УДК 538.91

Расчет транспортных характеристик бислоя графена с различным периодом муара

*Савельев Владислав Владимирович, асп., 4 год1,*savelevvladv@mail.ru *+7 (962)513-90-39*

*Хазанова Софья Владиславовна, к.ф.-м.н., доцент 1,* [*khazanova@phys.unn.ru*](mailto:khazanova@phys.unn.ru)*,*

*+7 (902) 304-71-48*

*1ННГУ им. Н.И. Лобачевского*

Аннотация: Вследствие смещения двух графеновых слоев на некоторый угол друг относительно друга в структуре возникают участки с различным типом кристаллографической упаковки (АА- и АВ- упаковка). При этом внешне данная структура имеет геометрический узор, напоминающий «муар», а в энергетическом спектре это проявляется как чередование щелевых и бесщелевых областей. Пространственный период изменения энергетических параметров составляет величину порядка десяти нанометров, следовательно, области могут рассматриваться как сверхрешётка. Кроме того, на границах участков с различной упаковкой происходит т.н. релаксация, влияющая на размеры областей и энергетическую структуру в них. В данной работе численно исследуется влияние угла разориентации слоев, параметра энергетической щели на транспортные характеристики слоев.

Ключевые слова: графен, двумерные материалы, твистроника, матрица переноса.

Введение

Основными требованиями, предъявляемыми к современным электронным устройствам, являются миниатюризация, быстродействие и низкое энергопотребление, поэтому элементная база таких устройств все чаще основывается на двумерных материалах, обладающих высокой подвижностью носителей заряда и рядом уникальных электрофизических свойств. Кроме того, создание структур пониженной размерности позволяет использовать квантовые эффекты, такие как дискретизация спектра, туннелирование, осцилляции проводимости в магнитном поле. С этой точки зрения особую привлекательность получили различные Ван-дер-Ваальсовы структуры. Одним из материалов для их создания является графен (монослой атомов углерода), существенным недостатком которого является отсутствие запрещённой зоны, необходимой для управления электронным транспортом приборов. Отсюда вытекает актуальность поиска щелевых модификаций графена, другими словами, создания структур, в которых графен становится узкощелевым полупроводником. Создание требуемых энергетических свойств для однослойного графена возможно с помощью легирования или воздействия подложки. Другой способ модифицировать графен связан с созданием структур из нескольких слоёв, развёрнутых относительно друг друга, что открывает новый раздел электроники – твистронику [1]. Управление характеристиками подобных структур может осуществляться путем смещения слоёв относительно друг друга или приложением перпендикулярного электрического поля. В зависимости от типа носителей, индуцированных в различные области структуры, можно переключать изолирующие и проводящие свойства [2], таким образом, моделирование позволит эффективнее создавать приборы с такими свойствами и управлять их характеристиками.

Расчёт транспортных характеристик

В двуслойном графене с различным углом разориентации появляются периодично расположенные области (т.н. АА- и АВ- упаковки), при этом свойства графена периодически меняются и возникает узор, напоминающий муаровый. Так появляется сверхпериод в геометрии данных слоев, а вследствие этого и в энергетической структуре, размеры областей и, соответственно, параметр сверхпериода зависят от угла разориентации. Можно подобрать углы таким образом, что пространственный период изменения энергетических параметров будет иметь порядок десяти нанометров. АА-упакованные области имеют полуметаллические свойства, характеризуются высокой плотностью состояний и обеспечивают конфайнмент электронов, в то время как АВ-упакованные имеют полупроводниковые свойства. Учитывая, что фаза графена с АА-упаковкой метастабильна, чередование различных упаковок делает структуру более стабильной и дает более широкие возможности для создания устройств на их основе. В ряде работ указывается что в некотором диапазоне угла разориентации скорость Ферми в графеновых муаровых слоях может уменьшаться [1]. С другой стороны, эффекты релаксации, усиливающие резкость границ и меняющие размеры областей с различными упаковками, приводят в результате к увеличению скорости Ферми и усложнению зонной структуры [3]. Для каждой конкретной структуры требуется детальное рассмотрение результата действия этих процессов на параметры.

В качестве исследуемых структур рассматривается двуслойный графен после релаксации, слои которого повернуты друг относительно друга на некоторый угол. В данной работе для структур с различным сверхпериодом муара численным методом матрицы переноса и теории оптического прохождения плоских волн сквозь волновод с гофрированной стенкой рассчитываются коэффициенты прохождения, затем на их основе получаются вольтамперные характеристики. Исследуется влияние угла разориентации слоёв, силы межслойного взаимодействия и параметра релаксации в двуслойном графене на транспортные характеристики структуры.

Выводы

Определены значения углов, начиная с которых зависимость транспортных характеристик двуслойного муарового графена от энергии становится немонотонной. Выявлены параметры, при которых вольтамперные характеристики двуслойного муарового графена имеют область отрицательной диффференциальной проводимости.

Список использованных источников

1. A.V. Rozhkov et al, Electronic properties of graphene-based bilayer systems // Physics Reports, 2016. Vol. 648, pp. 1–104.
2. Won Beom Choi et al, Characterization of a graphene-hBN superlattice field effect transistor // Applied Physics Letters, 2024. Vol. 125, p. 033503
3. Nguyen N. T. Nam and Mikito Koshino, Lattice relaxation and energy band modulation in twisted bilayer graphene // PRB, 2017. Vol. 96, p. 075311.

TRANSPORT CHARACTERISTICS CALCULATION OF GRAPHENE BILAYER

WITH DIFFERENT MOIRE PERIODS

V.V. Saveliev, S.V. Khazanova

Abstract: Due to the two graphene layers displacement at a certain angle relative to each other the different types regions of crystallographic (AA- and AB-packages) appears in the structure. At the same time, this structure has a geometric pattern looks like a “moiré” and their energy spectrum has alternation of the energy gap and gapless regions. The spatial period of the energy changing parameters is about ten nanometers order, therefore, the regions can be considered as a superlattice. In addition, at the areas boundaries, the relaxation occurs, which affects the region size and the energy structure in them. In this work, we numerically study the layers disorientation angle influence, the energy gap parameter on the transport characteristics.

Key words: graphene, two-dimensional materials, twistronics, transfer matrix