

УДК 538.9

EFFECT OF FERMİ VELOCITY ON THE TRANSMISSION OF THE DIRAC-WEYL QUASI-ELECTRONS IN A SINGLE-BARRIER GRAPHENE STRUCTURE

A. Korol, V. Vyshniak, S. Litvynchuk, I. Hutsalo
National University of Food Technologies

<p>Key words: <i>Graphene</i> <i>Nanostructures</i> <i>Fermi velocity</i> <i>Dirac-Weyl equation</i> <i>Transmission coefficient</i></p> <p>Article history: Received 18.02.2016 Received in revised form 03.03.2016 Accepted 20.03.2016</p> <p>Corresponding author: A. Korol E-mail: korolam@ukr.net</p>	<p>ABSTRACT</p> <p>We consider the single-barrier nanostructure based on the monolayer gapless graphene with various values of the Fermi velocity in the barrier region. The coefficient of the quasi-electron transmission through the given structure T is calculated with the help of the relativistic Dirac-Weyl equation which does not contain the mass term within the framework of the continuum model. We use the transfer-matrix method to obtain the numerical values of the quantum transparency of this system T. The dependence of the quantity T on the parameters of the considered structure is analyzed — first of all on the Fermi velocity magnitude, as well as on the external electrostatic potential, on the barrier width and on the angle of the charge carrier incidence on the SL.</p>
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

ВПЛИВ ШВИДКОСТІ ФЕРМІ НА КОЕФІЦІЄНТ ТРАНСМІСІЇ КВАЗІЕЛЕКТРОНІВ ДІРАКА-ВЕЙЛЯ В ОДНОБАР'ЄРНІЙ ГРАФЕНОВІЙ СТРУКТУРІ

А.М. Король, В.В. Вишняк, С.І. Літвинчук, І.В. Гуцало
Національний університет харчових технологій

У статті розглянуто однобар'єрну наноструктуру, створену на базі одношарового безщільового графена з різними значеннями швидкості Фермі в бар'єрній області. В рамках континуальної моделі за допомогою релятивістського рівняння Дірака-Вейля, яке не містить масового члена, розраховано коефіцієнт проходження квазіелектронів T крізь дану структуру. Для одержання кількісних значень коефіцієнта квантової прозорості системи T використано метод трансферних матриць. Проаналізовано залежність величини T від параметрів даної структури, передусім від значення швидкості Фермі, а також від зовнішнього електростатичного потенціалу, товщини бар'єру і кута падіння носіїв заряду на бар'єр.

Ключові слова: графен, наноструктури, швидкість Фермі, рівняння Дірака-Вейля, коефіцієнт трансмісії.

Постановка проблеми. Останніми роками увага дослідників прикута до вивчення різних структур на основі графена, що пояснюється його нетривіальними властивостями, в тому числі електронними. Достатньо назвати аналогію π -електронів графена з безмасовими діраківськими ферміонами при низьких енергіях (що формально описуються безмасовим рівнянням Дірака), лінійний закон дисперсії, властивість кіральності, клейнівське тунелювання, високу рухливість, балістичний транспорт, незвичайний квантовий ефект Холла тощо (див., наприклад, [1—13]). Слід також мати на увазі, що графен є перспективним матеріалом у сучасній електроніці в контексті заміни кремнієвої технології на графенову.

Балістичний транспорт квазіелектронів Дірака-Вейля крізь області графена з різними швидкостями Фермі (бар'єри швидкості) розглядався в низці праць [6—13], у яких було виявлено ряд нових важливих закономірностей. Зокрема, показано, що трансмісія крізь бар'єр швидкості є сильно анізотропною, при нормальному падінні квазічастинок на бар'єр вона є ідеальною (аналог парадокса Клейна), за умови $v_F > v_0$ (v_F , v_0 — швидкості Фермі в бар'єрі і в звичайному графені відповідно) існує критичний кут трансмісії (аналог кута Брюстера в оптиці) для безмасових діраківських електронів, спостерігаються сильні резонансні ефекти, сильний вплив магнітного поля на зв'язані стани тощо.

З метою регулювання транспортних властивостей графенових структур використовуються різні методи та прийоми, зокрема вивчався вплив на динаміку квазіелектронів зовнішніх електричного та магнітного полів. Ці поля можуть створювати потенціальні бар'єри для носіїв заряду, а змінюючи величину бар'єрів, можна зручно регулювати поведінку електронів або дірок. Недавно було запропоновано ще один шлях для керування електронними властивостями графенових структур, а саме: за допомогою просторової зміни швидкості Фермі [6]. Також розроблено декілька методів одержання структур, в яких швидкість Фермі квазічастинок є просторово залежною. Це досягнення технології відкриває нові можливості для створення наноелектронних приладів з бажаними транспортними властивостями. Але оскільки не всі властивості й характеристики зазначених структур вивчені і відомі, їх дослідження триває.

Метою дослідження є розрахунок і аналіз коефіцієнта трансмісії T (як функції енергії носіїв заряду E) крізь графенову структуру, в якій квазіелектрони зі швидкостями Фермі v_0 (як у звичайному графені) долають область графена з іншою швидкістю Фермі $v_F \neq v_0$; таку область прийнято називати бар'єрною, її ширина позначається літерою d .

Виклад основних результатів дослідження. Вважатимемо, що до бар'єрної області прикладено зовнішній електростатичний потенціал U — фактично йдеться про бар'єри подвійної природи. Як відомо, за допомогою електростатичного потенціалу зручно регулювати транспорт носіїв заряду в бар'єрних системах, і нижче буде доведено, що наявність потенціалу U справді істотно впливає на рух носіїв заряду в структурі, яка розглядається.

Оскільки розглядається графен, в якому швидкості Фермі квазічастинок залежать від просторової координати \vec{r} , тобто $\vec{v}_F = \vec{v}_F(\vec{r})$, рух квазіелектронів підпорядковується такому безмасовому рівнянню Дірака-Вейля:

$$i\hbar\bar{\sigma}\nabla[\sqrt{\bar{v}(\vec{r})}\phi(\vec{r})]\sqrt{\bar{v}(\vec{r})} = E\phi(\vec{r}), \quad (1)$$

де $\bar{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ — двовимірні матриці Паулі; $\phi(\vec{r}) = [\phi_A(\vec{r}), \phi_B(\vec{r})]^T$ — двокомпонентний спіно́р; T — символ транспонування. Вводячи допоміжний спіно́р $\varphi(r) = \sqrt{\bar{v}(\vec{r})}\phi(\vec{r})$, можна записати рівняння (1) у такій формі:

$$\ddot{\epsilon} - i\hbar\bar{v}(\vec{r})\bar{\sigma}\nabla\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}). \quad (2)$$

Припустимо, що зовнішній потенціал являє собою прямокутний бар'єр, розташований вздовж осі ОХ. Тоді із рівняння (2) можна одержати:

$$\frac{d^2\varphi_{A,B}}{dx^2} + (k^2 - k_y^2)\varphi_{A,B} = 0, \quad (3)$$

де A, B відносяться до графенових підґраток A і B ; квазіімпульс k дорівнює $k = (E - U)$ поза бар'єром і $k = \frac{E - U}{v_F}$ всередині бар'єру; одиниці вимірювання $\hbar = v_0 = 1$. Якщо представити розв'язок для власних функцій у вигляді плоских хвиль, що рухаються вздовж осі ОХ у прямому і зворотному напрямках, то одержимо:

$$\phi(x) = \left[a^{iqx} \begin{pmatrix} 1 \\ g^+ \end{pmatrix} + b^{-iqx} \begin{pmatrix} 1 \\ g^- \end{pmatrix} \right], \quad (4)$$

де $q = \sqrt{k^2 - k_y^2}$ для $k^2 > k_y^2$; $q = i\sqrt{k_y^2 - k^2}$ для $k^2 < k_y^2$; $g_{\pm}^{\pm} = \frac{(\pm q + ik_y)v_F}{E - U}$.

Верхній рядок у (4) стосується підґратки A , нижній — B .

Використовуючи далі граничні умови у вигляді

$$\sqrt{v_F}\phi(x_b^-) = \sqrt{v_0}\phi(x_b^+), \quad (5)$$

де індекс b відноситься до бар'єру, x_b — координата межі: бар'єр — позабар'єрна область, можна одержати вираз для коефіцієнта відбивання електронної хвилі від бар'єра:

$$R = \frac{e^{i\varphi} \sin(qd)(\sin\varphi - \sin\theta)}{\cos(qd)\cos\theta\cos\varphi + i\sin(qd)(\sin\theta\sin\varphi - 1)}, \quad (6)$$

де φ — кут падіння хвилі; $\theta = \arctg \frac{k_y}{q}$. Коефіцієнт проходження квазіелектронів крізь бар'єр T виражається через R таким чином:

$$T = 1 - |R|^2. \quad (7)$$

Зауважимо властивість симетрії стосовно кута падіння φ : $T(\varphi) = T(-\varphi)$, що дозволяє розглянути діапазон кутів падіння $\varphi = [0^\circ, 90^\circ]$.

На рис. 1 представлено залежність коефіцієнта трансмісії T від енергії квазіелектронів E для однобар'єрної графенової структури з параметрами: $d = 2$, $k_y = 0,12$; $U = 0$, для рисунків 1.1, 1.2, 1.3 величина швидкості Фермі дорівнює $v_F = 2, 3, 4$ відповідно.

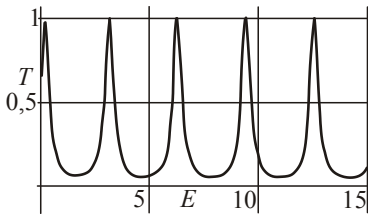


Рис. 1.1. Залежність коефіцієнта трансмісії T від енергії квазіелектронів E для одnobар'єрної графенової структури. Параметри: $d = 2$, $k_y = 0,12$, $U = 0$, $v_F = 2$

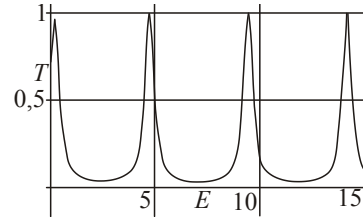


Рис. 1.2. Залежність коефіцієнта трансмісії T від енергії квазіелектронів E для одnobар'єрної графенової структури. Параметри: $d = 2$, $k_y = 0,12$, $U = 0$, $v_F = 3$

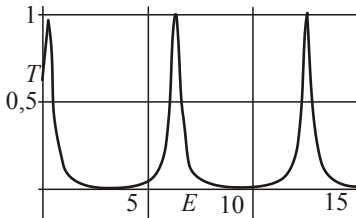


Рис. 1.3. Залежність коефіцієнта трансмісії T від енергії квазіелектронів E для одnobар'єрної графенової структури. Параметри: $d = 2$, $k_y = 0,12$, $U = 0$, $v_F = 4$

Аналізуючи наведені спектри, насамперед слід зазначити, що вони виявляють яскраво виражену періодичність по осі енергій. Ця періодичність є однією з найбільш характерних рис спектрів графенових структур з бар'єрами швидкості Фермі. Вона кардинально відрізняє дані спектри від спектрів трансмісії інших графенових структур (з бар'єрами іншої природи), в яких коефіцієнт проходження T асимптотично прямує до одиниці із зростанням енергії квазіелектронів E . Періодичність по енергії пояснюється тим, що бар'єри швидкості є залежними від енергії [9]. Якщо провести аналогію між тунелюванням у графені крізь прямокутний електростатичний бар'єр і тунелюванням крізь бар'єр швидкості Фермі, для потенціалу останнього потрібно записати:

$$U(E) = E - \frac{E}{v_F}. \quad (8)$$

Іншими словами, вирази для коефіцієнта пропускання в цих випадках збігаються, якщо задовольняється умова (8). Ця формула пояснює той факт, що спектри $T(E)$ для надгратки із бар'єрами швидкості періодичні по всій шкалі енергій.

Спектри демонструють також яскраво виражену резонансну структуру, тобто являють собою набір близьких до одиниці значень коефіцієнта трансмісії T для певних резонансних значень енергії E (для інших енергій значення T істотно менші). Із збільшенням величини v_F спостерігається зменшення мінімальних значень коефіцієнта T , що природно відповідає зростанню величини бар'єрів; резонансні значення T при цьому залишаються високими (близькими до одиниці). Важливо, що збільшення швидкості Фермі призводить також до істотного зростання періодів спектрів. Так, зокрема, зміна величини v_F від 2 до 3 приводить до збільшення періоду спектрів приблизно вдвічі.

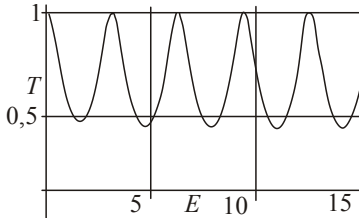


Рис. 2. Залежність коефіцієнта трансмісії T від енергії квазіелектронів E для однопар'єрної графенової структури. Параметри: $d = 2$, $k_y = 0,07$, $U = 0$, $v_F = 2$

Рис. 2 дає змогу побачити, як досліджувані спектри залежать від кута падіння квазіелектронів на бар'єр, тобто від величини k_y . Для цього рисунка параметри є такими: $d = 2$, $v_F = 2$, $U = 0$, $k_y = 0,07$. Порівнюючи рисунки 1.1 і 2, бачимо, що на резонансні значення коефіцієнта трансмісії T кут падіння не впливає — вони залишаються близькими до одиниці; водночас мінімальні значення T помітно зменшуються із зростанням кута падіння. Крім того, суттєво зменшується і напівширина спектральних ліній.

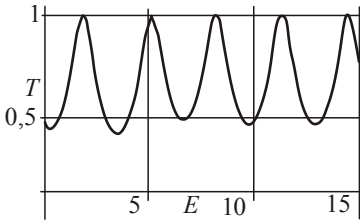


Рис. 3.1. Залежність коефіцієнта трансмісії T від енергії квазіелектронів E для однопар'єрної графенової структури. Параметри: $d = 2$, $k_y = 0,07$, $U = 5$, $v_F = 2$

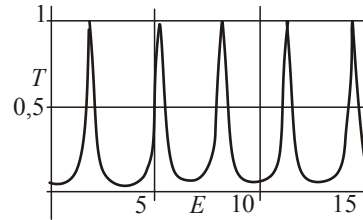


Рис. 3.2. Залежність коефіцієнта трансмісії T від енергії квазіелектронів E для однопар'єрної графенової структури. Параметри: $d = 2$, $k_y = 0,12$, $U = 5$, $v_F = 2$

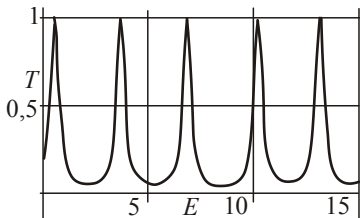


Рис. 3.3. Залежність коефіцієнта трансмісії T від енергії квазіелектронів E для однопар'єрної графенової структури. Параметри: $d = 2$, $k_y = 0,12$, $U = 10$, $v_F = 2$

Як відомо, транспортні характеристики бар'єрних структур зручно регулювати за допомогою зовнішнього електростатичного потенціалу U . Його вплив на функцію $T(E)$ для досліджуваної структури показано на рис. 3. Для рис. 3.1 і 3.2 параметри є такими: $d = 2$, $v_F = 2$, $U = 5$ і $k_y = 0,07$, $k_y = 0,12$ (тобто представлено залежність $T(E)$ для двох кутів падіння). Порівнюючи рисунки 3.1, 3.2 із попередніми, для яких $U = 0$, можна зробити такий висновок: головним результатом впливу зовнішнього електростатичного потенціалу U на досліджувані спектри є те, що наявність U призводить до зміщення положень екстремумів по осі енергій, тобто положення екстремумів залежить від U . Підкреслимо, що ця залежність є вельми істотною. Як випливає із виразів (1—6), при значеннях енергії $E \approx U$ мають реалізовуватись

максимальні значення коефіцієнта трансмісії T . Фізично це пояснюється тим, що саме для цих значень енергії коефіцієнт згасання квазіелектронної хвилі в бар'єрі є мінімальним. Очевидно також, що із збільшенням кута падіння хвилі на бар'єр коефіцієнт згасання зростає і максимум величини T зменшується. Представлені на рис. 3 розрахунки повністю підтверджують дані висновки: справді, в точці $E \approx U = 5$ утворюється саме максимальне значення коефіцієнта T (в ідеальному випадку нормального падіння квазіелектронів на бар'єр $T(E=U)=1$). Утворення максимуму T в точці $E \approx U$ супроводжується збільшенням мінімального значення величини T в околі цієї точки; цей ефект для взятих параметрів є незначним, але для іншого набору параметрів задачі він може бути суттєво більшим. Зауважимо також, що значення максимуму в зазначеній точці при кутах падіння менших від нормального є дещо меншим від одиниці, тоді як в інших точках максимумів він дорівнює одиниці. На рис. 3.3 наведено залежність коефіцієнта T від енергії E для випадку більшого значення зовнішнього потенціалу $U = 10$, інші значення параметрів, як для рис. 3.2.

Зазначимо окремо, що точки розміщення екстремумів на осі енергій є періодичними функціями потенціалу U . Значення даного періоду залежить від параметрів структури, що розглядається.

Висновки

Отже, у пропонованому дослідженні розглянуто процес квантового проходження (розраховано коефіцієнт квантової прозорості) релятивістських квазіелектронів Дірака-Вейля крізь однобар'єрну графенову структуру. Показано, що значення швидкості Фермі носіїв заряду чинить вельми істотний вплив на досліджуваний процес. Результати дослідження є корисними для встановлення оптимальних параметрів наноелектронних пристроїв на основі графена.

Література

1. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene // Nat. Materials. — 2007. — Vol. 6. — P. 183—188.
2. Castro Neto A. N., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K.S., Geim A.K. The electronic properties of graphene // Reviews of Modern Physics. — 2009. — Vol. 81. — P. 109—121.
3. Pereira J.M., Peeters F.M., Chaves A., Barbier M., Vasilopoulos P. Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene // Semiconductor Science and Technology. — 2010. — Vol. 25. — P. 033002—033009.
4. Cheianov V.V., Falko V.I. Selective transmission of Dirac electrons and ballistic magnetoresistance of n-p junctions in graphene // Physical Review B. — 2006. — Vol. 74. — P. 041403—041408.
6. Raoux A., Polini M., Asgari R., Hamilton A.R., Fazio R., MacDonald A.H. Velocity-modulation control of electron-wave propagation in graphene // Physical Review B. — 2010. — Vol. 81. — P. 073407—073412.
7. Krstajic P.M., Vasilopoulos P. Ballistic transport through graphene nanostructures of velocity and potential barriers // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2011. — Vol. 23. — P. 135302—135312.
8. Lei Liu, Yu-Xian Li, Jian-Jun Liu. Transport properties of Dirac electrons in graphene based double velocity-barrier structures in electric and magnetic fields // Physics Letters A. — 2012. — Vol. 376. — P. 3342—3350.
9. Concha A., Tesanovic Z. Effect of a velocity barrier on the ballistic transport of Dirac fermions // Physical Review B. — 2010. — Vol. 82. — P. 033413—033418.

10. Wang Y., Liu Y., Wang B. Resonant tunnelling and enhanced Goos-Hänchen shift in graphene double velocity barrier structure // *Physica E*. — 2013. — Vol. 53. — P. 186—192.
11. Zhao P., Chen X. Electronic band gap and transport in Fibonacci quasi-periodic graphene superlattice // *Applied Physics Letters*. — 2011. — Vol. 99. — P. 182108—182113.
12. Korol A.M., Medvid N.V., Litvynchuk S.I. Transport properties of the Dirac-Weyl electrons through the graphene-based superlattice modulated by the Fermi velocity barrier // *Springer Proceedings in Physics*. — 2015. — Vol. 167. — P. 215—221.
13. Korol A.M., Litvynchuk S.I., Bagliuk S.V., Isai V.M. Energy spectra of the graphene-based Fibonacci superlattice modulated by the Fermi velocity barrier // *Physical Science International Journal*. — 2016. — Vol. 9(3). — P. 1—8.

ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ ФЕРМИ НА КОЭФФИЦИЕНТ ТРАНСМИССИИ КВАЗИЭЛЕКТРОНОВ ДИРАКА-ВЕЙЛЯ В ОДНОБАРЬЕРНОЙ ГРАФЕНОВОЙ СТРУКТУРЕ

А.М. Король, В.В. Вишняк, С.И. Литвинчук, И.В. Гуцало
Национальный университет пищевых технологий

В статье рассматривается однобарьерная наноструктура, созданная на базе однослойного бесцелевого графена с разными значениями скорости Ферми в барьерной области. В рамках континуальной модели с помощью релятивистского уравнения Дирака-Вейля, не содержащего массового члена, рассчитывается коэффициент прохождения квазиэлектронов T через данную структуру. Для получения численных значений коэффициента квантовой прозрачности рассматриваемой системы T использован метод трансферных матриц. Проанализирована зависимость величины T от параметров данной структуры, прежде всего от значения скорости Ферми, а также от внешнего электростатического потенциала, толщины барьера и угла падения носителей заряда на барьер.

Ключевые слова: *графен, наноструктуры, скорость Ферми, уравнение Дирака-Вейля, коэффициент трансмиссии.*