

ЭЛЕКТРОТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ОДНОСЛОЙНОГО ГЕРМАНЕНА В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Судоргин С.А.

Волгоградский государственный аграрный университет
пр. Университетский, д. 26, г. Волгоград, 400002, РФ; e-mail: sergsud@mail.ru
Поступила в редакцию: 23.07.2021

Аннотация. В работе выполнено исследование электротранспортных характеристик однослойного германена во внешнем постоянном электрическом поле. Малая запрещенная щель германена поддается управлению электрическим полем, адсорбцией различных атомов, деформацией и взаимодействием с подложкой. Используя метод квазиклассического приближения получено аналитическое соотношение для удельной проводимости однослойного германена. Эволюция электронной системы германеновых листов описывалась с помощью кинетического уравнения Больцмана в рамках квазиклассического приближения времени релаксации. В качестве геометрической модели германеновой наноленты выбирался двумерный гексагональный слой. Математическая модель электронного строения недеформированных германеновых нанолент строится на основе их геометрического строения и зонной структуры гексагонального слоя. Используется зонная структура нанолент в рамках метода сильной связи в приближениях Хюккеля и ближайших соседей. Исследованы зависимости удельной проводимости германеновых слоев различной хиральности от величины напряженности внешнего электрического поля.

Ключевые слова: германен, электронный транспорт, электропроводность, наноструктуры, квазиклассическое приближение.

Современная физика и материаловедение в настоящее время активно занимаются синтезом и исследованием новых наноматериалов на основе углерода (графен, графеновые наноленты), обладающих уникальными электрофизическими, транспортными, оптоэлектронными, механическими свойствами, что может расширить спектр их практического использования [1,2].

Электрофизические свойства однослойных углеродных нанолент меняются в зависимости от природы и концентрации примесей, приложенных внешних электрических и магнитных полей, механических воздействий, деформаций различного типа (сдвига, растяжения, сжатия, изгиба и кручения и т.д.) До недавнего времени графен являлся одним из основных кандидатов для элементов наноэлектроники будущего. Вместо кремния он может быть использован в качестве основы для транзисторов, кантилевера для атомно-силового микроскопа, химических сенсоров и др.

Но графеновые структуры в плане практического применения не лишены ряда недостатков, например, практически полного отсутствия запрещенной энергетической зоны, что не дает возможности закрытия канала полевого транзистора на его основе [3]. Одним из приоритетных решений этой проблемы является поиск новых неуглеродных эффективных квазидвумерных материалов, имеющих структуру, аналогичную графену, но при этом обладающих запрещенной энергетической зоной.

Германен является новым материалом, состоящим из одного слоя атомов германия. Двумерная кристаллическая структура германена аналогична графену [4]. Теоретическая возможность существования германеновой структуры обсуждалась с середины 1990-х годов [5], и её устойчивость была предсказана в работе 2009 года [6], согласно которой германен представляет собой изогнутые слои. В 2013 г. путем компьютерного моделирования материалов со свойствами, подобными графену и со схожей двумерной структурой были выявлены 92 таких претендента [7]. Более сорока из них ранее никогда не предлагались в качестве графенового аналога, и их свойства, в том числе и проводящие, остаются малоизученной областью. Несмотря на такое обилие кандидатов, перспективных с точки зрения основы наноэлектронных устройств, их использование сильно ограничивает возможность синтеза и взаимодействия с подложкой. Поэтому актуальной задачей первого этапа работы будет поиск среди наноматериалов «семейства графена», реально синтезированных, и изучение их электротранспортных свойств. Также было показано, что носители заряда в германене описываются уравнением Дирака для безмассовых фермионов: закон дисперсии вблизи дираковских точек линейен и ширина запрещенной зоны равна нулю. С точки зрения электропроводности германен является полуметаллом.

Запрещенная энергетическая зона германена и его электронные свойства чувствительны к внешним полям, механическим деформациям и химической адсорбции. [8]. Запрещенная щель в германене составляет приблизительно 24 мэВ. Данное значение существенно превосходит аналогичные для графена (приблизительно 0.05 мэВ), что делает германеновые структуры идеальным кандидатом для изучения квантовых эффектов при технически достижимых температурах. Возрастание ширины запрещенной энергетической зоны создает возможности использования германена в устройствах, работа которых основана на полевых эффектах, таких как транзисторы. Этого можно добиться как приложением внешних воздействий [9], так и целенаправленным допированием наноматериала акцепторными и донорными примесями различных концентраций.

Экспериментально германен впервые получен в 2014 году двумя двумя независимо работавшими научными

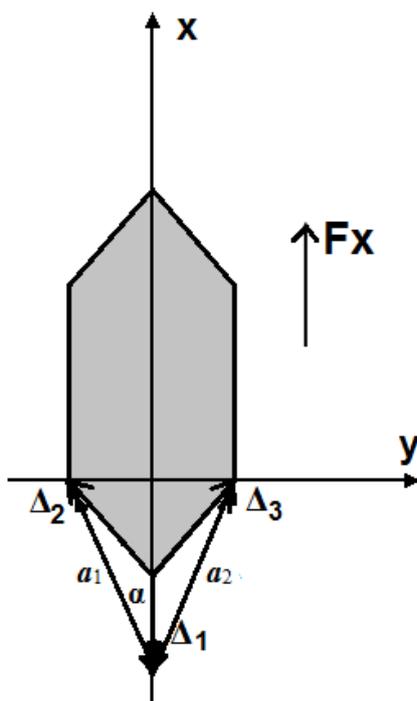


Рисунок 1. Фрагмент структуры германеновой наноленты, с выбранной системой координат, $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$ – вектора расстояний между ближайшими атомами, a_1, a_2 – вектора основных трансляций, α – угол между векторами трансляций

группами: европейской и китайской. Процесс его получения схож с процессом получением силицена и графена: для осаждения слоя германия на инертную подложку-основу используется глубокий вакуум и высокая температура. Европейская группа в качестве подложки использовала золото, а китайская - платину.

Выполнено исследование электротранспортных характеристик однослойного германена во внешнем постоянном электрическом поле. Малая запрещенная щель германена поддается управлению электрическим полем, адсорбцией различных атомов, деформацией и взаимодействием с подложкой [3]. Германен обладает большими потенциальными возможностями применения в солнечных элементах.

В качестве геометрической модели германеновой наноленты выбирался двумерный гексагональный слой. Фрагмент кристаллической структуры изображен на рисунке 1, на котором обозначены угол α между векторами основных трансляций a_1 и a_2 и вектора межатомных расстояний Δ_i , $a_1 = a_2 = a$ – постоянная решетки деформированной германеновой наноленты. Система координат выбрана таким образом, что вдоль оси OX отмеряется длина ленты, а ось OY направлена вдоль ширины ленты.

Математическая модель электронного строения недеформированных германеновых нанолент строится на основе их геометрического строения и зонной структуры гексагонального слоя. Используется зонная структура нанолент в рамках метода сильной связи в приближениях Хюккеля и ближайших соседей [7]:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) &= \pm \gamma_0 \left\{ 3 + 2\cos(\mathbf{k}a_1) + 2\cos(\mathbf{k}a_2) + 2\cos(\mathbf{k}(a_1 - a_2)) \right\}^{1/2} = \\ &= \pm \gamma_0 \left\{ 1 + 4\cos\left(\frac{\mathbf{k}(a_1 + a_2)}{2}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{k}(a_1 - a_2)}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{\mathbf{k}(a_1 - a_2)}{2}\right) \right\}^{1/2} \end{aligned} \quad (1)$$

где γ_0 – прыжковый интеграл, матричный элемент перехода электрона между соседними атомами, \mathbf{k} – волновой вектор, одна из компонент которого квантуется вдоль ширины ленты. Уровень Ферми в законе дисперсии (1) принимается равным 0 эВ.

Если длину германеновой наноленты выбрать вдоль направления вектора $(a_1 + a_2)$, то получится энергетический спектр наноленты типа «arm-chair», а если вдоль вектора $(a_1 - a_2)$, то спектр наноленты типа «zig-zag».

Условие квантования волнового вектора \mathbf{k} в направлении, поперечном длине германеновой наноленты, можно записать следующим образом [9]:

$$3k_x R_0 = \frac{2\pi q}{N_x}, \quad q=1,2,\dots,N_x, \quad (2)$$

для германеновых нанолент кресельного («arm-chair») типа,

$$\sqrt{3}k_y R_0 = \frac{2\pi q}{N_y}, \quad q=1,2,\dots,N_y, \quad (3)$$

для нанолент зигзагообразного («zig-zag») типа. Где R_0 – равновесное межатомное расстояние в

недеформированной GeNR, волновые числа k_x и $k_y \in$ зоне Бриллюэна.

В результате выражение (1) и соотношения (2), (3) полностью определяют энергетический спектр электронов недеформированных германеновых нанолент.

Для моделирования электротранспортных свойств однослойных германеновых нанолент используется кинетическое уравнение Больцмана. В рамках квазиклассического приближения функция распределения электронов $f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ находится из кинетического уравнения Больцмана. Интеграл столкновений выбираем в виде, используемом в τ -приближении. Можно считать, что время релаксации $\tau = const$, т.к. экспериментально установлено, что в наноструктурах уже при температурах порядка 40 К время релаксации постоянно и не зависит от температуры.

Запишем кинетическое уравнение Больцмана в τ -приближении в виде [10]

$$\frac{\partial f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\partial t} + \mathbf{F} \frac{\partial f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{p}} = \frac{f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r}) - f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau}, \quad (4)$$

Постоянная сила \mathbf{F} , действующая на частицу, может быть выражена с помощью закона динамики:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E}.$$

В рамках квазиклассического метода получено аналитическое соотношение для плотности тока:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = e \sum_{\mathbf{p}, s} \mathbf{v}_s(\mathbf{p}) f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r}). \quad (5)$$

Так как в стационарном случае отсутствуют источники зарядов, т.е. $\text{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$, то в стационарном приближении решение уравнения (4) имеет вид

$$f_s^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \hat{L}_p^{-1} \left(\frac{f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau} \right). \quad (6)$$

Обратный оператор определяется следующим правилом

$$\hat{L}_{\pm p}^{-1} \psi(\mathbf{p}) = \int_0^{\infty} \psi(\mathbf{p} \mp \mathbf{p}(t)) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) dt, \quad (7)$$

где $\mathbf{p}(t)$ – решение уравнения движения $d\mathbf{p}/dt = \mathbf{F}$, с начальным условием $\mathbf{p}(0) = 0$, \mathbf{F} – действующая на частицу постоянная сила, в данном случае электростатическая $\mathbf{F} = e\mathbf{E}$.

Чтобы не нарушить условие нормировки и корректно осуществить итерационную процедуру отыскания функции распределения $f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ в виде ряда по степеням величины $\nabla_x n(\mathbf{r})$, в правую часть уравнения (4) добавляем равное нулю слагаемое $f_s^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \text{div} \mathbf{j} / en$. Такой прием использовался в работах по исследованию неравновесных флуктуаций в электронном газе с синусоидальным и параболическим законом дисперсии [11]. После добавления слагаемого уравнение (3) запишется в виде

$$\hat{L}_p f_s = \frac{f_{0s}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau} - \text{div}(f_s v_s) + f_s^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \text{div} \mathbf{j} / en.$$

Получено аналитическое соотношение для продольной компоненту плотности тока $j = j_x$:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sigma(\mathbf{E})\mathbf{E} + D(\mathbf{E}) \frac{\nabla_x n}{n} \quad (8)$$

Для случая однородного распределения температуры $T(r) = const$ в линейном приближении по величине градиента концентрации электронов $\nabla_x n$ можно получить выражения для транспортных коэффициентов однослойных германеновых нанолент: удельной электропроводности и коэффициента диффузии электронов.

Удельная электропроводность германеновых нанолент задается следующим аналитическим соотношением:

$$\sigma(E) = \sum_s \int_{-\pi}^{\pi} \sum_m A_{ms} m f_{0s}(p_x, x) \frac{E}{E^2 m^2 + 1} [\sin(m p_x) + E m \cos(m p_x)] dp_x \quad (9)$$

На основе полученной зависимости построены графики зависимости электропроводности от напряженности внешнего электрического поля.

На рисунке 2 представлены зависимости удельной электропроводности однослойных германеновых нанолент от напряженности внешнего электрического поля для трех типов лент (12,0), (17,0) и (20,0). Полученные зависимости говорят о том, что с увеличением ширины германеновой ленты удельная электропроводность возрастает. Зависимость проводимости от напряженности электрического поля нелинейная, что также связано с периодическим и ограниченным законом дисперсии германена.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Волгоградской области в рамках научного проекта № 19-42-343001.

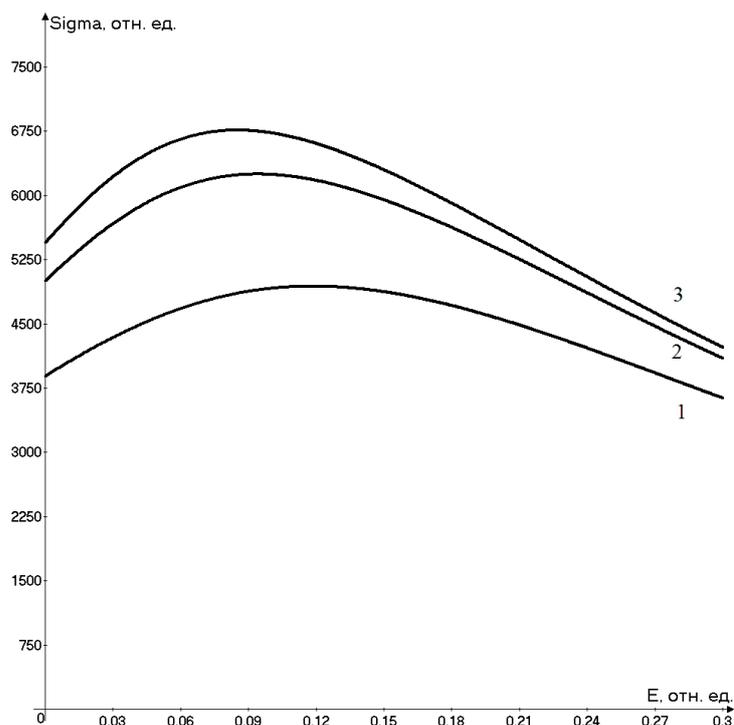


Рисунок 2. Зависимости удельной электропроводности однослойных германеновых нанолент от напряженности внешнего электрического поля для лент: 1 – для лент типа (12,0), 2 – для лент типа (17,0), 3 – для лент типа (20,0)

Список литературы / References:

1. Лозовик Ю.Е., Меркулова С.П., Соколик А.А. Коллективные электронные явления в графене. *Успехи физических наук*, 2008, т. 178, № 7, с. 758-776. [Lozovik Yu.E., Merkulova S.P., Sokolik A.A., Collective electron phenomena in graphene. *Phys. Usp.*, 2008, vol. 51, no. 7, 727-744. (In Russ.)]
2. Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Артюх А.А. Новые наноструктуры на основе графена: физико-химические свойства и приложения. *Успехи химии*, 2014, т. 83, вып. 3, с. 251-279. [Chernozatonskii L.A., Sorokin P.B., Artukh A.A. New nanostructures based on graphene: physical and chemical properties and applications. *Russ. Chem. Rev.*, 2014, vol. 83, pp. 251-279. (In Russ.)]
3. Lemme M.C. Current status of graphene transistors. *Solid State Phenomena*, 2009, vol. 156, pp. 499.
4. Davila M.E, Xian L., Cahangirov S., Rubio A., Le Lay G. Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene. *New Journal of Physics*, 2014, vol. 16, no. 9 p. 095002. doi: 10.1088/1367-2630/16/9/095002
5. Kyozauro T., Kenji S. Theoretical possibility of stage corrugation in Si and Ge analogs of graphite. *Physical Review B*, 1994, vol. 50, no. 20, pp. 14916-14922. DOI: 10.1103/PhysRevB.50.14916
6. Cahangirov S., Topsakal M., Aktürk E., Şahin H., Ciraci S. Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium. *Physical Review Letters*, 2009, vol. 102, no. 23, p. 236804. doi: 10.1103/PhysRevLett.102.236804
7. Lebe`gue S., Bjoerkman T., Klintonberg M., Nieminen R.M., Eriksson O. Two-Dimensional Materials from Data Filtering and Ab Initio Calculations. *Physical Review X*, 2013, vol. 3, p. 031002.
8. Mortazavi B., Rahaman O., Makaremi M., Dianat A., Cunibert G., Rabczuk T. First-principles investigation of mechanical properties of silicene, germanene and stanine. *Physica E*, 2017, vol. 87, pp. 228-232.
9. Kazemlou V. Phirouznia A. Influence of compression strains on photon absorption of silicene and germanene. *Superlattices and Microstructures*, 2019, vol. 128, pp. 23-29.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Физическая кинетика*. Физ.-мат. лит., 1979, 528 с. [Landau L.D., Lifshits E.M. *Physical kinetics*. Phys.-mat. lit., 1979, 528 p. (In Russ.)]
11. Дыкман И.М., Томчук П.М. *Явления переноса и флуктуации в полупроводниках*. Наук. думка, Киев, 1981, 320 с. [Dykman I.M., Tomchuk P.M. *Transport phenomena and fluctuations in semiconductors*. Science. dumka, Kiev, 1981, 320 p. (In Russ.)]

ELECTRIC TRANSPORT PROPERTIES OF SINGLE-LAYER GERMANENE IN THE SEMICLASSICAL APPROXIMATION**Sudorgin S.A.**

Volgograd State Agricultural University

Universitetsky ave., 26, Volgograd, 400002, Russia; e-mail: sergsud@mail.ru

Abstract. This article is devoted to the study of electrical transport characteristics of single-layer germanene in an external constant electric field. The small forbidden gap of germanene can be controlled by the electric field, adsorption of various atoms, deformation, and interaction with the substrate. Using the method of the semiclassical approximation, an analytical relation is obtained for the specific conductivity of single-layer germanene. The evolution of the electron system of germanene sheets was described using the kinetic Boltzmann equation in the framework of the semiclassical relaxation time approximation. A two-dimensional hexagonal layer was chosen as a geometric model of a germanene nanoribbon. The mathematical model of the electronic structure of undeformed germanene nanoribbons is based on their geometric structure and the band structure of the hexagonal layer. The band structure of nanoribbons is used within the framework of the tight binding method in the Hückel and nearest neighbors approximations. The dependences of the specific conductivity of germanene layers of different chirality on the strength of the external electric field are investigated.

Key words: *germanene, electron transport, electrical conductivity, nanostructures, semiclassical approximation.*