

# Туннельный контакт на базе графена

В. Л. Катков<sup>1)</sup>, В. А. Осипов

Лаборатория теоретической физики им. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований,  
141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 7 октября 2013 г.

Методом функций Грина в рамках приближения сильной связи рассчитан туннельный ток в контакте, состоящем из полуплоскостей графена и двуслойного графена с двумя возможными типами упаковки в двух возможных ориентациях кристаллической решетки. Показано, что зонная структура графена, ориентированного краем типа “кресло”, приводит к специфической для каждого из графенов степенной зависимости туннельного тока от напряжения, характер которой определяется изменением числа транспортных каналов при изменении напряжения. Обнаружено, что при встречной ориентации краем типа “зигзаг” для всех видов рассмотренных контактов туннельный ток содержит характерные пики, обусловленные влиянием локализованных краевых состояний. Исследован эффект влияния затвора. Показано, что в случае структур с краем зигзаг имеет место эффект “включения/выключения” контактов. Контакты же на графенах с краем “кресло” не обладают выраженным “переключающим” свойством, а увеличение напряжения на затворе приводит к увеличению проводимости.

DOI: 10.7868/S0370274X13230100

В последнее время были достигнуты серьезные успехи в синтезе графена с молекулярно ровными краями [1–5]. Это стимулировало активное исследование графена в качестве материала для электродов в различных наноэлектронных приборах [6, 7]. В частности, в работе [8] был исследован эффект краевых состояний в одномолекулярном устройстве на базе графена. Следует отметить, что планарная конфигурация графена открывает широкие возможности для построения на его базе туннельного полевого транзистора (ТПТ) [9]. Использование графена для изготовления таких устройств оправдано прежде всего уникально высокой подвижностью носителей заряда, в связи с чем ТПТ должны обладать хорошими высокочастотными свойствами. Кроме того, нельзя не отметить высокую стабильность кристаллической структуры углеродных материалов, которая сохраняется вплоть до высоких температур. В качестве слоя, разделяющего электроды, в разное время предлагалось использовать индуцированный внешним полем потенциальный барьер [10–12] либо слой диэлектрика [13]. В целом успехи в технологии изготовления разрезов в графене [4] позволяют ожидать получения туннельного контакта с протяженными ровными контактирующими краями.

Широко известны два факта: 1) зонная структура многослойных графенов вблизи уровня Ферми кри-

стическим образом зависит от числа слоев и способа их упаковки, 2) на краю типа “зигзаг” у графена присутствуют локализованные состояния. Целью данного исследования является ответ на вопрос о том, как перечисленные обстоятельства влияют на характеристики туннельного контакта на базе графена. Нами будет рассмотрено устройство с небольшой щелью, работающее в режиме туннельного контакта при различных вариантах ориентации графеновых электродов, различном количестве слоев (монослой или двуслой) и различном типе упаковки (АА или АВ) под влиянием потенциала затвора.

Структура туннельных контактов представлена на рис. 1. Энергию и напряжение мы нормируем на величину параметра взаимодействия  $t_0$  между ближайшими атомами в одном слое графена. Значение параметра взаимодействия выбрано как  $t_m = 0.01t_0$ , что, согласно известной оценке  $t(d) = t_0 \exp[-2/a_0(d - a_0)]$ , соответствует расстоянию между электродами, равному трем межатомным. Параметр взаимодействия между ближайшими атомами соседних слоев выбран как  $t_1 = 0.127t_0$ . Предполагается, что электроды полубесконечны в направлении  $x$  и бесконечны в направлении  $y$ . Все токи нормированы на ячейку, обведенную на рисунках штриховым прямоугольником.

Для расчетов были использованы метод функций Грина, а также приближение сильной связи. В рамках данного формализма ток описывается выражением [14, 15]

<sup>1)</sup>e-mail: katkov@theor.jinr.ru

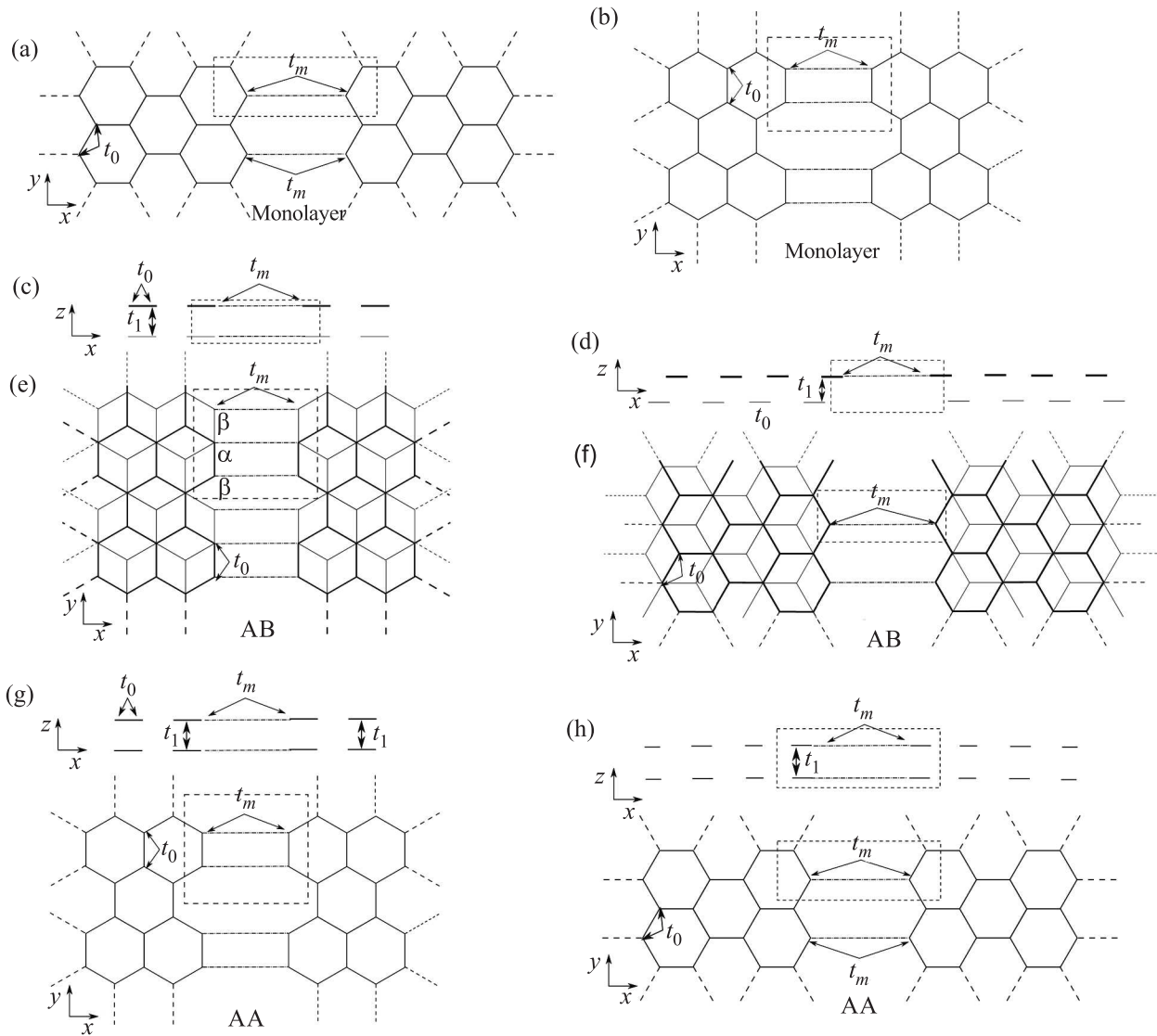


Рис. 1. Схематическое изображение соседних электродов в атомарном разрешении:  $t_0$  – параметр взаимодействия между соседними атомами одного слоя,  $t_m$  – между ближайшими атомами контактов,  $t_1$  – между ближайшими атомами соседних слоев. Структура полагается полубесконечной вдоль оси  $x$  и бесконечной вдоль оси  $y$

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Tr} [A_L (1 - t^\dagger g_R^- t g_L^-)^{-1} t^\dagger A_R t (1 - g_L^+ t^\dagger g_R^+ t)^{-1}] \times [f_L - f_R] d\varepsilon, \quad (1)$$

где  $g_{R,L}^+ = [(\varepsilon + i0^+) \mathbf{1} - H_{R,L}]^{-1}$  – запаздывающая функция Грина для краевых атомов правого (левого) контактов,  $g_{R,L}^- = (g_{R,L}^+)^{\dagger}$ ,  $A_{R,L} = i(g_{R,L}^+ - g_{R,L}^-)$  – спектральная плотность электронов,  $t$  – матрица взаимодействия атомов левого и правого контактов,  $f_L = f(\varepsilon - eV/2)$ ,  $f_R = f(\varepsilon + eV/2)$ ,  $f(\varepsilon) = [1 + \exp(\varepsilon/k_B T)]^{-1}$  – функция Ферми–Дирака,  $k_B T = 0.001 t_0$ ,  $\mathbf{1}$  – единичная матрица. Функции Грина для краевых атомов вычислялись с помощью ите-

рационной техники, предложенной в [16, 17]. Локальная плотность состояний для  $n$ -го атома пропорциональна соответствующему диагональному элементу функции Грина,  $\rho_n(\varepsilon) = -(1/\pi) \text{Im} g_{nn}^+$ . Поэтому данную величину мы не будем иллюстрировать отдельно, ограничившись предъявлением действительной и мнимой частей функции Грина. Оба контакта подвержены влиянию общего затвора. Реакция системы на напряжение затвора была учтена обычным образом:  $H_{R,L}(\varepsilon) \rightarrow H_{R,L}(\varepsilon + V_g)$ .

Следует отметить, что вторые слагаемые в круглых скобках выражения (1) учитывают влияние одного контакта на электронные состояния другого. При слабом влиянии данными слагаемыми можно

пренебречь. Тогда используемый подход сводится к известному методу туннельного гамильтониана [18]. Отметим, что подобное приближение для туннельной задачи оправдано лишь для края типа “кресло”, о чем будет подробнее говориться ниже. В рамках метода туннельного гамильтониана удается, в частности, получить аналитический результат для плотности тока монослоя графена:

$$I^A \simeq 1.18 \text{sign}(V) \frac{e t_m^2}{h t_0^3} V^2. \quad (2)$$

При выводе данного выражения использовались известная аппроксимация для зонной структуры вблизи точек  $K$  и  $K'$  в виде  $\varepsilon = \pm 3a_0 t_0 / (2\hbar) |\mathbf{p}|$ , а также приближение нулевой температуры.

К сожалению, для всех остальных рассмотренных случаев расчеты в рамках подхода туннельного гамильтониана крайне усложняются и аналитический результат получить не удастся. Однако полагая, что такие эффекты, как интерференция туннелирующих электронов, и правила отбора для матричного элемента, связанные с определенным видом волновой функции электрода внутри контакта, зависят от напряжения слабее, чем число транспортных каналов, можно получить оценку для функциональной зависимости тока от напряжения вблизи нуля. Используем для этого метод, предложенный Харрисоном [19] для расчета туннельного тока в массивных трехмерных контактах, который соответствует методу независимых каналов, ранее применявшемуся для вычисления автоэлектронной эмиссии [20–22].

В рамках данного подхода туннельный ток может быть найден как площадь фигуры, являющейся результатом наложения проекции (теней) зонных структур на направление движения электронов. Все точки внутри данной фигуры должны подчиняться следующему условию: заполненное состояние тени одного электрода должно накладываться на свободное состояние в тени другого. В частности, такой простой метод позволяет получить следующие оценки: для монослоя  $I^A \sim V^2$ , а для двуслоев  $I^{AA} \sim V$ ,  $I^{AB} \sim V^{3/2}$ . Как мы видим, для монослоя квадратичная зависимость подтверждается расчетами в рамках метода туннельного гамильтониана. Остальные зависимости мы сравним с результатами численных расчетов.

На рис. 2 представлены результаты для электродов, образованных монослоями графена с краем “кресло”. Видно, что плотность состояний в широких пределах совпадает с плотностью состояний атомов в бесконечном графене. Выражение (2) хорошо описывает расчет вплоть до значений  $V = \pm 0.4 t_0$  (на

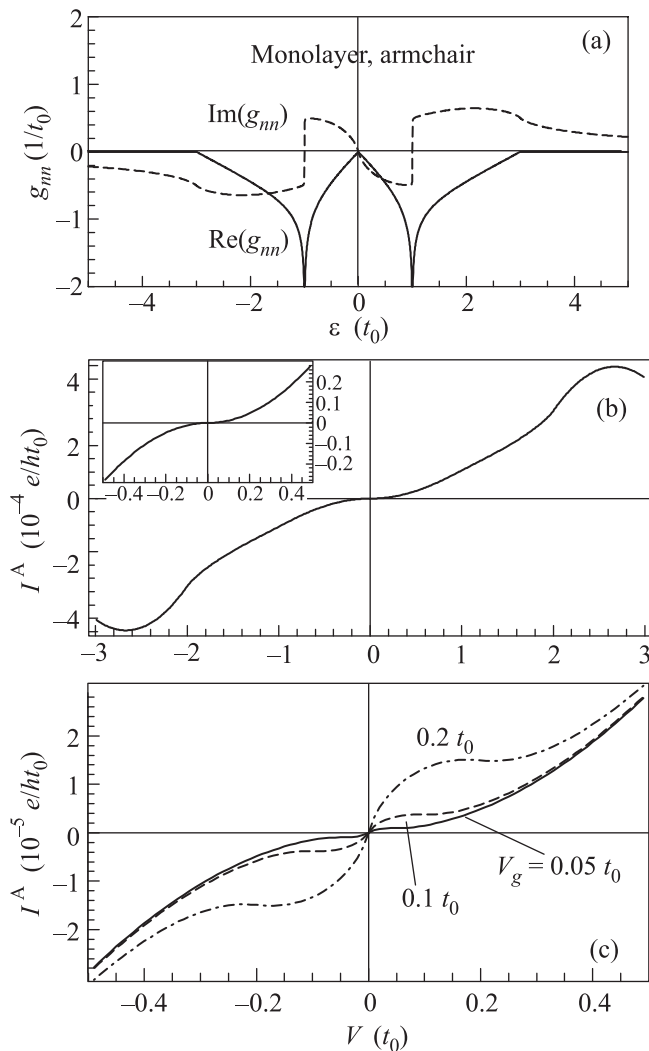


Рис. 2. Монослой графена с краем типа “кресло”. (а) – Функции Грина контактирующих атомов. (б) – Вольт-амперная характеристика. (с) – Вольт-амперные характеристики при напряжении затвора  $V_g = 0.05 t_0$ ,  $0.1 t_0$  и  $0.2 t_0$

иллюстрации не отображено, так как кривые хорошо совпадают). Реакция на затвор не является сильной. Она объясняется тем, что происходит смещение уровня Ферми из области с нулевой плотностью состояний в область с конечной плотностью состояний. Это делает зонную структуру монослоя похожей на зонную структуру двуслоя AA при нулевом напряжении на затворе. В результате квадратичная зависимость заменяется линейной.

На рис. 3 представлены результаты для AA двуслоев графена с краем “кресло”. Как и в предыдущем случае, плотность состояний мало отличается от таковой для атомов в бесконечном листе. Присутствует ожидаемая линейная зависимость тока от напряже-

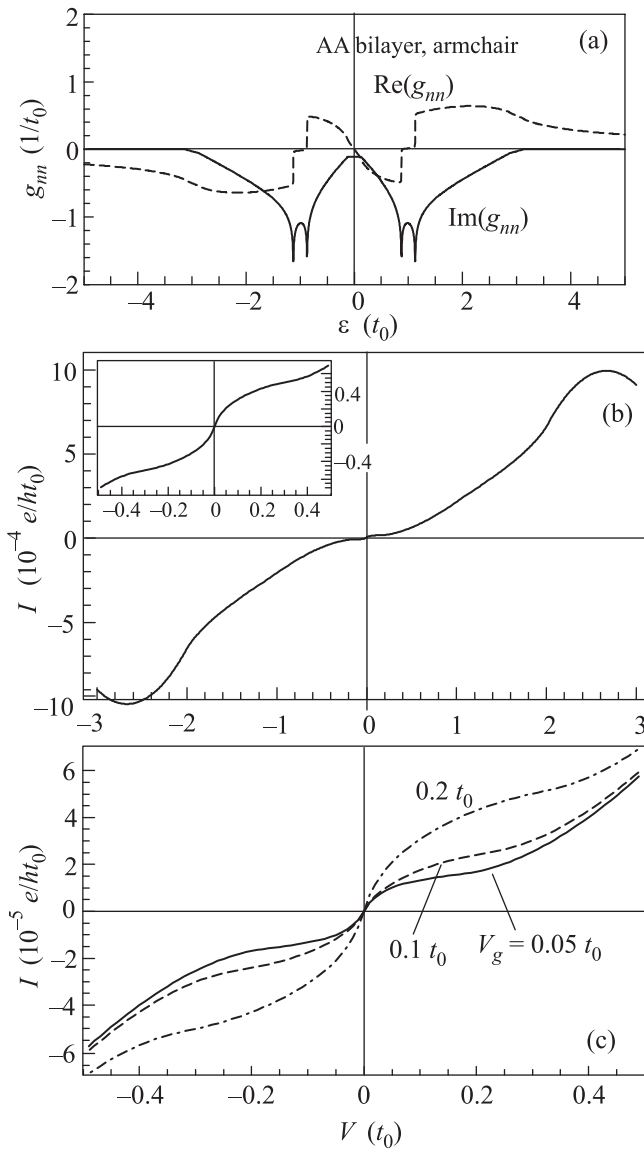


Рис.3. Двуслой АА с краем типа “кресло”. (а) – Функции Грина контактирующих атомов. (б) – Вольт-амперная характеристика. (с) – Вольт-амперные характеристики при напряжении затвора  $V_g = 0.05t_0, 0.1t_0$  и  $0.2t_0$

ния. Повышение напряжения на затворе не меняет характера этой зависимости (она остается линейной), а приводит к увеличению проводимости.

В случае двуслойного АВ-графена с краем “кресло” выделяются два типа граничных атомов: атомы с тремя соседями (они обозначены на рис. 1 символом  $\alpha$ ) и атомы с двумя соседями (обозначены символом  $\beta$ ). Они обладают различным поведением локальных поверхностных состояний. Атомы типа  $\alpha$  имеют нулевую плотность состояний на уровне Ферми, в то время как атомы типа  $\beta$  – конечную. Результат

усреднения близок к плотности состояний в бесконечном АВ-двуслое (см. рис. 1 в [23]). Существование двух типов атомов с различным спектром приводит к тому, что ожидаемая зависимость  $I \sim V^{3/2}$  отсутствует. Реакция на потенциал затвора мало отличается от таковой для монослоя и двуслоя АА с краем “кресло”.

Ситуация для монослоя с ориентацией “зигзаг” проиллюстрирована на рис.4. Локализованные на

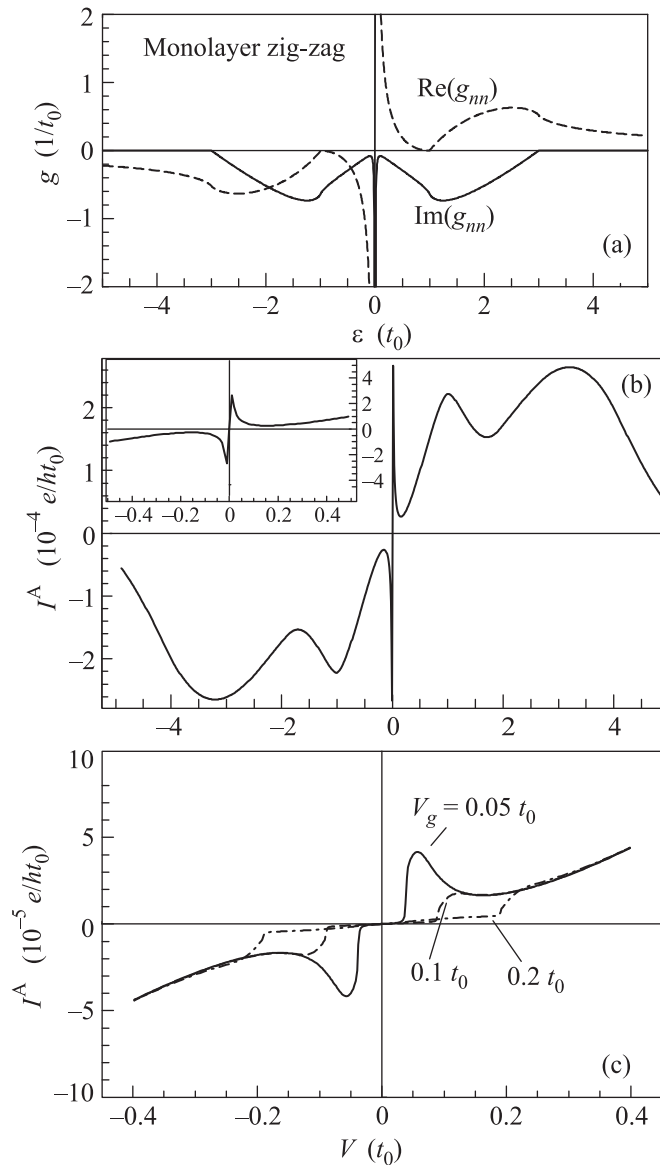


Рис.4. Монослой графена с краем типа “зигзаг”. (а) – Функции Грина контактирующих атомов. (б) – Вольт-амперная характеристика. (с) – Вольт-амперные характеристики при напряжении затвора  $V_g = 0.05t_0, 0.1t_0$  и  $0.2t_0$

краю состояния приводят к резонансному росту функции Грина вблизи уровня Ферми. В этом случае

игнорировать изменение плотности состояний одного электрода в присутствии другого (вторые слагаемые в скобках в (1)) при принятом значении параметра  $t_m = 0.01t_0$  некорректно.

В качестве иллюстрации на рис. 5 приведена мнимая часть функции Грина поверхностных атомов ле-

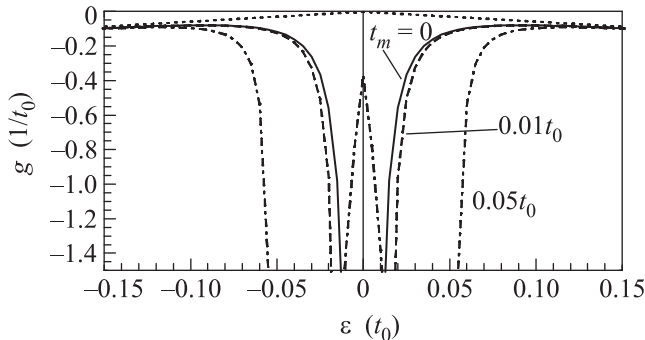


Рис. 5. Монослой графена с краем типа “зигзаг”. Мнимая часть функции Грина при разных значениях параметра взаимодействия

вого контакта, “возмущенная” правым контактом, в случае монослоя с краем типа “зигзаг” при разных значениях параметра связи между атомами соседних контактов ( $t_m = 0, 0.01t_0, 0.05t_0$  и  $t_0$ ):

$$\tilde{g}_L^+ = [\mathbf{1} - g_L^+ \Sigma_R]^{-1} g_L^+, \quad \Sigma_R = t^\dagger g_R^+ t. \quad (3)$$

Видно, что при  $t_m = 0.01t_0$  плотность состояний вблизи уровня Ферми испытывает заметные искажения. При увеличении параметра взаимодействия плотность состояний стремится к случаю бесконечного листа, который точно реализуется при  $t_m = t_0$ . Аналогичная ситуация имеет место для всех рассмотренных графенов с краем типа “зигзаг”.

Прямым следствием резонансного поведения плотности состояний вблизи уровня Ферми является скачок туннельного тока. Напряжение затвора приводит к эффективному смещению уровня Ферми от резонанса и, следовательно, к падению плотности тока, что отражено на соответствующих кривых на рис. 4. Таким образом, имеет место “выключение” данного контакта под действием затвора.

Для двуслоя AA с краем типа “зигзаг” ситуация оказывается обратной (см. рис. 6). При отсутствии напряжения на затворе имеется малая плотность состояний на уровне Ферми и в устройстве протекает небольшой туннельный ток. Когда напряжение затвора приближается к значению  $t_1$ , при котором локальная плотность состояний имеет характерный пик, происходит резкое повышение туннельного тока и можно говорить о “включении” устройства.

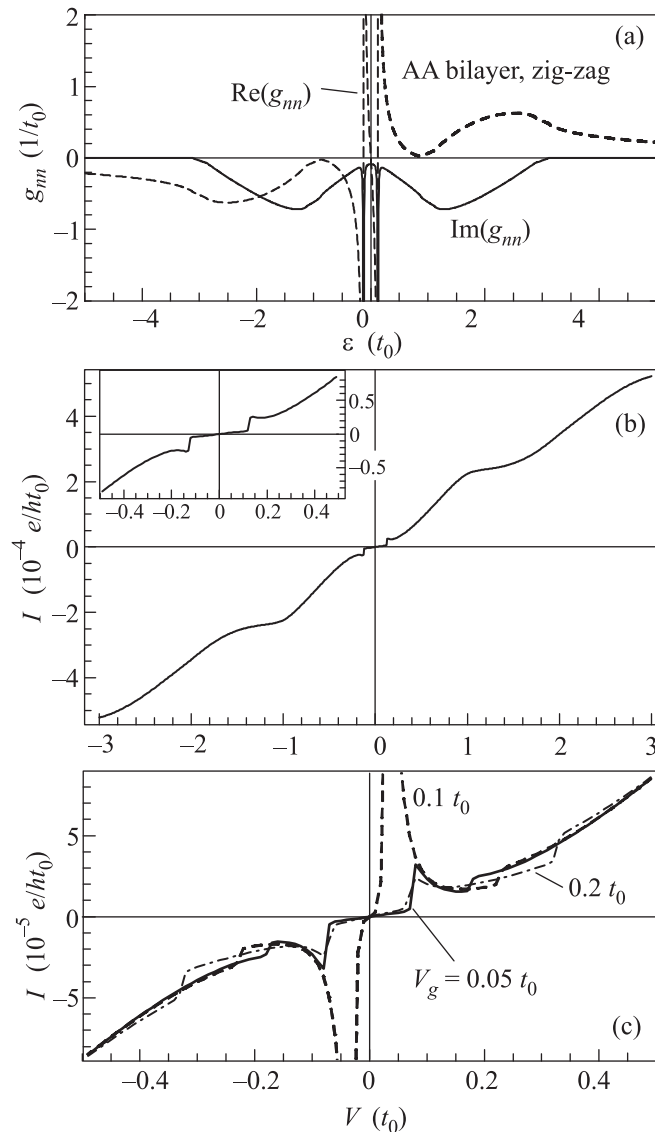


Рис. 6. Двуслой AA с краем типа зигзаг. (a) Функции Грина контактирующих атомов. (b) – Вольт-амперная характеристика. (c) – Вольт-амперные характеристики при напряжении затвора  $V_g = 0.05t_0, 0.1t_0$  и  $0.2t_0$

Случай двуслоя AB с краем типа “зигзаг” качественно не отличается от случая монослоя. Локализованные на границе состояния выглядят здесь схожим образом, и геометрия контакта совпадает. Однако следует отметить, что для двуслоя AB эффект “выключения” выражен сильнее.

В итоге можно констатировать, что на базе всех туннельных контактов с использованием графенов с краем типа “зигзаг” могут быть построены электронные переключающие устройства, что прямо связано с наличием на краю локализованных состояний в узком интервале энергии. Для монослоя и двуслоя AB

эти состояния находятся вблизи энергии Ферми. В то же время для двуслойа АА они сдвинуты относительно этой энергии на величину параметра взаимодействия между слоями. Таким образом, на базе первых двух контактов может быть реализовано устройство “выключающееся” при подаче напряжения на затвор, а на базе последнего – “включающееся” при подаче напряжения, близкого к параметру  $t_1$ . Контакты на графенах с краем “кресло” не обладают выраженным “переключающим” свойством. Здесь изменение напряжения на затворе может лишь изменять величину проводимости.

Авторы выражают благодарность РФФИ за финансовую поддержку работы (проект #12-02-01081-а.

1. X. Jia, M. Hofmann, V. Meunier, B.G. Sumpter, J. Campos-Delgado, J. M. Romo-Herrera, H. Son, Y.-P. Hsieh, A. Reina, J. Kong, M. Terrones, and M. S. Dresselhaus, *Science* **323**, 1701 (2009).
2. C. Jin, H. Lan, L. Peng, K. Suenaga, and S. Iijima, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 205501 (2009).
3. A. Chuvilin, J.C. Meyer, G. Algara-Siller, and U. Kaiser, *New J. Phys.* **11**, 083019 (2009).
4. Y. He, H. Dong, T. Li, C. Wang, W. Shao, Y. Zhang, L. Jiang, and W. Hu, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 133301 (2010).
5. H. M. Wang, Z. Zheng, Y. Y. Wang, J. J. Qiu, Z. B. Guo, Z. X. Shen, and T. Yu, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 023106 (2010).
6. G. Jo, M. Choe, S. Lee, W. Park, Y.H. Kahng, and T. Lee, *Nanotechnology* **23**, 112001 (2012).
7. X. Huang, Z. Zeng, Z. Fan, J. Liu, and H. Zhang, *Adv. Mater.* **24**, 5979 (2012).
8. D. A. Ryndyk, J. Bundesmann, M.-H. Lin, and K. Richter, *Phys. Rev. B* **86**, 195425 (2012).
9. A. M. Ionescu and H. Riel, *Nature* **479**, 329 (2011).
10. M. S. Janga, H. Kimb, Y.-W. Son, H. A. Atwater, and W. A. Goddard, *PNAS* **110**, 8786 (2012).
11. V. H. Nguyen, Y. M. Niquet, and P. Dollfus, *Semicond. Sci. Technol.* **27**, 105018 (2012).
12. P. Michetti, M. Cheli, and G. Iannaccone, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 133508 (2010).
13. Д. А. Свинцов, В. В. Вюрков, В. Ф. Лукичев, А. А. Орликовский, А. Буренков, Р. Охснер, *Физ. и тех. полупр.* **47**, 244 (2012).
14. C. Berthod and T. Giamarchi, *Phys. Rev. B* **84**, 155414 (2011).
15. T. N. Todorov, G. A. D. Briggs, and A. P. Sutton, *J. Phys. Condens. Matter* **5**, 2389 (1993).
16. M. P. Lopez Sancho, J. M. Lopez Sancho, and J. Rubio, *Phys. F: Met. Phys.* **14**, 1205 (1984).
17. M. P. Lopez Sancho, J. M. Lopez Sancho, and J. Rubio, *Phys. F: Met. Phys.* **15**, 851 (1985).
18. E. L. Wolf, *Principles of Electron Tunneling Spectroscopy*, Oxford University Press, New York (1989).
19. W. A. Harrison, *Phys. Rev.* **123**, 85 (1961).
20. V. L. Katkov and V. A. Osipov, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 035204 (2008).
21. V. L. Katkov and V. A. Osipov, *JETP Lett.* **90**, 304 (2009).
22. V. L. Katkov and V. A. Osipov, *Physics of Particles and Nuclei* **41**, 1027 (2010).
23. E. V. Castro, M. P. Lopez-Sancho, and M. A. H. Vozmediano, *New J. Phys.* **11**, 095017 (2009).