3p} \\ \varphi_{3n} \end{pmatrix}, \quad (2.57)$$

$$\psi^{II} = J \begin{pmatrix} e^{k_2x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-k_2x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_2x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-k_2x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1p} \\ \psi_{1n} \\ \psi_{1p} \\ \psi_{1n} \end{pmatrix}. \quad (2.58)$$

Выражения (2.55), (2.56) принимают вид:

$$\begin{aligned} G \begin{pmatrix} e^{ik_1d_I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_1d_I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1d_I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_1d_I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1p}(n) \\ \varphi_{1n}(n) \\ \varphi_{3p}(n) \\ \varphi_{3n}(n) \end{pmatrix} = \\ = J \begin{pmatrix} e^{k_2d_I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-k_2d_I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_2d_I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-k_2d_I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1p}(n) \\ \psi_{1n}(n) \\ \psi_{1p}(n) \\ \psi_{1n}(n) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.59)$$

$$J \begin{pmatrix} e^{k_2d} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-k_2d} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_2d} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-k_2d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1p}(n) \\ \psi_{1n}(n) \\ \psi_{1p}(n) \\ \psi_{1n}(n) \end{pmatrix} = G \begin{pmatrix} \varphi_{1p}(n+1) \\ \varphi_{1n}(n+1) \\ \varphi_{3p}(n+1) \\ \varphi_{3n}(n+1) \end{pmatrix}. \quad (2.60)$$

Преобразуем:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_{1p}(n) \\ \psi_{1n}(n) \\ \psi_{1p}(n) \\ \psi_{1n}(n) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{k_2d_I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-k_2d_I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_2d_I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-k_2d_I} \end{pmatrix} J^{-1} \times \\ &\times G \begin{pmatrix} e^{ik_1d_I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_1d_I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1d_I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_1d_I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1p}(n) \\ \varphi_{1n}(n) \\ \varphi_{3p}(n) \\ \varphi_{3n}(n) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.61)$$

$$\begin{pmatrix} \varphi_{1p}(n+1) \\ \varphi_{1n}(n+1) \\ \varphi_{3p}(n+1) \\ \varphi_{3n}(n+1) \end{pmatrix} = G^{-1} J \begin{pmatrix} e^{k_2 d} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-k_2 d} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_2 d} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-k_2 d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1p}(n) \\ \psi_{1n}(n) \\ \psi_{3p}(n) \\ \psi_{3n}(n) \end{pmatrix}. \quad (2.62)$$

После объединения (2.61), (2.62), с учетом (2.54) получаем выражение для Т-матрицы:

$$T = G^{-1} J \begin{pmatrix} e^{k_2 d_{II}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-k_2 d_{II}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_2 d_{II}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-k_2 d_{II}} \end{pmatrix} J^{-1} G \begin{pmatrix} e^{ik_1 d_I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d_I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1 d_I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_1 d_I} \end{pmatrix}. \quad (2.63)$$

Пусть $N=L/d$ — число сверхъячеек во всей сверхрешетке, L — длина сверхрешетки вдоль направления чередования слоев (ось X). Циклические граничные условия Борна-Кармана вдоль этого направления принимают вид:

$$\psi_{I,II}(N) = T^N \psi_{I,II}(0), \quad (2.64)$$

поэтому $T^N=1$ (имеется в виду единичная матрица 4x4). Переходим к диагональной форме трансляционной матрицы, используя унитарное преобразование S :

$$T_d = S T S^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix}, \quad (2.65)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ — собственные значения матрицы T . Должно выполняться соотношение $\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \lambda_3 \cdot \lambda_4 = 1$. Это условие будет выполнено, если $\lambda_2 = \lambda_1^*, \lambda_4 = \lambda_3^*, |\lambda_1| = 1$. Можно положить

$$T_d = S T S^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_1^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_1^* \end{pmatrix}, \quad (2.65')$$

$\lambda_1 = \exp(2\pi i n/N)$, $-N < n \leq N$ (всего $2N$ значений, удвоение связано с наличием двух треугольных подрешеток гексагональной решетки графена). Диагонализация трансляционной матрицы не приводит к изменению ее шпура

(суммы элементов главной диагонали): $\text{Tr}T = \text{Tr}T_d$. Вводим квазиимпульс электрона $k_x = 2\pi n/L$ ($-2\pi/d < k_x \leq 2\pi/d$), получаем дисперсионное уравнение:

$$\text{Tr}T = 4\cos k_x d \quad (2.66)$$

Дисперсионное соотношение, позволяющее вычислить значения энергии электрона $E_n(k_x, k_y)$ (n — номер минизоны, k_x, k_y — компоненты квазиимпульса электрона), представим в виде:

$$F(E, k_1(E), k_2(E), q_x, q_y) = 0 \quad (2.67)$$

Условия (2.43), (2.45) определяют две ветви затухающего в области барьера решения уравнения Шредингера, описывающего состояние электрона в рассматриваемой ГСР, что соответствует присутствию в спектре двухслойного графена двух ветвей, при этом в дисперсионном уравнении (2.67) нужно полагать k_2 вещественным. В случаях, когда выполняются условия, противоположные условиям (2.43), (2.45), существуют два осциллирующих решения, соответствующего двум ветвям спектра исходного материала — двухслойного графена, при этом в дисперсионном уравнении (2.67) нужно полагать k_2 мнимым. Сгруппируем полученные результаты по типу соответствия той или иной дисперсионной кривой двухслойного графена.

Перейдем к безразмерным переменным: $q_{x,y} = k_{x,y}d$, $q_{1,2} = k_{1,2}d$, $a_I = d_I/d$, $a_{II} = d_{II}/d$, $B = \hbar v_F/(t_\perp d)$, величины E и Δ будем измерять в единицах $t_\perp$. Введем обозначения.

$$\begin{aligned} Q_2^+ &= q_y^2 - \frac{\Delta^2 - E^2}{B^2} + \frac{\sqrt{(4\Delta^2 + 1)E^2 - \Delta^2}}{B^2} \\ Q_2^- &= q_y^2 - \frac{\Delta^2 - E^2}{B^2} - \frac{\sqrt{(4\Delta^2 + 1)E^2 - \Delta^2}}{B^2} \\ Q_1 &= \frac{E^2}{B^2} - q_y^2 \end{aligned} \quad (2.68)$$

$$F_1 = 2\cos q_1 a_I \text{ch} q_2 a_{II} + \frac{E^2(q_1^2 - q_2^2) + \Delta^2(q_y^2 - q_1^2)}{(\Delta^2 - E^2)q_1 q_2} \sin q_1 a_I \text{sh} q_2 a_{II} - 2\cos q_x \quad (2.69)$$

$$F_2 = 2\cos q_1 a_I \cos q_2 a_{II} + \frac{E^2(q_1^2 + q_2^2) + \Delta^2(q_y^2 - q_1^2)}{(\Delta^2 - E^2)q_1 q_2} \sin q_1 a_I \sin q_2 a_{II} - 2\cos q_x \quad (2.70)$$

Первое семейство поверхностей может быть получено на основе решения дисперсионного уравнения (2.67) со следующими значениями параметров:

$$\begin{aligned} Q_1 \geq 0, Q_2^+ \geq 0: q_1 = \sqrt{Q_1}, q_2 = \sqrt{Q_2^+}, F = F_1 \\ Q_1 \geq 0, Q_2^+ < 0: q_1 = \sqrt{Q_1}, q_2 = \sqrt{-Q_2^+}, F = F_2 \end{aligned} \quad (2.71)$$

Второе семейство:

$$\begin{aligned} Q_1 \geq 0, Q_2^- \geq 0: q_1 = \sqrt{Q_1}, q_2 = \sqrt{Q_2^-}, F = F_1 \\ Q_1 \geq 0, Q_2^- < 0: q_1 = \sqrt{Q_1}, q_2 = \sqrt{-Q_2^-}, F = F_2 \end{aligned} \quad (2.72)$$

Дисперсионные уравнения (2.71), (2.72) решались численно методом Ньютона.

Поскольку рассматриваемая структура состоит из чередующихся полосок различных материалов, вследствие нарушения периодичности кристаллических решеток однослойного и двухслойного графена на границе их соприкосновения формируются связанные состояния носителей тока, получившие название поверхностные или таммовские [109-112]. Периодичность в расположении барьеров приводит к формированию таммовской зоны из единичных состояний на границе раздела материалов разного типа. Эти состояния можно получить, положив в (2.6) $k_1 \rightarrow ik_1$. В этом случае левые части дисперсионных уравнений (2.67), по аналогии с (2.69), (2.70), примут вид, соответственно,

$$F_3 = 2\text{ch}q_1 a_I \text{ch}q_2 a_{II} + \frac{-E^2(q_1^2 + q_2^2) + \Delta^2(q_y^2 + q_1^2)}{(\Delta^2 - E^2)q_1 q_2} \text{sh}q_1 a_I \text{sh}q_2 a_{II} - 2\cos q_x \quad (2.73)$$

$$F_4 = 2\text{ch}q_1 a_I \cos q_2 a_{II} + \frac{-E^2(q_1^2 - q_2^2) + \Delta^2(q_y^2 + q_1^2)}{(\Delta^2 - E^2)q_1 q_2} \text{sh}q_1 a_I \sin q_2 a_{II} - 2\cos q_x \quad (2.74)$$

Первое семейство поверхностей, соответствующих таммовской зоне, определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} Q_1 < 0, Q_2^+ \geq 0: q_1 = \sqrt{-Q_1}, q_2 = \sqrt{Q_2^+}, F = F_3 \\ Q_1 < 0, Q_2^+ < 0: q_1 = \sqrt{-Q_1}, q_2 = \sqrt{-Q_2^+}, F = F_4 \end{aligned} \quad (2.75)$$

Второе семейство

$$\begin{aligned} Q_1 < 0, Q_2^- \geq 0: q_1 = \sqrt{-Q_1}, q_2 = \sqrt{Q_2^-}, F = F_3 \\ Q_1 < 0, Q_2^- < 0: q_1 = \sqrt{-Q_1}, q_2 = \sqrt{-Q_2^-}, F = F_4 \end{aligned} \quad (2.76)$$

Выражения (2.71), (2.72), (2.75), (2.76) перебирают все возможные значения Q_1 и $Q_2^\pm$. Таким образом, одно семейство дисперсионных поверхностей определяется выражениями (2.71), (2.75), второе семейство — выражениями (2.72), (2.76).

На рисунке 2.2 показаны нижние четыре минизоны, расположение которых соответствует зоне проводимости исходного материала (рассмотрен случай широких барьеров – ширина полосы двухслойного графена намного больше ширины полосы однослойного графена, величина $\Delta=0.1$ в единицах $t_\perp$). Две нижние минизоны определяются решением дисперсионного уравнения, форма которого задана выражениями (2.72) и (2.76), две верхние минизоны – решением дисперсионного уравнения в форме, заданной (2.71). Видно, что в рассматриваемой ситуации существенны энергетические щели, возникающие между минизонами, то есть рассматриваемая структура должна иметь свойства полупроводника. Энергетический спектр периодичен по q_x .

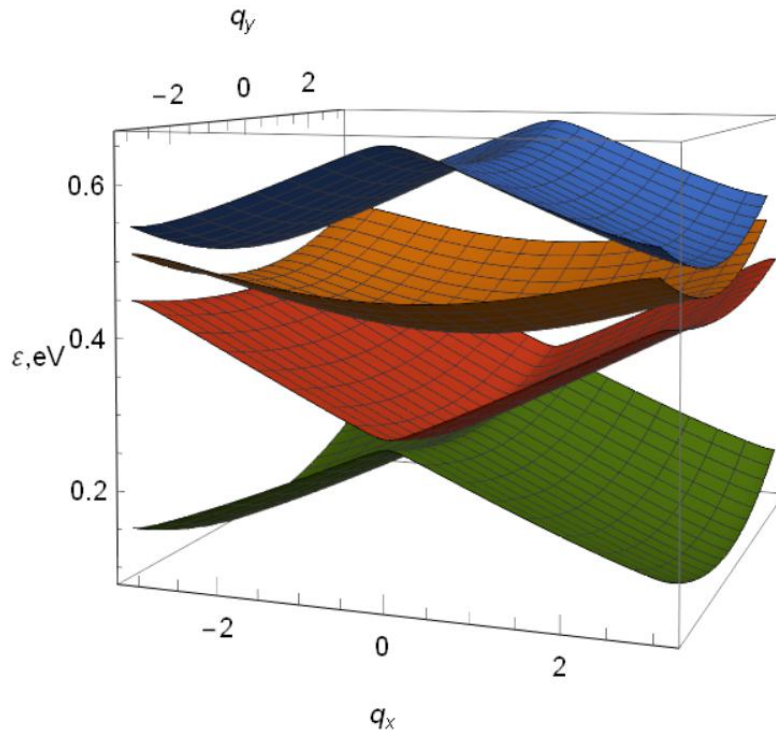


Рисунок 2.2 – Дисперсионные поверхности носителей заряда при $a_I = 0.05$; $a_{II} = 0.95$; $\Delta = 0.1$

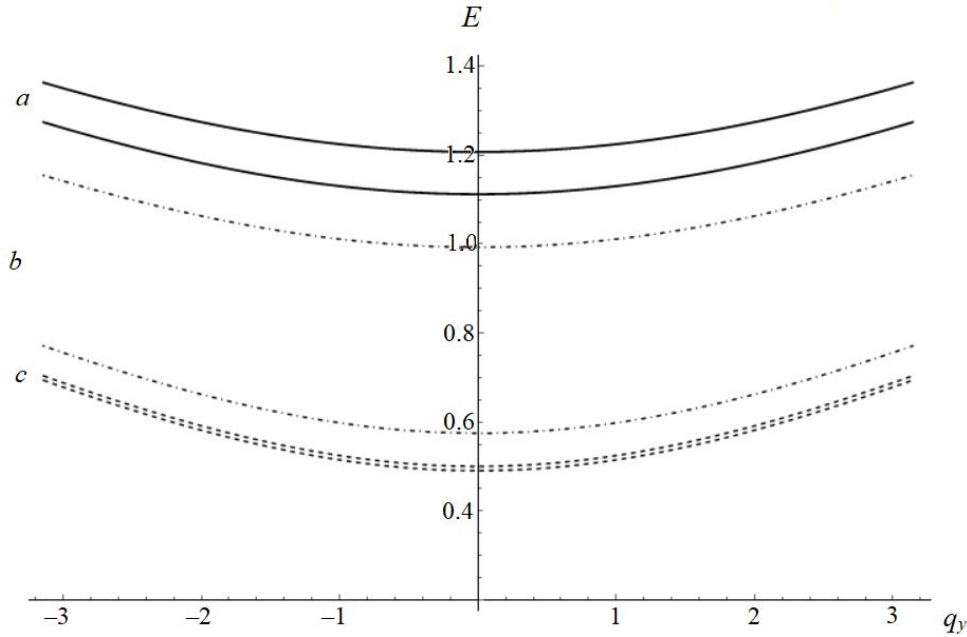


Рисунок 2.3 — Дисперсионные кривые, построенные для случая $\Delta = 0.1$; $q_x = \pi$, описываемые дисперсионным уравнением (2.71) в случае разных относительных ширин ямы и барьера: а) $a_I = 0.05$; $a_{II} = 0.95$; б) $a_I = 0.5$; $a_{II} = 0.5$; в) $a_I = 0.99$; $a_{II} = 0.01$

Величина постоянного поперечного электрического поля, определяющая параметр Δ , оказывает очень существенное влияние на характер энергетического спектра рассматриваемой структуры. При $\Delta \rightarrow 0$ минимальное значение энергии в самой нижней минизоне, описываемой выражениями (2.72) и (2.76), располагающееся в точке $\{q_x, q_y\} = \{0, 0\}$, равно нулю, то есть зона проводимости и валентная зона рассматриваемой сверхрешетки касаются в этой точке, что является характерной особенностью однослойного графена и двухслойного графена в отсутствие внешнего поперечного электрического поля. Именно при $\Delta \rightarrow 0$ в энергетическом спектре появляются так называемые дираковские точки и дираковские линии — наборы значений точек в пространстве квазиимпульсов $\{q_x, q_y\}$, в которых соседние минизоны касаются. Существенно влияет также отношение ширины барьера к ширине ямы (ширины a_{II} полосы двухслойного

графена к ширине полосы однослойного графена a_I). Как видно из рисунка 2.2, две верхние минизоны, описываемые дисперсионным уравнением в форме (2.71), наиболее близко сходятся друг к другу при значениях $q_x = \pm \pi$.

На рисунке 2.3 построены зависимости энергии электрона от q_y при условии $q_x = \pi$ для таких минизон при разных значениях ширины ям и барьеров. Расчет показывает, что при близких значениях a_I и a_{II} энергетическая щель максимальна, в случае узких барьеров энергетическая щель стремится к нулю, что соответствует дираковским линиям. Для минизон, описываемых дисперсионным уравнением в формате (2.72), (2.76) положение дираковской линии определяется значением $q_x = 0$. На рисунке 2.4 представлены профили дисперсионных поверхностей, изображенных на рисунке 2.2, построенные для случаев $q_y = 0$ и $q_y = \pi$. С ростом q_y форма дисперсионных линий меняется мало, линии лишь смещаются в область больших энергий.

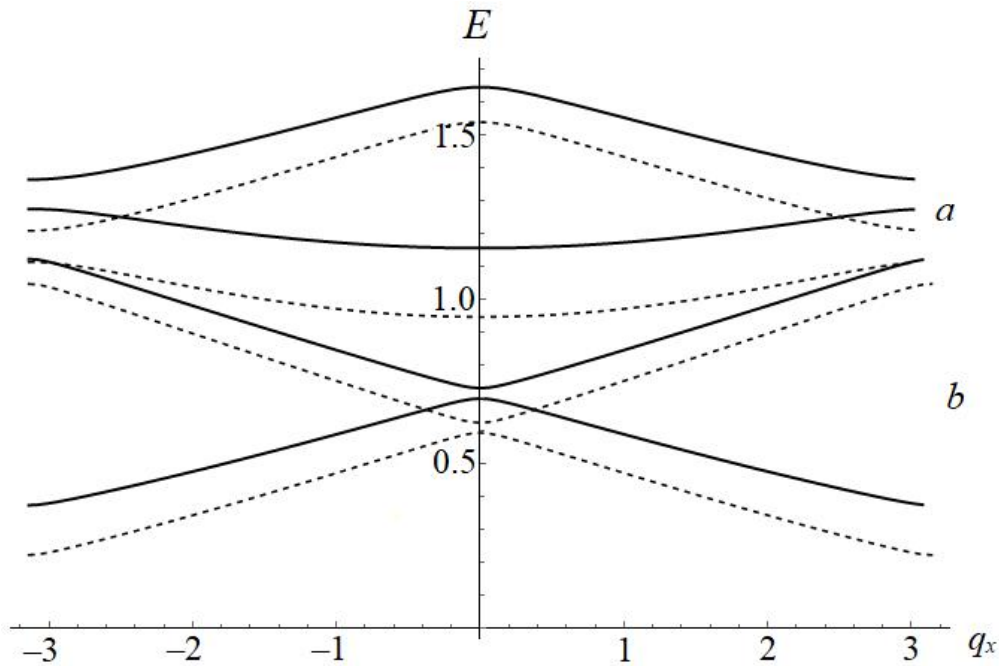


Рисунок 2.4 — Дисперсионные кривые при $a_I = 0.05$; $a_{II} = 0.95$; $\Delta = 0.1$ для случаев $q_y = \pi$ (сплошная линия) и $q_y = 0$ (пунктирная линия), описываемые выражениями а) (2.71), б) (2.72) и (2.76)

Следует отметить, что форма дисперсионных поверхностей, соответствующих различным семействам, существенно отличается в случае широких полосок двухслойного и узких полосок однослойного графена (рисунки 2.2, 2.4). В противоположном случае рассматриваемые семейства дисперсионных поверхностей имеют сходную форму, но разнесены на небольшое расстояние по энергии. На рисунке 2.5 показаны дисперсионные линии, построенные для случая $a_I = 0.95$; $a_{II} = 0.05$ и $\Delta=0$. Сплошной линией обозначены дисперсионные кривые, описываемые выражениями (2.72), пунктирной линией – кривые, описываемые выражением (2.71).

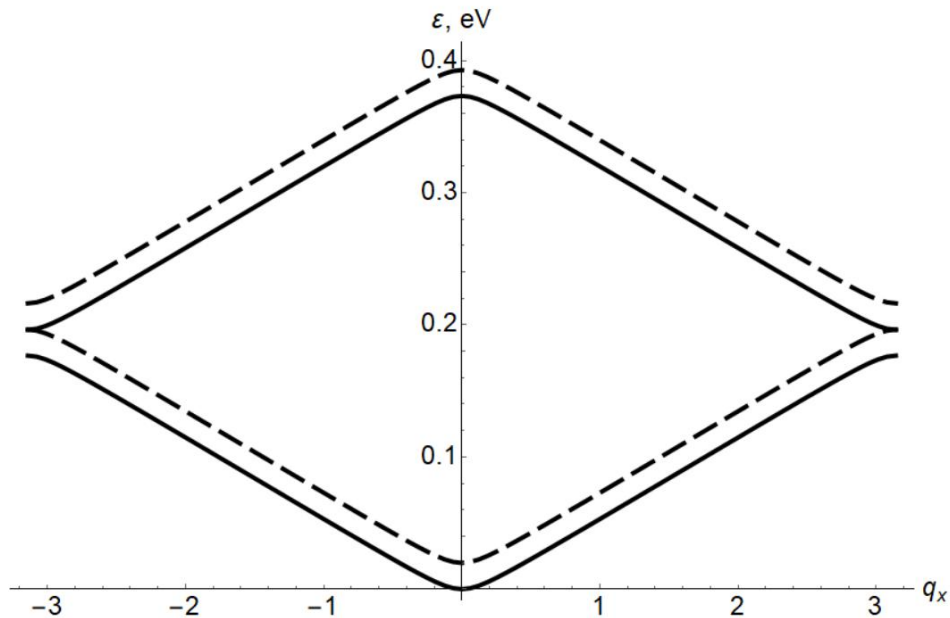


Рисунок 2.5 — Дисперсионные кривые, построенные для случая $a_I = 0.95$; $a_{II} = 0.05$; $\Delta=0$

На рисунке 2.5 особенно хорошо видно возникновение дираковской линии: верхняя минizona семейства, описываемого выражениями (2.72) и (2.76), пересекается с нижней минизоной семейства, описываемого выражением (2.71) при значениях $q_x = \pm \pi$.

Таким образом, с использованием метода Т-матрицы получены дисперсионные соотношения, описывающие два семейства дисперсионных

поверхностей. В отсутствие внешнего поперечного электрического поля минимум энергии электрона в самой нижней минизоне, соответствующей зоне проводимости исходных материалов (однослойного и двухслойного графена), располагается в К-точке, при этом значение энергии оказывается равным нулю, причем форма дисперсионной поверхности в этой точке близка к параболической. Полученный энергетический спектр ГСР имеет минизонный характер, ширина энергетических щелей между полученными минизонами сильно зависит от соотношения ширины ямы и барьера. Приведенные выше результаты получены с использованием низкоэнергетического приближения для спектра однослойного и двухслойного графена. Существенно, что вычисленные дисперсионные поверхности описываются парами дисперсионных уравнений (2.71), (2.75) и (2.72), (2.76), то есть наряду с решениями уравнения Шредингера, осциллирующими в области ямы, вклад вносят и затухающие в области ямы решения, соответствующие таммовским состояниям. Следует отметить, что в сверхрешетке, исследованной в [6], представляющей собой лист графена, помещенный на подложку из чередующихся полосок различных диэлектриков, таммовские состояния не возникают. Независимую проверку полученных результатов, именно, выводов о существовании дираковских точек и дираковских линий, относительной ширины запрещенных и разрешенных минизон, влияния отношения ширины полосок однослойного и двухслойного графена на характер энергетического спектра рассматриваемой ГСР можно осуществить на основе квантовохимического моделирования.

2.2 КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА

Моделирования энергетического спектра рассмотренной выше ГСР проводились с использованием пакета OpenMX (Open source package for Material

eXplorer) – программы для моделирования наноразмерных материалов на основе теории функционала плотности, сохраняющих норму псевдопотенциалов (англ. norm-conserving pseudopotentials), с использованием базиса псевдоатомных орбиталей (англ. pseudo-atomic localized basis functions) [113 - 116]. Программа позволяет эффективно рассчитывать периодические системы, состоящие из сотен и тысяч атомов, за время существенно меньшее, чем программы, основанные на базисных функциях, представленных в виде плоских волн. Алгоритмы и методы, используемые OpenMX, и их реализация адаптированы для *ab initio* вычисления электронной структуры сравнительно крупных структур на параллельных компьютерах. Расчеты выполнялись для сверхрешетки с периодом $d=10.9$ нм, что соответствует 51 периоду основной решетки графена, ширина второго слоя графена изменялась. В процессе SCF-вычислений использовался PBE-функционал, интегрирование по зоне Бриллюэна выполнялось на регулярной сетке 4×16 , точность вычислений составила 10^{-6} Хартри.

Графен имеет гексагональную кристаллическую решетку, постоянная решетки $a_0=2.46$ Å. Прimitives ячейка графена включает 2 атома, расположенных в плоскости решетки. Параметры решетки однослойного графена совпадают с параметрами примитивной решетки двухслойного графена, состоящей из 4 атомов. Расположение атомов в графене представлено на рисунке 2.6. Здесь $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ — векторы кристаллической решетки графенового листа, $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ — векторы обратной решетки. Рассматривается двухслойный графен типа АВ (Bernal stacking графен). И в однослойном, и в двухслойном графене минимум зоны проводимости располагается в К-точке зоны Бриллюэна. Полоски однослойного и двухслойного графена в рассматриваемой сверхрешетке чередуются в направлении оси X .

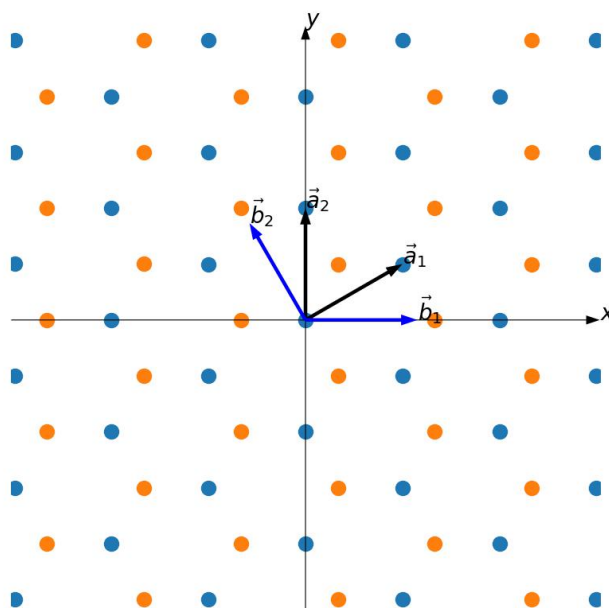
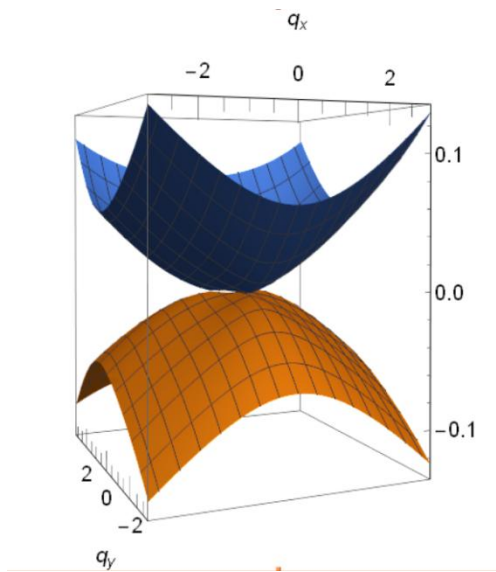
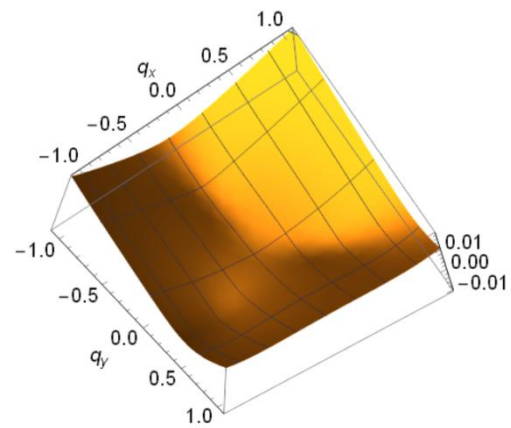


Рисунок 2.6 – Ориентация векторов основной и обратной решетки в графене

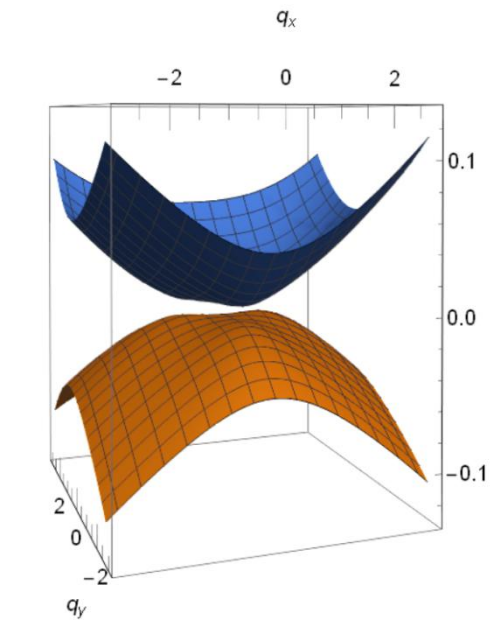
Исследован спектр графеновой сверхрешетки с различным отношением ширин полосок однослойного и двухслойного графена. Рассмотрим, в первую очередь, предельные случаи. На рисунке 2.7 показаны дисперсионные поверхности, построенные для случая двухслойного графена ($d_{II}=d$), отсчет квазиволновых векторов ведется от К-точки. Вблизи дна зоны проводимости различимы особенности, сходные по форме с дираковскими точками (рисунок 2.7б). В случае воздействия на образец постоянного поперечного электрического поля возникает энергетическая щель (рисунок 2.7в), а особенности сглаживаются (рисунок 2.7г). Возникновение дополнительных дираковских точек, расположенных в вершинах и центре правильного треугольника, в спектре двухслойного графена типа АВ, отмечалось в ряде работ, посвященных квантовохимическому моделированию этого материала (см., например, обзор [117]).



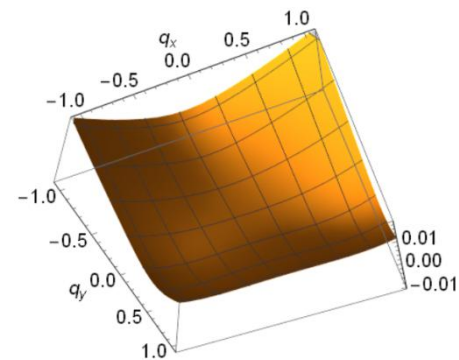
а)



б)



в)



г)

Рисунок 2.7 – Дисперсионные поверхности, ближайшие к уровню Ферми, полученные для случая двухслойного графена. а), б) – в отсутствие внешнего поперечного электрического поля; в), г) – в условиях воздействия поперечного электрического поля 10^6 В/см

На рисунке 2.8 показаны результаты исследования зависимости формы дисперсионных поверхностей от ширины полосы d_{II} двухслойного графена по

отношению к периоду СР. Энергия измеряется в электрон-вольтах. Видно, что в предельном случае $d_{II}=0$ (фактически, однослойный графен) вблизи К-исходного материала спектр рассматриваемой структуры имеет вид дираковских конусов (рисунок 2.8а), Из рисунков 2.8б) – 2.8е) видно, что с увеличением ширины полосы двухслойного графена энергетический спектр рассматриваемой СР существенно изменяется (отсчет значений квазиволновых векторов ведется от К-точки). Во-первых, минизоны, формирующие дираковский конус, смещаются в область больших энергий.

Во-вторых, на рисунках 2.9 и 2.10 наблюдается периодичность энергетического спектра исследуемой сверхрешетки в направлении чередования слоев и его четность по q_x (этот результат справедлив для всех относительных ширин полосок однослойного и двухслойного графена). В-третьих, видно, что энергетический спектр становится несимметричным по q_y . Когда ширина полосы двухслойного графена мала по сравнению с периодом сверхрешетки (рисунок 2.8б, 2.8в), можно рассматривать атомы углерода, находящиеся во втором слое графена, как регулярно расположенные примеси высокой концентрации, что объясняет смещение положения дираковской точки. Периодичность расположения такой «примеси» приводит к формированию минизон, которые, в силу большого отличия периода СР и периода кристаллической решетки основного материала – однослойного графена – не обязаны быть симметричны относительно К-точки. Как показано на рисунках 2.8б), 2.8в), 2.10, при небольшой относительной ширине полосы двухслойного графена ($d_{II}=3a_0$ при $d=51a_0$) несимметричность дисперсионных кривых по q_y невелика, поэтому при таких условиях низкоэнергетическое приближение, используемое выше в разделе 2.1 при аналитическом рассмотрении свойств СР, может считаться обоснованным.

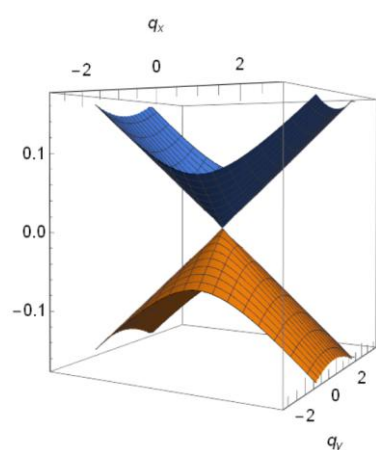
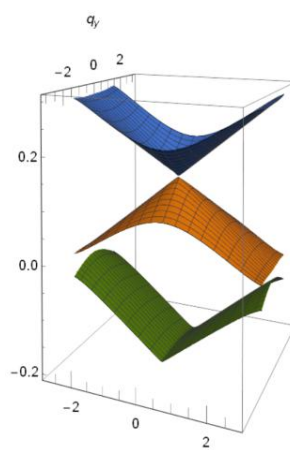
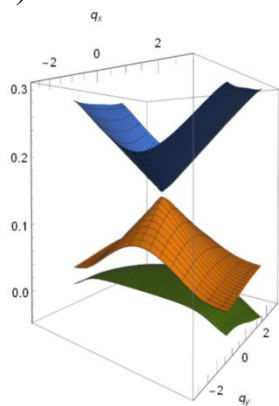
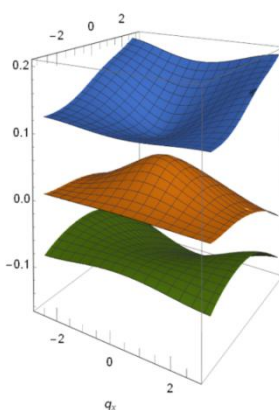
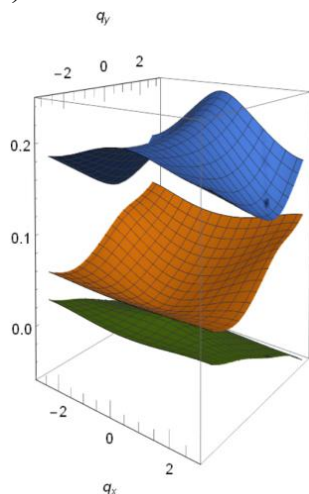
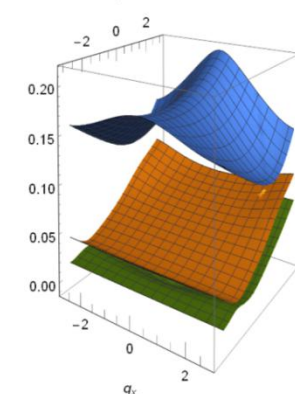
а) $d_{II}/d=0$ б) $d_{II}/d=2/51$ в) $d_{II}/d=3/51$ г) $d_{II}/d=24/51$ д) $d_{II}/d=48/51$ е) $d_{II}/d=50/51$

Рисунок 2.8 – Зависимость формы дисперсионных поверхностей вблизи дираковской точки от ширины полосы двухслойного графена в отсутствие внешнего электрического поля, перпендикулярного поверхности образца

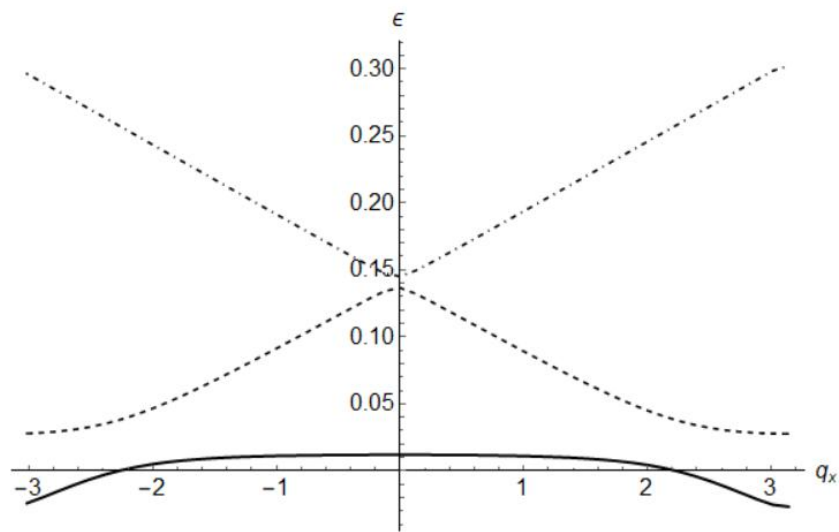
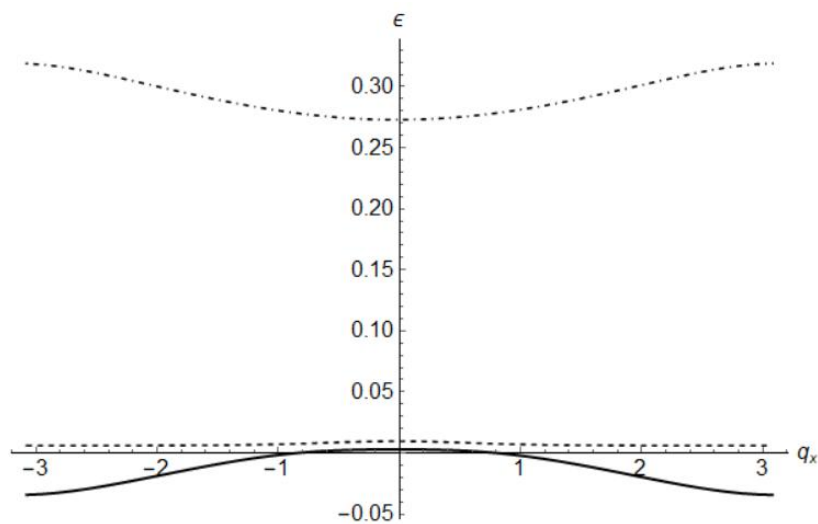
Рисунок 2.9 а) $q_y = 0$ Рисунок 2.9 б) $q_y = \pi$

Рисунок 2.9 – Зависимость энергии электрона от проекции квазиимпульса в направлении оси сверхрешетки, в минизонах, ближайших к дираковской точке в спектре графена в отсутствие внешнего электрического поля, перпендикулярного поверхности образца, в случае $d_{II}/d=3/51$

На рисунке 2.11 показаны две ближайшие к дираковской точке минизоны, относящиеся к зоне проводимости исходного материала, рассчитанные с использованием методов теории функционала плотности и на основе

модифицированной модели Кронига-Пенни, описанной в разделе 2.1. Видно, что форма дисперсионных поверхностей, рассчитанных разными методами, сходна. Аналитическое рассмотрение, основанное на решении уравнения Шредингера, не учитывает смещения уровня Ферми, полагая его одинаковым как для однослойного графена, так и для сверхрешетки, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена. Квантовохимический расчет показал, что положение дираковской точки при добавлении дополнительной полоски графена смещается в область больших энергий примерно на 0.1 эВ, причем даже в отсутствие поперечного электрического поля формируется запрещенная зона. При аналитическом рассмотрении при $\Delta=0$, что соответствует отсутствию внешнего поперечного электрического поля, энергия в минимуме нижней минизоны, соответствующей К-точке, равна нулю. Таким образом, квантовохимическое моделирование показало, что при условии $d_{II} \ll d$, то есть при малой ширине полоски двухслойного графена по сравнению с шириной полоски однослойного графена, в рассматриваемой сверхрешетке справедливо использование низкоэнергетического приближения в модели Кронига-Пенни, служащее для вывода дисперсионного уравнения. Энергетический спектр сверхрешетки, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена, имеет минизонный характер.

Следует отметить, что в предположении узости полосок двухслойного графена по сравнению с полосками однослойного графена рассматриваемая сверхрешетка оказывается идеологически близкой к одной из первых моделей ГСР, предложенной в [118]. В [118] рассмотрена ГСР, формирующаяся в однослойном графене в результате нанесения на него периодически расположенных линий атомов водорода

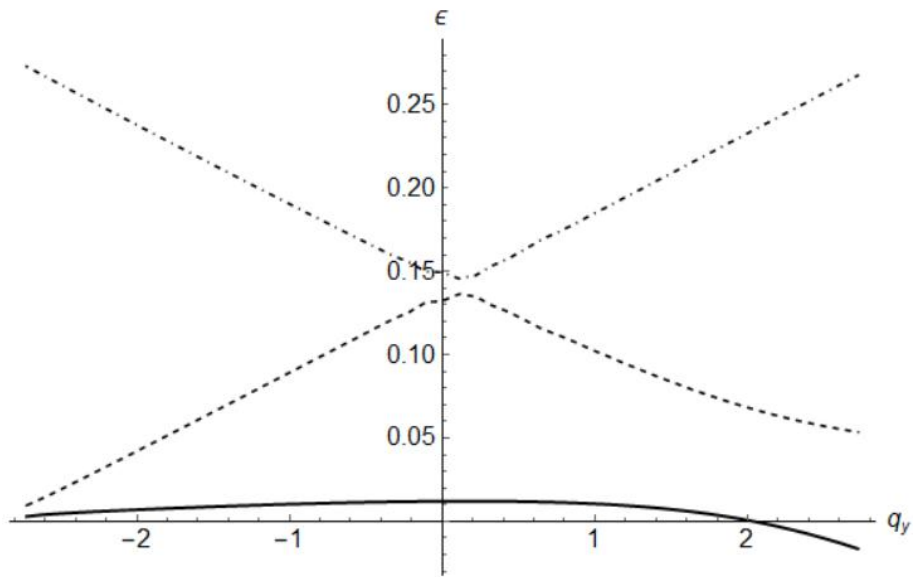
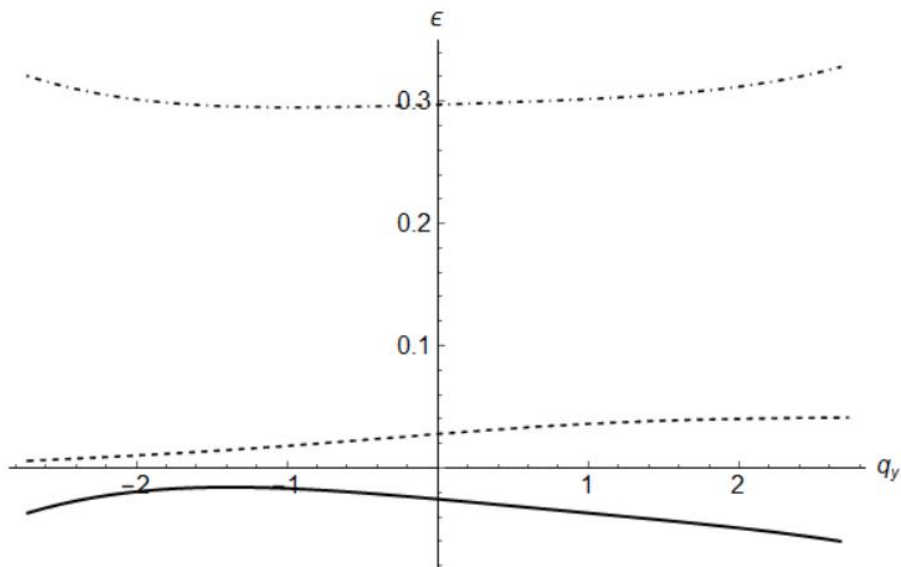
Рисунок 2.10 а) $q_x = 0$ Рисунок 2.10 б) $q_x = \pi$

Рисунок 2.10 – Зависимость энергии электрона от проекции квазиимпульса в направлении, перпендикулярном оси сверхрешетки, в минизонах, ближайших к дираковской точке в спектре графена, в случае $d_{II}/d=3/51$

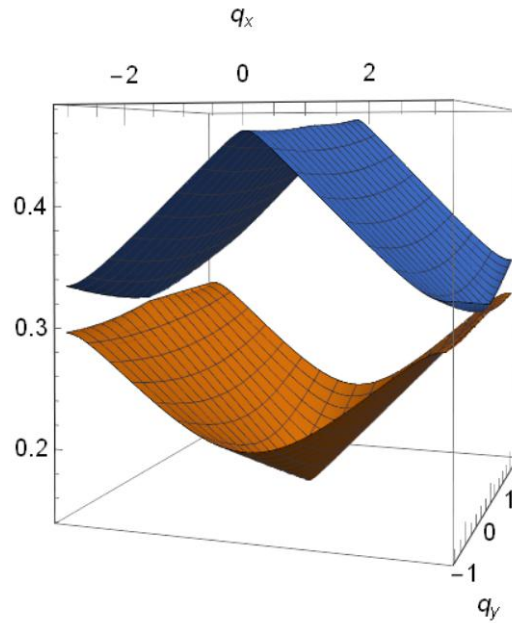


Рисунок 2.11 а)

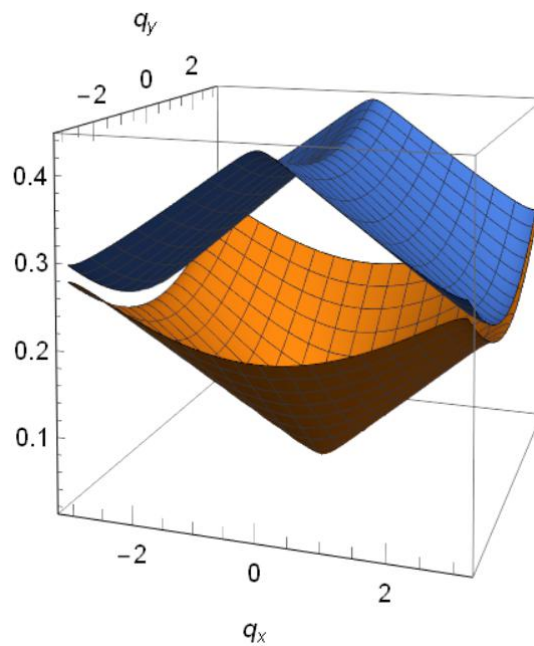


Рисунок 2.11 б)

Рисунок 2.11 – Дисперсионные поверхности в случае $d_{II}/d=3/51$ в отсутствие внешнего электрического поля: а) квантовохимический расчет; б) расчет на основе дисперсионного уравнения (2.75). Энергия измеряется в электрон-вольтах

Рассматриваемая в настоящей работе сверхрешетка имеет ширины запрещенных и разрешенных минизон порядка сотых долей электрон-вольта, причем этими параметрами можно управлять, прикладывая внешнее электрическое поле перпендикулярно поверхности образца.

В отличие от сверхрешетки, предложенной в [6], рассматриваемая свехрешетка имеет в своём спектре таммовские состояния. При стремлении внешнего поперечного поля к нулю результаты аналитического рассмотрения, касающиеся дираковских линий и точек, совпадают с результатами работы [72].

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 2

1. Рассмотрены электронные состояния в сверхрешетке, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена. Задача решалась с использованием аналитического подхода, основанного на модифицированной модели Кронига-Пенни, а также на основе квантовохимического моделирования методами теории функционала плотности.

2. Выявлено, что энергетический спектр рассматриваемой структуры имеет минизонный характер. Существует две группы дисперсионных поверхностей, соответствующие двум ветвям в энергетическом спектре двухслойного графена.

3. Показано, что, кроме электронных состояний, формируемых основным периодическим потенциалом и образующим минизоны, возникающие на границах областей разных типов графена таммовские (поверхностные) состояния за счет периодического расположения границ также формируют минизоны, в некоторых случаях достраивая минизоны, сформированные основными состояниями.

4. При помощи квантовохимического моделирования показано, что, во-первых, энергетическая щель в спектре рассматриваемой сверхрешетки возникает и в отсутствие электрического поля, во-вторых, о симметрии получаемых минизон относительно К-точки можно приближенно говорить

только в случае узких по сравнению с полосками однослойного графена полосок двухслойного графена.

5. Проведено сравнение формы энергетических поверхностей, рассчитанных на основе анализа модели Кронига-Пенни и с использованием моделирования методами теории функционала плотности. Обе модели показали хорошее совпадение.

ГЛАВА 3. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНОВЫХ СВЕРХРЕШЕТОК

3.1 ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЖЗОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕТА В СВЕРХРЕШЕТКЕ, СОСТОЯЩЕЙ ИЗ ЧЕРЕДУЮЩИХСЯ ОБЛАСТЕЙ ОДНОСЛОЙНОГО И ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА

Появление эффективных источников терагерцевого излучения в последние годы [119] и широкие перспективы использования волн этого диапазона в медицинской диагностике стимулируют исследования твердотельных структур, подходящих для создания детекторов терагерцевого излучения

Энергетический спектр двухслойного графена, помещенного в постоянное электрическое поле, перпендикулярное поверхности образца, имеет вид [98, 117]:

$$\varepsilon = \pm \sqrt{\Delta^2 + v_F^2 p^2 + \frac{t_{\perp}^2}{2}} \pm \sqrt{v_F^2 p^2 (4\Delta^2 + t_{\perp}^2) + \frac{t_{\perp}^4}{4}} \quad (3.1)$$

Здесь v_F – скорость на поверхности Ферми в графене, $t_{\perp} \approx 0.4$ эВ – интеграл перекрытия между слоями двухслойного графена, Δ – полуширина запрещенной зоны в энергетическом спектре этого материала, которая непосредственно зависит от постоянного электрического поля, приложенного перпендикулярно поверхности образца, p – модуль квазиимпульса электрона в двухслойном графене.

Рассмотрим особенности спектра графеновой сверхрешетки, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена. Период сверхрешетки обозначим d , ширина полоски однослойного графена d_I , ширина полоски двухслойного графена d_{II} . Подобная ГСР исследовалась ранее в [72], где, однако, влияние поперечного поля не учитывалось.

В главе 2 с использованием метода трансляционной матрицы и модели Кронига-Пенни выведено дисперсионное соотношение для рассматриваемой СР, в общем случае имеющее вид:

$$F(\varepsilon, q_x, q_y) = 0, \quad (3.2)$$

где ε – энергия электрона, $q_{x,y} = p_{x,y} d / \hbar$. Перейдем к безразмерным переменным: $a_I = d_I / d$, $a_{II} = d_{II} / d$, $B = \hbar v_F / (t_\perp d)$, величины ε и Δ будем измерять в единицах $t_\perp$. Введем обозначения

$$Q_2^+ = q_y^2 - \frac{\Delta^2 + \varepsilon^2}{B^2} + \frac{\sqrt{(4\Delta^2 + 1)\varepsilon^2 - \Delta^2}}{B^2}, \quad (3.3)$$

$$Q_2^- = q_y^2 - \frac{\Delta^2 + \varepsilon^2}{B^2} - \frac{\sqrt{(4\Delta^2 + 1)\varepsilon^2 - \Delta^2}}{B^2}, \quad (3.4)$$

$$Q_1 = \frac{\varepsilon^2}{B^2} q_y^2. \quad (3.5)$$

$$F_1 = 2 \cos q_1 a_I \operatorname{ch} q_2 a_{II} + \frac{\varepsilon^2(q_1^2 - q_1^2) + \Delta^2(q_y^2 - q_1^2)}{(\Delta^2 - \varepsilon^2)q_1 q_2} \sin q_1 a_I \operatorname{sh} q_2 a_{II} - 2 \cos q_x \quad (3.6)$$

$$F_2 = 2 \cos q_1 a_I \cos q_2 a_{II} + \frac{\varepsilon^2(q_1^2 + q_1^2) + \Delta^2(q_y^2 - q_1^2)}{(\Delta^2 - \varepsilon^2)q_1 q_2} \sin q_1 a_I \sin q_2 a_{II} - 2 \cos q_x \quad (3.7)$$

$$F_3 = 2 \operatorname{ch} q_1 a_I \operatorname{ch} q_2 a_{II} + \frac{-\varepsilon^2(q_1^2 + q_1^2) + \Delta^2(q_y^2 + q_1^2)}{(\Delta^2 - \varepsilon^2)q_1 q_2} \operatorname{sh} q_1 a_I \operatorname{sh} q_2 a_{II} - 2 \cos q_x \quad (3.8)$$

$$F_4 = 2 \operatorname{ch} q_1 a_I \cos q_2 a_{II} + \frac{-\varepsilon^2(q_1^2 - q_1^2) + \Delta^2(q_y^2 + q_1^2)}{(\Delta^2 - \varepsilon^2)q_1 q_2} \operatorname{sh} q_1 a_I \sin q_2 a_{II} - 2 \cos q_x \quad (3.9)$$

Первое семейство дисперсионных поверхностей $\varepsilon_i(q_x, q_y)$ получается из решения (3.2) при учете следующих соотношений:

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_1 \geq 0, Q_2^+ \geq 0: q_1 = \sqrt{Q_1}, q_2 = \sqrt{Q_2^+}, F = F_1; \\ Q_1 \geq 0, Q_2^+ < 0: q_1 = \sqrt{Q_1}, q_2 = \sqrt{-Q_2^+}, F = F_2; \\ Q_1 < 0, Q_2^+ \geq 0: q_1 = \sqrt{-Q_1}, q_2 = \sqrt{Q_2^+}, F = F_3; \\ Q_1 < 0, Q_2^+ < 0: q_1 = \sqrt{-Q_1}, q_2 = \sqrt{-Q_2^+}, F = F_4. \end{array} \right. \quad (3.10)$$

Второе семейство – при учете соотношений:

$$\begin{cases} Q_1 \geq 0, Q_2^- \geq 0: q_1 = \sqrt{Q_1}, q_2 = \sqrt{Q_2^-}, F = F_1; \\ Q_1 \geq 0, Q_2^- < 0: q_1 = \sqrt{Q_1}, q_2 = \sqrt{-Q_2^-}, F = F_2; \\ Q_1 < 0, Q_2^- \geq 0: q_1 = \sqrt{-Q_1}, q_2 = \sqrt{Q_2^-}, F = F_3; \\ Q_1 < 0, Q_2^- < 0: q_1 = \sqrt{-Q_1}, q_2 = \sqrt{-Q_2^-}, F = F_4. \end{cases} \quad (3.11)$$

Два семейства дисперсионных поверхностей соответствуют двум ветвям в спектре двухслойного графена (3.1). Первая и вторая строки в выражениях (3.10), (3.11) соответствуют состояниям, формируемым основным периодическим потенциалом, третья и четвертая строки – состояниям, возникающим за счет периодического расположения поверхностных (таммовских) состояний, формируемых на границе однослойного и двухслойного графена. С использованием квантовохимического моделирования методами теории функционала плотности показано, что в случае относительно узких полосок двухслойного графена по сравнению с периодом сверхрешетки ($d_{II} \ll d$) энергетический спектр рассматриваемой структуры можно считать симметричным относительно К-точки исходного материала (однослойного графена), и в этом случае низкоэнергетическое приближение, использованное для вывода дисперсионного уравнения, может считаться правомерным. Далее рассматривается именно такой случай: сверхрешетка состоит из широких полосок однослойного графена и узких полосок двухслойного.

Рассмотрим влияние параметра Δ на зонную структуру ГСР. На рисунке 3.1 показаны графики решения дисперсионного уравнения при $k_y = 0$. Видно, что в случае $\Delta = 0$ (рис. 3.2а) формируются две минизоны, каждая из которых дополнительно расщепляется на две подзоны, соответствующие решению уравнения (3.10) и (3.11). В случае, когда Δ отлично от нуля, первый положительный корень уравнения (3.11) при малых значениях k_x переносится в область значений энергии, соответствующих второй минизоне, а первая минизона не формируется, энергетическая поверхность терпит разрыв первого рода.

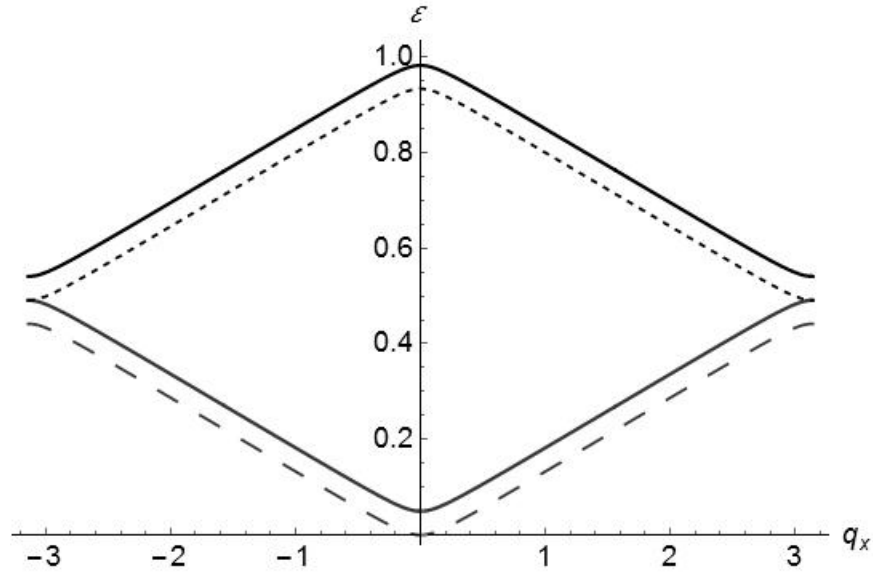


Рисунок 3.1.а

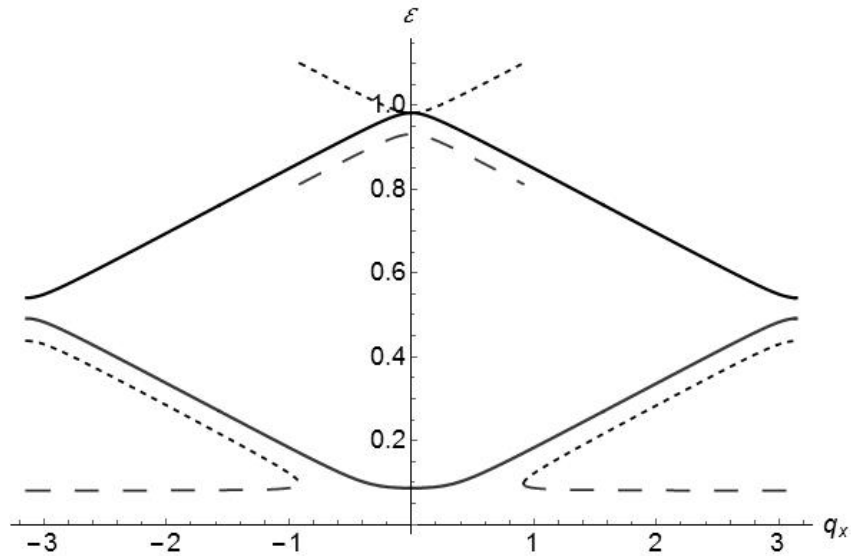


Рисунок 3.1.б

Рисунок 3.1 – Зависимость энергии $\varepsilon(q_x)$, $q_y = 0$ для двух нижних минизон, соответствующих зоне проводимости; а) $\Delta=0$; б) $\Delta=0.08t_{\perp}$; сплошные линии соответствуют решению дисперсионного уравнения (3.10), пунктирные линии – решению уравнения (3.11). Энергия измеряется в единицах $t_{\perp}$.

Следует отметить, что квантовохимическое моделирование, проведенное в главе 2, не показало существование расщепления минизон. Более того, при моделировании установлено, что энергетическая щель в спектре сверхрешетки

возникает и в отсутствие постоянного электрического поля. Наличие дополнительных полосок графена, расположенных над поверхностью основного графенового листа, приводит к нарушению симметрии в спектре этого материала и к открытию энергетической щели. При этом из двух состояний, предсказываемых моделью Кронига-Пенни, реализуется одно – описываемое решением дисперсионного уравнения (3.10).

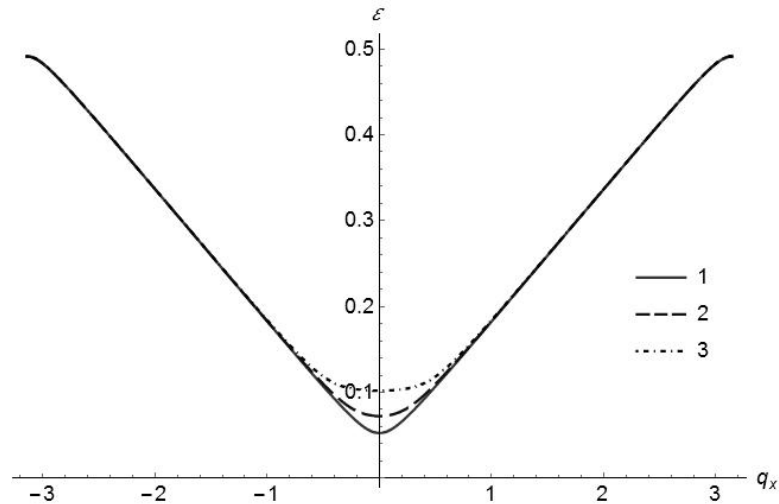


Рисунок 3.2.а

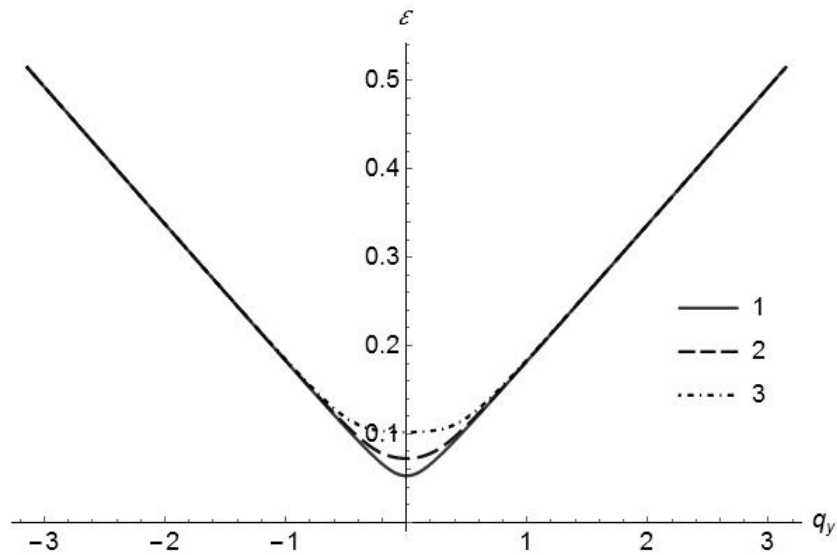


Рисунок 3.2 б

Рисунок 3.2 – Зависимость энергии электрона ε от компонент квазиимпульса q_x , q_y в нижней минизоне, описываемой дисперсионным уравнением (3.10); а) $\varepsilon(q_x)$ при $q_y = 0$; б) $\varepsilon(q_y)$ при $q_x = 0$; 1 – $\Delta = 0.02t_{\perp}$, 2 – $\Delta = 0.06t_{\perp}$, 3 – $\Delta = 0.08t_{\perp}$. Энергия измеряется в единицах $t_{\perp}$.

Параметр Δ – полуширина запрещенной зоны, формируемой в двухслойном графене при воздействии постоянного электрического поля, перпендикулярного поверхности образца. Меняя этот параметр, меняется и ширина запрещенной зоны исследуемой СР, то есть появляется возможность строить на основе такого материала измеритель частоты, работающий в терагерцевом диапазоне, основанный на эффекте межзонного поглощения. На рисунке 3.2 приведены графики $\varepsilon(q_x)$ при $q_y=0$ и $\varepsilon(q_y)$ при $q_x=0$ в самой нижней минизоне, описываемой дисперсионным уравнением (3.10) при разных значениях Δ . Из графиков видно, что изменение параметра Δ влияет на форму дисперсионных поверхностей вблизи дна минизоны проводимости, с ростом $|\vec{q}|$ зависимость $\varepsilon(q_x)$, $\varepsilon(q_y)$ близка к линейной. Значение Δ является оценкой снизу для полуширины запрещенной зоны в энергетическом спектре рассматриваемой структуры. По q_x минизона, как и должно быть, конечна, но, как видно из графиков, ширина минизоны оказывается почти на порядок больше ширины запрещенной зоны. Полагая $\Delta = 0.1$, $t_{\perp} = 0.04$ эВ и приравнивая $2\Delta = kT$, получаем $T \approx 90$ К – характерная температура, при которой в минизоне проводимости начнут появляться носители заряда вследствие теплового движения. Следовательно, при температурах порядка нескольких десятков кельвинов можно ожидать проявления эффекта межзонного поглощения света, носящего пороговый характер.

Поскольку ширина минизоны проводимости оказывается значительно больше ширины запрещенной зоны, и учет состояний вблизи потолка минизоны проводимости не столь важен при исследовании эффекта межзонного поглощения, энергетический спектр рассматриваемой структуры будем аппроксимировать моделью Кейна [120, 121]:

$$\varepsilon = \sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2(p_x^2 + p_y^2)} \quad (3.12)$$

Это выражение приближенно описывает спектр графена на подложке из карбида кремния [122, 123] или нитрида бора [124], в спектре которого присутствует энергетическая щель. Параметр v_0 в случае графена на подложке, благодаря взаимодействию с которой в его спектре формируется энергетическая щель, отождествляется со скоростью на поверхности Ферми v_F . Воспользуемся несколько видоизмененным выражением для подбора параметров кейновского спектра:

$$\varepsilon(q_x, q_y) = \varepsilon_0(\gamma + \sqrt{\Delta'^2 + (q_x^2 + q_y^2)}) \quad (3.13)$$

Подбор коэффициентов будем вести таким образом, чтобы значения исходной и приближенной функции были максимально близки вблизи дна минизоны. В таблице 3.1 (Приложение 1) приведены значения параметров модели (3.13), вычисленные для случаев $\Delta=0.04t_\perp$ и $\Delta=0.08t_\perp$.

Из таблицы 3.1 видно, что можно подобрать коэффициенты таким образом, чтобы параметр γ был пренебрежимо мал по сравнению с параметром Δ' . Таким образом, гамильтониан, описывающий состояния электрона в рассматриваемой графеновой сверхрешетке, может быть представлен в следующем виде:

$$H(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \Delta_0 & v_0(p_x - ip_y) \\ v_0(p_x + ip_y) & -\Delta_0 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Используя модель (3.12) для описания состояния электрона, фактически полагаем валентную зону и зону проводимости симметричными относительно значения энергии $\varepsilon=0$. Гамильтониан (3.14) описывает две зоны, волновая функция электрона имеет вид:

$$\Psi_0 = \frac{1}{L} \frac{\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p^2}}{\sqrt{(\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p^2} \pm \Delta_0)^2 + v_0^2 p^2}} \left(1; \frac{v_0(p_x + ip_y)}{\Delta_0 \pm \sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p^2}} \right)^T \exp\left(\frac{ip_x x}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{ip_y y}{\hbar}\right) \quad (3.15)$$

энергия электрона в зоне проводимости

$$\varepsilon = \pm \sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p^2}. \quad (3.16)$$

В выражениях (3.15), (3.16) знак «плюс» соответствует зоне проводимости, знак «минус» — валентной зоне, L^2 — нормировочная площадь.

Рассмотрим эффект межзонного поглощения электромагнитной волны. Пусть на поверхность образца падает электромагнитная волна, плоскость поляризации которой направлена вдоль оси X . Векторный потенциал высокочастотного поля положим равным

$$\vec{A} = \{A_x, A_y\} = \left\{ \frac{-ic}{\omega} E_m \exp(-i\omega t), 0 \right\}. \quad (3.17)$$

Выпишем уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \Psi = \left(H(\vec{p}) + H'(\vec{A}) \right) \Psi, \quad (3.18)$$

где оператор взаимодействия электрона с электромагнитным полем имеет вид

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & v_0 \frac{e}{c} A_x(t) \\ v_0 \frac{e}{c} A_x(t) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Средняя энергия, получаемая материалом в единицу времени с единицы площади

$$Q_{abs} = \frac{1}{L^2} \sum_{l, \vec{p}, l', \vec{p}'} W(l, \vec{p}, l', \vec{p}') f(l, \vec{p}) (1 - f(l', \vec{p}')) \hbar \omega \quad (3.20)$$

где l, l' — номера зон, $\vec{p}, \vec{p}'$ — квазиимпульсы электрона в начальном и конечном состояниях, $W(l, \vec{p}, l', \vec{p}')$ — вероятность перехода, $f(l, \vec{p})$ — функция распределения электронов. Поскольку влияние электромагнитной волны рассматривается как возмущение, в качестве функций $f(l, \vec{p})$, $f(l', \vec{p}')$ возьмем равновесные функции Ферми-Дирака, полагая значение химического потенциала равным нулю. Вероятность перехода имеет вид:

$$W(l, \vec{p}, l', \vec{p}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int \Psi^*(l', \vec{p}') H' \Psi(l, \vec{p}) d\vec{r} \right|^2 \delta(\varepsilon(l', \vec{p}') - \varepsilon(l, \vec{p}) - \hbar \omega), \quad (3.21)$$

где в качестве волновых функций возьмем собственные функции (3.15) невозмущенного гамильтониана кейновского спектра. Вычисляем матричный элемент перехода.

$$\int \Psi_c^*(\vec{p}') H' \Psi_v(\vec{p}) d\vec{r} = \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} v_0 \frac{e}{c} A_x(t) \times$$

$$\times \frac{\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2} + \Delta_0}{\sqrt{(\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2} + \Delta_0)^2 + v_0^2 p'^2}} \frac{\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2} - \Delta_0}{\sqrt{(\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2} - \Delta_0)^2 + v_0^2 p'^2}} \left(\frac{v_0(p_x + ip_y)}{\Delta_0 - \sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2}} + \frac{v_0(p'_x - ip'_y)}{\Delta_0 + \sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2}} \right) \quad (3.22)$$

Как и должно быть, возникает правило отбора, требующее равенства начального и конечного значения квазиимпульса электрона, характерное для процессов, обусловленных прямыми переходами. Таким образом, вероятность перехода имеет вид:

$$W(l, \vec{p}, l', \vec{p}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 E_m^2}{\omega^2} v_0^2 \delta \left(\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2} - \left(-\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p^2} \right) - \hbar\omega \right) \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \times \\ \times \left(\frac{\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2} + \Delta_0}{\sqrt{(\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2} + \Delta_0)^2 + v_0^2 p'^2}} \frac{\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2} - \Delta_0}{\sqrt{(\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2} - \Delta_0)^2 + v_0^2 p'^2}} \left(\frac{v_0(p_x + ip_y)}{\Delta_0 - \sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2}} + \frac{v_0(p'_x - ip'_y)}{\Delta_0 + \sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p'^2}} \right) \right)^2 \quad (3.23)$$

Приведем выражение для средней энергии, получаемой материалом в единицу времени с единицы площади за счет межзонных переходов. Суммирование по $\vec{p}'$ в (3.20) снимается, сумма по l, l' — сводится к одному слагаемому, соответствующему переходу электрона из валентной зоны в зону проводимости. После перехода от суммирования к интегрированию по $\vec{p}$ и записи интеграла по пространству квазиимпульсов в полярной системе координат получаем:

$$Q_{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 E_m^2}{\omega^2} \frac{v_0^2}{2} \frac{\hbar\omega}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \int_0^{\infty} p dp \delta \left(2\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p^2} - \hbar\omega \right) \times \\ \times \frac{\exp \sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p^2} / T}{\left(1 + \cosh \left(\sqrt{\Delta_0^2 + v_0^2 p^2} / T \right) \right)} \frac{\Delta_0^2 + (v_0 p \sin \varphi)^2}{\Delta_0^2 + v_0^2 p^2} \quad (3.24)$$

После вычисления интегралов получаем окончательно

$$Q_{abs} = \frac{1}{8\hbar} \frac{e^2 E_m^2}{(\hbar\omega)^2} \frac{\exp \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right)}{1 + \cosh \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right)} \left(\Delta_0^2 + \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right)^2 \right) \theta(\hbar\omega - 2\Delta_0) \quad (3.25)$$

где $\theta(x)$ – функция Хэвисайда.

На единицу площади поверхности в единицу времени падает энергия

$$Q_0 = \frac{E_m^2}{2\pi} c \quad (3.26)$$

Коэффициент поглощения $\alpha = Q_{abs} / Q_0$,

$$\alpha = \frac{\pi e^2}{16\hbar c} \frac{\exp(\hbar\omega/(2T))}{1 + \cosh(\hbar\omega/(2T))} \left(1 + \left(\frac{2\Delta_0}{\hbar\omega} \right)^2 \right) \theta(\hbar\omega - 2\Delta_0). \quad (3.27)$$

На рисунке 3.3 представлена зависимость коэффициента поглощения от частоты падающей волны при различных значениях полуширины запрещенной зоны.

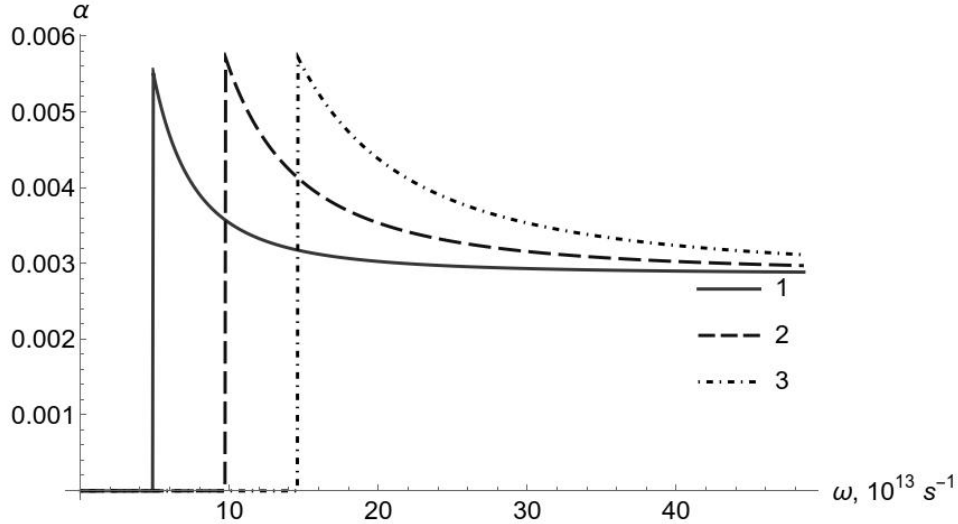


Рисунок 3.3 – Зависимость коэффициента поглощения α от частоты падающей волны ω при разных значениях полуширины запрещенной зоны Δ_0 : 1 – $\Delta_0=0.04t_{\perp}$; 2 – $\Delta_0=0.08t_{\perp}$; 3 – $\Delta_0=0.12t_{\perp}$. Температура $T=90K$.

3.2 ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК ПЛОТНОСТИ ТОКА С УЧЁТОМ ИОНИЗАЦИИ ПРИМЕСИ В СВЕРХРЕШЕТКЕ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА

Для двумерной сверхрешетки на основе графена на «шахматной» подложке в одноминизонном приближении (рисунок 3.4) было проведено исследование генерации высших гармоник плотности тока с учётом ионизации примеси.

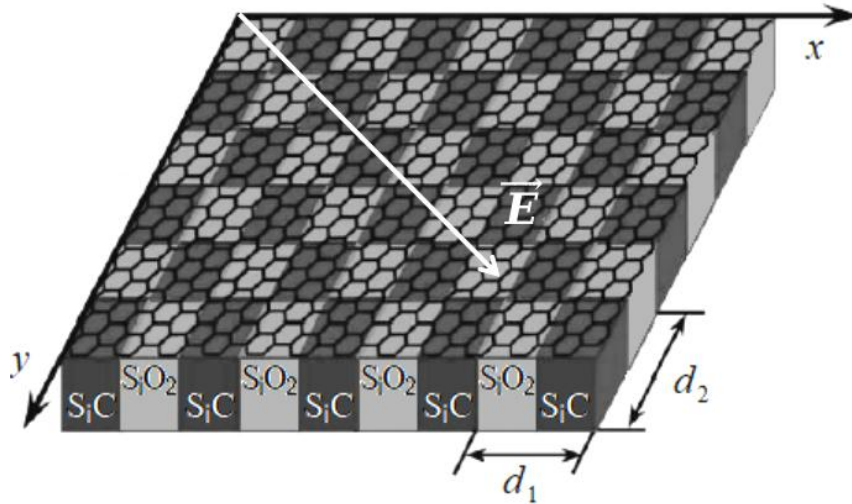


Рисунок 3.4 — Двумерная графеновая сверхрешетка

Энергетический спектр носителей заряда в 2D ГСР в приближении сильной связи выбран в виде [125]

$$\varepsilon(\vec{p}) = \pm \Delta \sqrt{f_1^2 + f_2^2 (1 - \cos(p_x d_1 / \hbar)) + f_3^2 (1 - \cos(p_y d_2 / \hbar))} \quad (3.28)$$

где Δ — полуширина запрещённой зоны щелевой модификации графена, коэффициенты f_i подбираются численно на основе непосредственного решения дисперсионного соотношения [6], $\vec{p} = (p_x, p_y)$ — вектор квазиимпульса электрона, $d_i = d_I + d_{II}$ — период СР ($i=1,2$), d_I и d_{II} — ширина полосок бесщелевого и щелевого графена. Разные знаки относятся к минизоне проводимости и валентной минизоне.

Для расчета рассмотрим случай симметричной 2D ГСР с $d_I = d_{II} = d = 2 \cdot 10^{-6}$ см. Численный расчет дает коэффициенты аппроксимации $f_1 = 0.4217$, $f_2 = f_3 = 0.3318$, ширину запрещенной зоны между валентной минизонной и минизонной проводимости $\varepsilon_g = 0.8573\Delta$; ширину запрещенной зоны между первой и второй минизонами проводимости $\varepsilon_{g12} = 0.6270\Delta$; ширину первой минизоны проводимости $\varepsilon_e = 0.2111\Delta$. К системе приложено поле $\vec{E} = (E_{1x} + E_{0x} \cos(\omega t); E_{1y} + E_{0y} \cos(\omega t))$, где $E_{1x,y}$ — модуль напряженности постоянного электрического поля, $E_{0x,y}$, ω — амплитуда и частота переменного электрического поля (рисунок 3.4).

Использовался квазиклассический подход, при котором закон дисперсии носителей заряда определялся аппроксимацией квантовомеханического расчета, а вычисление электрического тока производилось с помощью классического кинетического уравнения Больцмана с модельным интегралом столкновений Бхатнагара-Гросса-Крука:

$$\frac{\partial f(p,t)}{\partial t} + eE \frac{\partial f(p,t)}{\partial p} = - (v - v_r) f(p,t) + \left(v \frac{n}{n_0} - v_r \right) f_0(p) + G(\vec{p}) \quad (3.29)$$

где $G(\vec{p}) = (N - (n_0 - n)) \frac{\exp(-2\text{Im}(S)/\hbar)}{\text{Im}\tau} \delta(p)$ — член генерации носителей тока. Это количество носителей, которые образуются в единице объема вещества в единицу времени в результате ионизации. Член генерации связан с концентрацией n следующим образом:

$$n = n_0 + \frac{1}{v_r} \sum_p G(p) \quad (3.30)$$

Для нахождения гармоник тока использовалось разложение плотности тока в ряд Фурье

$$j(t) = a_0 + \sum_{l=1}^{\infty} (a_l \cos l\omega t + b_l \sin l\omega t) \quad (3.31)$$

$$a_l = j_0 B_{\text{ion}} \sum_{k,m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{nm} C_{nm} J_k(D_{nm}) J_{k+l}(D_{nm}) [\sin \varphi_{(k+l)nm} \cos \varphi_{(k+l)nm} +$$

$$+ (-1)^l \sin \varphi_{-(k+l)nm} \cos \varphi_{(k+l)nm}]$$

$$b_l = -j_0 B_{\text{ion}} \sum_{k,m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{nm} C_{nm} J_k(D_{nm}) J_{k+l}(D_{nm}) [\sin^2 \varphi_{(k+l)nm} - (-1)^l \sin^2 \varphi_{-(k+l)nm}]$$

где $j_0 = -edn_0 \Delta/2\hbar$, n_0 — концентрация электронов в зоне проводимости, $B_{\text{ion}} = 1 + \frac{N}{n_0} \frac{\exp(-2\sigma \text{Im}S)}{\tau_0 \nu_r \exp(-2\sigma \text{Im}S)}$, N — концентрация примесей в графене, $\sigma = \Delta/\nu \hbar$,

$\gamma = \nu/\nu_r$, τ_0 — время туннелирования, ν_r — частота рекомбинации, ν — частота столкновений, $J_n(x)$ — функция Бесселя 1-го рода n -го порядка, $\xi(x,y) =$

$$\sqrt{f_1^2 + f_2^2 (2 - \cos x - \cos y)} \quad , \quad C_{nm} = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(nx) \cos(my) \exp(-\delta \xi(x,y)) dx dy \quad ,$$

$$D_{nm} = nF_{0x}/w + mF_{0y}/w, \quad w = \omega/\nu, \quad \sin \varphi_{knm} = \left(1 + (nF_{1x} + mF_{1y} + kw)^2 \right)^{-1/2}, \quad \delta =$$

$$\Delta/k_B T \quad , \quad A_{nm} = \frac{1}{C_{00}} \frac{f_2^2}{2\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(x) \sin(nx) \cos(my) \xi(x,y)^{-1} dx dy \quad , \quad \vec{F}_1 =$$

$\{deE_{1x}/\hbar v, deE_{1y}/\hbar v\}$, $\vec{F}_0 = \{deE_{0x}/\hbar v, deE_{0y}/\hbar v\}$. Амплитуда l -ой гармоники плотности тока определяется выражением $j_l = \sqrt{a_l^2 + b_l^2}$.

Для случая туннелирования электрона с примесного уровня в зону проводимости применим так называемый квазиклассический метод [126]. Процесс ионизации примеси представляет собой туннелирование электрона через потенциальный барьер и может носить квазиклассический характер.

При этом вероятность перехода (ионизации) может быть записана с экспоненциальной точностью в виде

$$W = \exp(-2\text{Im}(S)/\hbar) \quad (3.32)$$

где S — классическое действие, набираемое частицей при подбарьерном движении, определяемое формулой

$$S = \int_0^{t_0} [\varepsilon(p(t)) - V] dt \quad (3.33)$$

где $p(t)$ импульс электрона, определяемый из классического уравнения движения, V энергия залегания примеси. Критерием применимости квазиклассического метода является условие $\text{Im}(S) \gg \hbar$. Предполагаем, что примеси находятся в графене на определенной глубине v (отсчет ведется от дна зоны проводимости, посередине запрещённой зоны, рисунок 3.5).

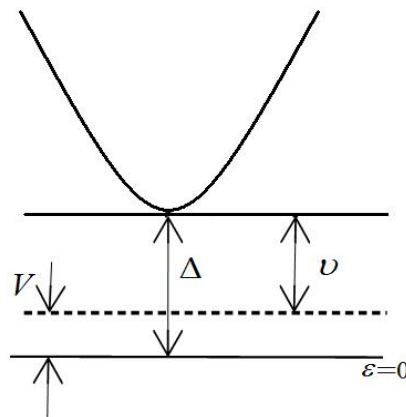


Рисунок 3.5 — Энергетическая диаграмма примеси. Уровень энергии примеси обозначен стриховой линией.

Момент начала туннелирования t_0 находится из условия минимума мнимой части действия $\left. \frac{\partial \text{Im}(S)}{\partial t} \right|_{t_0} = 0$, что соответствует условию

$$\varepsilon(t_0) = V \quad (3.34)$$

Используя метод мнимого времени можно рассчитать квазиклассически вероятность туннельного перехода электронов с примеси в зону проводимости под влиянием постоянного поля напряженностью $\vec{E}_0$ и переменного с амплитудой $\vec{E}_1$ и частотой ω .

Время туннелирования τ_0 определяется из решения трансцендентного уравнения

$$\text{ch}[x(\tilde{\tau}_0)] + \text{ch}[y(\tilde{\tau}_0)] = \frac{2f_2^2 + f_1^2 - (f_1 - \tilde{v})^2}{f_2^2} \quad (3.35)$$

где $\tilde{\tau}_0 = \tau_0 \nu$, $x(\tilde{\tau}_0) = F_{1x} \tilde{\tau}_0 + F_{0x} \text{sh}(w \tilde{\tau}_0)/w$, $y(\tilde{\tau}_0) = F_{1y} \tilde{\tau}_0 + F_{0y} \text{sh}(w \tilde{\tau}_0)/w$, $\tilde{v} = v/\Delta$.

Учитывая, что выход частицы из-под барьера происходит при $t = 0$ [14], находим мнимую часть действия, входящего в вероятность ионизации примеси

$$\text{Im}S = \int_0^{\tilde{\tau}_0} \left\{ \sqrt{f_1^2 + f_2^2 (2 - \text{ch}[x(t)] - \text{ch}[y(t)])} + (\tilde{v} - f_1) \right\} dt. \quad (3.36)$$

Непосредственно из анализа формулы (3.31) следует, что амплитуды четных гармоник тока в случае отсутствия постоянного поля ($E_1 = 0$) равны нулю. При этом нечетные гармоники тока присутствуют. Аналогичный вывод о генерации нечетных гармоник в одномерных ГСР под воздействием переменного электрического поля приведен в работе [127].

Как видно из (3.31), вследствие неаддитивности энергетического спектра и учета столкновений, гармоники плотности тока, текущего вдоль исследуемого направления, зависят как от напряженности постоянного и амплитуды переменного электрических полей, поляризованных вдоль этого направления, так и от параметров полей, ориентированных перпендикулярно.

Дальнейший анализ формулы (3.31) в силу ее сложности производился численно.

Зависимость амплитуд гармоник плотности тока от характеристик, приложенных к системе полей имеет немонотонный осциллирующий характер. Это дает возможность в широком интервале значений управлять амплитудой гармоник, усиливая одни и подавляя другие.

Рассмотрим случай, когда электрические поля поляризованы вдоль оси x . На рисунке 3.6 показаны области значений полей для первых четырех гармоник, амплитуда каждой из которых превосходит три остальные для фиксированной частоты переменного электрического поля. Особенно перспективным в плане практического приложения представляется начальная область полей, поскольку именно здесь амплитуда осцилляций максимальна.

Для оценки эффективности генерации гармоник введен коэффициент

$$K_{\vartheta}(\omega) = \frac{(j_i - j_k)}{j_i} \quad (3.37)$$

где i – номер преобладающей гармоники из рассматриваемых четырех, k – номер гармоники, следующей по амплитуде. Жирными точками на рисунке 3.6 отмечены положения максимумов этих коэффициентов. При увеличении частоты переменного поля происходит сдвиг максимумов амплитуд гармоник в сторону более сильных полей.

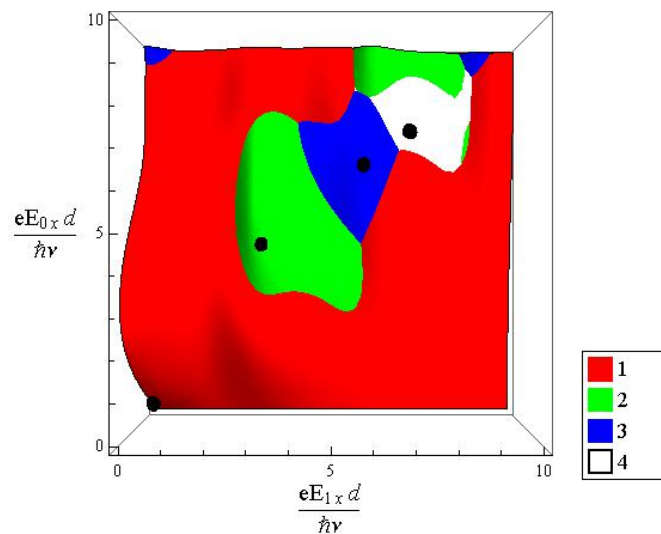


Рисунок 3.6 — Карта максимумов первых четырех гармоник: $F_{0y} = F_{1y} = 0$, $w = 3.0$

В таблице 3.2 (Приложение 2) приведены эффективные значения гармоник плотности тока, в безразмерных единицах. Для первой гармоники подобное значение всегда находится в начальной области полей вне зависимости от частоты. При увеличении частоты сдвиг максимумов для остальных трех гармоник происходит в область более сильных полей (Приложение 3). При определенных соотношениях параметров можно добиться ситуации, когда первую гармонику превосходят остальные.

Исследована зависимость коэффициента нелинейных искажений (коэффициент гармоник) от параметров приложенных полей. Расчет коэффициента произведен по следующей формуле [128]

$$K_{\Gamma}(\omega) = \frac{\sqrt{j_2^2 + j_3^2 + \dots + j_n^2}}{j_1} \quad (3.38)$$

На рисунке 3.7 представлена зависимость коэффициента гармоник от частоты, для полей, соответствующих максимумам второй (*a*) и третьей (*б*) гармоники при частоте $\omega=2.0$ и второй (*в*) и третьей (*г*) гармоники при $\omega=4.0$ (см. Таблица 3.2 в Приложении 2). Коэффициент нелинейных искажений в начальной области частот может принимать значения больше единицы и имеет немонотонный осциллирующий характер. Начиная с некоторой характерной частоты, определяемой величиной электрических полей, первая гармоника преобладает над остальными, коэффициент $K_{\Gamma}(\omega)$ убывает, становясь меньше единицы. По графику $K_{\Gamma}(\omega)$ можно определить частоту, при которой наблюдается наибольшее преобладание высших гармоник над первой. При увеличении напряженности постоянного и амплитуды переменного электрических полей увеличивается область частот, в которых существенны нелинейные искажения.

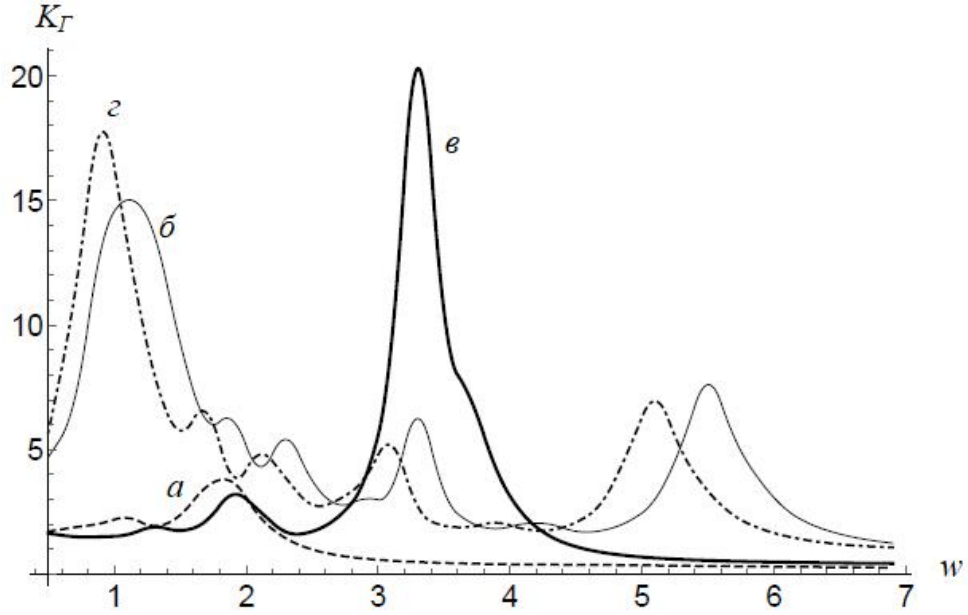


Рисунок 3.7 — Зависимость коэффициента гармоник от частоты, $F_{0y}=F_{ly}=0$: $w = 2.0$: а) $F_{lx}=2.30625$, $F_{0x}=3.125$, б) $F_{lx}=8.50625$, $F_{0x}=9.8625$; $w = 4.0$: в) $F_{lx}=4.13125$, $F_{0x}=6.25$, г) $F_{lx}=7.88125$, $F_{0x}=9.06875$

Рассмотрим случай произвольной поляризации электрических полей. Вследствие неаддитивности энергетического спектра ГСР появляется возможность управления амплитудами гармоник поперечными электрическими полями. На рисунке 3.8 приведена зависимость амплитуды первой гармоники от амплитуды переменного электрического поля при фиксированных значениях напряженности постоянного поля приложенного вдоль оси Y , частоты и параметров полей, поляризованных вдоль оси X . В отсутствии примесей (а) эффективность воздействия поперечных электрических полей на амплитуды гармоник в ГСР меньше по сравнению с щелевым графеном [129], из-за отличия их энергетических спектров (наличия произведения косинусов от разных компонент квазиимпульса в спектре щелевого графена). Резкое возрастание амплитуды гармоники (б,в) определяется ионизацией примеси, причем для более глубоких примесей (в) начало роста сдвигается в сторону более сильных полей.

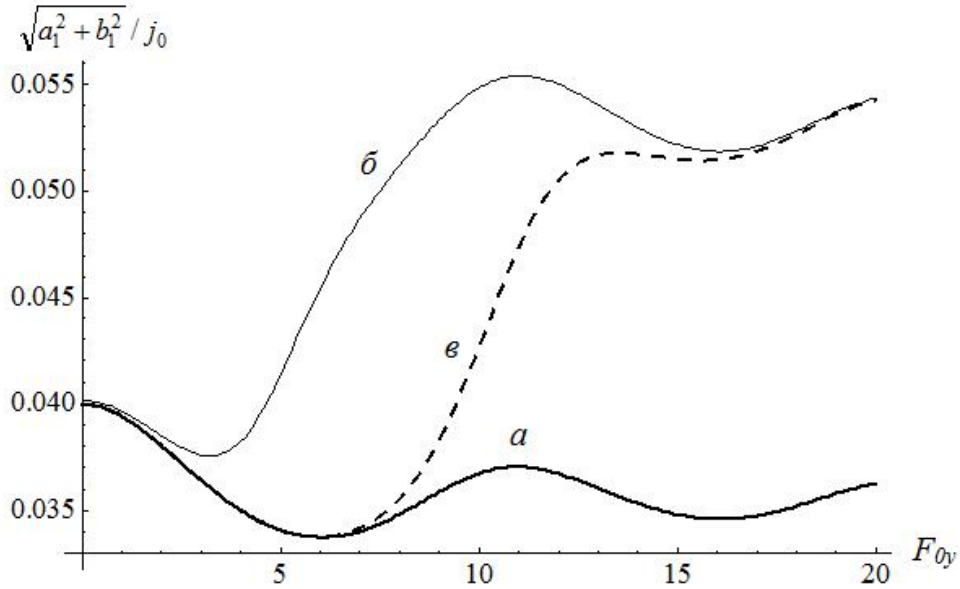


Рисунок 3.8 — Зависимость амплитуды первой гармоники от амплитуды переменного электрического поля приложенного вдоль оси Y , при фиксированных знаменаниях $F_{0x} = F_{lx} = 2.7$, $F_{ly} = 0$, $w = 3.0$: а) без учета ионизации примеси, б) с учетом ионизации примеси $\tilde{\nu} = 0.1f_1$, в) с учетом ионизации примеси $\tilde{\nu} = 0.14f_1$.

Удобно для аналитических расчетов использовать разложение (3.28) в двойной ряд Фурье. С увеличением периода ГСР уменьшается влияние неаддитивности энергетического спектра и при $d > 5 \cdot 10^{-6}$ см, можно с хорошей степенью точности аппроксимировать «истинный» спектр структуры аддитивной зависимостью энергии от квазиимпульса. В частном случае ($d = 2 \cdot 10^{-6}$ см) энергетический спектр обладает слабой неаддитивностью, что и проявляется в слабой зависимости амплитуд гармоник от поперечного электрического поля. При уменьшении периода ГСР возможность управления амплитудами гармоник поперечными электрическими полями увеличивается.

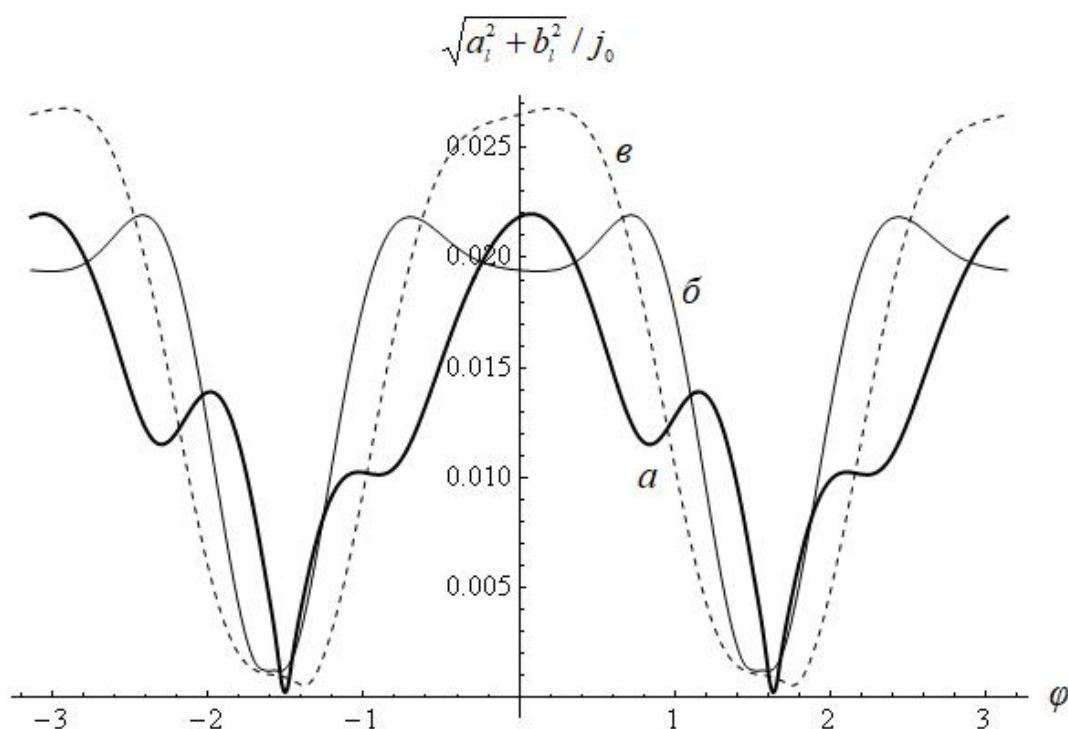


Рисунок 3.9 — Зависимость амплитуд гармоник плотности тока от угла поворота вектора поляризации переменного электрического поля, при $\alpha=\pi/6$, $F_0=7.0$, $F_1=6.0$, $w=3.0$: а) первая гармоника, б) вторая гармоника, в) третья гармоника.

Зависимость амплитуд гармоник плотности тока от угла φ между вектором поляризации переменного электрического поля и осью x , при фиксированных значениях параметров внешних электрических полей показана на рисунке 3.9. Угол α задает поворот вектора напряженности постоянного электрического поля по отношению к оси X . Параметры полей выбраны в области эффективного значения третьей гармоники. На рисунке 3.9 наблюдается асимметрия компоненты $j_l(\varphi)$, связанная с анизотропией, наведенной постоянным электрическим полем, и самого спектра ГСР. Поворотом вектора поляризации переменного электрического поля можно добиться преобладания одной гармоники над другими. Подбор примеси заданной глубины и учет их ионизации приводит к возможности существенного управления амплитудой гармоники (рисунок 3.10)

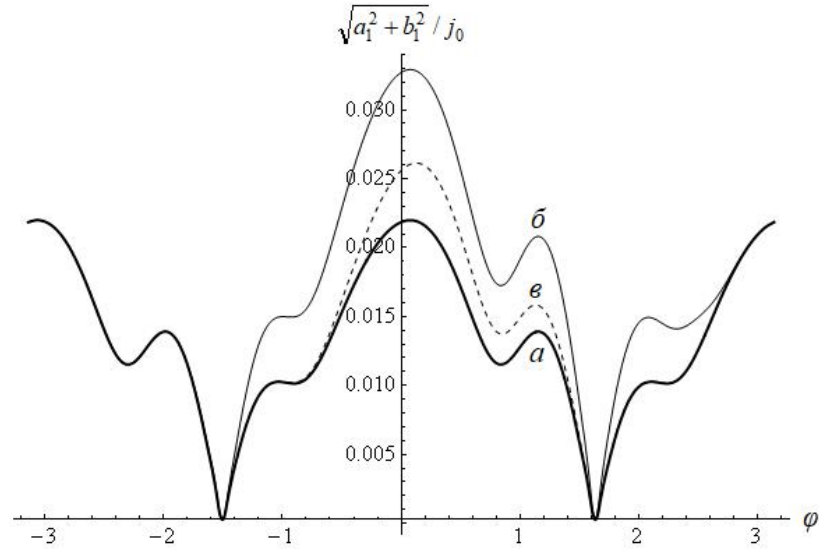


Рисунок 3.10 — Зависимость амплитуды первой гармоники плотности тока от угла поворота вектора поляризации переменного электрического поля, при $\alpha=\pi/6$, $F_0=7.0$, $F_1=6.0$, $w=3.0$: а) без учета ионизации примеси, б) с учетом ионизации примеси $\tilde{\nu} = 0.1f_1$ в) с учетом ионизации примеси $\tilde{\nu} = 0.14f_1$

Сделаем численные оценки: значения безразмерных напряженностей $F_{0.1} = 1$ соответствуют $E_{0.1} \approx 30 \text{ В см}^{-1}$, а безразмерной частоте $w = 1$ соответствует $\omega = 10^{11} \text{ Гц}$, $N=5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, $n_0=10^{11} \text{ см}^{-2}$, $\nu_r=10^7 \text{ Гц}$, $T \approx 70 \text{ К}$.

3.3 ЦИРКУЛЯРНЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В АНИЗОТРОПНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ

Гамильтониан сверхрешетки на основе дираковского материала с одномерным потенциалом имеет вид [130]:

$$v_F \hat{p}_x \hat{\sigma}_x \psi + \left(V(x) + \alpha p_y^2 \right) \sigma_y \psi = \varepsilon \psi \quad (3.39)$$

где $\alpha = 1 / 2m^*$, а профиль пространственной модуляции $V(x)$ задается моделью Кронига – Пенни:

$$V(x) = \begin{cases} \Delta_1, (s-1)d < x < a + (s-1)d, \\ \Delta_2, a + (s-1)d < x < s \end{cases} \quad (3.40)$$

Энергетический спектр рассматриваемой структуры в низкоэнергетическом приближении имеет следующий вид [130]:

$$\varepsilon(\vec{p}) = \pm 2F \sqrt{\sin^2 \left(\frac{p_x}{2} \right) + \frac{1}{4} (p_y^2 + \Delta_{eff})^2} \quad (3.41)$$

где $\Delta_{1,2} = \Delta_{1,2}d/v_F$ полуширина запрещённой зоны, $\Delta_{eff} = \frac{\Delta_1 + n\Delta_2}{1+n}$, $F = \frac{Q}{shQ}$, $Q = n \frac{(\Delta_1 - \Delta_2)}{(1+n)^2}$, $p_x = p_x/d$, $p_y^2 = \alpha p_y^2 d/v_F$, $n = b/a$, a , b – ширина ямы и барьера соответственно, $d = a + b$ период сверхрешетки (рисунок 3.11). Разные знаки относятся к валентной зоне и зоне проводимости. Переходы между полуметаллическим состоянием и зонным изолятором обусловлены параметром Δ . Когда Δ отрицательно, в спектре появляется седловая точка. Увеличение Δ приводит к ситуации, когда седловая точка и обе точки Дирака эволюционируют в единый локальный минимум спектра на переходе (при $\Delta = 0$) до открытия щели (при $\Delta > 0$). Рассматриваемая в данной работе сверхрешетка образована чередованием полос двух 2D кристаллов Дирака с различными значениями параметра Δ (Δ_1 и Δ_2), параметры Δ_1 и Δ_2 определяют величину потенциала в области ямы и барьера.

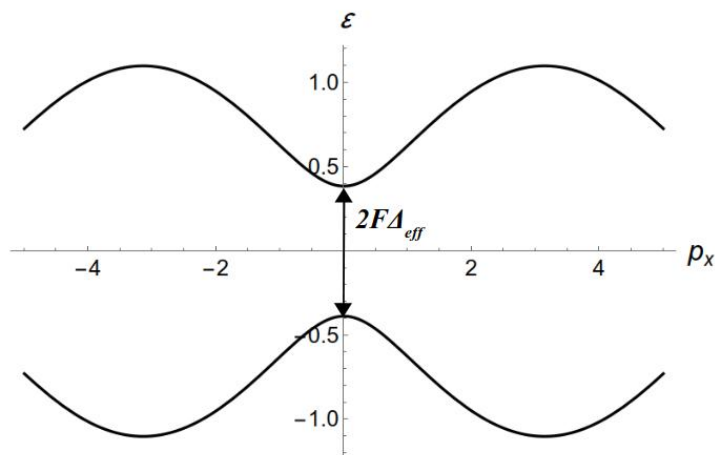


Рисунок 3.11 — Зонная структура графеновой сверхрешетки $\Delta_1 = -5$ и

$$\Delta_2 = 3.5, n = 1, p_y = 0$$

Будем рассматривать отклик сверхрешетки на действие постоянного и переменного электрических полей. $\vec{E} = (E_{1x}\cos(\omega t) + E_0; E_{1y}\cos(\omega t + \varphi))$ где E_0 – модуль напряженности постоянного электрического поля, $E_{1x,y}$, ω – амплитуда и частота переменного электрического поля. Геометрия задачи представлена на рисунке 3.12.

Плотность тока j_y , текущего вдоль оси Y (рисунок 3.12) определяется по формуле:

$$j_y = \left\langle e \sum_p v_y f(p, t) \right\rangle_t \quad (3.42)$$

где e – заряд электрона, $f(p, t)$ – неравновесная функция распределения носителей.

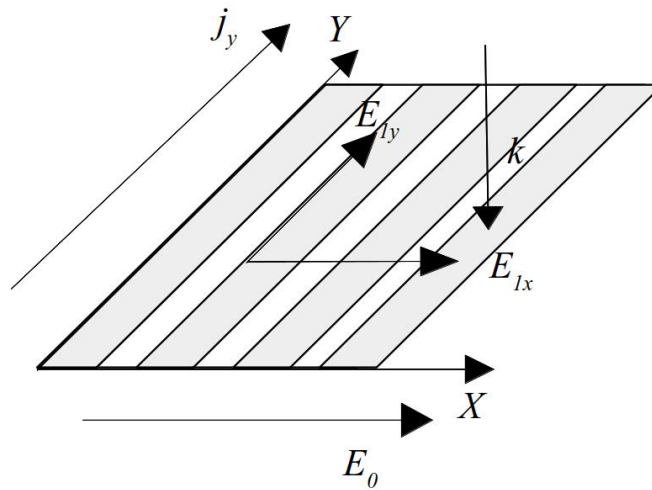


Рисунок 3.12 — Геометрия задачи

Функцию распределения будем находить при помощи классического уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f(p, t)}{\partial t} + eE \frac{\partial f(p, t)}{\partial p} = -\nu [f(p, t) - f_0(p)] \quad (3.43)$$

где $f_0(p)$ – равновесная функция распределения, ν – частота столкновений.

Скорость движения электронов вдоль оси y имеет вид

$$v_y = \frac{\partial \varepsilon(p)}{\partial p_y} = \frac{F p_y (p_y^2 + \Delta_{eff})}{\sqrt{\sin^2 \left(\frac{p_x}{2} \right) + \frac{1}{4} (p_y^2 + \Delta_{eff})^2}} \quad (3.44)$$

После разложения скорости по p_y получаем следующее выражение:

$$v_y \approx \frac{2F\Delta_{eff}p_y}{\sqrt{\sin^2\left(\frac{p_x}{2}\right) + \Delta_{eff}^2}} \quad (3.45)$$

$$v_y'(x) = \frac{1}{\sqrt{\sin^2\left(\frac{p_x}{2}\right) + \Delta_{eff}^2}} \quad (3.46)$$

Раскладываем (3.46) в комплексный ряд Фурье

$$v_y'(x) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{a}_m e^{imp_x} \quad (3.47)$$

$$\text{где } \hat{a}_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{imp_x} dp_x}{\sqrt{\sin^2\left(\frac{p_x}{2}\right) + \Delta_{eff}^2}}$$

Решая уравнение (3.43) методом характеристик, после подстановки его и (3.44) в (3.42), получается выражение для постоянной составляющей тока.

$$j_y = \frac{2ev}{(2\pi\hbar)^2} \left\langle \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^t e^{-\nu(t-t')} v_y(p_x; p_y) \times \right. \\ \left. \times f_0\left(p_x - \frac{e}{c}(A_x(t) - A_x(t')); p_y - \frac{e}{c}(A_y(t) - A_y(t'))\right) d^2p dt' \right\rangle_t \quad (3.48)$$

Делаем замену переменных:

$$j_y = \frac{2ev}{(2\pi\hbar)^2} \left\langle \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^t e^{-\nu(t-t')} v_y\left(p_x' + \frac{e}{c}(A_x(t) - A_x(t')); p_y' + \frac{e}{c}(A_y(t) - A_y(t'))\right) \times \right. \\ \left. \times f_0(p_x', p_y') d^2p' dt' \right\rangle_t \quad (3.49)$$

$$j_y = \frac{2ev}{(2\pi\hbar)^2} \frac{\hbar}{d} \sqrt{\frac{v_F\hbar}{\alpha d}} \left\langle \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^t e^{-\nu(t-t')} \times \right. \\ \times v_y\left(p_x' - \frac{edE_{0x}}{\hbar\omega}(\sin(\omega t) - \sin(\omega t')) - \frac{edE_0}{\hbar}(t - t'); \right. \\ \left. p_y' - \sqrt{\frac{\alpha d}{v_F\hbar}} \frac{e}{\omega} E_{0y}(\sin(\omega t + \varphi) - \sin(\omega t' + \varphi))\right) f_0(p_x', p_y') d^2p' dt' \right\rangle_t \quad (3.50)$$

Подставляем (3.45) с учётом разложения (3.48) в (3.50)

$$j_y = \frac{4evF\Delta_{eff}\hbar}{(2\pi\hbar)^2} \frac{\hbar}{d} \sqrt{\frac{v_F\hbar}{\alpha d}} \left\langle \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^t e^{-\nu(t-t')} \times \right. \\ \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{a}_m \exp \left[i \left(x - \frac{edE_{0x}}{\hbar\omega}(\sin(\omega t) - \sin(\omega t')) - \frac{edE_0}{\hbar}(t - t') \right) \right] \times$$

$$\times \left(y - \sqrt{\frac{ad}{v_F \hbar} \frac{e}{\omega}} E_{0y} (\sin(\omega t + \varphi) - \sin(\omega t' + \varphi)) \right) f_0(x, y) dx dy dt' \Big|_t \quad (3.51)$$

После подстановки функции распределения f_0 и перехода к новым переменным получаем:

$$j_y = \frac{evF\Delta_{eff}n_0\hbar}{I_0} \sqrt{\frac{v_F\hbar}{ad}} \left\langle \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^t e^{-\nu(t-t')} e^{\frac{-\varepsilon(x,y)}{kT}} \times \right. \\ \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{a}_m \exp[ix] \exp[-i\alpha_{0x}(\sin(\omega t) - \sin(\omega t'))] \times \\ \left. \times \exp\left(y - \beta_{0y}(\sin(\omega t + \varphi) - \sin(\omega t' + \varphi))\right) dx dy dt' \right\rangle_t \quad (3.52)$$

$$\text{где } p'_x = x, p'_y = y, \alpha_{0x} = \frac{medE_{0x}}{\hbar\omega}, \alpha_0 = \frac{medE_0}{\hbar}, \beta_{0y} = \sqrt{\frac{ad}{v_F\hbar} \frac{e}{\omega}} E_{0y}, I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} e^{\frac{-\varepsilon(x,y)}{kT}} dx dy$$

Перейдём к новым переменным: $t - t' = \tau$, $\omega t = k$ и, воспользовавшись тем, что $e^{\pm iz \sin(t)} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(z) e^{\pm ilt}$, где $J_l(z)$ – функция Бесселя, получаем:

$$j_y = \frac{evF\Delta_{eff}n_0\hbar}{I_0} \sqrt{\frac{v_F\hbar}{ad}} \frac{1}{2\pi\omega} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-\nu(\tau)} e^{\frac{-\varepsilon(x,y)}{kT}} \times \\ \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{a}_m e^{imx} e^{-i\alpha_0\tau} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(\alpha_{0x}) e^{-ilk} \sum_{z=-\infty}^{\infty} J_z(\alpha_{0x}) e^{iz(k-\omega\tau)} \\ \times \left(y - \beta_{0y}(\sin(k + \varphi) - \sin(k - \omega\tau + \varphi)) \right) dk d\tau dx dy \quad (3.53)$$

После интегрирования по k и τ выражение (3.53) принимает вид:

$$j_y = \frac{evF\Delta_{eff}n_0\hbar}{I_0} \sqrt{\frac{v_F\hbar}{ad}} \frac{1}{2\pi\omega} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\varepsilon(x,y)}{kT}} \times \\ \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{a}_m e^{imx} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{z=-\infty}^{\infty} J_z(\alpha_{0x}) J_l(\alpha_{0x}) \times \\ \times \frac{-ie^{-i(\varphi+\pi(l-z))} (e^{2i\pi(l-z)} - 1) \beta_{0y} \omega (-e^{2i\varphi} (\alpha_0 - i\nu + \omega(z-1))(l+1-z) - (l-1-z)(\alpha_0 - i\nu + \omega(z+1)))}{2(\alpha_0 - i\nu + \omega(z-1))(l+1-z)(l-1-z)(\alpha_0 - i\nu + \omega(z+1))(\alpha_0 - i\nu + \omega z)} dx dy \quad (3.54)$$

Разбиваем выражение (3.54) на две дроби:

$$j_y = \frac{evF\Delta_{eff}n_0\hbar}{I_0} \sqrt{\frac{v_F\hbar}{ad}} \frac{1}{2\pi\omega} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\varepsilon(x,y)}{kT}} \times$$

$$\times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{a}_m e^{imx} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{z=-\infty}^{\infty} J_l(\alpha_{0x}) \left(\frac{-\beta_{0y}\omega}{2} \right) \times \quad (3.55)$$

$$\frac{-ie^{-i(\varphi+\pi(l-z))} (e^{2i\pi(l-z)} - 1) J_z(\alpha_{0x}) (l-1-z)(\alpha_0 - i\nu + \omega(z+1))}{(\alpha_0 - i\nu + \omega(z-1))(l+1-z)(l-1-z)(\alpha_0 - i\nu + \omega(z+1))(\alpha_0 - i\nu + \omega z)} \Bigg\} dx dy$$

Учитывая, что $\lim_{x \rightarrow \mp 1} \frac{(e^{2i\pi(x)} - 1)}{x \pm 1} = 2i\pi$, в первой дроби делаем замену $z=l-1$, а

во второй $z=l+1$;

$$j_y = \frac{e\tilde{\nu}F\Delta_{eff}n_0}{I_0} \frac{\hbar}{d} \sqrt{\frac{v_F\hbar}{\alpha d}} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\varepsilon(x,y)}{kT}} \times$$

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{a}_m e^{imx} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(\alpha_{0x}) (-\beta_{0y}) \left\{ \frac{e^{i(\varphi-\pi)} J_{l-1}(\alpha_{0x})}{(\tilde{\alpha}_0 - i\tilde{\nu} + (l-1))(\tilde{\alpha}_0 - i\tilde{\nu} + l)} \times \right.$$

$$\left. \times \frac{+e^{-i(\varphi-\pi)} J_{l+1}(\alpha_{0x})}{(\tilde{\alpha}_0 - i\tilde{\nu} + (l+1))(\tilde{\alpha}_0 - i\tilde{\nu} + l)} \right\} dx dy \quad (3.56)$$

где $\tilde{\nu} = \nu/\omega$, $\tilde{\alpha}_0 = \alpha_0/\omega$

Поскольку ряд по l меняется в пределах от $-\infty$ до $+\infty$, то в первой дроби делаем замену $l \rightarrow l+1$ и $e^{\pm i\pi} = -1$

$$j_y = \frac{e\tilde{\nu}F\Delta_{eff}n_0}{I_0} \frac{\hbar}{d} \sqrt{\frac{v_F\hbar}{\alpha d}} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\varepsilon(x,y)}{kT}} \times$$

$$\times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{a}_m e^{imx} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \beta_{0y} \left\{ \frac{e^{i\varphi} J_l J_{l+1}(\alpha_{0x})}{(\tilde{\alpha}_0 - i\tilde{\nu} + l)(\tilde{\alpha}_0 - i\tilde{\nu} + (l+1))} \frac{+e^{-i\varphi} J_l J_{l+1}(\alpha_{0x})}{(\tilde{\alpha}_0 - i\tilde{\nu} + (l+1))(\tilde{\alpha}_0 - i\tilde{\nu} + l)} \right\} dx dy \quad (3.57)$$

Итоговое выражение для плотности тока имеет вид:

$$j_y = j_0 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \hat{a}_m C_m \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{2\beta_{0y} J_l J_{l+1}(\alpha_{0x}) \cos \varphi}{(\tilde{\alpha}_0 - i\tilde{\nu} + l)(\tilde{\alpha}_0 - i\tilde{\nu} + (l+1))} \quad (3.58)$$

где $C_m = \frac{1}{I_0} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\varepsilon(x,y)}{kT}} e^{imx}$, $j_0 = \frac{\hbar e \tilde{\nu} F \Delta_{eff} n_0}{d} \sqrt{\frac{v_F \hbar}{\alpha d}}$

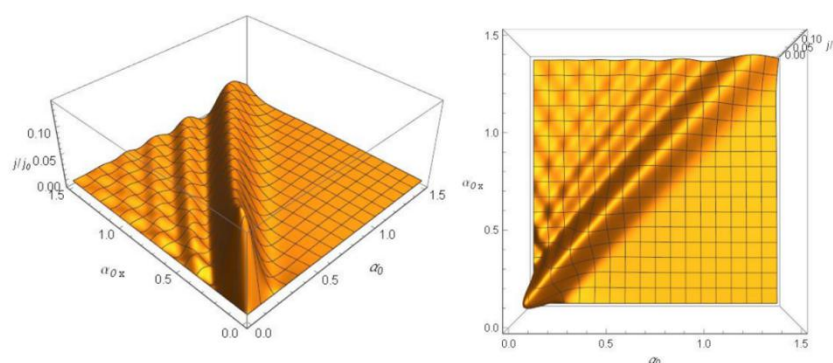


Рисунок 3.13 — Зависимость плотности тока от напряженности постоянного и амплитуды переменного электрического поля, приложенного вдоль оси X при $\beta_{0y} = 1.0$ и $\varphi = \pi/4$, $\Delta_1 = -5$, $\Delta_2 = 2$

На рисунке 3.13 показана зависимость постоянной составляющей плотности тока от напряженности постоянного и амплитуды напряженности переменного электрического поля, приложенного вдоль оси X , при $\beta_{0y}=1,0$ и $\varphi=\pi/4$. Зависимость тока от амплитуды поля волны, поляризованной вдоль оси сверхрешетки, носит осциллирующий характер. Наибольшая амплитуда колебаний достигается в области слабых полей. Одной безразмерной единице α , β соответствует 65.8 В/см, одна единица $\Delta_{1,2}$ равна 0.0329 эВ.

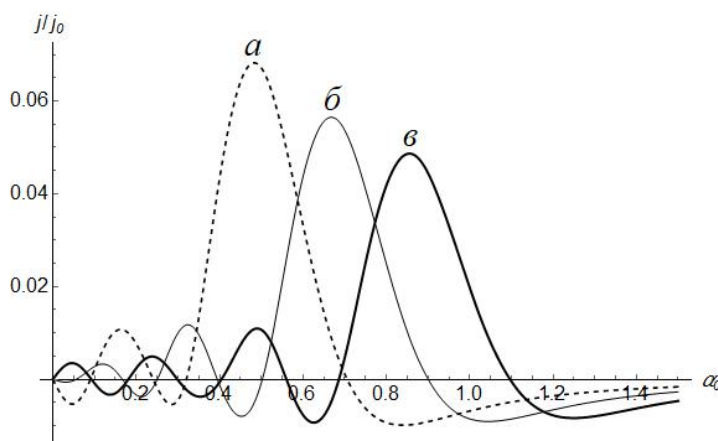


Рисунок 3.14 — Зависимость плотности тока от напряженности постоянного электрического поля приложенного вдоль оси X при фиксированных значениях $\Delta_1 = -5$, $\Delta_2 = 2$, $\beta_{0y} = 1.0$ и $\varphi = \pi/4$ а) $\alpha_{0x} = 0.6$ б) $\alpha_{0x} = 0.8$ в) $\alpha_{0x} = 1.0$

На рисунке 3.14 показана зависимость плотности постоянного электрического тока вдоль оси Y от амплитуды переменного электрического поля волны, поляризованного вдоль оси X , при нескольких значениях напряженности постоянного электрического поля. На рисунке 3.15 показана зависимость плотности постоянного электрического тока вдоль оси Y от напряженности постоянного электрического поля при нескольких значениях амплитуды переменного поля поляризованного вдоль оси X .

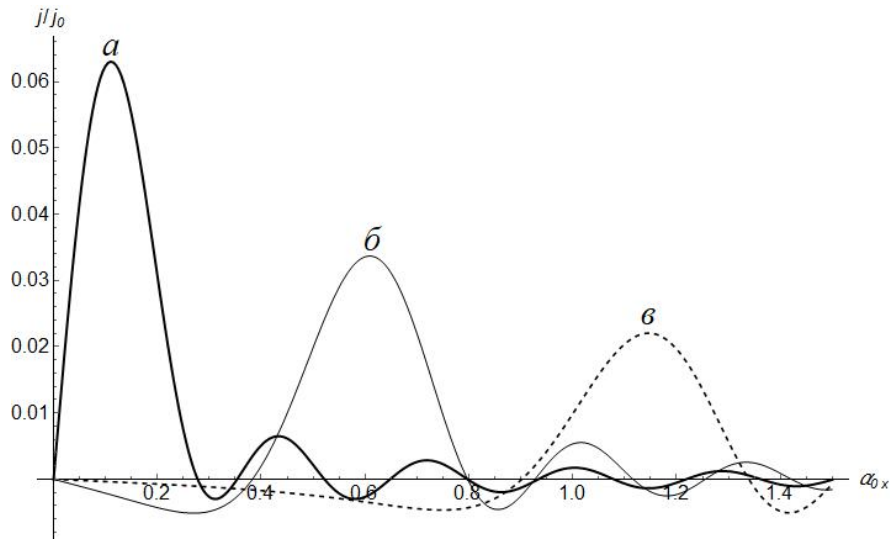


Рисунок 3.15— Зависимость плотности тока от амплитуды переменного электрического поля приложенного вдоль оси X при фиксированных значениях $\Delta_1 = -5$, $\Delta_2 = 2$, $\beta_{0y} = 0.5$ и $\varphi = \pi/4$ а) $\alpha_0 = 0.05$ б) $\alpha_0 = 0.5$ в) $\alpha_0 = 1.0$

Следует отметить, что в работе [131] изучался циркулярный эффект Холла в родственной структуре. Зависимость плотности тока в направлении перпендикулярном оси сверхрешетки от напряженности постоянного поля носила несколько иной характер.

$$j_y = j_0 \beta_{0y} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(\alpha_{0x}) (J_{l+1}(\alpha_{0x}) - J_{l-1}(\alpha_{0x})) \frac{(\tilde{\alpha}_0^2 - l^2 + \tilde{\nu}^2)}{((\tilde{\alpha}_0 - l)^2 + \tilde{\nu}^2)((\tilde{\alpha}_0 + l)^2 + \tilde{\nu}^2)} \cos \varphi \quad (3.59)$$

Выражение (3.59) имеет структуру характерную для резонанса, когда энергия набираемая электроном на расстоянии равном периоду сверхрешетки

численно равна целому числу энергий кванта света. На графиках, представленных на рисунке 3.14 не видно характерных для резонанса разрывов второго рода. Выражение (3.58) не обнаруживает резонансных зависимостей. Такое различие связано с превышением пределов применимости квазиклассического приближения в работе [131] при построении зависимости плотности постоянного тока в поперечном направлении от напряженности постоянного поля.

Неаддитивность энергетического спектра сверхрешетки на основе графена приводит к взаимной зависимости движений носителей заряда в направлениях, перпендикулярных друг другу, что, в частности, и является причиной проявления в такой структуре постоянного тока в направлении, перпендикулярном тянущему полю, под действием падающей на поверхность образца эллиптически поляризованной волны. При этом плотность тока в поперечном направлении примерно на порядок меньше плотности тока в направлении оси сверхрешетки. Зависимость плотности тока от напряженности приложенного поля имеет немонотонный характер. Природа этой зависимости аналогична природе штарковского резонанса, известного в квантовых полупроводниковых сверхрешетках.

Численные оценки: $T=70$ К, $d = 2 \cdot 10^{-6}$ см, $v_F=10^8$ см/с.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 3

1. На основе анализа дисперсионных уравнений сверхрешетки, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена, параметры энергетического спектра которой можно регулировать, меняя внешнее электрическое поле, перпендикулярное поверхности образца, полученных при помощи модели Кронига - Пенни, показано, что энергетический спектр такой сверхрешетки может быть аппроксимирован кейновской моделью. Вычислен коэффициент поглощения света при межзонных переходах в такой структуре.

2. Исследовано влияние постоянного электрического поля на циркулярный эффект Холла в анизотропной графеновой сверхрешетке при нормальном падении. Получено выражение для плотности тока в такой сверхрешетке.

3. Неаддитивность энергетического спектра сверхрешетки на основе графена приводит к взаимной зависимости движений носителей заряда в направлениях, перпендикулярных друг другу, что, в частности, и является причиной проявления в такой структуре постоянного тока в направлении, перпендикулярном тянущему полю, под действием падающей на поверхность образца эллиптически поляризованной волны. При этом плотность тока в поперечном направлении примерно на порядок меньше плотности тока в направлении оси сверхрешетки. Зависимость плотности тока от напряженностей приложенных полей имеет немонотонный характер

4. Получено и численно проанализировано выражение для амплитуд высших гармоник плотности тока в двумерной графеновой сверхрешетке (2D ГСР) под воздействием постоянного и переменного электрических полей.

5. Выявлена возможность управления амплитудами гармоник поперечными электрическими полями. По сравнению с щелевым графеном, эффективность воздействия поперечных электрических полей на амплитуды гармоник в 2D ГСР меньше из-за существенного отличия их энергетических спектров.

6. Зависимость амплитуд гармоник плотности тока от характеристик приложенных к системе полей имеет немонотонный осциллирующий характер. Это дает возможность в широком интервале значений управлять амплитудой гармоник.

7. В результате комплексного анализа выявлены области параметров рассматриваемой системы для первых четырех гармоник, амплитуды каждой из которых превосходят три остальные.

ГЛАВА 4. БРИЗЕРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СВЕРХРЕШЕТКЕ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА

Графеновые сверхрешетки (ГСР), при получении которых используются различные способы формирования периодического потенциала, в последние годы широко исследуются теоретически и экспериментально. Непараболичность энергетического спектра ГСР позволяет ожидать проявления ряда нелинейных эффектов, известных для полупроводниковых сверхрешеток (СР). Одним из таких эффектов является распространение в сверхрешетках уединенных волн – солитонов и бризеров. В работе [132] было проанализировано уравнение Даламбера, записанное для электромагнитных волн, распространяющихся в ГСР, состоящей из чередующихся полосок щелевой и бесщелевой модификации графена [6]. Энергетический спектр сверхрешетки, рассмотренной в [132], имеет вид:

$$\varepsilon = \sqrt{\Delta^2 + p_x^2 v_F^2 + \Delta_1^2 \left(1 - \cos \frac{p_z d}{\hbar}\right)}. \quad (4.1)$$

Здесь p_x , p_z – компоненты квазиимпульса электрона, d – период СР, Δ – полуширина запрещенной зоны в щелевой модификации графена, $v_F=10^8$ см·с⁻¹ – скорость на поверхности Ферми в графене. В расчетах будем полагать $\Delta=0.13$ эВ, что соответствует полуширине запрещенной зоны графена на подложке из карбида кремния. Параметр Δ_1 соответствует полуширине минизоны проводимости одномерной графеновой СР. Например, в [133] полагают $\Delta_1=0.059$ эВ. В настоящей работе будем считать значение Δ_1 меньше или порядка Δ . Известно [132], что в этом материале вектор-потенциал электромагнитного поля является решением уравнения Даламбера, представляемого в виде

$$\frac{\partial^2 \alpha}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} + \frac{\omega_0^2 b^2 \sin \alpha}{\sqrt{1+b^2(1-\cos \alpha)}} = 0, \quad (4.2)$$

Здесь $\alpha = edA_z/\hbar c$ — безразмерная компонента векторного потенциала в направлении чередования слоев СР, $\omega_0^2 = \frac{2\pi n_0 e^2 d^2 \Delta}{a_0 \hbar^2}$, n_0 — поверхностная концентрация носителей заряда, $a_0 = 0.12$ нм — толщина графенового слоя, $b = \Delta_1/\Delta$. Уравнение колебаний в форме (4.2) соответствует направлению вектора напряженности электрического поля вдоль оси Z , при этом волна распространяется вдоль оси X (рисунок 4.1). Уравнение (4.2) имеет решение в виде 2π -импульса, выраженное неявно [132]:

$$\int_{\pi}^{\alpha(\xi)} \frac{d\alpha}{\sqrt{\sqrt{1+b^2(1-\cos\alpha)}-1}} = 2\xi, \quad (4.3)$$

$\xi = (x - vt)/L_0$, $L_0 = \frac{c}{\omega_0} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$, v — скорость электромагнитного импульса. В работе [134] исследуется вопрос области стабильности 2π -импульса в ГСР, а также динамика π -импульса. Исследованию взаимодействия кинков и антикинков уравнения (4.2) посвящен обзор [135]. В статье [136] численно исследовано неупругое столкновение кинков и антикинков с одинаковой, но противоположной по направлению скоростью. После взаимодействия кинка и антикинка они уходят в бесконечность, когда скорость рассматриваемых уединенных волн либо больше некоторого критического значения, либо находится внутри ряда резонансных окон; в противном случае они образуют состояние, подобное бризеру, которое медленно распадается за счет излучения энергии.

В работе [137] предложен способ получения приближенного решения нелинейного уравнения Клейна-Гордона в виде бегущего бризера малой амплитуды и в качестве примера исследовано решение уравнения (4.2), принимающее вид

$$\alpha = \left(\frac{32(1-\omega^2)}{3b^2+2} \right)^{1/2} \frac{\cos \left(\gamma \omega \omega_0 b \left(t - x \sqrt{\gamma^2 - 1} / (\gamma c) \right) \right)}{\cosh \left(\omega_0 b \sqrt{\gamma^2 - 1} \sqrt{1 - \omega^2} \left(t - x \gamma / (c \sqrt{\gamma^2 - 1}) \right) \right)}, \quad (4.4)$$

$\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. При выводе (4.4) предполагалось, что $\omega \approx 1$ и $\omega < 1$.

Наличие бризерного решения нелинейного уравнения интересно само по себе, а исследование динамики бризера в нелинейной среде может дать сведения о применимости ее, например, для передачи информации при помощи солитоноподобных импульсов. Ряд исследований посвящены динамике уединенных волн, являющихся решениями уравнений типа Клейна-Гордона [137,138]. В качестве экспериментального доказательства существования электромагнитного бризера в ГСР может выступить бризерозлектрический эффект, который должен проявляться в возникновении потока электронов в направлении распространения волны. В работе [139] рассмотрен эффект увлечения электронов в поле бризера в полупроводниковой СР в качестве примера использования бризерного решения уравнения синус-Гордона, описывающего распространение нелинейных волн в указанной структуре. Ряд работ [140-142] посвящены эффекту увлечения электронов солитонами (кинками) в полупроводниковых и графеновых сверхрешетках.

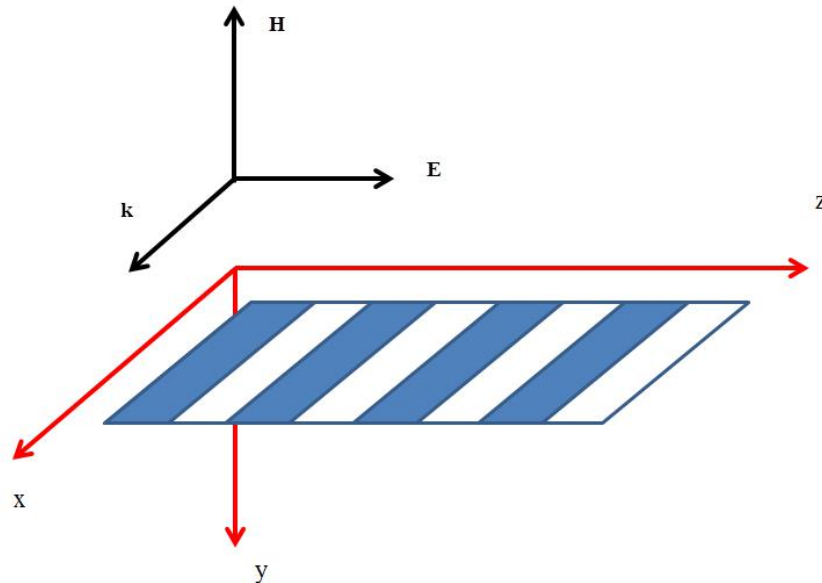


Рисунок 4.1 — Геометрия задачи.

Геометрия задачи показана на рисунке 4.1. Волна распространяется вдоль оси X (перпендикулярно к направлению чередования слоев сверхрешетки), вектор $\vec{E}$ электрической напряженности поля волны направлен вдоль оси Z (вдоль оси сверхрешетки), вектор $\vec{H}$ напряженности магнитного поля волны вдоль оси Y , то есть $\vec{E} = \{0, 0, E\}$, $\vec{H} = \{0, H, 0\}$. Векторы $\vec{E}$ и $\vec{H}$ связаны с векторным потенциалом электромагнитного поля соотношениями

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad (4.5)$$

$$\vec{H} = \text{rot} \vec{A}, \quad (4.6)$$

что в рассматриваемой геометрии задачи приводит к соотношениям

$$E_z = E = -\frac{1}{c} \frac{\partial A_z}{\partial t}, \quad (4.7)$$

$$H_y = H = -\frac{\partial A_z}{\partial x}. \quad (4.8)$$

Учитывая, что значения величин ω и γ близки к единице, выражение (4.4) для векторного потенциала бризера можно представить в виде произведения $A_z = P \cdot Q$ быстроосциллирующей функции P и медленно меняющейся функции Q :

$$P = \cos \left(\gamma \omega \omega_0 b \left(t - x \sqrt{\gamma^2 - 1} / (\gamma c) \right) \right), \quad (4.9)$$

$$Q = \frac{\hbar c}{ed} \left(\frac{32(1-\omega^2)}{3b^2+2} \right)^{1/2} \left(\cosh \left(\omega_0 b \sqrt{\gamma^2 - 1} \sqrt{1-\omega^2} \left(t - x \gamma / (c \sqrt{\gamma^2 - 1}) \right) \right) \right)^{-1}. \quad (4.10)$$

Дифференцируя только быстроосциллирующую часть, получаем соотношение между напряженностями электрического и магнитного полей:

$$H_y = -\frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma} E_z = \frac{\hbar}{ed} \frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma} \frac{\partial \alpha}{\partial t}. \quad (4.11)$$

В бесстолкновительном приближении плотность тока увлечения электронов бризером определяется следующим образом:

$$j_x = en_0 u_x(p_x, p_y) = en_0 \frac{p_x v_F^2}{\sqrt{\Delta^2 + p_x^2 v_F^2 + \Delta_1^2} \left(1 - \cos \frac{p_z d}{\hbar} \right)}, \quad (12)$$

где $\vec{u} = \{u_x, u_z\}$ — вектор скорости электрона в ГСР, p_x, p_z — решения классических уравнений движения электрона в поле электромагнитной волны

$$\begin{cases} \frac{dp_x}{dt} = -\frac{e}{c} u_z H_y, \\ \frac{dp_z}{dt} = e E_z + \frac{q}{c} u_x H_y. \end{cases} \quad (4.13)$$

Ввиду малости u_x по сравнению со скоростью света c вторым слагаемым в (4.15) пренебрегаем. Воспользовавшись выражением (4.11), получаем:

$$\begin{cases} \frac{dp_x}{dt} = -\frac{\Delta_1^2 \sin \frac{p_z d}{\hbar}}{2c \sqrt{\Delta^2 + p_x^2 v_F^2 + \Delta_1^2 (1 - \cos \frac{p_z d}{\hbar})}} \frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma} \frac{\partial \alpha}{\partial t}, \\ \frac{dp_z}{dt} = -\frac{\hbar}{d} \frac{\partial \alpha}{\partial t}. \end{cases} \quad (4.14)$$

Решая второе уравнение в (4.14), получаем

$$p_z = -\frac{\hbar}{d} \alpha. \quad (4.15)$$

Поскольку рассматривается эффект увлечения электронов нелинейной волной, можно электрическое поле волны считать слабым в том смысле, что оно мало влияет на разогрев электронного газа в материале. Поэтому можно подобрать такие значения температуры, когда большинство электронов находятся вблизи дна минизоны проводимости и выполняется условие $p_0 v_F \ll \Delta, \Delta_1$, где p_0 — некоторое характерное значение абсолютной величины квазиимпульса электрона. В этом случае вторым слагаемым в знаменателе правой части первого уравнения в (4.14) можно пренебречь. Учитывая (4.15), первое из уравнений движения электрона принимает вид:

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\Delta_1^2}{2c} \frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma} \frac{\sin \alpha}{\sqrt{\Delta^2 + \Delta_1^2 (1 - \cos \alpha)}} \frac{\partial \alpha}{\partial t}. \quad (4.16)$$

Интегрируя (4.16) в пределах от минус бесконечности до текущего момента времени t , получаем:

$$p_x = -\frac{\Delta_1^2}{2c} \frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma} \int_{-\infty}^t \left(\frac{\sin \alpha}{\sqrt{\Delta^2 + \Delta_1^2 (1 - \cos \alpha)}} \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right) dt. \quad (4.17)$$

Полагая, что в далеком прошлом векторный потенциал поля бризера был равен нулю, получаем

$$p_x = -\frac{\Delta_1^2}{2c} \frac{\sqrt{\gamma^2-1}}{\gamma} \int_0^\alpha \frac{\sin \alpha d\alpha}{\sqrt{\Delta^2 + \Delta_1^2 - \Delta_1^2 \cos \alpha}} = \frac{\sqrt{\gamma^2-1}}{\gamma c} \left(\Delta - \sqrt{\Delta^2 + \Delta_1^2 - \Delta_1^2 \cos \alpha} \right). \quad (4.18)$$

С учетом приближения $p_x v_F \ll \Delta, \Delta_1$ выражение для плотности тока увлечения принимает вид:

$$j_x = en_0 \frac{v_F^2}{c} \frac{\sqrt{\gamma^2-1}}{\gamma} \left(\frac{1}{\sqrt{1+b^2(1-\cos \alpha)}} - 1 \right) \quad (4.19)$$

Заряд, переносимый через единицу площади поперечного сечения образца (в рассматриваемом случае двумерной структуры – через единицу длины поперечного сечения), в результате прохождения бризера, определяется выражением

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} j_x(x_0, t) dt \quad (4.20)$$

для определенности полагаем $x_0 = 0$.

Преобразуем выражение (4.4). Введем новые переменные:

$$x\omega_0 b/c \rightarrow x, t\omega_0 b \rightarrow t. \quad (4.21)$$

Получаем:

$$\alpha = \left(\frac{32(1-\omega^2)}{3b^2+2} \right)^{1/2} \frac{\cos(\gamma \omega t - \omega x \sqrt{\gamma^2-1})}{\cosh(t\sqrt{\gamma^2-1}\sqrt{1-\omega^2} - x\gamma\sqrt{1-\omega^2})}, \quad (4.22)$$

$$Q = Q_0 \frac{1}{b} \frac{v}{c} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{1+b^2(1-\cos \alpha)}} - 1 \right) dt, \quad (4.23)$$

$$Q_0 = \frac{en_0 v_F^2}{c\omega_0}. \quad (4.24)$$

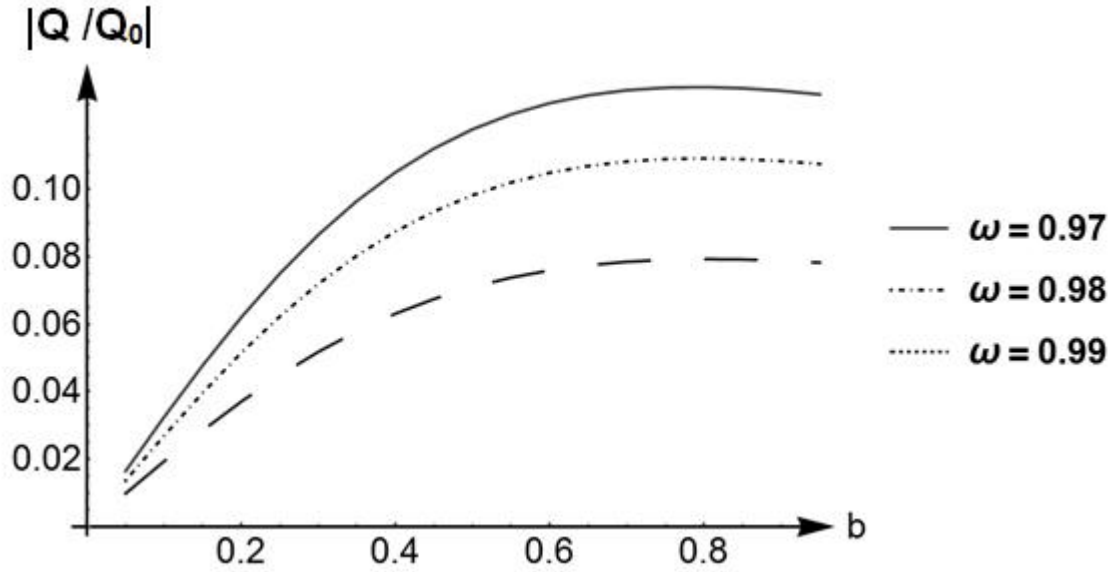


Рисунок 4.2 — Зависимость заряда, увлеченного бризером, от параметра $b = \Delta_1/\Delta$ при различных значениях параметра ω .

На рисунках 4.2, 4.3 приведены зависимости заряда, увлекаемого бризером, от параметра $b = \Delta_1/\Delta$ при разных значениях параметров ω и v/c , соответственно. Выбранные значения параметра ω и скорости v обусловлены условиями существования решения в указанной форме. При характерных значениях параметров $d = 2 \cdot 10^{-6}$ см, $\Delta = 0.13$ эВ, $n_0 = 10^{10}$ см $^{-2}$, $v_F = 10^8$ см/с, $a_0 = 0.12$ нм получаем величину увлеченного заряда, приходящуюся на единицу длины поперечного сечения, равной $Q_0 = 5 \cdot 10^{-19}$ Кл / см. Полагая толщину образца порядка a_0 , величина увлеченного бризером заряда, отнесенная к единице площади поперечного сечения, составляет примерно $Q_0 = 10^{-12}$ Кл / см 2 , что по порядку величины совпадает со значением, полученным в работе [139] для полупроводниковой СР с одномерным периодическим потенциалом.

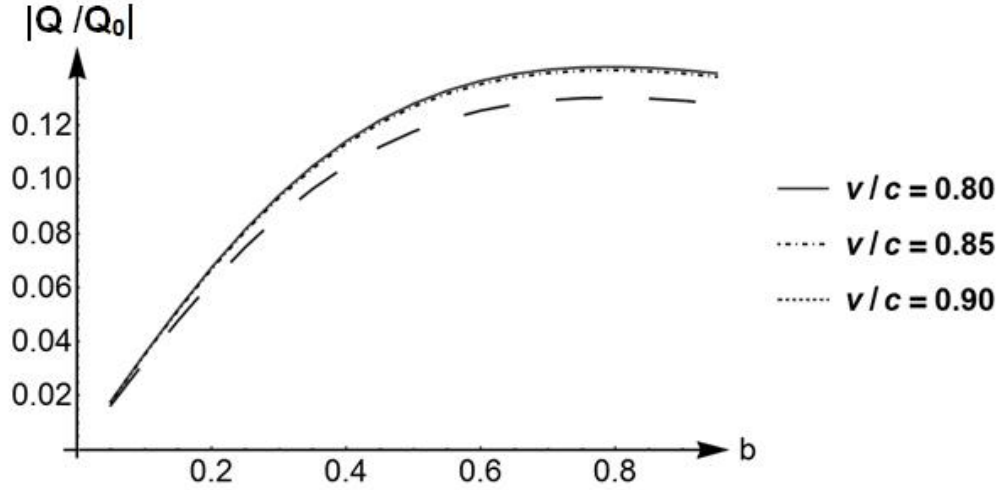


Рисунок 4.3 — Зависимость заряда, увлеченного бризером, от параметра $b=\Delta_1/\Delta$ при различных значениях скорости распространения волны.

Будем предполагать время свободного пробега электрона τ большим по сравнению со временем пребывания электрона в поле солитона w/v (w — ширина бризера, v — скорость). Тогда при определении формы бризера можно пренебречь столкновениями, а найденное таким образом поле волны подставить в уравнение Больцмана, учитывающее столкновения [139, 140]. При условии, что длина λ свободного пробега электрона мала по сравнению с шириной l бризера ($\lambda \ll l$), в уравнении Больцмана можно пренебречь членом с пространственной производной:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + eE_z(x, t) \frac{\partial f}{\partial p_z} = -\frac{f-f_0}{\tau}. \quad (4.25)$$

Средняя длина свободного пробега λ в графене при комнатной температуре и концентрации носителей заряда $n \sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$ составляет $\lambda \sim 4 \cdot 10^{-5} \text{ см}$ [143], при этом ширина бризера составляет порядка 10^{-4} см (рисунок 4.4), поэтому условие $\lambda \ll l$ выполняется в графеновой сверхрешетке значительно менее строго, чем в полупроводниковой [139-141].

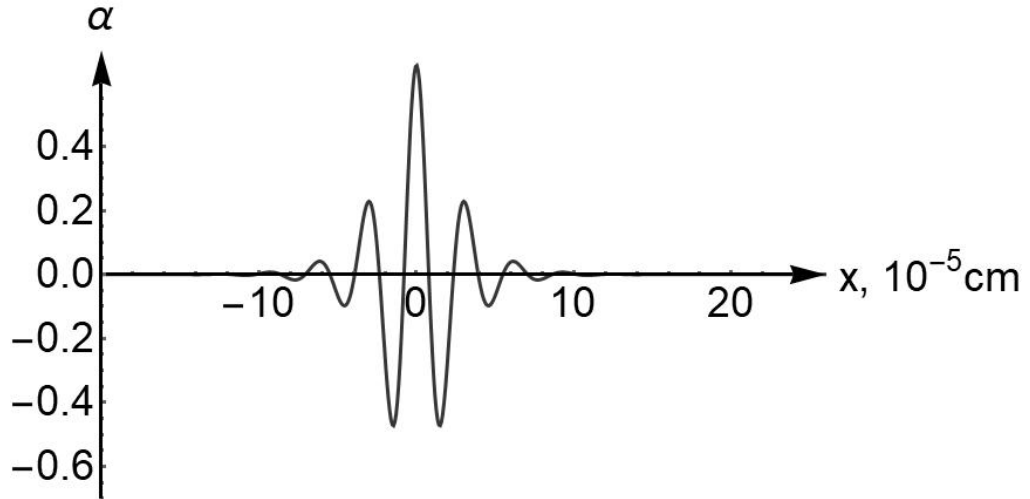


Рисунок 4.4 — График приближенного брызгового решения уравнения (4.2) при $v/c=0.9$, $\Delta_1/\Delta=0.9$, $\omega=0.1$

В уравнении (4.25) $f(p_x, p_z, t)$ — функция распределения электронов проводимости, $f_0(p_x, p_z)$ — равновесная функция распределения, поле брызга $E_z(x, t)$ определяется выражениями (4.7), (4.4). Решение уравнения (4.25) с начальным условием $f(\vec{p}, t_0) = f_0(\vec{p})$ имеет вид:

$$f = f_0 \left(p_x, p_z - e \int_{t_1}^t E_z(x, t') dt' \right) \exp \left(- \frac{t - t_0}{\tau} \right) + \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^t dt_1 \exp \left(- \frac{t - t_0}{\tau} \right) f_0 \left(p_x, p_z - e \int_{t_1}^t E_z(x, t') dt' \right) \quad (4.26)$$

При стремлении t_0 к минус бесконечности первое слагаемое в (4.26) стремится к нулю. Выражение для электронной функции распределения принимает вид:

$$f = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^t dt_1 \exp \left(- \frac{t - t_0}{\tau} \right) f_0 \left(p_x, p_z + \frac{\hbar}{d} (\alpha(x, t) - \alpha(x, t_1)) \right) \quad (4.27)$$

Равновесную функцию распределения возьмем в форме функции распределения Максвелла-Больцмана. Выражение для плотности тока вдоль направления колебаний электрического поля волны принимает вид:

$$j_z = en_0 \frac{1}{\tau} \frac{d \Delta_1^2 I_1}{\hbar 2 \Delta I_0}, \quad (4.28)$$

$$I_1 = \int_{-\infty}^t dt_1 \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau}\right) \int_{-\pi}^{\pi} dp_z \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \times \\ \times \frac{\sin\left(p_z - (\alpha(x,t) - \alpha(x,t_1))\right) \exp\left(-\frac{1}{T} \sqrt{1 + \beta_1 p_x^2 + b^2(1 - \cos p_z)}\right)}{\sqrt{1 + \beta_1 p_x^2 + b^2(1 - \cos(p_z - (\alpha(x,t) - \alpha(x,t_1)))}} \quad (4.29)$$

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\pi}^{\pi} dp_z \exp\left(-\frac{1}{T} \sqrt{1 + \beta_1 p_x^2 + b^2(1 - \cos p_z)}\right). \quad (4.30)$$

В (4.28) – (4.30) был произведен переход к безразмерным переменным: $p_{x,z}d/\hbar \rightarrow p_{x,z}$, $x\omega_0 b/c \rightarrow x$, $t\omega_0 b \rightarrow t$, $kT/\Delta \rightarrow T$, и введены обозначения: $\beta_1 = v_F^2 \hbar^2 / (\Delta^2 d^2)$, $\tau' = \tau \omega_0 b$, функция $\alpha(x, t)$ определяется выражением (4.22).

Для определения времени пробега бризера найдем скорость изменения его волнового импульса, отнесенную к единице площади поперечного сечения образца:

$$F = \frac{1}{ca_0} \int_{-\infty}^{\infty} [\vec{j}, \vec{H}]_x dx = -\frac{\hbar}{eda_0} \frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} j_z \frac{\partial \alpha}{\partial t} dx. \quad (4.31)$$

Импульс бризера (в расчете на единицу площади) равен

$$G = \frac{\varepsilon}{4\pi c} \int_{-\infty}^{\infty} [\vec{E}, \vec{H}]_x dx = \frac{\varepsilon}{4\pi} \frac{\hbar^2}{e^2 d^2} \frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma} \omega_0 b \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial t}\right)^2 dx. \quad (4.32)$$

Из (4.31), (4.32) получаем время пробега бризера

$$\tau_s = \frac{G}{F} = -\frac{\varepsilon}{2\pi} \frac{\hbar^2}{e^2 d^2} \frac{\omega_0}{n_0} \frac{\tau'}{\Delta} a_0 I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\partial \alpha}{\partial t}\right)^2 \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial \alpha}{\partial t} I_1. \quad (4.33)$$

Выражение (4.33) исследуется численно. Расчет показывает, что отношение интегралов в (4.33) дает величину порядка единицы. При характерных значениях параметров $b=\Delta_1/\Delta=0.25$, $d=2 \cdot 10^{-6}$ см, $\Delta = 0.13$ эВ, $n_0 = 10^{10}$ см⁻², $\tau=10^{-10}$ с, $\varepsilon=3.3$, $T=200$ К получаем величину $\tau_s \sim 10^{-12}$ с. Для сравнения, в работе [139] в случае полупроводниковой сверхрешетки получили $\tau_s=10^{-10}$ с. Следует отметить, что используемое в настоящей работе бризерное решение является приближенным, форма которого сохраняется на протяжении около десяти ширин импульса, что соответствует приблизительно $10^{-12} - 10^{-11}$ с. Поскольку вычисленное время пробега бризера, обусловленное влиянием столкновений, оказывается одного порядка с этой величиной, можно подобрать параметры сверхрешетки и

внешнего поля, при которых бризероэлектрический эффект можно рассматривать в бесстолкновительном приближении.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 4

1. Исследован бризероэлектрический эффект в графеновой сверхрешетке в бесстолкновительном приближении и оценено влияние столкновений электронов с неоднородностями кристаллической решетки на среднее время пробега бризера. За счет большей длины свободного пробега в графене по сравнению с типичными полупроводниками условие малости длины свободного пробега по сравнению с длиной бризера, требуемое для рассмотрения поля бризера как однородного, выполняется хуже, чем для полупроводниковой СР. За счет особенностей энергетического спектра ГСР интегралы в выражении для среднего времени пробега бризера приходится брать численно. Кроме того, исходя из способа получения выражения для времени пробега бризера эта величина, вообще говоря, зависит от времени, поэтому приведенные оценки среднего времени пробега бризера верны с точностью до порядка.

2. Полученное время пробега бризера оказывается одного порядка со временем, в течение которого форма бризерного решения может считаться постоянной, что может служить обоснованием использования бесстолкновительного приближения при расчете величины увлеченного заряда.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертации с использованием квазиклассического подхода, метода кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации и приближении Бхатнагара-Гросса-Крука, метода мнимого времени изучено поглощение электромагнитных волн и увлечения ими носителей тока в сверхрешетках на основе диракоподобных материалов. В частности, получен энергетический спектр сверхрешетки, состоящей из чередующихся областей однослойного и двухслойного графена методом трансляционной матрицы, изучено межзонное поглощение света в сверхрешетке, состоящей из чередующихся областей однослойного и двухслойного графена, генерация высших гармоник плотности тока с учётом ионизации примеси в графеновой сверхрешетке, циркулярный эффект Холла в анизотропной графеновой сверхрешетке, бризерозлектрический эффект в сверхрешетке на основе графена.

Основные результаты исследования.

1. Рассмотрены электронные состояния в сверхрешетке, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена. Задача решалась с использованием аналитического подхода, основанного на модифицированной модели Кронига-Пенни, а также на основе квантовохимического моделирования методами теории функционала плотности. Проведено сравнение формы энергетических поверхностей, рассчитанных на основе анализа модели Кронига-Пенни и с использованием моделирования методами теории функционала плотности. Обе модели показали хорошее совпадение. Вычислен коэффициент поглощения света при межзонных переходах.

2. Исследовано влияние постоянного электрического поля на циркулярный эффект Холла в анизотропной графеновой сверхрешетке при нормальном падении. Получено выражение для плотности тока в такой сверхрешетке. Неаддитивность энергетического спектра сверхрешетки на основе графена приводит к взаимной зависимости движений носителей заряда в направлениях, перпендикулярных друг другу, что, в частности, и является причиной

проявления в такой структуре влияния тока выпрямление в направлении, перпендикулярном тянущему полю, под действием падающей на поверхность образца эллиптически поляризованной волны. При этом плотность тока в поперечном направлении примерно на порядок меньше плотности тока в направлении оси сверхрешетки

3. Получено и численно проанализировано выражение для амплитуд высших гармоник плотности тока в 2D ГСР под воздействием постоянного и переменного электрических полей. Выявлена возможность управления амплитудами гармоник поперечными электрическими полями.

4. Исследован бризероэлектрический эффект в графеновой сверхрешетке в бесстолкновительном приближении и оценено влияние столкновений электронов с неоднородностями кристаллической решетки на среднее время пробега бризера. За счет большей длины свободного пробега в графене по сравнению с типичными полупроводниками условие малости длины свободного пробега по сравнению с длиной бризера, требуемое для рассмотрения поля бризера как однородного, выполняется хуже, чем для полупроводниковой СР.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

1. Влияние электрического поля на циркулярный фотогальванический эффект в топологической сверхрешетке/ П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, Е.С. Сивашова// спецвыпуск «Журнала Технической Физики» по материалам конференции «Нанотуглерод и Алмаз».-2025.-Т.95, №3

2. Analytical and Numerical Study of the Energy Spectrum of a Superlattice Consisting of Strips of Single-layer and Bilayer Graphene / В.Л. Абдрахманов, П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // Journal of Nano- and Electronic Physics. - 2020. - Vol. 12, No. 6. – P. 06029-1 – 06029-5.DOI: 10.21272/jnep.12(6).06029.

3. Межзонное поглощение света в сверхрешётке, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена / П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // Известия Российской академии наук. Серия физическая. - 2021. - Т. 85, № 1. - С. 39-46. (версия на английском: Interband Light Absorption in a Superlattice Consisting of Alternating Segments of Single and Double Layers of Graphene / П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. - 2021. - Vol. 85, issue 1. - С. P. 29-34. DOI: 10.3103/S1062873821010044.)

4. Бадикова, П.В. Высшие гармоники плотности тока в двумерной сверхрешётке на основе графена в условиях воздействия внешних электрических полей с учётом ионизации примеси / П.В. Бадикова, С.Ю. Глазов, Г.А. Сыродоев // Известия РАН. Серия физическая. - 2020. - Т. 84, № 1. - С. 38-42. (версия на английском: Бадикова, П.В. 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 / П.В. Бадикова, С.Ю. Глазов, Г.А. Сыродоев // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. - 2020. - Vol. 84, Issue 1. – P. 30–34.)

5. Бадикова, П.В. Особенности ионизации примесей в квазиклассически сильных постоянном и переменном электрических полях в двумерной сверхрешётке на основе графена / П.В. Бадикова, С.Ю. Глазов, Г.А. Сыродоев // Физика и техника полупроводников. - 2019. - Т. 53, вып. 7. - С. 927-934. (версия на английском: Бадикова, П.В. Differences in the Impurity Ionization in Quasi-Classically Strong Constant and Alternating Electric Fields in a Two-Dimensional Superlattice Based on Graphene / П.В. Бадикова, С.Ю. Глазов, Г.А. Сыродоев // Semiconductors. - 2019. - Vol. 53, No. 7. – P. 911-918.)

6. Эффект увлечения электронов бризером в сверхрешетке на основе графена / П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // Известия Российской академии наук. Серия физическая. - 2023. - Т. 87, № 1. - С. 38-43. – DOI: 10.31857/S0367676522700077. (версия на английском: Effect of Electron Entrainment by a Breather in a Graphene-Based Superlattice / П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. - 2023. - Vol. 87, issue 1 (January). – P. 30-35. – DOI: <https://doi.org/10.3103/S1062873822700071>.)

7. Бадикова, П.В. Циркулярный фотогальванический эффект в анизотропной графеновой сверхрешетке в присутствии постоянного электрического поля / П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, Е.С. Сивашова // Международная конференция "Нанюглерод и алмаз" (НиА2024) (г. Санкт-Петербург, 1-5 июля 2024 г.). Школа-конференция молодых ученых "Нанюглерод и алмаз. Получение, свойства, применения и методы диагностики" : сб. тез. докл. / ФГБУН Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук [и др.]. - Санкт-Петербург, 2024. - С. 157.

8. Бадикова, П.В. Бризерное решение нелинейного уравнения Клейна-Гордона в пределе малой амплитуды / П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, В.И. Конченков // Физика. Технологии. Инновации. ФТИ-2022 : тез. докл. IX Междунар. молодеж. науч. конф., посвящ. 100-летию со дня рожд. проф. С. П. Распопина (г. Екатеринбург, 16-20 мая 2022 г.) / отв. за вып. А. В. Ищенко ;

ФГАОУ ВО «УрФУ им. первого Президента России Б. Н. Ельцина», Физико-технологический ин-т. - Екатеринбург, 2022. - С. 131-132.

9. Приближенное бризерное решение уравнения, описывающего распространение нелинейных волн в сверхрешетке на основе графена / П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, В.И. Конченков // Сборник трудов XXXIII Всероссийской школы-семинара «Волновые явления: физика и применения» имени профессора А. П. Сухорукова («Волны-2022») (5-10 июня 2022 г.). Секция 2. Когерентная и нелинейная оптика / под общ. ред. А. Н. Калиша ; Московский гос. ун-т им. М. В. Ломоносова, Физический факультет. - Москва, 2022. - С. 10-13.

10. Бадикова, П.В. Circular photovoltaic effect in an anisotropic graphene superlattice in the presence of a constant electric field / П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, Д.Н. Жариков // Нанопроектирование, технология, компьютерное моделирование – NDTCS-2021 : тез. докл. XIX Междунар. симпозиума (XIX International Workshop on New Approaches to High-Tech: Nano-Design, Technology, Computer Simulations) (Республика Беларусь, г. Минск, 28-29 октября 2021 г.) / редкол.: В. А. Богуш [и др.] ; УО «Белорусский гос. ун-т информатики и радиоэлектроники», МИРЭА — Российский технологический ун-т. - Минск, 2021. - С. 50-52.

11. Бадикова, П.В. Влияние постоянного электрического поля на циркулярный фотогальванический эффект в анизотропной графеновой сверхрешетке при нормальном падении / П.В. Бадикова, Д.В. Завьялов, В.И. Конченков // Сборник трудов XXXII Всероссийской школы-семинара «Волновые явления: физика и применения» имени профессора А. П. Сухорукова («Волны-2021») (6-11 июня 2021 г.) / под общ. ред. А. Н. Калиша ; Московский гос. ун-т им. М. В. Ломоносова, Физический факультет. - Москва, 2021. - С. 21-22.

12. Межзонное поглощение света в сверхрешётке, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена / П.В. Бадикова,

Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // Сборник трудов XVII Всероссийской школы-семинара «Волновые явления в неоднородных средах» имени А. П. Сухорукова («Волны-2020») (23-28 августа 2020 г.) / под общ. ред. А. Н. Калиша ; Московский гос. ун-т им. М. В. Ломоносова, Физический факультет. - Москва, 2020. - С. 10-12.

ИСТОЧНИКИ

1. Bradley A. J. The Formation of Superlattices in Alloys of Iron and Aluminium / A. J. Bradley, A. H. Jay // Proc. R. Soc. Lond. A. -1932. -V.136. -P. 210-232. doi: 10.1098/rspa.1932.0075
2. 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. DOI: 10.1147/rd.141.0061
3. Capasso F. Band-Gap Engineering: From Physics and Materials to New Semiconductor Devices / F. Capasso // Science. -1987. -V.235(4785). -P. 172-176. doi:10.1126/science.235.4785.172
4. Terasaki I. 1.09 - Thermal Conductivity and Thermoelectric Power of Semiconductors / I. Terasaki // Comprehensive Semiconductor Science and Technology.-2011.- V.1.- P.-326-358. <https://doi.org/10.1016/B978-0-44-453153-7.00070-5>
5. Angle-dependent bandgap engineering in gated graphene superlattices / H. García-Cervantes, [et al.] // AIP Advances.-2016.- V.6.-P.035309 doi: 10.1063/1.4944495
6. Ratnikov P.V. Superlattice Based on Graphene on a Strip Substrate / P. V. Ratnikov // ETP Letters. -2009. -V.90(6).- P.469–474. DOI: 10.1134/S0021364009180143
7. Electrostatic superlattices on scaled graphene lattices / SC. Chen, [et al.] // Commun Phys.-2020. -V.3. -P. 71. <https://doi.org/10.1038/s42005-020-0335-1>

8. Functional nanoporous graphene superlattice / H. Lv, [et al.] // Nat Commun.-2024. -V.15. -P.1295. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-45503-9>
9. Ghorashi S. A. A. Multilayer graphene with a superlattice potential / S. A. A. Ghorashi, J.Cano. // Phys. Rev. B. -2023.-V. 107.-P 195423. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.195423>
10. Pudlak M. Valley focusing effect in a rippled graphene superlattice / M. Pudlak, R. G. Nazmitdinov // Phys. Rev. B.- 2024.- V.109.- P.205402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.205402>
11. A Tunable Graphene Superlattice with Deformable Periodical Nano-Gating / B. Wei, [et al.] // Nanomaterials. -2024. -V.14(12). -P.1019. <https://doi.org/10.3390/nano14121019>
12. Structural and Electronic Properties of Superlattice Composed of Graphene and Monolayer MoS₂ / X. D. Li, [et al.] // J. Phys. Chem. C. - 2013. -V.117(29). -P. 15347–15353.<https://doi.org/10.1021/jp404080z>
13. Superlattice Dirac points and space-dependent Fermi velocity in a corrugated graphene monolayer / H. Yan, [et al.] // PHYSICAL REVIEW B. -2013. -V.87. - P.075405.DOI: 10.1103/PhysRevB.87.075405
14. Nanomesh-Type Graphene Superlattice on Au(111) Substrate / P.Süle,[et al.] // Nano Lett. -2015. -V.15(12). -P.8295–8299. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b03886>
15. Graphene nanoribbon superlattices fabricated via He ion lithography / Braulio S. Archanjo,[et al.] // Appl. Phys. Lett. -2014. -V.104. -P.193114. <https://doi.org/10.1063/1.4878407>
- 16.Tunable electronic band structures and zero-energy modes of heterosubstrate-induced graphene superlattices/ X. Fan,[et al.]//Phys. Rev. B.-2016.-V.93.-P.165137. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.165137>
17. Lima J. R. F.Electronic structure of a graphene superlattice with massive Dirac fermions/ J. R. F. Lima// J. Appl. Phys.-2015.-V.117 (8).-P 084303. <https://doi.org/10.1063/1.4909504>

18. Graphene superlattice with periodically modulated Dirac gap/ G. M. Maksimova,[et al.]//Phys. Rev. B.-2012.- V.86.-P. 205422. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.205422>
19. Band structure engineering of 2D materials using patterned dielectric superlattices/ C. Forsythe,[et al.]//Nature Nanotechnology.-2018.-V. 13.-P. 566-571.<https://doi.org/10.1038/s41565-018-0138-7>
20. Electronic transport in a two-dimensional superlattice engineered via self-assembled nanostructures/Y. Zhang,[et al.] // npj 2D Materials and Applications.-2018.-V.2.-P.31. <https://doi.org/10.1038/s41699-018-0076-0>
21. Emergent Inhomogeneity and Nonlocality in a Graphene Field-Effect Transistor on a Near-Parallel Moiré Superlattice of Transition Metal Dichalcogenides /S. Sett,[et al.]//Nano Lett.-2024.-V. 24(30).-P.9245-9252. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c01755>
22. Gate-Tunable Two-Dimensional Superlattices in Graphene/ R. Huber,[et al.] //Nano Letters.-2020.-V.20(11).-P.8046-8052.DOI: 10.1021/acs.nanolett.0c03021
23. Ratnikov P. V., Silin A. P. Novel Type of Superlattices Based on Gapless Graphene with the Alternating Fermi Velocity/P. V. Ratnikov,A. P. Silin// JETP Letters.- 2014.-V.100(5).-P. 311–318.DOI: 10.1134/S0021364014170123
24. Moon,P.Koshino M. Electronic properties of graphene/hexagonal-boron-nitride moiré superlattice/P. Moon, M. Koshino// Phys. Rev. B.-2014.-V.90.-P.155406. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.155406>
25. Moiré excitons in biased twisted bilayer graphene under pressure/V. G. M. Duarte,[et al.] // Phys. Rev. B.-2024. -V.110.P.035405. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.110.035405>
26. Recent Advances in Twisted Structures of Flatland Materials and Crafting Moiré Superlattices/G. Abbas,[et al.] //Advanced Functional Materials.-2020.-V.30(36).-P.2000878. <https://doi.org/10.1002/adfm.202000878>

27. Grishanov E.N., Popov I.Y. Solvable model of moire superlattice in a magnetic field/E.N. Grishanov, I.Y. Popov//Indian J Phys.-2024.<https://doi.org/10.1007/s12648-024-03274-5>

28. Krisna L. P. A., Koshino M. Moiré phonons in graphene/hexagonal boron nitride moiré superlattice/L. P. A. Krisna, M. Koshino//Phys. Rev. B.-2023.-V.107.-P.115301. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.115301>

29. Hofstadter's butterfly in moiré superlattices: A fractal quantum Hall effect/C. R. Dean,[et al.] //Nature.-2013.-V. 497.- P. 598–602. DOI: 10.1038/nature12186

30. Moiré' Superlattice Effects and Band Structure Evolution in Near-30-Degree Twisted Bilayer Graphene/M. J. Hamer,[et al.] //ACS Nano.-2022.-V.16.-P.1954–1962.<https://doi.org/10.1021/acsnano.1c06439>

31. Moiré patterns arising from bilayer graphene/graphene superlattice/H. Li, [et al.]//Nano Res.-2020.-V. 13.-P.1060–1064. <https://doi.org/10.1007/s12274-020-2744-6>

32. Graphene moiré superlattices with giant quantum nonlinearity of chiral Bloch electrons /P. He,[et al.]// Nat. Nanotechnol.-2022.-V. 17.-P.378–383. <https://doi.org/10.1038/s41565-021-01060-6>

33. Graphene based heterostructures/C. Dean, [et al.]// Solid State Communications.-2012.-V.152(15).-P.1275-1282. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.04.021>

34. Nahid S.M., Nam SW., A. M. van der Zande. Depolarization Field-Induced Photovoltaic Effect in Graphene/ α -In₂Se₃/Graphene Heterostructures /S.M. Nahid, SW. Nam, A. M. van der Zande// ACS Nano.-2024.-V.18(22).-P.14198–14206. <https://doi.org/10.1021/acsnano.3c11558>

35. Infrared photodetection in graphene-based heterostructures: bolometric and thermoelectric effects at the tunneling barrier /D. A. Mylnikov, [et al.]//npj 2D Mater Appl.-2024.-V.8.-P.34. <https://doi.org/10.1038/s41699-024-00470-z>

36. Bilayer graphene with single and multiple electrostatic barriers: Band structure and transmission/M. Barbier,[et al.]//Phys. Rev. B.-2009.-V.79.-P.155402. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.155402>
37. Accurate Gap Determination in Monolayer and Bilayer Graphene/h-BN Moire ´ Superlattices/H. Kim,[et al.]//Nano Lett.-2018.-V.18.P.7732–7741. DOI: [10.1021/acs.nanolett.8b03423](https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b03423)
38. Topological and stacked flat bands in bilayer graphene with a superlattice potential/S. A. A. Ghorashi,[et al.]//Physical Review Letters.-2023.-V.130(19).-P.196201. DOI: [10.1103/PhysRevLett.130.196201](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.130.196201)
39. Engineering correlated insulators in bilayer graphene with a remote Coulomb superlattice/ Z.Zhang,[et al.]//Nature Materials.-2024.-V.23.-P.189–195. <https://doi.org/10.1038/s41563-023-01754-3>
40. Chu Z.-D., He W.-Y., He L. Coexistence of van Hove singularities and superlattice Dirac points in a slightly twisted graphene bilayer/Z.-D. Chu, W.-Y. He, L. He//Phys. Rev. B.-2013.-V.87.-P.155419. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.155419>
41. Band-gap engineering with a twist: Formation of intercalant superlattices in twisted graphene bilayers/F.Symalla,[et al.]//Phys. Rev. B.-2015.-V.91.-P.205412. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.205412>
42. Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices/ Y. Cao,[et al.]//Nature.-2018.-V.556.-P.43–50. <https://doi.org/10.1038/nature26160>
43. Properties and applications of new superlattice: twisted bilayer graphene/J. Wang,[et al.]//Materials Today Physics.-2019.-V.9.-P.100099. <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2019.100099>
44. Gate-tunable topological phases in superlattice modulated bilayer graphene/Y. Zeng,[et al.]//Phys. Rev. B.-2024.-V.109.-P.195406. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.195406>
45. Functional nanoporous graphene superlattice/H.Lv,[et al.]// Nat Commun.-2024.-V.15.-P.1295. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-45503-9>

- 46.High-harmonic generation from artificially stacked 2D crystals/C. Heide//Nanophotonics.-2023.-V.12(2).-P.255–261. <https://doi.org/10.1515/nanoph-2022-0595>
- 47.Ji G., Shi J.Quantum anomalous Hall insulator of composite fermions in twisted bilayer graphene/G.Ji, J.Shi//Arxiv.-2023.<https://doi.org/10.48550/arXiv.2212.1320>
- 48.Meitei O. R.,Voorhis T. V. Electron Correlation in 2D Periodic Systems from Periodic Bootstrap Embedding/O. R. Meitei, T. V. Voorhis//J. Phys. Chem. Lett.- 2024.-V15.-P.11992–12000.<https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.4c02686>
- 49.Clean assembly of van der Waals heterostructures using silicon nitride membranes/W. Wang,[et al.]/Nat Electron.-2023.-V.6.-P.981–990. <https://doi.org/10.1038/s41928-023-01075-y>
- 50.Sekwao S.,Leburton J.-P. Terahertz harmonic generation in graphene/S. Sekwao,J.-P. Leburton//Appl. Phys. Lett.-2015.-V.106.-P. 063109.<https://doi.org/10.1063/1.4908293>
- 51.Chen Z.-Y., Qin R.High harmonic generation in graphene–boron nitride heterostructures /Z.-Y. Chen, R. Qin//J. Mater. Chem. C.-2020.-V.548.-P.12085.DOI: 10.1039/d0tc02036b
- 52.Ballistic miniband conduction in a graphene superlattice/M. Lee,[et al.]/Science.-2016.-V.353(6307).-P. 1526-1529. doi: 10.1126/science.aaf1095
- 53.Single-valley engineering in graphene superlattices/Y.Ren,[et al.]/Phys. Rev. B.-2015.-V.91.-P.245415.<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.245415>
- 54.Rotenberg E., Bostwick A. Superlattice effects in graphene on SiC(0001) and Ir(111) probed by ARPES/ E. Rotenberg, A. Bostwick//Synthetic Metals.-2015.-V.210(A).-P. 85-94.<https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2015.07.030>
- 55.Bezerra Í. S.F. , Lima J. R.F. Transport properties of magnetic graphene superlattices with modulated Fermi velocity/Í. S.F. Bezerra, J. R.F. Lima//Solid State Communications.-2021.-V.340.-P. 114511. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2021.114511>

56.Choubabi E. B.Kamal A.,Jellal A. Transport Properties in Graphene Superlattices/ E. B. Choubabi,A. Kamal,A. Jellal // arXiv.-2018. DOI: 10.48550/arXiv.1812.10148

57.Bonilla L.L.,Barletti L.,Álvaro M. Nonlinear Electron and Spin Transport in Semiconductor Superlattices/L.L. Bonilla, L.Barletti, M. Álvaro//SIAM Journal on Applied Mathematics.-2008.-V.69(2).-P.494-513. DOI: 10.1007/978-3-642-12110-4_16

58.Tunable Superlattice in Graphene To Control the Number of Dirac Points/S. Dubey,[et al.] // Nano Lett.-2013.-V.13(9).-P.3990–3995.<https://doi.org/10.1021/nl4006029>

59.Whiteway E., Hilke M. Thermal conductivity of graphene isotope superlattices/E. Whiteway, M. Hilke//arXiv.-2020. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2005.0920>

60.Out-of-equilibrium criticalities in graphene superlattices/A.I. Berdyugin ,[et al.]//Science.-2022.-V.375.-P.430-433. <https://doi.org/10.1126/science.abi8627>

61.Thermopower in hBN/graphene/hBN superlattices/V.H. Guarochico-Moreira,[et al.]//Phys. Rev. B.-2023.-V. 108.-P.115418.<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.115418>

62.Dynamical properties of quasiparticles in a tunable Kekulé graphene superlattice/X.-Y. Xiong//Physics Letters A.-2023.-V.480.-P.128957.<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2023.128957>

63.Chamon C. Solitons in Carbon Nanotubes/C.Chamon// Phys. Rev.B.-2000.-V.62.-P.2806.<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.2806>

64. Hou C.,Chamon C.,Mudry C. Electron fractionalization in two-dimensional graphene like structures/C. Hou, C. Chamon, C. Mudry// Phys. Rev.Lett.-2007.-V.98.-P.186809. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.186809>

64. Masses in graphene like two-dimensional electronic systems: Topological defects in order parameters and their fractional exchange statistics/S. Ryu,[et al.]// Phys.Rev.B.-2009.-V.80.-P.205319.<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.205319>

65. Xu X., Law K.T., Lee P.A. Kekulé valence bond order in an extended Hubbard model on the honeycomb lattice with possible applications to twisted bilayer graphene/X. Xu, K.T. Law, P.A. Lee//Phys.Rev.B.-2009.-V.98.-P.121406 (2009).<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.121406>
66. Weeks C., Franz M., Interaction-driven instabilities of a Dirac semimetal/C. Weeks, M. Franz//Phys. Rev. B.-2010.-V.81.-P.085105.<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.085105>
67. Transport anomaly at the ordering transition for adatoms on graphene/S. Kopylov,[et al.]// Phys. Rev. B.-2011.-V. 83.-P.201401.<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.201401>
68. Kharitonov M. Phase diagram for the $\nu = 0$ quantum Hall state in monolayer graphene/M. Kharitonov// Phys.Rev.B.-2012.-V.85.-P.155439. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.155439
69. Imaging chiral symmetry breaking from Kekulé bond order in graphene/C. Gutiérrez,[et al.]// Nature Phys.-2016.-V.12.-P.950–958.<https://doi.org/10.1038/nphys3776>
70. Experimental Evidence of Chiral Symmetry Breaking in Kekulé-Ordered Graphene/C. Bao,[et al.]// Phys.Rev. Lett.-2021.-V.126.-P.206804. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.206804>
71. Zitterbewegung near new Dirac points in graphene superlattices/J. Luan,[et al.]//J. Phys.: Condens. Matter.-2018.-V.30.-P.395502.DOI 10.1088/1361-648X/aadbe0
72. Electronic band gaps and transport properties in periodically alternating mono- and bi-layer graphene superlattices/X. Fan,[et al.]// EPL.-2015.-V.112.-P.58003. DOI 10.1209/0295-5075/112/58003
73. Gate-dependent pseudospin mixing in graphene/boron nitride moiré superlattices/Z. Shi,[et al.]// Nature Phys.-2014.-V.10.-P.743–747. <https://doi.org/10.1038/nphys3075>

74. Ratnikov P. V., Silin A. P. Plasmons in a Planar Graphene Superlattice/P. V. Ratnikov, A. P. Silin//JETP Letters.- 2015.-V.102(11).-P. 713–719.DOI: 10.1134/S0021364015230137
75. Krasheninnikov M.V., Chaplik A.V. Theory of electromagnetic excitation of two-dimensional plasma waves in multilayer superlattices/M.V. Krasheninnikov, A.V. Chaplik//JETP.-1983.- V.57(3).-P.624.
76. Chaplik A.V. Amplification of two-dimensional plasma waves in superlattices/A.V. Chaplik//JETP.-1980.- V.32(8).-P.529-532.
77. Glazov S.Yu., Kovalev A. A., Mescheryakova N. E. Plasma Waves in a Graphene-Based Superlattice in the Presence of a High Static Electric Field /S. Yu. Glazov, A. A. Kovalev, N. E. Mescheryakova//Semiconductors.-2015.-V.49(4).-P. 504–507.DOI: 10.1134/S1063782615040119
78. Giant magnetoresistance of Dirac plasma in high-mobility graphene/N. Xin,[et al.]//Nature.-2023.-V.616.-P.270–274. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-05807-0>
79. Clapa M., Gaj J. Behavior of graphene under glow discharge plasma/M. Clapa, J. Gaj//Sensors and Actuators A: Physical.-2021.-V.332(1).-P.113069.<https://doi.org/10.1016/j.sna.2021.113069>
80. 2D atomic crystal molecular superlattices by soft plasma intercalation/ L. Zhang,[et al.]// Nat Commun.-2020.-V.11.-P.5960. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-19766-x>
81. Density-independent plasmons for terahertz-stable topological metamaterial/J. Wang,[et al.]//Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.-2021.-V.118(19).-P.e2023029118. <https://doi.org/10.1073/pnas.2023029118>
82. Глазов С. Ю., Ковалев А. А., Крючков С. В. Плазменные волны в двумерной сверхрешетке с неаддитивным энергетическим спектром в присутствии сильного статического электрического поля / С. Ю. Глазов, А. А. Ковалев, С. В. Крючков // ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ. -2020 .- Т 84(2) .- с. 254–257. DOI: 10.31857/S036767652002012X

83. Velocity renormalization and Dirac cone multiplication in graphene superlattices with various barrier-edge geometries/A. de Jamblinne de Meux,[et al.]//PHYSICAL REVIEW B.-2015.-V.91.-P.235139.DOI: 10.1103/PhysRevB.91.235139
84. High-temperature quantum oscillations caused by recurring Bloch states in graphene superlattices/R. Krishna Kumar,[et al.]//Science.-2017.-V.357(6347).-P.181-184.DOI: 10.1126/science.aal3357
85. Kryuchkov S. V., Kukhar'E.I. 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.https://doi.org/10.1016/j.physe.2012.08.014
86. Transport in weak barrier superlattices and the problem of the terahertz Bloch oscillator/A. A. Andronov,[et al.]// Phys. Usp.-2003.-V.46(7).-P.755–758.DOI10.1070/PU2003v046n07ABEH001611
87. Sevinçli H., Topsakal M., Ciraci S. Superlattice structures of graphene-based armchair nanoribbons/H. Sevinçli, M. Topsakal, S. Ciraci//Phys. Rev. B.-2008.-V.78.-P. 245402.https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.245402
88. Bolmatov D.,Mou C.-Y. Graphene-based modulation-doped superlattice structures/D. Bolmatov, Chung-Yu Mou//Exp. Theor. Phys.-2011.-V.112.-P.102–107.https://doi.org/10.1134/S1063776111010043
89. Parashar J., Sharma H. Optical rectification in a carbon nanotube array and terahertz radiation generation/J. Parashar, H. Sharma//, Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures.-2012.-V.44.-P.2069.https://doi.org/10.1016/j.physe.2012.06.013
90. Cross-sectional imaging of individual layers and buried interfaces of graphene-based heterostructures and superlattices/S.J. Haigh,[et al.]// Nature Materials.-2012.-V.11.-P.764-767.https://doi.org/10.1038/nmat3386

91.Sattari F., Faizabadi E.Transport in magnetic graphene superlattice with Rashba spin-orbit interaction/F.Sattari, E.Faizabadi //Eur. Phys. J. B.-2013.-V.86.-P.278 . <https://doi.org/10.1140/epjb/e2013-40275-0>

92.Photogalvanic effect in monolayer WSe₂-MoS₂ lateral heterojunction from first principles/W.-M. Luo,[et al.]// Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.-V.115.-2020.-P.113714. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2019.113714>

93. Tunable Circular Photogalvanic and Photovoltaic Effect in 2D Tellurium with Different Chirality/C. Niu,[et al.]// Nano Lett.-2023.-V.23 (8).-P.3599–3606. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.3c00780>

94. Gao Y., Zhang Y., Xiao D. Tunable Layer Circular Photogalvanic Effect in Twisted Bilayers /Y. Gao, Y. Zhang, D. Xiao// Phys. Rev. Lett.-2020.-V.124.-P.077401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.077401>

95.Pal A. , Varjas D., Cook A. M. Robust quantisation of circular photogalvanic effect in multiplicative topological semimetals/ A. Pal, D. Varjas, A. M. Cook// ArXiv.- 2023. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2312.03159>

96.Pal A. , Winter J. H., Cook A. M. Multiplicative topological semimetals/A. Pal, J. H. Winter, A. M. Cook// Phys. Rev. B.-2024.-V.109.-P.035147. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.035147>

97.Zheng Z.,Chang K.,Cheng J. L.Gate voltage induced injection and shift currents in AA- and AB-stacked bilayer graphene/ Z. Zheng, K. Chang, J. L. Cheng.// Phys. Rev. B.-2023.-V.108.-P.235401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.235401>

98. Electronic properties of bilayer and multilayer graphene /J. Nilsson,[et al.]// Physical Review B.-V.78 (4).-2008.-P.045405. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.045405>

99.Shi W., Ma.X. Photovoltaic Effect in Graphene/MoS₂/Si Van der Waals Heterostructures / W. Shi, X. Ma.// Coatings.-2018.-V.8(1).-P.2. <https://doi.org/10.3390/coatings8010002>

100. Nonlinear helicity anomalies in the cyclotron resonance photoresistance of two-dimensional electron systems/E. Mönch, [et al.]// Phys. Rev. Research.-2024.- V.6.-P. 023106. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.6.023106>

101. Шорохов А.В. Генерация постоянного тока в полупроводниковой сверхрешетке под действием бихроматического поля как параметрический эффект / А.В. Шорохов, Н.Н. Хвастунов, Т. Хъярт, К.Н. Алексеев // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2010. – Т. 138. – Вып. 5(11). – С. 930-938. <https://doi.org/10.1134/S1063776110110130>

102.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. <https://doi.org/10.1134/S1063783410040219>

103.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. <https://doi.org/10.1134/S1063782612010216>

104. Graphene superlattice with periodically modulated Dirac gap / G. M. Maksimova,[et al.]// Physical Review B. – 2012. – V. 86. - 205422. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.205422>

105.Ферри Д. Электроника ультрабольших интегральных схем / Д. Ферри, Л. Эйкерс, Э. Гринич -М.: Мир, 1991. -327 с.

106.Дмитриев И.А., Сурис Р.А. Локализация электронов и блоховские осцилляции в сверхрешетках из квантовых точек в постоянном электрическом поле / И.А. Дмитриев, Р.А. Сурис // Физика и техника полупроводников. – 2001 – Т. 35. .– С. 219.

107.Завьялов Д.В. Анизотропные триггерные электрические свойства двумерных сверхрешеток / Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // Физика и техника полупроводников. - 2019. – Т. 53 – С. 1527-1531.

108. Pham C.H., Nguyen H.C., Nguyen V.L. Massless Dirac fermions in a graphene superlattice: a T-matrix approach / C.H. Pham, H.C. Nguyen, V.L. Nguyen // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2010. – V. 22.-P. 425501. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/22/42/425501>

109. Trzeciakowski W. Effective-mass approximation in semiconductor heterostructures: One-dimensional analysis / W. Trzeciakowski // Physical Review B. – 1998. – V. 38. – P.12493. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.12493>

110. Tikhodeev S.G. Tamm minibands in superlattices / S .G. Tikhodeev // Solid State Communications. – 1991. – V. 78. – P. 339-342. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(91\)90679-P](https://doi.org/10.1016/0038-1098(91)90679-P)

111. Bastard G. Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation / G. Bastard // Physical Review B. – 1982. – V. 25. - P.7584. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.25.7584>

112. Stęślicka M. Tamm surface states in semiconductor superlattices / M. Stęślicka // Progress in Surface Science. – 1995. – V. 50. – P. 65-76. [https://doi.org/10.1016/0079-6816\(95\)00045-3](https://doi.org/10.1016/0079-6816(95)00045-3)

113. Ozaki T. Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures / T. Ozaki // Physical Review B. – 2003. – V. 67.-P.155108. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.155108>

114. Ozaki T., Kino H. Numerical atomic basis orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // Physical Review B. – 2004. – V. 69. -P.195113. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.195113>

115. Ozaki T., Kino H. Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method / T. Ozaki, H. Kino // Physical Review B. – 2005. – V. 72. -P. 045121. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.045121>

116. Lejaeghere K. Reproducibility in density functional theory calculations of solids / K. Lejaeghere ,[et al.] // Science. – 2016. – V. 351. -P.aad3000. <https://doi.org/10.1126/science.aad3000>.

117. Rozhkov A.V. Electronic properties of graphene-based bilayer systems / A.V. Rozhkov,[et al.] // Physics Reports. – 2016. – V. 648. – P. 1-104. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2016.07.003>
118. Чернозатонский Л.А. Сверхрешетки, состоящие из «линий» адсорбированных пар атомов водорода на графене / Л.А. Чернозатонский, П.В. Сорокин, Е.Э. Белова, Й. Брюнинг, А.С. Федоров / Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. - 2007.- Т. 85. - Вып. 1.- С. 84-89.
119. Perenzoni M. Douglas J. P. Physics and Applications of Terahertz Radiation//Springer.-2014.-255 p.ISBN : 978-94-007-3836-2
120. Kane E. O. Band structure of indium antimonide/E. O. Kane//Journal of Physics and Chemistry of Solids.-1957.-V.1(4).-P.249-261.[https://doi.org/10.1016/0022-3697\(57\)90013-6](https://doi.org/10.1016/0022-3697(57)90013-6)
121. Chakraborty P.K., Choudhury S., Ghatak K.P. Simple theoretical of Kane type semiconductors in the presence of an external electric field/P.K. Chakraborty, S. Choudhury, K.P. Ghatak // Physica B.-2007.- V 387.- P.333–343. DOI: 10.1016/j.physb.2006.04.017
122. Symmetry breaking in few layer graphene films / A. Bostwick,[et al.] // New Journal of Physics. – 2007.- V. 9. - P. 385. DOI 10.1088/1367-2630/9/10/385
123. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene/ S.Y.Zhou, [et al.]// Nature Materials. - 2007.- V. 6. - P.770-775. <https://doi.org/10.1038/nmat2003>
124. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations/G. Giovannetti, [et al.]// Phys. Rev. B.-2007.-V. 76.-P. 073103.<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.073103>
125. Kryuchkov S.V., Popov C.A. Two-Dimensional Graphene Superlattice: Energy Spectrum and Current-Voltage Characteristics/Kryuchkov S.V., Popov C.A. // J. Nano. Electron. Phys. -2017. -V. 9(2).- P. 02013.
126. Келдыш Л.В. Ионизация в поле сильной электромагнитной волны/Л.В. Келдыш// ЖЭТФ.- 1964.-Т.47 (5).-С.1945.

127. Глазов С.Ю., Мещерякова Н.Е. Генерация высших гармоник в сверхрешетке на основе графена в присутствии постоянного электрического поля/С.Ю.Глазов, Н.Е. Мещерякова// Наносистемы: физ., хим., матем.- 2012.- Т. 3. № 1.- С. 64.

128. Афонский А.А., Дьяконов В.П. Электронные измерения в нанотехнологиях и микроэлектронике. Москва: ДМК Пресс.-2011.-С.688.

129. Глазов С.Ю. Управление проводимостью графена поперечными статическим и переменным электрическими полями/С.Ю.Глазов// Изв. РАН. Сер. физ.-2019.-Т. 83. № 1.-С. 19.

130. Kukhar E.I., Kryuchkov S.V. Topological phase transitions in superlattice based on 2D Dirac crystals with anisotropic dispersion/E.I. Kukhar, S.V. Kryuchkov// Superlattices and Microstructures.- 2019.- V.133.- P.106183. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.106183>

131. Завьялов, Д.В. Выпрямление поперечного тока в сверхрешётке на основе графена / Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // Физика и техника полупроводников. - 2012. - Т. 46, № 1.- С. 113-120.

132. Kryuchkov S.V., Kukhar E.I. The solitary electromagnetic waves in the graphene superlattice/ S.V. Kryuchkov, E.I. Kukhar// Physica B: Condensed Matter.- 2013.- V.408.- P.188-192. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2012.09.052>

133. Kryuchkov S.V., Kukhar E.I. 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: Low-dimensional Systems and Nanostructures .- 2012.- V. 46. – P. 25-29. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2012.08.014>

134. Kryuchkov S.V., Kukhar E.I., Zav'yalov D.V. Charge dynamics in graphene and graphene superlattices under a high-frequency electric field: a semiclassical approach/S.V. Kryuchkov, E.I. Kukhar', D.V. Zav'yalov// Laser Phys.- 2013.- V. 23(6). P.065902. DOI 10.1088/1054-660X/23/6/065902

135. Martin-Vergara, F., Rus, F., Villatoro, F.R. Solitary Waves on Graphene Superlattices. In: Archilla, J., Palmero, F., Lemos, M., Sánchez-Rey, B., Casado-

Pascual, J. (eds) Nonlinear Systems, Vol. 2. Understanding Complex Systems. Springer, Cham.-2018. https://doi.org/10.1007/978-3-319-72218-4_4

136.Martin-Vergara F. ,Rus F.,Villatoro F. R.Fractal structure of the soliton scattering for the graphene superlattice equation/F. Martin-Vergara, F. Rus, F. R. Villatoro//Chaos, Solitons & Fractals.-2021.-V. 151.-P.111281.<https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.111281>

137.Zav'yalov D.V.Konchenkov V.I., Kryuchkov S.V. Breather solution of nonlinear Klein-Gordon equation/D.V. Zav'yalov, V.I. Konchenkov, S.V. Kryuchkov//Technical Physics.- 2022.-V. 67(12). -P. 1527. <https://doi.org/10.21883/TP.2022.12.55185.144-22>

138.Martin-Vergara F. ,Rus F.,Villatoro F. R.Padé schemes with Richardson extrapolation for the sine-Gordon equation/F. Martin-Vergara, F. Rus, F. R. Villatoro/Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation.-2020.-V. 85.-P.105243.<https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2020.105243>

139.С. В. Крючков, Г. А. Сыродоев, Затухание бризера в сверхрешетке/С. В. Крючков, Г. А. Сыродоев // Физика и техника полупроводников.- 1990.-Т.24.-В.6.-С.1120–1123.

140.Epshtein E. M. Drag of electrons by solitons in a semiconductor super-lattice // SOVIET PHYSICS SEMICONDUCTORS-USSR. – 1980. – Т. 14. – №. 12. – С. 1438-1439.

141.Эпштейн Э. М. Затухание солитона в сверхрешетке //Изв. вузов СССР. Радиофизика. – 1981. – С. 1293-1294.

142. Kryuchkov, S.V., Kukhar, E.I. Charge Dragged by the Solitary Electromagnetic Wave in the Graphene superlattice/S.V.Kryuchkov,E.I. Kukhar//Physica E: Low-Dimensional System & Nanostructures.-2013.-V.48.-P. 96-100.<https://doi.org/10.1016/j.physe.2012.12.004>

143. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films/ K.S Novoselov,[et al.] // Science.-2004.-V.306.-P.666-669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>

Таблица 3.1. Значения подгоночных параметров в модели кейновского спектра (3.13)

	ε_0 , мэВ	Δ'	γ
$\Delta=0.04t_{\perp}$	62.3674	0.22072	0.149129
$\Delta=0.08t_{\perp}$	67.2993	0.518656	-0.0386933

Таблица 3.2. Эффективные значения гармоник плотности тока

w	2 гармоника			3 гармоника			4 гармоника		
	F_{1x}	F_{0x}	j_2/j_0	F_{1x}	F_{0x}	j_3/j_0	F_{1x}	F_{0x}	j_4/j_0
0.2	1.2063	0.8625	0.01106 0	4.0750	4.2750	0.02097 3	9.9375	10.2875	0.01526 5
0.5	1.4500	1.3813	0.02207 7	4.1125	4.2625	0.01874 2	8.7500	9.1500	0.01578 9
1.0	1.7188	1.8250	0.02889 4	5.4375	5.9063	0.02048 0	9.2688	9.8063	0.01537 1
1.5	1.9563	2.4000	0.03889 7	6.4813	7.1625	0.02066 7	3.1375	10.2188	0.02991 8
2.0	2.3063	3.1250	0.04481 2	8.5063	9.8625	0.02135 4	2.1125	10.3875	0.03027 2
2.5	2.7188	3.9188	0.04845 2	0.0000	9.7938	0.04974 8	6.0625	6.3875	0.01999 0
3.0	3.1625	4.7188	0.05056 9	5.8625	6.8313	0.03269 5	7.1875	7.8000	0.02032 1
3.5	3.6438	5.4813	0.05132 0	6.8625	7.9563	0.03308 8	8.2313	9.31875	0.02083 1
4.0	4.1313	6.2500	0.05183 9	7.8813	9.0688	0.03327 3	9.8250	10.387	0.01710 5

