ГОСУДАРСТВЕННОЕ НАУЧНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«ИНСТИТУТ ФИЗИКИ им. Б.И. СТЕПАНОВА
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

На правах рукописи
УДК 539.23; 539.216.1; 538.916

СОРОКО
Василий Аркадьевич

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ ГРАФЕНОВЫХ СТРУКТУР И ПРОФИЛИРОВАННЫХ ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Минск, 2018

Научная работа выполнена в Белорусском государственном университете

Научный руководитель: **Батраков Константин Германович**, кандидат физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник НИУ "Институт ядерных проблем" Белорусского государственного университета.

Официальные оппоненты: **Могилевцев Дмитрий Сергеевич,** доктор физико-математических наук, член-корреспондент НАН Беларуси, заместитель заведующего Центра квантовой оптики и квантовой информатики (ЦКОКИ) ГНУ "Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси";

Петров Александр Владимирович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела криогенных исследований ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению».

Оппонирующая организация: Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники.

Защита состоится **19 октября** 2018 г. в **16.30** на заседании совета по защите диссертаций Д 01.05.02 при Институте физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси по адресу: 220072, г. Минск, пр.Независимости, 68.
Телефон, e-mail ученого секретаря: +375 17 284-15-59, vyblyi@gmail.com

С диссертацией можно ознакомиться в Центральной научной библиотеке им. Я. Коласа Национальной академии наук Беларуси.

Автореферат разослан "____" _____ 2018 г.

Ученый секретарь совета
по защите диссертаций,
кандидат физико-математических наук Ю.П. Выблый

ВВЕДЕНИЕ

Современное экспериментальное оборудование и методы позволяют свободно манипулировать нанообъектами и изучать их свойства – это открывает перспективы для развития имеющихся и создания принципиально новых технических устройств.

Среди огромного разнообразия наноструктур особое место занимают наноструктуры на основе углерода: фуллерены, нанотрубки, графен и графеновые наноленты. Нанотрубки изучаются более 20 лет с момента публикации в 1991 году работы Ииджимы. Активный научный интерес к этим структурам связан с разработкой масштабируемых методов контролируемого синтеза углеродных нанотрубок и их упорядоченных массивов. Другим перспективным углеродным материалом является графен. Этот двумерный кристалл, состоящий из монослоя атомов углерода, уложенных в гексагональную решетку, был получен в свободном состоянии группой А. Гейма и К. Новоселова в Манчестерском университете Великобритании. Первые образцы графена были получены методом микромеханического расщепления графита, для чего использовался обычный скотч. На данный момент появились методики синтеза графеновых пленок большой площади, с содержанием монослоя графена порядка 95 %. Графен является отличным материалом для многочисленных приложений, начиная от химических сенсоров и заканчивая электроникой. Следует заметить, что, как двумерный материал, графен представляет собой *мембрану*. Такие объекты не используются в современной электронике. Нетрудно представить, что графен может служить подложкой гибкой оптоэлектронной схемы, состоящей из одномерных объектов – графеновых нанолент. Графеновые наноленты представляют собой полосы графенового листа нанометровой ширины. К настоящему моменту было предложено много способов их синтеза: электронная нанолитография, травление исходного листа графена, метод продольного разрезания и разворота многослойных углеродных нанотрубок. Особо стоит отметить методы, основанные на полимеризации молекулярных прекурсоров на металлической поверхности или в растворе. Используя методы самосборки молекулярных прекурсоров, можно получать идеальные края с *атомарной точностью*, а также сверхрешеточные структуры шевронного типа.

Вышеописанные низкоразмерные углеродные наноструктуры являются перспективными материалами для терагерцовой технологии, а также терагерцовой и инфракрасной нанофотоники. Терагерцовая частотная область уникальна, так как многие коллективные возбуждения в физике твердого тела, такие как плазмоны, магноны и т.д., имеют характерные частоты, лежащие в этой области. Кроме этого, характерные времена релаксации, рассе-

яния и туннелирования в твердых телах также соответствуют терагерцовым частотам. Взаимодействие вещества с излучением данной частоты является нетривиальным, в связи с чем работающих в данном диапазоне частот приборов сравнительно мало. Для наглядного описания этой проблемы существует специальный термин – «терагерцовая яма», который указывает на отсутствие эффективных источников и детекторов терагерцового излучения. В большинстве случаев используются многоступенчатые системы преобразования мощных СВЧ сигналов или лазерных импульсов. Недостатками таких методов получения излучения являются ограничения по уровню мощности, продолжительности импульса, его когерентности, кроме того есть проблемы с перестройкой частоты. Попытки преодолеть эти недостатки, как правило, приводят к тому, что устройства получаются довольно громоздкими. Таким образом, существует проблема источников и детекторов терагерцового излучения (миллиметрового диапазона) для приложений в электронных и фотонных цепях в области беспроводной коммуникации. Решение этой проблемы на данный момент часто связывается с углеродными наноструктурами. Привлекательной является идея реализации таких устройств на плоских структурах, которые более технологичны, ввиду их совместимости с планарной технологией, развитой за последние 60 лет в полупроводниковой электронике. Целью диссертационной работы является теоретическое исследование свойств планарных углеродных структур, перспективных для генерации терагерцового (и инфракрасного) излучения. Так как оптические и электрические свойства материалов находятся в прямой корреляции с их электронными свойствами, которые в случае наноразмерных объектов определяются не только их составом, но и геометрией, должное внимание будет уделено исследованию взаимосвязи структуры планарного объекта с его электронными свойствами. В частности, подробно будет исследовано влияние структуры края графеновых нанолент на их электронные свойства и методы управления этими свойствами посредством внешних полей, а также будет изучено взаимодействие двумерных планарных систем с электромагнитным излучением.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с научными программами (проектами) и темами

Исследования, результаты которых вошли в диссертацию, проводились в Научно–исследовательском учреждении “Институт ядерных проблем” Белорусского государственного университета в рамках следующих НИР: «Активные и пассивные элементы высокочастотных электрических цепей на основе различных форм наноуглерода» (ном. гос. рег. 20120027, сроки выполнения 2011-2015, ГКПНИ «Электроника и фотоника», задание 2.1.11.3); «Физиче-

ские принципы создания источников излучения с перестраиваемой длиной волны на основе графена и нанотрубок» (ном. гос. рег. 20112080, сроки выполнения 2011-2015, ГКПНИ «Конвергенция», задание 3.1.04.3)

Тема диссертационной работы соответствует пунктам «6. Электроника и фотоника» и «8. Многофункциональные материалы и технологии» перечня приоритетных направлений, определенных Постановлением Совета Министров Республики Беларусь №190 от 12.03.2015 «О приоритетных направлениях научных исследований Республики Беларусь на 2016 – 2020 годы».

Цель и задачи исследования

Целью диссертации является теоретическое предсказание новых эффектов и определение основных свойств и характеристик низкоразмерных углеродных наносистем, перспективных для приложений в нанофотонике.

Поставленная цель предполагает решение ряда задач:

1. Получить самосогласованную систему уравнений, описывающую эволюцию операторов рождения и уничтожения π-электронов в квазидвумерных многослойных системах.

2. Развить метод получения и решения дисперсионных уравнений для коллективных электронных возбуждений в слоистых квазидвумерных системах.

3. Провести анализ дисперсионных соотношений для коллективных электронных возбуждений в однослойных и двухслойных графеновых структурах, получить аналитические выражения для коэффициента замедления фазовой скорости в таких структурах.

4. Установить характер зависимости коэффициента замедления фазовой скорости плазмонных возбуждений в таких структурах от физических параметров системы (концентрации носителей заряда, расстояния между слоями двухслойной структуры).

5. Развить метод описания сверхрешеточной структуры профилированных графеновых нанолент и провести их классификацию.

6. Установить характер зависимости электронных свойств профилированных графеновых нанолент от основных геометрических параметров элементарной ячейки и внешнего электрического поля.

Объектом исследования являются низкоразмерные углеродные системы: многослойные графеновые структуры и профилированные графеновые наноленты. *Предметом исследования* являются коллективные электронные возбуждения и электронные свойства таких низкоразмерных углеродных систем.

Научная новизна

Актуальность представленного исследования заключается в новизне рассматриваемых систем: недавно открывшейся возможностью их экспериментальных исследований, а также перспективой их применения в нанофото-

нике. Оригинальностью полученных результатов является обобщение теории линейного отклика на случай многослойных структур и полученное в рамках него аналитическое выражение для поляризационной функции в графене, которое описывает коллективные электронные возбуждения не только при высоких, но и при низких концентрациях носителей заряда в одно- и двухслойной графеновых системах. В данной работе также впервые проведено систематическое теоретическое исследование профилирования края графеновых нанолент и установлено, что изменение параметров профилирования изменяет ширину запрещенной зоны графеновых нанолент, и таким образом является не менее важным структурным параметром, чем ширина нанолент. В данной работе также теоретически показано, что внешнее электрическое поле, приложенное в плоскости ленты перпендикулярно ее продольной оси, способно изменять ширину запрещенной зоны узких лент (~ 5 нм) в широких энергетических пределах $\sim 0{,}5$ эВ.

Положения, выносимые на защиту

1. Аналитические выражения для фазовой скорости поверхностного плазмон-поляритона в графене, позволяющие вычислить величину его коэффициента замедления при различных концентрациях носителей заряда.

2. Классификация сверхрешеток на основе графеновых нанолент с профилированными краями, позволяющая определять характер их зонной структуры и электронных свойств.

3. Метод расчета электронной зонной структуры графеновых нанолент сложной геометрии и способ перестройки их зонной структуры путем профилирования, позволяющий дискретно перестраивать частоту детекторов и генераторов электромагнитного изулучения на их основе.

4. Метод перестройки ширины запрещённой зоны профилированных графеновых нанолент во внешнем электрическом поле, параллельном плоскости сверхрешётки, позволяющий плавно перестраивать частоту генерации или детектирования электромагнитного излучения в устройствах на их основе.

Личный вклад соискателя ученой степени

Исследования по тематике диссертации проводились в соавторстве с научным руководителем, ведущим научным сотрудником НИИ ЯП БГУ, к.ф.-м.н., доцентом К.Г. Батраковым и директором НИИ ЯП БГУ, д.ф.-м.н., проф. С.А. Максименко. Исследования электронных свойств профилированных графеновых нанолент проводились совместно с группой главного научного сотрудника Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, д.ф.-м.н., проф. Л.А. Чернозатонского. Физическая интерпретация полученных результатов для электромагнитных свойств слоистых графеновых систем обсужда-

лась совместно с проф. К. Томсоном из Берлинского технического университета (Германия). Постановка задачи и общее руководство осуществлялись к.ф.-м.н. К.Г. Батраковым и д.ф.-м.н. С.А. Максименко. Диссертационная работа и все представленные в ней результаты отражают личный вклад автора в проведенные исследования.

Апробация результатов диссертации

Результаты, полученные в ходе исследований по теме диссертации, докладывались на Международных конференциях *"Nanomeeting"* (Минск, Беларусь, 2011, 2013, 2015); Международных семинарах *"Fundamental and Applied NanoElectroMagnetics"* (Минск, Беларусь, 2012, 2015); Международной конференции*"Advanced Carbon NanoStructures"* (Санкт-Петербург, Россия, 2013); Международной студенческой конференции *"INASCON"* (Лондон, Великобритания, 2013); XIII Ежегодной международной молодежной конференции *"ИБХФ РАН-ВУЗы"* (Москва, Россия, 2013); 71-ой Научной конференции студентов и аспирантов БГУ (Минск, Беларусь, 2014); Международном симпозиуме *"TeraNanoV"* (Мартиник, Франция, 2014).

Опубликование результатов диссертации

Список опубликованных работ по теме диссертации включает 9 наименований, в том числе 4 статьи в рецензируемых научных журналах (общим объемом 3,2 авторских листа), 4 статьи в сборниках материалов конференций и 1 глава в сборнике научных трудов.

Структура и объем диссертации

Диссертация включает в себя оглавление, перечень условных обозначений, введение, общую характеристику работы, четыре главы, содержащие аналитический обзор литературы и результаты оригинальных исследований, заключение с рекомендациями по практическому использованию полученных результатов и библиографический список. Полный объем диссертации составляет 134 страницы. Диссертация содержит 31 рисунок на 30 страницах и 5 таблиц на 5 страницах. Библиографический список включает 223 наименования и занимает 18 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ

Первая глава посвящена аналитическому обзору современного состояния теоретических исследований наноструктур на основе графена: слоистых графеновых систем и графеновых нанолент. В **разделе 1.1** кратко описывается история развития плазмоники в системах различной конфигурации, рассматриваются модели, используемые в литературе для описания коллективных электронных возбуждений. Указывается актуальность плазмонных

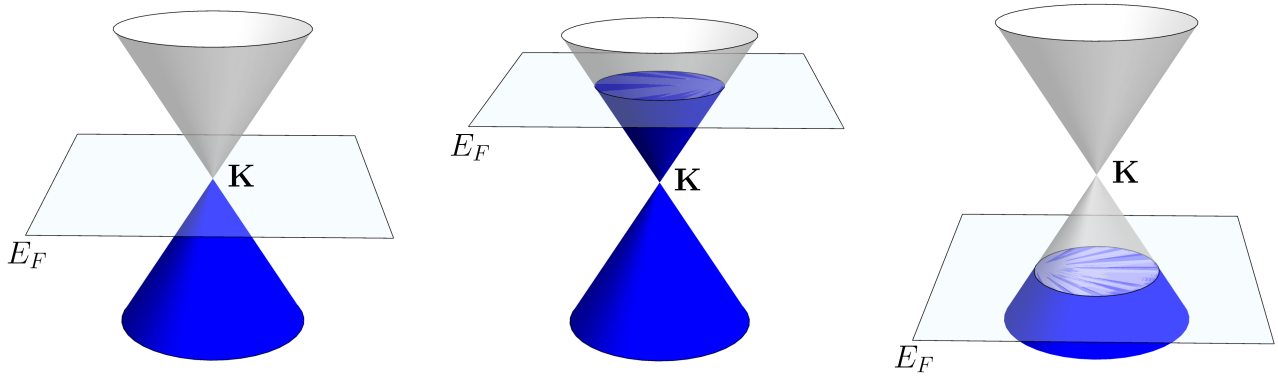
исследований относительно атомарно тонких систем. В **разделе 1.2** приводится обзор структурных и электронных свойств монослоя графена, вводятся основные понятия (долины, псевдоспин, хиральность), используемые для описания релятивистской физики таких систем. В **разделе 1.3** приводится обзор литературы, посвященной исселедованиям электронных свойств графеновых нанолент и сверхрешеток на их основе, обосновывается выбор профилированных графеновых нанолент в качестве объекта исследований.

Вторая глава посвящена исследованию самосогласованной задачи о распространении электромагнитной волны в двумерных слоистых системах с произвольным числом слоев. Проводится последовательное развитие метода получения дисперсионных уравнений для поверхностных плазмонов в слоистых наноструктурах. В **разделе 2.1**, с использованием аппарата *вторичного квантования* квантовой теории поля, выводится самосогласованная система уравнений, описывающая совместную динамику электронов и электромагнитного поля [6, 7]. В **разделе 2.2** полученная система уравнений специализируется в рамках метода сильной связи, который хорошо подходит для описания ковалентных связей углеродных наноструктур и во многих случаях позволяет получить аналитические решения. Метод имеет весьма общий характер и может быть пременен к широкому классу двумерных материалов, которые стали синтезироваться в последнее время. К таким структурам относятся не только графен, но и силицен, фосфорен, гексагональный нитрид бора, дихалькогениды и двумерные топологические изоляторы. Далее в общем виде разрабатываются два варианта решения полученного специализированного уравнения в приближении электронов с волновой функцией *локализованной* и *делокализованной* на слоях рассматриваемой многослойной системы, что соответствует методу *эффективных граничных условий* (**раздел 2.3**) и методу *интегральных уравнений* (**раздел 2.4**).

Третья глава посвящена исследованию и сравнительному анализу замедляющих свойств однослойных и двухслойных графеновых систем [1, 7]. В **разделе 3.1** исследуются коллективные электронные возбуждения в *однослойном графене*. В рамках метода *интегральных уравнений* в длинноволновом приближении выводится поляризационная функция, которая корректно описывает систему вблизи дираковской точки (см. рисунок 1):

$$P(k_\parallel, \omega) = \rho_k k_F \frac{2\pi\left(\omega - \sqrt{\omega^2 - v_F^2 k_\parallel^2}\right)}{\hbar v_F \sqrt{\omega^2 - v_F^2 k_\parallel^2}} \,. \tag{1}$$

где ρ_k – плотность состояний в обратном пространтве ($\mathbf{k}$-пространстве), k_F – квазиволновой вектор электрона на *поверхности Ферми*, которая, как пока-



(а) (б) (в)

Схематическое изображение зонной структуры графена вблизи дираковской точки **K** вместе с уровнем Ферми для (а) недопированного, (б) допированного электронами и (в) допированного дырками графена

Рисунок 1. – Допирование графена

зано на рисунке 1, в случае двумерной системы представляет собой линию, а для графена – окружность, $v_F = \frac{\sqrt{3}at}{2\hbar}$ – *скорость Ферми* для электронов в графене ($a = 0{,}246$ нм – постоянная кристаллической решетки графена; $\hbar$ – приведенная постоянная Планка), ω и $k_\parallel$ – частота и волновой вектор плазмона соответственно.

В рамках длинноволнового приближения анализируются два случая, разграниченные неравенством $gk_Fe^2 \gg \hbar v_F k_\parallel$, где e – элементарный заряд, g – степень вырождения состояния (в графене наряду с обычным спиновым вырождением, $g_1 = 2$, следут учитывать также *долинное* вырождение, $g_2 = 2$, т.е. $g = g_1 g_2 = 4$). В общем случае дисперсия плазмонов в графене описывается следующим уравнением:

$$\omega(k_\parallel) = \sqrt{\frac{v_F}{\hbar}} \frac{\left(gk_Fe^2 + \hbar v_F k_\parallel\right)}{\sqrt{2gk_Fe^2 + \hbar v_F k_\parallel}} \sqrt{k_\parallel}\,. \tag{2}$$

Однако, если использовать *дополнительное условие* ($gk_Fe^2 \gg \hbar v_F k_\parallel$) в рамках длинноволнового приближения, уравнение примет следующий вид:

$$\omega(k_\parallel) = e\sqrt{\frac{gv_Fk_Fk_\parallel}{2\hbar}}\,. \tag{3}$$

Таким образом, коэффициент замедления плазмонов в графене в первом приближении можно описывать следующим выражением:

$$\beta(k_\parallel) = \frac{c}{v_{ph}(k_\parallel)} = \frac{c}{e}\sqrt{\frac{\hbar}{v_F}} \frac{1}{(g\pi n)^{1/4}} \sqrt{k_\parallel} \tag{4}$$

где c – скорость электромагнитной волны в вакууме, $k_F = \sqrt{4\pi n/g}$. Откуда следует, что зависимость от концентрации носителей в зоне проводимости имеет вид $n^{-1/4}$. Так как данная величина является перестраиваемым параметром, то можно добиться того, чтобы фазовая скорость плазмонов была очень низкой. На практике это реализуемо вариацией напряжения, приложенного к металлическому электроду, напыленному с обратной стороны подложки, на которую высажен графен. В **подразделе 3.1.2** показывается, что дисперсионное уравнение, аналогичное уравнению (2), получается и в рамках метода *эффективных граничных условий*.

Двухслойная графеновая система, в которой взаимодействие между слоями осуществляется электростатически, исследуется в **разделе 3.2**. Дисперсионное уравнение, полученное для случая *симметричного* допирования, анализируется в **подразделе 3.2.1**. Дисперсионное уравнение для коллективных возбуждений в двухслойной системе:

$$\omega_{\pm}(k_{\parallel}) = \sqrt{\frac{v_F k_{\parallel}}{2\hbar}} \frac{g k_F e^2 \left(e^{hk_{\parallel}} \pm 1\right) + \hbar v_F k_{\parallel} e^{hk_{\parallel}}}{\sqrt{g k_F e^2 \left(e^{hk_{\parallel}} \pm 1\right) e^{hk_{\parallel}} + \dfrac{\hbar v_F k_{\parallel}}{2} e^{2hk_{\parallel}}}} \,, \tag{5}$$

при помощи дополнительного условия приводится к виду:

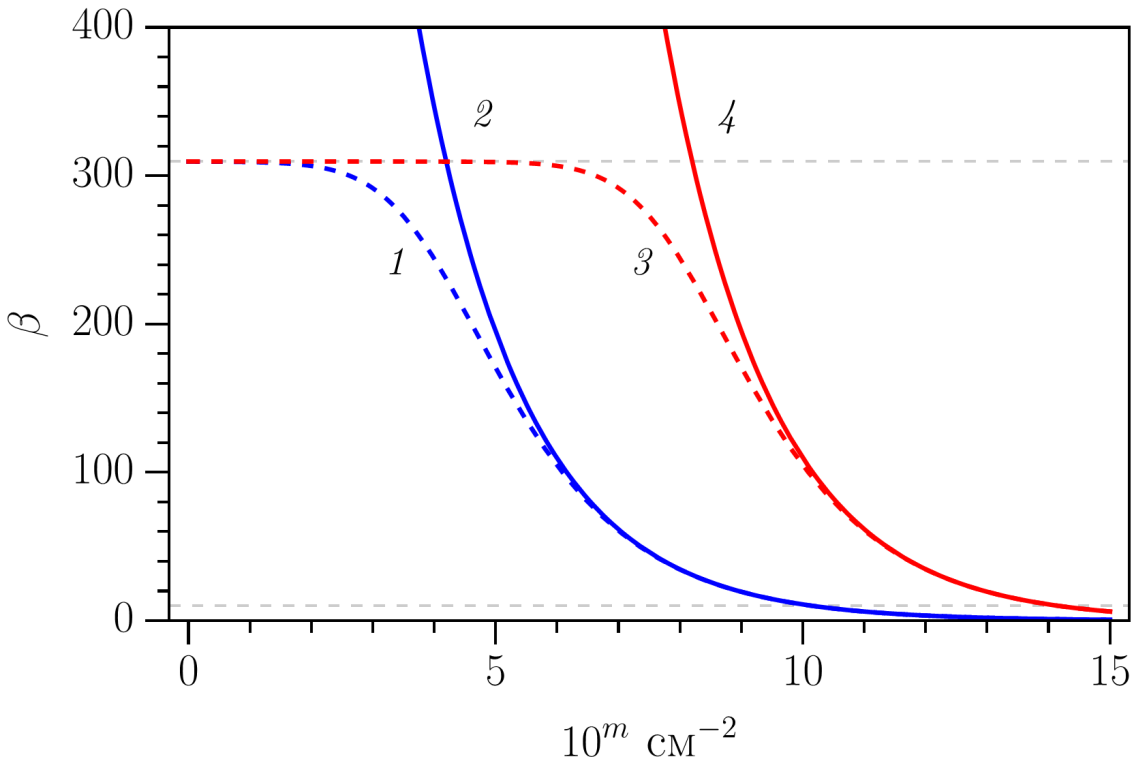
$$\omega_{\pm}(k_{\parallel}) = e\sqrt{\frac{g v_F k_F k_{\parallel} \left(1 \pm e^{-hk_{\parallel}}\right)}{2\hbar}} \,, \tag{6}$$

где h – расстояние между слоями двухслойной системы, а знаки “$+$” и “$-$” различают *симметричную* и *асимметричную* плазмонную моду в двухслойной системе. Из уравнения (6) следует, что коэффициент замедления фазовой скорости *асимметричной* плазмонной моды является функцией не только концентрации носителей ($\sim n^{-1/4}$), но и расстояния между слоями системы ($\sim 1/\sqrt{h}$) (при $hk_{\parallel} \to 0$):

$$\beta^{(-)}_{\max} = \frac{c}{e}\sqrt{\frac{\hbar}{v_F}} \frac{1}{(g\pi n)^{1/4}} \sqrt{\frac{1}{h}}. \tag{7}$$

Анализу *асимметричного* допирования двухслойной системы посвящен **подраздел 3.2.2**. В этом подразделе показывается, что асимметричное допирование, *контролируемое* (электростатическое) или *случайное* (примеси, оставшиеся в результате технологической обработки), отрицательно сказывается на коэффициенте замедления фазовой скорости плазмона. Однако, это негативное влияние относительно невелико и в худшем случае, когда концентрации носителей заряда в различных слоях сильно отличаются ($n_2 \ll n_1$), уменьшает коэффициент замедления в $\sqrt{2}$ раз.

В **разделе 3.3** проводится сравнительный анализ однослойных и двухслойных систем. Анализируется влияние *квазистатического* и *длинноволнового* приближения. Исследуется частотная зависимость и показывается, что для однослойного и двухслойного графена коэффициент замедления либо линейно зависит, либо практически не зависит от частоты, соответственно. В **подразделе 3.3.3** показывается, что разница между полученными уравнениями, разграниченными дополнительным условием, становится существенной в случае низких концентраций носителей заряда. Наглядно эти различия представлены на рисунке 2. Таким образом, показывается, что максимально



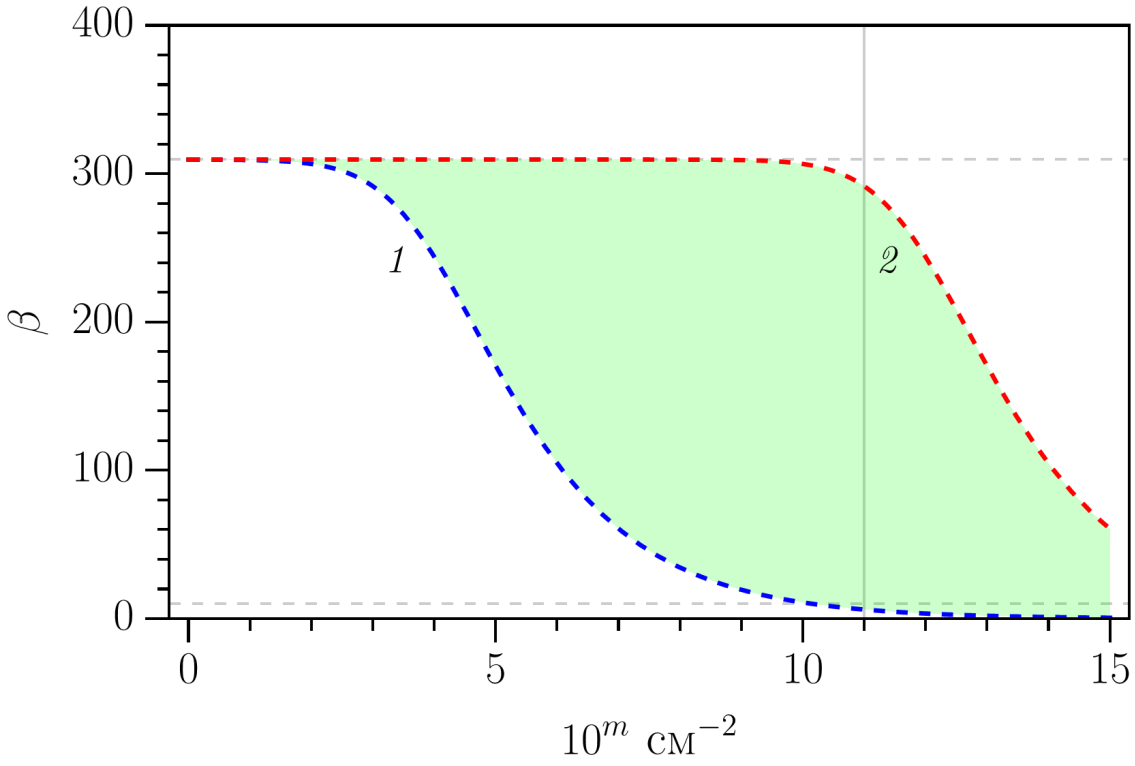
Штрихованная линия (*1*) и сплошная линия (*2*) соответствуют коэффициентам замедления плазмона в однослойной системе, полученным из уравнений (2) и (3). Штрихованная линия *(3)* и сплошная линия *(4)* – коэффициенты замедления в двухслойной системе, полученные из уравнений (5) и (6). Расстояние между слоями в двухслойной системе $h = 10^{-5}$ см

Рисунок 2. – Зависимость коэффициента замедления плазмонов в одно- и двухслойной системе при фиксированном волновом векторе

возможная теоретическая величина замедления фазовой скорости плазмонов в одно- и двухслойном графене равна $c/v_F \approx 300$.

В заключительном **подразделе 3.3.4** проанализирована возможность достижения высокого уровня замедления плазмонов в двухслойных системах на эксперименте. Как показано на рисунке 3, предельное замедление не только

возможно при типичных концентрациях носителей $\sim 10^{11}$ см$^{-2}$, наблюдаемых в экспериментах, и расстоянии между слоями $h \sim 1$ нм, но и на порядки превосходит таковое в однослойных графеновых системах [5] .



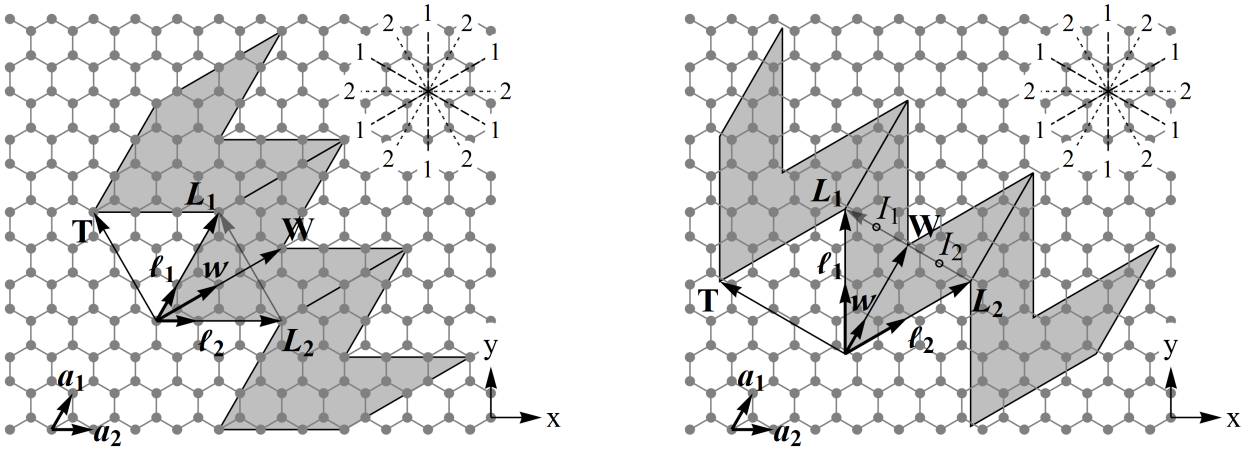
Штриковые линии (*1*) и (*2*) соответствуют коэффициенту замедления плазмона в одно-и двухслойной системах, полученные из уравнений (2) и (5), соответственно. Расстояние между слоями в двухслойной системе $h = 10^{-7}$ см, волновой вектор $k = 3 \times 10^4$ см$^{-1}$. Серая вертикальная линия отмечает типичную концентрацию носителей заряда, наблюдаемую в экспериментах.

Рисунок 3. – Сильное замедление плазмонов в двухслойных системах

Четвертая глава посвящена исследованию краевых эффектов в графеновых наноструктурах. В этой главе в качестве модельной системы рассматриваются квазиодномерные свехрешетки на основе графеновых нанолент – *профилированные графеновые наноленты* (ПГНЛ). В **разделе 4.1** описывается кристаллическая структура систем и разрабатывается их классификация [8]. Структурные особенности новых систем обсуждаются относительно более известных углеродных нанотрубок и обычных графеновых нанолент. В методологическом **разделе 4.2** приводятся особенности алгоритмической реализации ортогонального метода сильной связи для π-электронов в плоских углеродных наноструктурах. Рассматривается построение матричного гамильтониана системы в базисе *блоховских функций*, а также модели учета *эффектов релаксации* связей и внешних полей. Обсуждается совместное ис-

пользование алгоритма с методами классической молекулярной динамики.

В **разделе 4.3** исследуются электронные свойства профилированных графеновых нанолент [2, 4]. Аналогично структурным свойствам, эти свойства сравниваются с электронными свойствами углеродных нанотрубок и графеновых нанолент. Особое внимание уделяется изучению поведения ширины запрещенной зоны ПГНЛ как функции основных структурных параметров элементарной ячейки, представленных на рисунке 4. В этом разделе показы-



(а) (б)

Панели (а) и (б) изображают профилированные ленты с краями типа «зигзаг» и «кресло», соответственно. $\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2$, $\mathbf{W}$ – базисные векторы, $\boldsymbol{\ell}_1$, $\boldsymbol{\ell}_2$, $\mathbf{w}$ – элементарные векторы, $\mathbf{T}$ – период трансляции элементарной ячейки ГНЛ с профилированными краями. $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ – базисные векторы гексагональной решетки графена. Серая область выделяет из гексагональной решетки графена три элементарные ячейки профилированной ленты.

Рисунок 4. – Структура графеновой ленты с профилированными краями

вается, что в зависимости от типа края сверхрешетки, плечо профилирования $\ell_{1,2}$ может оказывать существенное влияние на ширину запрещенной зоны. Как видно из рисунка 5, зависимость ширины запрещенной зоны E_g от плеча профилирования $\ell_{1,2}$ носит регулярный характер для всех типов ПГНЛ, за исключением ПГНЛ Z120. В частности видно, что при использовании соответсвующих методов синтеза, например, метода самосборки из органических молекулярных прекурсоров, в таких структурах можно проводить достаточно точную (плавную) инженерию запрещенной зоны. Данные результаты получены с учетом эффектов релаксации связей на краю ПГНЛ. Заключительный **раздел 4.4** посвящен выявлению полевого эффекта в профилированных графеновых нанолентах в широком диапазоне внешних электрических полей (ε) от 0 до 0,1 В/Å(пробойное поле для SiO_2) [3]. В монослойных плоских ПГНЛ

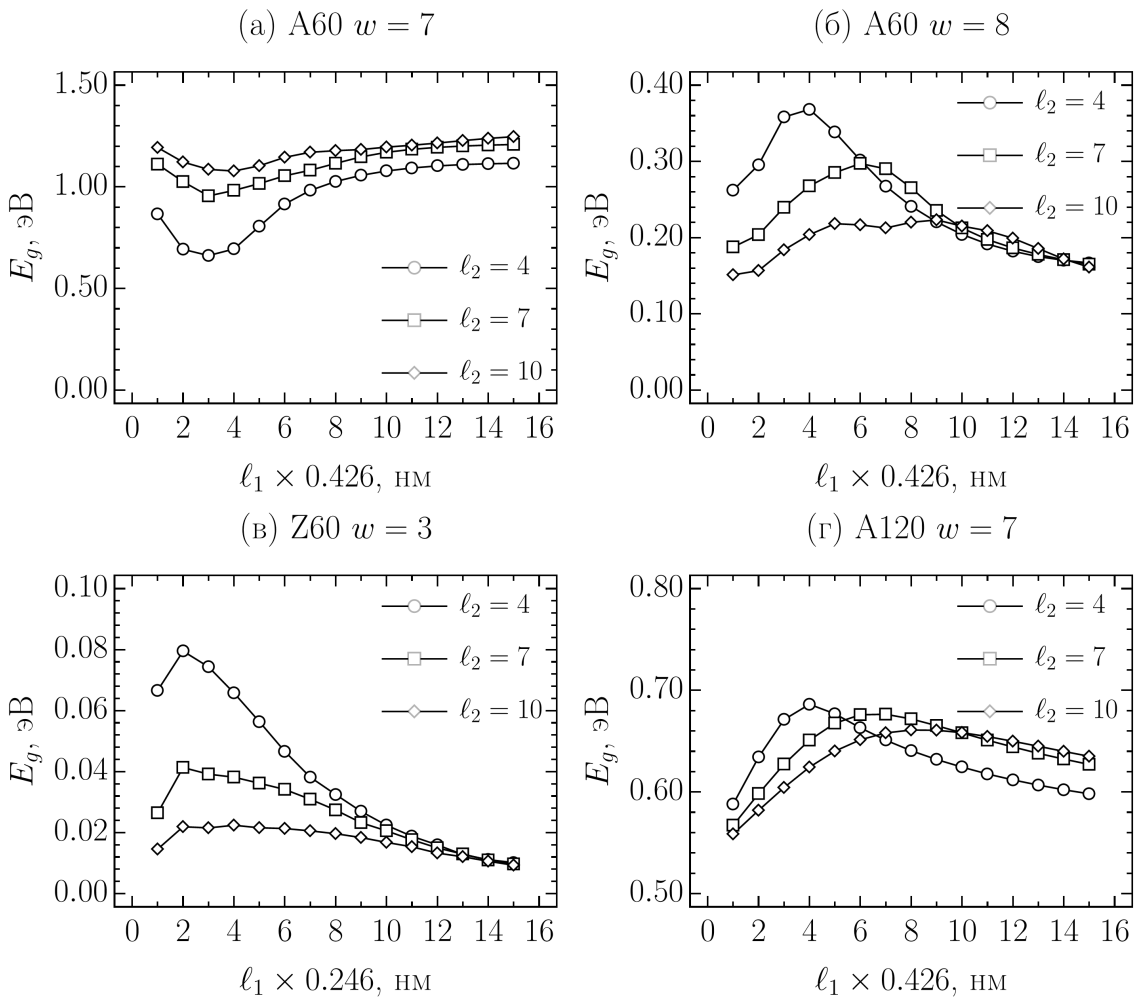
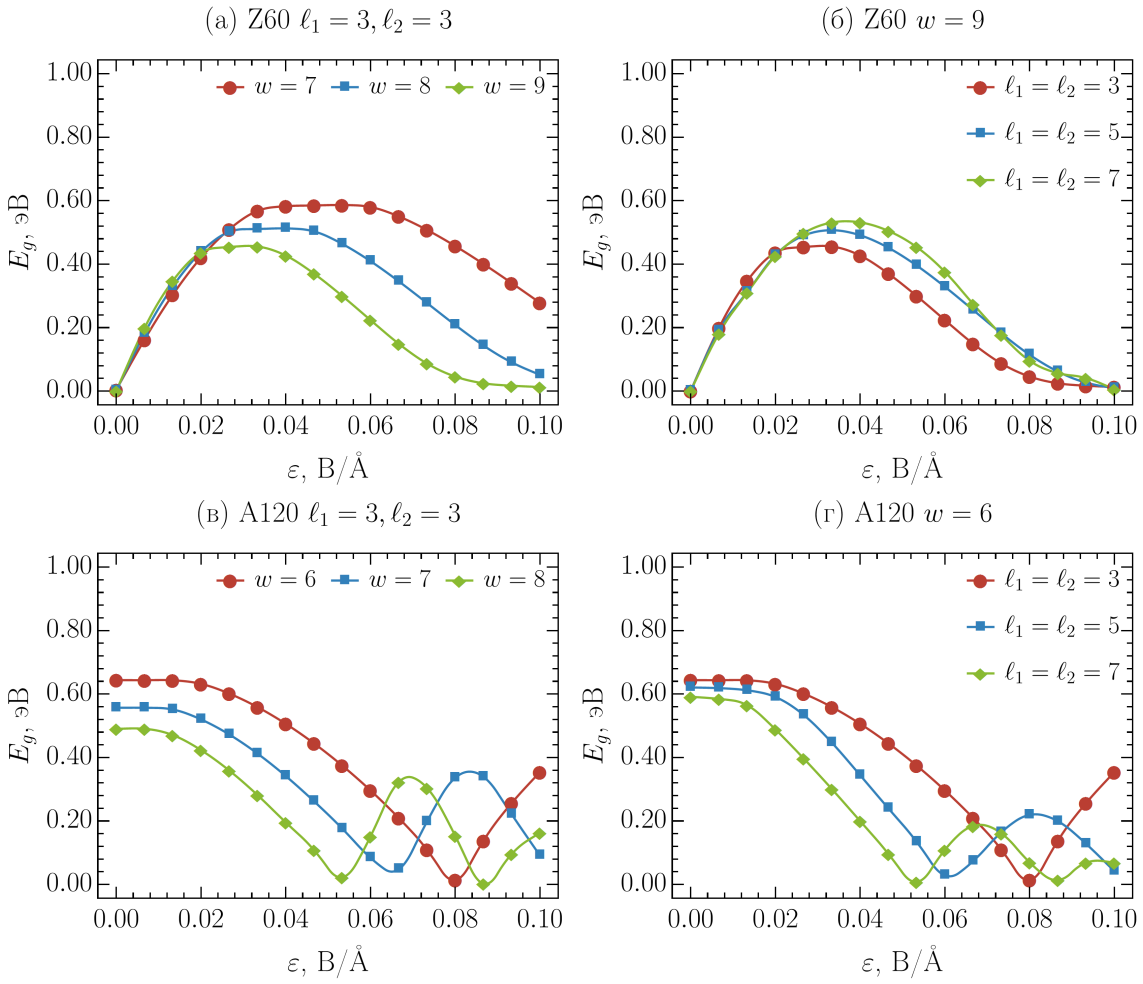


Рисунок 5. – Зависимость ширины запрещенной зоны E_g профилированных лент A60, Z60 и A120 от длины плеча ℓ_1

такой эффект возможен при приложении поля в плоскости сверхрешетки перпендикулярно ее оси. При исследовании эффекта внешнего электростатического поля, для учета краевых эффектов при сохранении геометрии структур в модели сильной связи для π-электронов учитываются ближайшие соседи до третьего порядка включительно. В первую очередь анализируются такие изменения в зонной структуре, которые затрагивают запрещенную зону, так как в структурах с прямой запрещенной зонной, какими являются ПГНЛ, это влияет на фундаментальный край поглощения. На рисунке 6 показано, что в зависимости от ширины w и длины плеч $\ell_{1,2}$ в симметричных ПГНЛ Z60 и A120 ширина запрещенной зоны может перестраиваться в широком диапазоне от 0 до 0,5 эВ. В зависимостях $E_g(\varepsilon)$ выделяются и анализируются линейные и квадратичные участки, которые представляют интерес для линейных и нелинейных модуляторов и оптических преобразователей на основе таких структур. Далее полевой эффект в ПГНЛ сопоставляется с аналогичным эффектом в различных структурно-подобных графеновых нанолентах

без профилирования края, также исследуется влияние *асимметрии* $\ell_1 \neq \ell_2$ на полевой эффект в ПГНЛ. В заключительном **подразделе 4.4.4** полученные результаты для модельных структур исследуются относительно более стабильных форм ПГНЛ Z60. В этом подразделе основные закономерности в поведении ширины запрещенной зоны ПГНЛ как функции структурных параметров w и $\ell_{1,2}$ обобщаются на более широкий класс сверхрешеток, в которых вектор ширины w изменяется по направлению [3, 9].



(а), (б) Z60 и (в), (г) A120, характеризуемые различными значениями индексов ширины w и плеч $\ell_1 = \ell_2$

Рисунок 6. – Зависимость ширины запрещенной зоны E_g от внешнего поперечного электрического поля ε для симметричных ПГНЛ

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

В диссертационной работе теоретически исследованы два типа наноуглеродных систем: квазидвухмерные многослойные графеновые структуры и

квазиодномерные профилированные графеновые наноленты, – которые являются преспективными для реализации различных механизмов генерации когерентного электромагнитного излучения. Для первого типа систем рассматривались электромагнитные свойства, для второго типа систем – электронные свойства, которые делают их перспективными для реализации наноразмерных источников когерентного электромагнитного излучения в средней и дальней инфракрасной области частот. В ходе исследования получены следующие результаты:

1) Посредством анализа системы самосогласованных уравнений, описывающих динамику операторов рождения и уничтожения для π-электронов в многослойных квазидвумерных системах с произвольным числом слоев, предложен метод получения и решения дисперсионных уравнений для поверхностных плазмонов. [6, 7]

2) Получено аналитическое выражение для поляризационной функции графена, справедливое в пределе низких концентраций носителей заряда и показана эквивалентность метода интегральных уравнений методу эффективных граничных условий. [1, 7]

3) Показано, что зависимость коэффициента замедления от расстояния h между слоями двухслойной системы приближенно описывается зависимостью $\sim 1/\sqrt{h}$. Определен теоретический предел коэффициента замедления c/v_F для однослойной и двухслойной систем. Показано, что для двухслойных систем в отсутствие туннелирования между слоями предельное замедление должно наблюдаться для типичных концентраций носителей 10^{-11} см$^{-2}$. [5]

4) Разработана классификация и метод описания зигзагообразной сверхрешеточной структуры лент. Исследована связь структуры профилированных лент с одностенными углеродными нанотрубками и монослойными графеновыми нанолентами. [8]

5) Получены зависимости запрещенной энергетической зоны от основных структурных параметров элементарной ячейки сверхрешеточной структуры. Исследовано влияние релаксации химических связей на краях сверхрешеток. Показано, что наряду с шириной профилированной ленты для более тонкой подстройки запрещенной зоны можно использовать плечо профилирования ленты. [2, 4]

6) С помощью ортогонального метода сильной связи для π-электронов показано, что запрещенная энергетическая зона узких сверхрешеток ($\sim$ 5 нм) может эффективно модулироваться в широких пределах ($\sim$ 0,5 эВ) за счет приложенного в плоскости ленты перпендикурярно ее продольной оси электрического поля ($<$ 0,1 В/Å). [3, 9]

Рекомендации по практическому использованию результатов

Разработанный в Главе 2 формализм получения дисперсионных уравнений для поверхностных плазмонов в слоистых наноструктурах может быть использован для рассмотрения коллективных электронных возбуждений в таких двумерных материалах как силицен, германен, фосфорен, гексагональный нитрид бора, дихалькогениды и двумерные топологические изоляторы. Предсказанный в Главе 3 режим сильного замедления плазмонных возбуждений в двухслойной системах может быть использован для генерации когерентного терагерцового излучения по механизму Черенкова. Предложенные в Главе 4 описание и классификация сверхрешеточных структур на основе графеновых нанолент могут быть применены к новым графеновым структурам, синтезируемым методом самосборки молекулярных органических прекурсоров, которые активно разрабатываются на биохимическом факультате Бернского университета под руководством Р. Фазеля, а также на химическом факультете университета Небраски (Линкольн) под руководством А. Синицкого. Выявленная связь между структурой и шириной запрещенной энергетической зоны может быть использована для проектирования электронных цепей и оптических устройств в ближней и дальней инфракрасной области частот. Полевой эффект для профилированных графеновых нанолент, выявленный в Главе 4, может быть использован для создания полностью металлического транзистора, а также инфракрасных и терагерцовых лазеров с широкой полосой перестраивания частоты.

Благодарности

Автор выражает признательность научному руководителю к.ф.-м.н. К.Г. Батракову, д.ф.-м.н. С.А.Максименко, к.ф.-м.н. П.П.Кужир, В.А. Демину и С.П. Воронович-Солоневич за помощь в работе над диссертацией; а также выражает благодарность проф., д.ф.-м.н. Л.А. Чернозатонскому и проф. Томсону за обсуждение результатов. Частичная апробация результатов и значительная часть работы над рукописью диссертации проводились во время стажировки в группе проф. М.Е. Портного из Эксетерского университета (Великобритания). Автор признателен проф. М.Е. Портному за гостеприимство и финансовую помощь.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ АВТОРОМ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в научных журналах:

1. Plasmon polariton deceleration in graphene structures / K.G. Batrakov, V.A. Saroka, S.A. Maksimenko, C. Thomsen // J. Nanophotonics. — 2012. — Vol. 6. — P. 061719-1–061719-11.

2. Сороко, В.А. Графеновые наноленты с зигзагообразно модифицированными краями: структура и электронные свойства / В.А. Сороко, К.Г. Батраков, Л.А. Чернозатонский // Физика твердого тела. — 2014. — Т. 56. — С. 2066–2075.

3. Band gaps in jagged and straight graphene nanoribbons tunable by an external electric field / V.A. Saroka, K.G. Batrakov, V. A. Demin, L.A. Chernozatonskii // J. Phys.: Condens. Matter. — 2015. — Vol. 27. — P. 145305–145318.

4. Сороко, В. А. Зигзагообразные сверхрешетки на основе графеновых нанолент: структура и электронные свойства / В.А. Сороко, К.Г. Батраков // Известия ВУЗов. Физика. — 2016. — Т. 59. — С. 27–32.

Сборники научных трудов:

5. Batrakov, K. Surface plasmon retardation in graphene bilayer / K. Batrakov, V.A. Saroka // Nanomaterials Imaging Techniques, Surface Studies, and Applications. Springer Proceedings in Physics 146. — 2013. — Vol. 27. — P. 103–115.

Материалы конференций:

6. Batrakov, K. Electron beam instability in graphene / K. Batrakov, V. Soroko // Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures: Reviews and Short Notes Proceedings of International Conference Nanomeeting – 2011, Minsk, Belarus, 24 – 27 May 2011 / Edited by: V.E Borisenko et al. — Singapore: World Scientific, 2011. — P.307–310.

7. Saroka, V. Reduction of plasmon-polariton phase velocity in a double-layer graphene / V. Saroka // Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures: Reviews and Short Notes Proceedings of International Conference Nanomeeting – 2013, Minsk, Belarus, 28 – 31 May 2013 / Edited by: V.E. Borisenko et al. — Singapore: World Scientific, 2013. — P.218–221.

8. Сороко, В.А. Электронные свойства графеновых нанолент с зигзагообразно модифицированными краями / В.А. Сороко, К.Г. Батраков, Л.А. Чернозатонский // Биохимическая физика: Труды XIII Ежегодной международной молодежной конференции ИБХФ РАН-ВУЗы, Москва, 28–30 октября 2013 г. / — Москва: РУДН, 2013. — С. 211-215.

9. Saroka, V. Dirac electrons of graphene nanoribbons tunable by a transverse electric field / V. Saroka, K. Batrakov // Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures: Reviews and Short Notes Proceedings of International Conference Nanomeeting – 2015, Minsk, Belarus, 26 – 29 May 2015 / Edited by: V.E. Borisenko et al. — Singapore: World Scientific, 2015. — P.240–243.

РЕЗЮМЕ

Сороко Василий Аркадьевич

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ ГРАФЕНОВЫХ СТРУКТУР И ПРОФИЛИРОВАННЫХ ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ

Ключевые слова: графен, двухслойный графен, поверхностные плазмоны, замедление фазовой скорости, графеновые наноленты, сверхрешетки, электронные свойства, запрещенная зона.

Целью диссертации является исследование электромагнитных и электронных свойств низкоразмерных планарных углеродных наносистем – двумерных слоистых графеновых систем и квазиодномерных сверхрешеток на основе графеновых нанолент, – перспективных для приложений в нанофотонике терагерцовых и инфракрасных частот.

Исследования проводились аналитическими и численными теоретическими методами. Теоретически получен и обоснован эффект сильного замедления ($\approx$ 300 раз) фазовой скорости плазмонных возбуждений в двухслойных графеновых системах, при экспериментально достижимых параметрах системы: концентрации носителей заряда ($\sim 10^{-11}$ см$^{-2}$) и расстоянии между графеновыми слоями ($\sim$ 1 нм). Показано, что коэффициент замедления двухслойных систем на порядки выше такового в однослойном графене, что обеспечивает принципиальные преимущества двухслойных систем перед однослойными.

Предложен новый класс квазиодномерных структур на основе графена – профилированные графеновые наноленты. Описана структура таких сверхрешеток и проводится систематическое численное моделирование их электронных свойств с учетом краевых эффектов релаксации в рамках ортогонального метода сильной связи для π-электронов. Показано, что ширина запрещенной зоны может перестраиваться посредством изменения не только ширины, но и параметров профилирования, что может служить основой для проектирования оптоэлектронных элементов с заданными свойствами.

Показано, что для перестройки ширины запрещенной зоны профилированных графеновых нанолент может быть использовано внешнее электрическое поле, приложенное в плоскости структуры перпендикулярно направлению трансляционной инвариантости. Определено, что для узких лент порядка $\sim$ 5 нм перестройка запрещенной зоны может осуществляться в широких пределах порядка 0,5 эВ, при использовании полей $<$ 0,1 В/Å.

РЭЗЮМЭ

Сарока Васіль Аркадзьевіч

ЭЛЕКТРАМАГНІТНЫЯ І ЭЛЕКТРОННЫЯ ЎЛАСЦІВАСЦІ ДВУХСЛАЁВЫХ ГРАФЕНАВЫХ СТРУКТУР І ПРАФІЛІРАВАНЫХ ГРАФЕНАВЫХ НАНАСТУЖАК

Ключавыя словы: графен, двухслаёвы графен, паверхневыя плазмоны, запавольванне фазавай хуткасці, графенавая нанастужкі, звышрашоткі, электронныя ўласцівасці, забароненая зона.

Мэтай дысертацыі з'яўляецца даследаванне электрамагнітных і электронных уласцівасцей нізкапамерных планарных вугляродных нанасістэм – двухпамерных слаістых графенавых сістэм і квазіаднапамерных звышрашотак на аснове графенавых нанастужак, – перспектыўных для прыкладанняў у нанафатоніцы тэрагерцовых і інфрачырвоных частот.

Даследаванні праводзіліся аналітычнымі і лікавымі тэарэтычнымі метадамі. Тэарытычна атрыманы і абгрунтаваны эфект моцнага запавольвання (≈ 300 разоў) фазавай хуткасці плазмонных узбуджэнняў у двухслаёвых графенавых сістэмах, пры эксперыментальна дасягальных параметрах сістэмы: канцэнтрацыі носьбітаў электрычнага зараду ($\sim 10^{-11}$ см$^{-2}$) і адлегласці паміж графенавымі слаямі (~ 1 нм). Паказана, што каэфіцыент запавольвання двухслаёвых сістэм на парадкі вышэйшы за такі ў аднаслаёвым графене, што забяспечвае перавагі двухслаёвых сістэм перад аднаслаёвымі.

Прапанаваны новы класс квазіаднапамерных структур на аснове графена – прафіліраваныя графенавыя нанастужкі. Апісана структура такіх звышрашотак і праводзіцца сістэматычнае лікавае мадэляванне іх электронных уласцівасцей з улікам краёвых эфектаў рэлаксацыі ў рамках артаганальнага метада моцнай сувязі для π-электронаў. Паказана, што шырыня забароненай зоны можа перабудоўвацца з дапамогай змянення не толькі шырыні нанастужкі, але і параметраў профілю, што можа служыць асновай для праектавання аптычнаэлектронных элементаў з заданымі характарыстыкамі.

Паказана, што для змянення шырыні забароненай зоны прафіляваных графенавых нанастужак можа выкарыстоўвацца знешняе электрычнае поле, прыкладзенае ў плоскасці структуры перпендыкулярна накірунку трансляцыйнай інварыянтнасці. Вызначана, што для вузкіх стужак каля ~ 5 нм перамена забароненай энергетычнай зоны можа ажыццяўляцца ў шырокіх межах каля 0,5 эВ, калі выкарыстоўваюцца палі $< 0{,}1$ В/Å.

SUMMARY

Saroka Vasil Arkadzevich

ELECTROMAGNETIC AND ELECTRONIC PROPERTIES OF GRAPHENE DOUBLE-LAYER STRUCTURES AND ZIGZAG-SHAPED GRAPHENE NANORIBBONS

Key words: graphene; graphene double-layer; surface plasmon-polariton wave; slowing down; graphene nanoribbons, superlattices, electronic properties, band gap.

The main goal of this dissertation is to investigate the electromagnetic and electronic properties of low-dimensional planar carbon nanosystems – two-dimensional layered graphanen structures and quasi-one-dimensional graphene nanoribbon-based superlattices, – that are promising for applications in terahertz and mid-infrared nanophotonics.

This theoretical study is carried out by exact and approximate analytical and numerical methods. It is theoretically found that there is an effect of strong slowing down ($\approx$ 300 times) of the plasmon phase velocity in double-layer graphene structures. It is also justified that this effect can be achieved at experimentally available parameters: charge carrier density ($\sim 10^{-11}$ cm^{-2}) and interlayer separation ($\sim$ 1 nm). It is shown that the slowing down coefficient in double-layer systems is orders of magnitude higher than that in single layer graphene, thereby providing considerable advantages to double-layer systems against the single layer ones.

A new class of quasi-one-dimensional structures is proposed in this dissertation – zigzag-shaped graphene nanoribbons. The structure of such superlattices is described and systematic numerical modeling of their electronic properties is carried out within the orthogonal tight-binding model for π-electrons, with accounting for the effect of ribbon edge relaxation. It is shown that the direct energy band gap in such structures can be engineered not only by the width of the superlattices but also by their edge profile geometry, which allows one to design of the opto-electronic elements with a predefined charateristics.

It is also shown that an external electric field can be used to tune the energy band gap in zigzag-shaped ribbons if it is applied in the plane of the structure perpendicular to the direction of the ribbon translational symmetry. It is determined that for narrow zigzag-shaped ribbons $\sim$ 5 nm the energy band gap can be tuned in a wide range of about 0.5 eV if the electric field strength does not exceed 0.1 V/Å.

Сороко Василий Аркадьевич

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ ГРАФЕНОВЫХ СТРУКТУР И ПРОФИЛИРОВАННЫХ ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ

Подписано в печать “____” _____ 2018 г. Формат 60 × 90 1/16.
Бумага офисная. Печать офсетная. Печ. л. ____
Учетн. изд. л. ____ Тираж 60 экз. Заказ № ____.

ГНУ «Институт физики им. Б.И. Степанова
Национальной академии наук Беларуси»
220072, г. Минск, пр. Независимости, 68.
Отпечатано на ризографе ГНУ «Институт физики
им. Б.И. Степанова НАН Беларуси»