

Ионизация примесей постоянным электрическим полем в графене с широкой запрещенной зоной

С.Ю. Глазов^{1,2*}, П.В. Бадикова¹

¹ Волгоградский государственный социально-педагогический университет, пр. им. В.И. Ленина, 27, 400066 Волгоград, Россия

² Волгоградский государственный медицинский университет, пл. Павших борцов, № 1, 400131 Волгоград, Россия

(Получено 15.01.2018; опубликовано online 29.04.2018)

Получено аналитическое выражение для вероятности ионизации примесей в щелевой модификации графена в присутствии постоянного электрического поля в квазиклассическом приближении. Исследована вероятность ионизации примесей от направления вектора напряженности электрического поля. Вероятность ионизации в постоянном электрическом поле обладает слабо выраженной анизотропией, проявляющейся в случае, когда ширина запрещенной зоны графена больше энергии перескока электронов между соседними узлами кристаллической решетки. Проведено сравнение результатов с ранее известными, полученными для спектра, заданного в низкоэнергетическом приближении.

Ключевые слова: Ионизация примесей, Вероятность ионизации, Туннелирование, Щелевая модификация графена.

DOI: 10.21272/jnep.10(2).02020

PACS numbers: 73.40.Gk, 72.80.Vp

1. ВВЕДЕНИЕ

Электрические и оптические свойства полупроводников в значительной мере определяются наличием в них примесей. Особенно актуальной такая ситуация представляется в сильных электрических полях, которые могут приводить к кардинальной модификации примесных состояний и тем самым динамически изменять концентрацию носителей в зоне проводимости.

Квазиклассическая теория ионизации атомов под действием внешних электрических полей построена в работах [1-4]. Основные результаты этих работ были получены с помощью метода «мнимого времени», в котором для описания туннелирования используется классическое уравнение движения, но с чисто мнимым «временем». Во всех перечисленных работах энергетический спектр носителей заряда в рассматриваемых структурах считался квадратичным.

Развитие такого подхода для полупроводниковых структур с неквадратичным энергетическим спектром выполнено в [5-6]. Последующие работы этих авторов также посвящены изучению влияния ионизации примесных центров на различные физические явления в полупроводниковых структурах с узкой зоной проводимости (квантовых сверхрешетках) в условиях воздействия внешних электрических полей.

В последнее время активно изучается графен и структуры на его основе [7-9], интерес к которым обусловлен высокой подвижностью носителей заряда, непараболичностью и неаддитивностью (полная энергия электронов графена не является суммой ее компонент по двум взаимно перпендикулярным направлениям) энергетического спектра. Особенно востребованными для реализации многих электронных устройств являются структуры со щелью в энер-

гетическом спектре образца (щелевые модификации графена). Запрещенная зона может возникать в графене, помещенном на подложку. В монослойном графене на подложке *h*-BN запрещенная зона составляет 53 мэВ [10], на подложке SiC \approx 0.26 эВ [11]. Присутствие примесей и дефектов может сильно повлиять на электрические свойства графена [см 8, 12 и литературу в них], вызвать существенное изменение его энергетического спектра, в частности, привести к появлению запрещенной зоны в энергетическом спектре. Особенно важным является учет примесей вблизи дираковской точки. Например, в примесной структуре на основе графена – гидриде графена (графане) энергетическая щель по разным оценкам составляет 3.5-6.1 эВ [13-15], а в соединении фтора и графена (флюорографане) – 3.0-7.1 эВ [16, 17].

Случайные дефекты, редкие примеси могут приводить к появлению в запрещенной зоне полупроводника примесных уровней, с которых электроны имеют возможность перейти в зону проводимости за счет теплового движения или под воздействием внешних электрических полей. В [18] с помощью метода «мнимого времени» рассчитана вероятность ионизации примесей при воздействии постоянного электрического поля в случае графена на подложке карбида кремния и выполнено исследование влияния ионизации примесных центров на плотность тока в графене под действием постоянного электрического поля. При этом электронный спектр графена был выбран в низкоэнергетическом приближении в виде

$$\varepsilon = \sqrt{\Delta^2 + v_f^2 p^2}, \quad (1)$$

где Δ – полуширина запрещенной зоны графена, $v_f \approx 10^8$ см/с – скорость Ферми.

Спектр (1) используется для исследования элек-

* ser-glazov@yandex.ru

трических свойств графена в большом количестве работ в случае слабого возмущения электронной системы. Вызывает интерес правомерность его использования для расчета вероятности ионизации примеси в щелевой модификации графена квазиклассическим методом, в случае квазиклассически сильных электрических полей.

В данной работе исследуется вероятность ионизации примесей в щелевой модификации графена при воздействии постоянного электрического поля и проводится сравнение с результатами [18], полученными для спектра, заданного в низкоэнергетическом приближении.

2. СРАВНЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ ГРАФЕНА СО ЩЕЛЬЮ

Перед тем, как непосредственно заняться вычислением вероятности ионизации приведем анализ энергетического спектра графена со щелью.

Энергетический спектр носителей заряда в щелевой модификации графена в приближении сильной связи можно описать в виде [19]

$$\varepsilon = \pm \sqrt{\Delta^2 + \gamma^2 [1 + 4 \cos y (\cos x + \cos y)]} \quad (2)$$

где $\gamma \approx 2.7$ эВ – энергия перехода электронов между соседними узлами кристаллической решетки графена, $x = p_x a$, $y = p_y a / \sqrt{3}$, $a = 3b / 2\hbar$, $b = 0.142$ нм – расстояние между соседними атомами углерода в графене, $\vec{p} = (p_x, p_y)$ – вектор квазиимпульса электрона. Разные знаки относятся к зоне проводимости и валентной зоне. Наличие запрещенной зоны в спектре (2) позволяет вести расчеты в однозонном приближении, накладывая ограничения на параметры внешних полей и температуру.

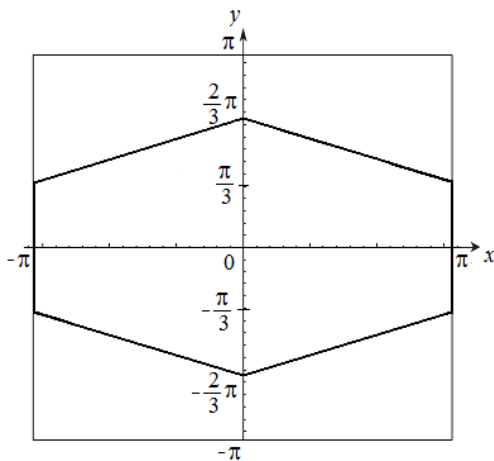


Рис. 1 – Первая зона Бриллюэна графена

Областью определения квазиимпульса \vec{p} , т.е. первой зоной Бриллюэна, является шестиугольник, показанный на рис. 1 для безразмерных компонент квазиимпульса (x, y) .

Отметим, что спектр (1) можно получить, разложив подкоренное выражение в (2) по импульсам в одной из точек Дирака и сдвинув спектр в импульсном пространстве таким образом, чтобы электрон в

точке Дирака имел импульс $(0,0)$. До сдвига в низкоэнергетическом приближении такой спектр будет иметь вид

$$\varepsilon = \sqrt{\Delta^2 + \gamma^2 [(x - x_0)^2 + 3(y - y_0)^2]}, \quad (3)$$

где (x_0, y_0) – одна из точек Дирака: $(0, 2\pi/3)$, $(0, -2\pi/3)$, $(\pi, \pi/3)$, $(\pi, -\pi/3)$, $(-\pi, \pi/3)$, $(-\pi, -\pi/3)$.

На рис. 2 показано сравнение спектров (2) и (3) вблизи одной из точек Дирака. Сплошной линией показан график, соответствующий спектру (2), штриховой – спектру (3). Анализируя сходство между спектрами вблизи точек Дирака, можно определить максимально допустимую величину напряженности электрического поля, для которого физические эффекты, теоретически исследуемые с помощью обоих спектров будут совпадать с достаточной точностью.

Если электроны находятся вблизи дна зоны проводимости, то условие на напряженность постоянного электрического поля имеет вид

$$eE\lambda \ll \varepsilon_e, \quad (4)$$

где λ – средняя длина свободного пробега носителей заряда ($\lambda \approx 10^{-4} - 10^{-5}$ см), ε_e – ширина области совпадения зон проводимости.

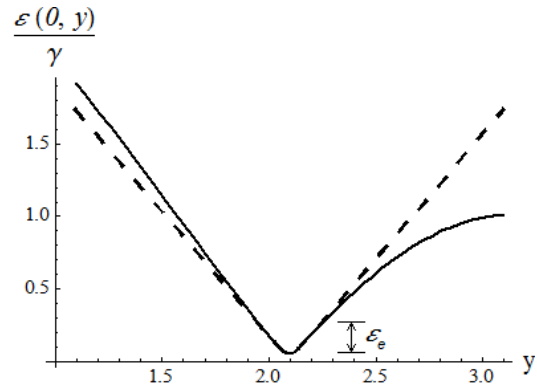


Рис. 2 – Энергетический спектр графена вблизи одной из точек Дирака $(0, 2\pi/3)$, $2\Delta \approx 0.26$ эВ

Использование в расчетах спектра электронов в низкоэнергетическом приближении всегда предполагает ограничения на параметры приложенных электрических полей, но позволяет в большинстве случаев получить аналитический результат.

Далее будем интересоваться вероятностью ионизации примесей в щелевой модификации графена, энергетический спектр которого имеет вид (2).

3. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Для случая туннелирования электрона с примесного уровня в зону проводимости применим так называемый квазиклассический метод [1, 2]. 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

$$W = \exp\left(-\frac{2\text{Im}(S)}{\hbar}\right), \quad (5)$$

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

$$S = \int_0^{t_0} [\varepsilon(p(t)) - V] dt, \quad (6)$$

где $p(t)$ – импульс электрона, определяемый из классического уравнения движения, V – энергия залегания примеси. Предполагаем, что примеси находятся в графене на определенной глубине ν . На рис. 3. уровень энергии примеси обозначен штриховой линией. Начало отсчёта энергии выбираем посередине запрещённой зоны.

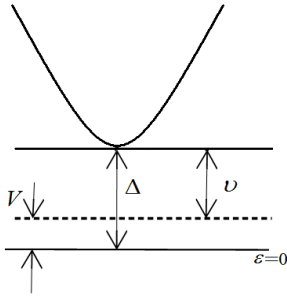


Рис. 3 – Энергетическая диаграмма примеси

Критерием применимости квазиклассического метода является условие

$$\text{Im}(S) \gg \hbar. \quad (7)$$

Момент начала туннелирования t_0 находится из условия минимума мнимой части действия

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

что соответствует условию

$$\varepsilon(t_0) = V. \quad (8)$$

Используя метод мнимого времени можно рассчитать квазиклассически вероятность туннельного перехода электронов с примеси в зону проводимости под влиянием постоянного поля напряженностью \vec{E} .

Рассмотрим сначала один из частных случаев, когда вектор напряженности электрического поля направлен вдоль оси x .

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

$$\text{Im} S = \frac{\gamma}{\alpha} \left\{ 2\tilde{\Delta} \left[-E(\text{arctg}(\xi); 1-k) + F(\text{arctg}(\xi); 1-k) + \xi \sqrt{\frac{1+k\xi^2}{1+\xi^2}} \right] + (\tilde{\nu} - \tilde{\Delta})\beta \right\}, \quad (11)$$

где $F(x;k) = \int_0^x \frac{dx}{\sqrt{1-k\sin^2(x)}}$ – эллиптический интеграл I рода, $\xi = sh(\beta/2)$.

Формула (11) определяет зависимость мнимой части действия от параметров щелевой модифика-

ции графена, примесного центра и вектора напряженности постоянного электрического поля, ориен-

$$\frac{d p_x}{d t} = e E_x, \quad \frac{d p_y}{d t} = 0,$$

с граничным условием

$$p_x(0) = p_{0x}, \quad p_y(0) = p_{0y} \quad (9)$$

что соответствует попаданию электрона в зону проводимости в состояние с минимальной энергией, в одну из точек Дирака (p_{0x}, p_{0y}).

Решая уравнение (8) найдем момент начала туннелирования

$$t_0 = i \frac{\beta}{\alpha},$$

$$\text{где } \beta = \text{arcsch} \sqrt{\left(\frac{(\tilde{\Delta} - \tilde{\nu})^2 - \tilde{\Delta}^2 - 1 - 4 \cos^2 y_0}{4 \cos y_0} \right)^2 - 1},$$

$\alpha = 3beE/2\hbar$, $\tilde{\Delta} = \Delta/\gamma$, $\tilde{\nu} = \nu/\gamma$. Учитывая, что для любой точки Дирака $\cos^2 y_0 = 1/4$, выражение для β примет вид

$$\beta = \text{arcsch} \sqrt{\tilde{\nu}(2\tilde{\Delta} - \tilde{\nu}) \left[\frac{\tilde{\nu}}{4} (2\tilde{\Delta} - \tilde{\nu}) + 1 \right]}.$$

По формуле (6) проведен расчет классического действия, набираемого частицей при подбарьерном движении с момента времени начала туннелирования t_0 до момента выхода частицы из под барьера при $t = 0$. Промежуточный результат имеет вид

$$S = \frac{\gamma}{\alpha} \left\{ 2\sqrt{\tilde{\Delta}^2 + (\cos x_0 + 2 \cos y_0)^2} E\left(i \frac{\beta}{2}; k\right) + i(\tilde{\nu} - \tilde{\Delta})\beta \right\}, \quad (10)$$

где $k = 8 \cos x_0 \cos y_0 / (\tilde{\Delta}^2 + (\cos x_0 + 2 \cos y_0)^2)$,

$$E(x;k) = \int_0^x \sqrt{1 - k \sin^2(x)} dx - \text{эллиптический интеграл}$$

II рода. Отметим, что формально действие в (10) зависит от граничных условий (9), т.е. от того, в какую точку Дирака совершается переход. Однако, учитывая то, что для любой точки Дирака $\cos x_0 + 2 \cos y_0 = 0$ и $\cos x_0 \cos y_0 = -1/2$, выражение для S примет окончательный вид

$$S = \frac{\gamma}{\alpha} \left\{ 2\tilde{\Delta} E\left(i \frac{\beta}{2}; k\right) + i(\tilde{\nu} - \tilde{\Delta})\beta \right\},$$

где $k = -4/\tilde{\Delta}^2$.

После выделения мнимой части действия, используя [20], получаем

тированного вдоль оси x . Мнимая часть действия имеет характерную зависимость от напряженности постоянного электрического поля $\text{Im}S \sim 1/E$.

В случае, когда вектор напряженности электрического поля направлен вдоль оси y , аналитическое выражение для действия представляется через гипергеометрические функции и ввиду громоздкости его не приводим. Дальнейший анализ формул для мнимой части действия проводился численно.

Как в случае ориентации вектора напряженности электрического поля вдоль оси x , так и вдоль оси y мнимые части действия, а, следовательно, и вероятности ионизации примесей (5) не зависят от того, в какую точку Дирака совершается переход.

Выполнено исследование зависимости мнимой части действия от глубины залегания примеси и от ширины запрещенной зоны. Сравнение мнимой части действия для ориентации напряженности электрического поля вдоль осей x и y выявило хорошее совпадение для значений полуширины запрещенной зоны, определяемых неравенством $\Delta \leq \gamma$. С ростом Δ различие увеличивается, причем мнимая часть действия для ориентации вектора напряженности электрического поля \vec{E} вдоль оси x больше чем при направлении \vec{E} вдоль оси y .

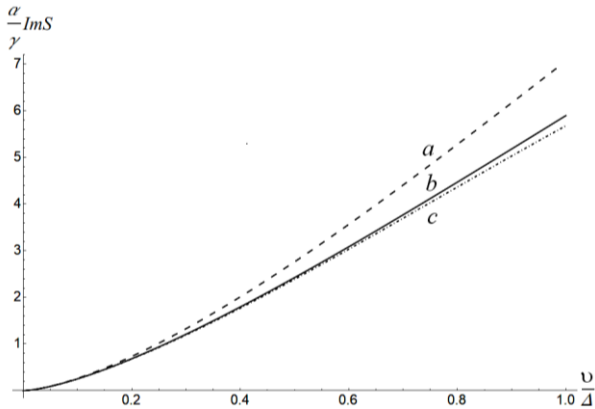


Рис. 4 – Зависимость мнимой части действия от глубины залегания примеси ν в безразмерных единицах, а) низкоэнергетическом приближении б) направление \vec{E} вдоль оси x ; в) направление \vec{E} вдоль оси y

На рис. 4 приведена зависимость мнимой части действия от глубины залегания примеси ν для разной ориентации вектора напряженности электрического поля (кривые b и c) для случая $\Delta = 3\gamma$. При увеличении глубины залегания примеси, как и следовало ожидать, мнимая часть действия возрастает, при этом вероятность ионизации уменьшается.

На рис. 5 представлена зависимость мнимой части действия от ширины запрещенной зоны Δ для фиксированного значения глубины залегания примеси $\nu \approx \gamma$. При увеличении глубины залегания примеси анизотропия вероятности ионизации становится все более заметнее.

Выполнено исследование зависимости мнимой части действия от ширины запрещенной зоны для разной ориентации вектора напряженности электрического поля для глубокой примеси $\nu \approx \Delta$. В этом

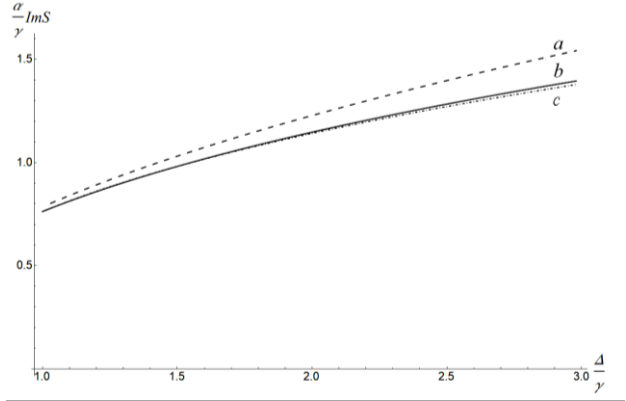


Рис. 5 – Зависимость мнимой части действия от ширины запрещенной зоны Δ в безразмерных единицах, а) низкоэнергетическом приближении б) направление \vec{E} вдоль оси x ; в) направление \vec{E} вдоль оси y

случае увеличение ширины запрещенной зоны связано с увеличением глубины залегания примеси, что приводит к уменьшению вероятности ионизации. Характер зависимости совпадает с $\text{Im}S(\nu)$, представленной на рис. 4 (кривые b и c). Для заданного значения ширины запрещенной зоны по этим данным можно определить значение мнимой части действия (вероятности ионизации), что позволяет указать предельное значение напряженности электрического поля, удовлетворяющего условию квазиклассического приближения (7). Так, для графена на подложке SiC ($2\Delta \approx 0.26$ эВ) $E \ll 8 \cdot 10^2$ ед. СГСЭ, для графана ($2\Delta \approx 5.4$ эВ) $E \ll 3 \cdot 10^5$ ед. СГСЭ.

4. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для спектра (1) в [18] получено выражение для действия

$$\text{Im}S = \frac{\gamma}{2\alpha} \left(\tilde{\Delta}^2 \arctg \frac{\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - (\tilde{\Delta} - \tilde{\nu})^2}}{\tilde{\Delta} - \tilde{\nu}} - (\tilde{\Delta} - \tilde{\nu}) \sqrt{\tilde{\Delta}^2 - (\tilde{\Delta} - \tilde{\nu})^2} \right). \quad (12)$$

Как видно из формул (11) и (12) зависимость мнимой части действия и, следовательно, вероятности ионизации примесей от постоянного электрического поля (параметр α), для обоих спектров, совпадают. Графический анализ показал хорошее совпадение зависимости мнимой части действия от глубины залегания примеси ν , рассчитанной по формулам (11) и (12) в области $\Delta \ll \gamma$ (на рис. 4 кривая a и b, c).

В случае глубокой примеси $\nu \approx \Delta$ выражение (12) примет вид

$$\text{Im}S = \frac{\pi\gamma}{4\alpha} \tilde{\Delta}^2. \quad (13)$$

В случае $\nu \approx \Delta \ll \gamma$ из (13) и (7) имеем простое выражение для предельного значения напряженности электрического поля

$$E \ll \frac{\Delta^2}{2b\gamma e}. \quad (14)$$

По сравнению с (14) условие (4) предъявляет более жесткие требования к величине напряженности

постоянного электрического поля. Так, для графена на подложке SiC при расхождении спектров на 10 % $E \ll 2 \cdot 10^2$ ед. СГСЭ при $\lambda \approx 10^{-5}$ см. Это ограничение на величину напряженности постоянного электрического поля следует учитывать при расчете плотности тока с использованием низкоэнергетического приближения для энергии носителей заряда.

Таким образом, для расчета вероятности ионизации примесей для щелевой модификации графена с полушириной запрещенной зоны $\Delta \ll \gamma$, можно пользоваться формулой (12). В противном случае нужно учитывать, что она дает заниженное значение вероятности ионизации и для точного расчета пользоваться формулой (11).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении сформулируем основные выводы из данной работы:

1. Получено выражение для вероятности ионизации примесей в квазиклассическом приближении в щелевой модификации графена при воздействии постоянного электрического поля без использования низкоэнергетического приближения для энергии носителей заряда.

2. Исследована вероятность ионизации примесей от направления вектора напряженности электрического поля. Показано, что вероятность ионизации в постоянном электрическом поле обладает слабо выраженной анизотропией, проявляющейся в случае, когда ширина запрещенной зоны графена больше энергии перескока электронов между соседними узлами кристаллической решетки.

3. Выполнено сравнение результатов данной работы с ранее известными, полученными для спектра, заданного в низкоэнергетическом приближении. Вероятности ионизации примесей для обоих спектров совпадают, когда интеграл перескока электронов между соседними узлами кристаллической решетки много больше ширины запрещенной зоны графена.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках проектной части государственного задания, код проекта: 3.2797.2017/4.6.

Ionization of Impurities by a Constant Electric Field in Graphene with a Wide Forbidden Band

S.Yu. Glazov^{1,2}, P.V. Badikova¹

¹ *Volgograd State Social Pedagogical University, 27, Lenin Prosp., 400066 Volgograd, Russia*

² *Volgograd State Medical University, 1, Pavshikh Bortsov Sq., 400131 Volgograd, Russia*

An analytical expression for the probability of ionization of impurities in the gap modification of graphene in the presence of a constant electric field in the semiclassical approximation is received. The probability of ionization of impurities from the direction of the electric field strength vector is investigated. The probability of ionization in a constant electric field has a weakly pronounced anisotropy, manifested in the case when the width of the forbidden graphene band is greater than the energy of electron hopping between neighboring lattice sites. The results are compared with those previously known for the spectrum given in the low-energy approximation.

Keywords: Ionization of impurities, Ionization probability, Tunneling, Gap graphene modification.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.С. Попов, В.П. Кузнецов, А.М. Переломов, *ЖЭТФ* **53**, 331 (1967).
2. А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (Москва: Наука. 1989).
3. В.С. Попов, Б.М. Карнаков, В.Д. Мур, *ЖЭТФ* **113**, В.5. 1579 (1998).
4. Б.М. Карнаков, В.Д. Мур, С.В. Попруженко, В.С. Попов, *УФН* **185**, 3 (2015).
5. С.В. Крючков, Г.А. Сыродоев, *ФТП* **22** No 9, 1695 (1988).
6. С.В. Крючков, Г.А. Сыродоев, Изв. ВУЗов СССР. *Радиофизика* **6**, 762-764 (1990).
7. A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
8. M.I. Katsnelson, *Graphene: carbone in two dimensions*. (Cambridge: Cambridge University Press. 2012).
9. S. Das Sarma, S.S. Adam, E.H. Hwang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, No 2, 407 (2011).
10. G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, *Phys. Rev. B.* **76**, 073103 (2007).
11. S.Y. Zhou, G.-H. Gweon, A.V. Fedorov, *Nat. Mater.* **6**, No 10, 770 (2007).
12. С.Ю. Давыдов, *Теория адсорбции: метод модельных гамильтонианов* (СПб.: СПбГЭТУ «ЛЭТИ». 2013).
13. J.O. Sofo, A.S. Chaudhari, G.D. Barber, *Phys. Rev. B* **75**, 153401 (2007).
14. D.S. Elias, R.R. Nair, T.M.G. Mohiuddin, *Science* **323**, 610 (2009).
15. F. Karlický, R. Zbořil, M. Otyepka, *J. Chem. Phys.* **137**, 034709 (2012).
16. R.R. Nair, W. Ren, R. Jalil, *Small* **6**, 2877 (2010).
17. H. Sahin, M. Topsakal, and S. Ciraci, *Phys. Rev. B* **83**, 115432 (2011).
18. Т.А. Носаева, Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. Ростов-на-Дону, 2014. <https://dlib.rsl.ru/01005546821>.
19. P.V. Badikova, S.Yu. Glazov, *Bull. Rus. Acad. Sci. Phys.* **79**, No 12, 1443-1447 (2015).
20. *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица, И. Стигана. (Москва: Наука. 1979).