

В.Г. ЛИТОВЧЕНКО, А.І. КУРЧАК, М.В. СТРИХА

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
(Просп. Науки, 46, Київ 03028; e-mail: maksym_strikha@hotmail.com)

АНІЗОТРОПІЯ ПРОВІДНОСТІ ДВОШАРОВОГО ГРАФЕНУ ПРИ ВІДНОСНОМУ ЗМІЩЕННІ ЙОГО ШАРІВ

УДК 539.9

У рамках методу сильного зв'язку досліджено трансформацію зонного спектра двошарового графену (ДГ) зі зсунутими один щодо одного графеновими шарами. Показано, що в усьому діапазоні експериментально актуальних значень зсуву ДГ залишається матеріалом з нульовою забороненою зоною, однак розташування точок дотикання зони провідності і валентної зони при цьому суттєво залежить від напрямку зсуву площин одна щодо одної. Наслідком зсуву є поява суттєвої анізотропії зон, яка, в свою чергу, приводить до суттєвої (порядку 10–20%) анізотропії провідності ДГ. Обговорено можливе застосування такої анізотропії в чутливих сенсорах механічних напружень та для генерації в анізотропному багатодолінному ДГ суто долинного струму за умови рівності нулевій середнього електронного спіну й електронного струму.

Ключові слова: двошаровий графен, анізотропія провідності, долинний струм.

1. Вступ

Двошаровий графен (ДГ, англ. bilayer graphene) є об'єктом інтенсивного вивчення впродовж останніх років (див. огляд [1] і літературу до нього). ДГ складається з двох графенових шарів, які через вимогу мінімізації енергії набувають конфігурації так званого А–В (“берналівського”) пакування (рис. 1, а), за якого половина атомів “верхнього” шару розташовані над атомами “нижнього” шару. Фактично ДГ є проміжною структурою між одношаровим графеном і об'ємним графітом. ДГ, як і одношаровий графен, є безщілинним матеріалом, проте його спектр безпосередньо в околі точки К зони Бріллюена є вже не лінійним, а квадратичним (що, однак, на масштабі енергій одиниць і десятків меВ декілька разів змінює вигляд і вешті-решт робиться лінійним зі збільшенням значення квазі-хвильового вектора в площині xy) [2].

Інтерес до вивчення ДГ було посилено тим, що майже відразу було показано: поява різниці між електрохімічними потенціалами “верхнього” і “нижнього” шарів внаслідок прикладання електричного поля вздовж осі z приводить до появи енергетичної щілини між електронними й дірковими станами й появи “мексиканського капелюха” в

енергетичному спектрі зон [3]. Оскільки “легування” ДГ, як і одношарового графену, як правило, здійснюють прикладанням напруги до затвору, ця напруга з урахуванням відстані між шарами графену в ДГ 0,34 нм робить дві площини потенціально різними, і значенню концентрації 10^{12} см⁻² відповідає щілина порядку 10 меВ. Звідси випливає, що для концентрацій порядку 10^{11} см⁻² таким розщепленням можна знехтувати.

Іншим способом розкриття щілини є прикладання одновісного пружного стиску, що, так само як і електричне поле, знижує симетрію А–В ДГ і знімає виродження в точках К [4, 5]; або ж поворот однієї з площин ДГ щодо другої [6, 7]. У [8] на основі методу сильного зв'язку показано, що прикладання до ДГ одновісного напруження в межах 6% у площині xy уздовж напрямків як “крісла”, так і “зигзагу” призводить до суттєвої перебудови станів поблизу точки К, проте щілина між станами зони провідності й валентної зони при цьому не виникає. У роботі [9] з використанням обчислень з першопринципів показано, що розкриття щілини можливе внаслідок прикладання до ДГ механічного стиску в перпендикулярному до площини ДГ напрямку, причому поки міжплощинна відстань лишається більшою від 0,25 нм, зона “пряма”, для більших стисків і менших відстаней матеріал робиться непрямозонним.

© В.Г. ЛИТОВЧЕНКО, А.І. КУРЧАК,
М.В. СТРИХА, 2014

Питанню провідності ДГ та розсіянню носіїв у ньому присвячено значну кількість робіт (див. [10–13]). У них розгляд проводився як у рамках больцманівського наближення, так і з використанням складніших чисельних моделей. Проте, оскільки в реальних структурах, як виглядає, часи розсіяння на заряджених домішках підкладки та на короткомасштабних неоднорідностях самого ДГ є величинами одного порядку, а задача про екранування в 2D структурі є складною, теоретичний опис таких процесів далекий від завершеності.

У цій роботі нами розглянуто ситуацію, експериментальна реалізація якої може виявитися простою від запропонованих у [4–7]. В рамках моделі сильного зв'язку нами розглянуто зміщення двох “ненапружених” шарів у ДГ один щодо одного, що його можна описати кутом θ (див. рис. 1, б). Такого зміщення можна досягнути, розмістивши ДГ між двома діелектричними підкладками, до яких прикладено зміщення в протилежних напрямках. При цьому відстань між шарами ДГ ми вважали сталою і рівною 3,4 А. Це накладає обмеження на величину можливого зсуву, яка має бути меншою від атомного радіуса (0,8 А для вуглецю), а відтак і на кути зміщення $\theta \leq 6^\circ$.

Подальшу нашу роботу викладено так. У розділі 2 в рамках методу сильного зв'язку розраховано зонну структуру ДГ зі зміщеними один щодо одного шарами. У розділі 3 у рамках стандартної схеми розрахунку провідності багатодолинних матеріалів показано, що таке зміщення приводить до появи анізотропії провідності. У висновках обговорено отримані результати і використані при цьому наближення.

2. Зонна структура ДГ зі зміщеними графеновими шарами

У рамках формалізму методу сильного зв'язку, аналогічно до [8], хвильову функцію ДГ ψ ми будемо як лінійну комбінацію хвильових функцій χ , центрованих на чотирьох сусідніх атомах з координатами $\mathbf{r}_{A,B}$ двох площин (див. рис. 2):

$$\begin{aligned} \psi = & C_{A1} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{A1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{A1}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A1}) + \\ & + C_{B1} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{B1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{B1}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{B1}) + \\ & + C_{A2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{A2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{A2}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A2}) + \end{aligned}$$

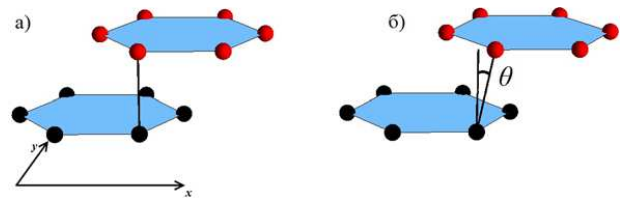


Рис. 1. ДГ у “берналіївському” пакуванні без зсуву графенових шарів один щодо одного (а); зі зсувом вздовж осі x (б)

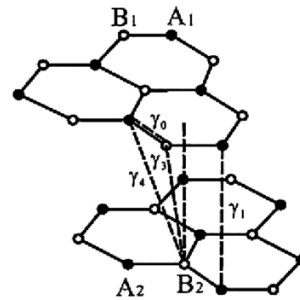


Рис. 2. Розташування атомів $A_{1,2}$ і $B_{1,2}$ у двох площинах ДГ у “берналіївському” пакуванні. У позиції А атоми є в обох площинах, у позиції В – лише в одній. Вісь x відповідає напрямку “крісла”, y – “зигзагу”. Позначено пари близько розташованих атомів, які утворюють відповідні інтеграли перекриття γ

$$+ C_{B2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{B2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{B2}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{B2}). \quad (1)$$

Врахуємо можливість того, що площина 2 може бути зсунута щодо площини 1 у довільному напрямкові. Такий зсув описуватимемо через лінійне зміщення цієї площини:

$$\delta x = I_c \tan[\theta] \cos[\varphi], \quad (2)$$

$$\delta y = I_c \tan[\theta] \sin[\varphi], \quad (3)$$

де $I_c = 0,34$ нм – відстань між площинами ДГ, кут θ зображено на рис. 1, б, φ є кутом між напрямком зсуву і віссю x .

З урахуванням (2), (3) модифікуємо гамільтоніан ДГ [2, 8] як:

$$\begin{aligned} H = & \\ = & \begin{pmatrix} \gamma_6 & \gamma_0(h_1+h_2) & \gamma'_1 & \gamma'_4 h_1^* + \gamma''_4 h_2 \\ \gamma_0(h_1^*+h_2) & 0 & \gamma'_4 h_1^* + \gamma''_4 h_2 & \gamma'_3 h_1 + \gamma''_3 h_2 \\ \gamma'_1 & \gamma'_4 h_1 + \gamma''_4 h_2 & \gamma_6 & \gamma_0(h_1^*+h_2) \\ \gamma'_4 h_1 + \gamma''_4 h_2 & \gamma'_3 h_1^* + \gamma''_3 h_2 & \gamma_0(h_1+h_2) & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4)$$

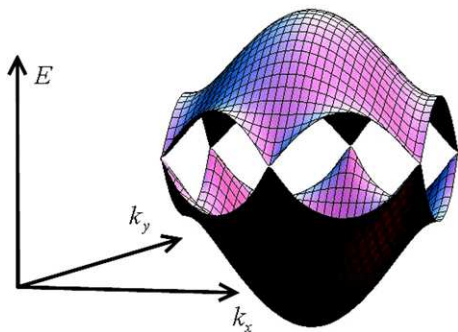


Рис. 3. Загальний вигляд структури “нижнього” з двох дублетів ДГ

Тут

$$h_1 = e^{ik_x[b+\delta x]}, \quad (5)$$

$$h_2 = 2 \cos \left(k_y \left[\frac{b\sqrt{3}}{2} + \delta y \right] \right) e^{ik_x \left[\frac{b}{2} + \delta x \right]}, \quad (6)$$

$b = 0,142$ нм – довжина зв’язку між двома атомами в площині графену, а інтеграли перекриття між сусідніми атомами, зображені на рис. 2, модифіковано з урахуванням зсуву (2), (3):

$$\gamma'_1 = \frac{\gamma_1 I_c^2}{I_c^2 + \delta x^2 + \delta y^2}, \quad (7)$$

$$\gamma'_3 = \frac{\gamma_3 (b^2 + I_c^2)}{(b + \delta x)^2 + I_c^2 + \delta y^2}, \quad (8)$$

$$\gamma''_3 = \frac{\gamma_3 (b^2 + I_c^2)}{\left(\frac{b}{2} + \delta x\right)^2 + \left(\frac{b\sqrt{3}}{2} + \delta y\right)^2 + I_c^2}, \quad (9)$$

$$\gamma'_4 = \frac{\gamma_4 (b^2 + I_c^2)}{(b + \delta x)^2 + I_c^2 + \delta y^2}, \quad (10)$$

$$\gamma''_4 = \frac{\gamma_4 (b^2 + I_c^2)}{\left(\frac{b}{2} + \delta x\right)^2 + \left(\frac{b\sqrt{3}}{2} + \delta y\right)^2 + I_c^2}. \quad (11)$$

Надалі ми використовуватимемо стандартні чисельні значення для інтегралів перекриття у ДГ без деформації [8]: $\gamma_0 = 2,598$ еВ (описує зв’язок між сусідніми атомами в одній графеновій площині); $\gamma_1 = 0,364$ еВ (описує зв’язок між двома атомами в позиції А в різних площинах); $\gamma_3 = 0,319$ еВ (описує зв’язок між двома атомами в позиції В у різних площинах); $\gamma_4 = 0,177$ еВ (описує зв’язок між двома атомами в позиціях А і В у різних площинах, див. рис. 2). Врахування різного хімічного

оточення атомів у позиціях А і В приводить також до появи малого інтеграла $\gamma_6 = -0,026$ еВ.

Результатом чисельного розв’язання задачі на власні значення (4) є відомий вигляд зонного спектра ДГ (див. рис. 3, де для наочності зображено лише один з двох дублетів значень, а саме той, що формує зону провідності й валентну зону).

При цьому в усіх випадках для значень зсуву $\theta < 6^\circ$, коли ще працює наша модель, ДГ залишається матеріалом з нульовою забороненою зоною. Проте розташування точок дотикання зони провідності і валентної зони при цьому суттєво залежить від напрямку зсуву площин одна щодо одної (рис. 4). Це є очевидним наслідком зниження симетрії системи, що включає ґратку з базисом, під впливом зсуву площин одна щодо одної. Ще одним наслідком зсуву є поява суттєвої анізотропії зон. Необхідно відзначити: аналогічна ситуація має місце також для одношарового графену: матеріал залишається безщільним до великих значень 10–20% прикладеної деформації, проте в ньому так само виникає анізотропія (див., наприклад, [14] і посилання в ній).

На рис. 5 зображено зонний спектр недеформованого ДГ і матеріалу зі зсувом площин одна щодо одної уздовж осі x , розрахований в околі верхнього з шести екстремумів, зображених на рис. 4. Як видно, до енергій порядку 0,5 еВ анізотропія (в англійській літературі вживають термін “wagring” – викривлення, спотворення) в недеформованому ДГ для вибраних напрямків несуттєва. Натомість за наявності зсуву вона робиться істотною. Якщо для напрямку вздовж великої півосі ефективна маса майже зберігається, то вздовж малої півосі вона суттєво зменшується.

Відзначимо, що загалом наближення ефективних мас необхідно застосовувати до ДГ з великою обережністю в силу причин, викладених у [2], скрізь, крім безпосереднього околу точки К шириною порядку 1 меВ. Однак, оскільки реальні спектри, що є наслідками чисельного розв’язання (4), можуть бути апроксимовані еліпсами ефективних мас у площині k_x, k_y з точністю порядку 5%, надалі ми з метою зручності й наочності користуватимемося цим наближенням.

Аналогічні результати для зсуву вздовж осі y , та зсуву вздовж напрямку 45° щодо x зображено на рис. 6, 7.

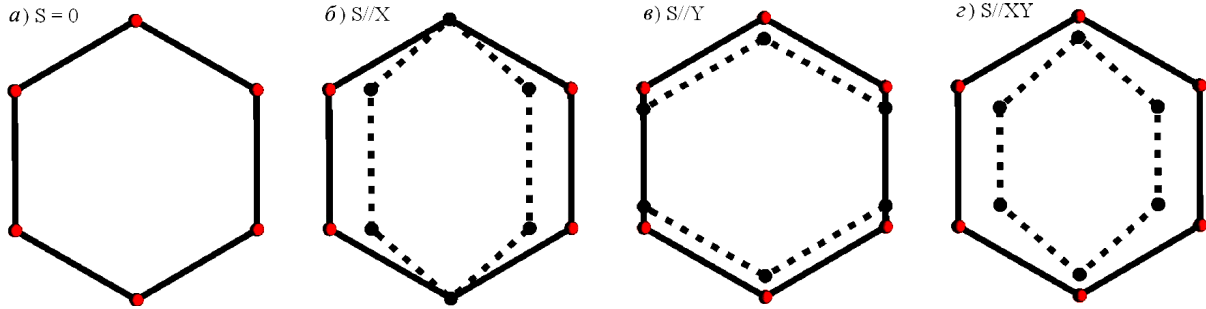


Рис. 4. Модифікація розташування точок дотикування зони провідності і валентної зони залежно від напрямку зсуву S : a – без зсуву; b – зсув вздовж x ; v – зсув вздовж y ; z – зсув вздовж напрямку 45° щодо xy

Як видно з рис. 6, 7, результати для зсуву вздовж осі y якісно подібні, але велика й мала півосі еліпса при цьому міняються місцями, а для зсуву вздовж напрямку 45° щодо x маси також робляться анізотропними, і їхні значення помітно менші, ніж у недеформованому випадку. Водночас відзначмо: прикладання зсуву знижує симетрію задачі і ділить шістьку фізично еквівалентних екстремумів (рис. 4, a) на двійку і четвірку еквівалентних екстремумів (рис. 4, b – z). Відтак цим двійці і четвірці будуть притаманні власні ефективні маси, які ми позначаємо індексами 1 і 2. Значення цих мас, реконструйовані з наближення простого параболічного закону дисперсії і його точного анізотропного вигляду, чисельно отриманого для енергії 0,09 eV (що відповідає реальним значенням концентрацій у ДГ порядку 10^{11} см^{-2}), подано в таблиці.

3. Анізотропія провідності ДГ зі зміщеними графеновими шарами

Розгляньмо електропровідність ДГ зі зміщеними графеновими шарами в рамках стандартної схеми для багатодолинного матеріалу (див., наприклад, [15]). Якщо напівпровідник має M долин у зоні провідності, то повна густина струму дорівнює сумі за густиною струму в кожній долині:

$$j = \sum_{\nu=1}^M j^{(\nu)}. \quad (12)$$

Щоб знайти струм у певній ν -й долині $j^{(\nu)}$, необхідно записати вектор електричного поля \mathbf{E} у головних осях тензора ефективної маси для цієї долини. З урахуванням двовимірності задачі \mathbf{E} має

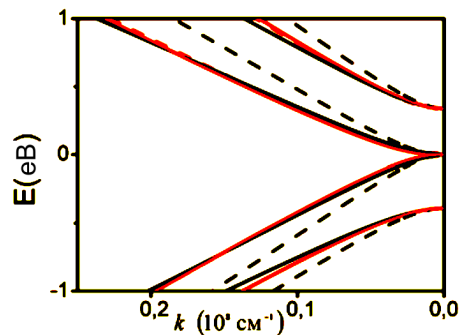


Рис. 5. Зонний спектр недеформованого ДГ (суцільні лінії) і для ДГ зі зсувом уздовж осі x в околі верхнього екстремуму на рис. 4 (розрахунок для $\theta = 5^\circ$, пунктирні лінії). Темні (чорні) лінії й точки – напрям уздовж k_x , світлі (червоні) – вздовж k_y

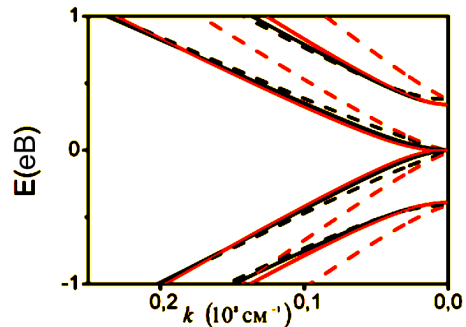


Рис. 6. Те саме, що на рис. 5, для зсуву вздовж осі y

вигляд:

$$\mathbf{E} = (E_1^{(\nu)}, E_2^{(\nu)}). \quad (13)$$

Тоді шуканий струм запишеться як:

$$j^{(\nu)} = (j_1^{(\nu)}, j_2^{(\nu)}) = (\sigma_1^{(\nu)} E_1^{(\nu)}, \sigma_2^{(\nu)} E_2^{(\nu)}). \quad (14)$$

Ефективні маси у ДГ (у одиницях маси вільного електрона) у наближенні еліптичних поверхонь однакової енергії: без зсуву; зсув вздовж x ; зсув вздовж y , зсув вздовж напрямку 45° щодо x . В останніх трьох випадках індекси 1 і 2 відповідають парі й четвірці еквівалентних екстремумів, зображених на рис. 4

S = 0		S//X				S//Y				S//X Y			
m_t	m_l	m_t^1	m_l^1	m_t^2	m_l^2	m_t^1	m_l^1	m_t^2	m_l^2	m_t^1	m_l^1	m_t^2	m_l^2
0,064	0,069	0,042	0,062	0,051	0,051	0,051	0,053	0,048	0,058	0,041	0,053	0,044	0,050

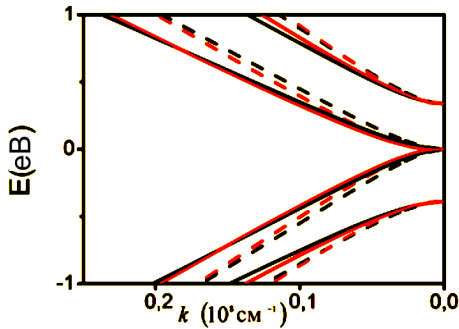


Рис. 7. Те саме, що на рис. 5, для зсуву вздовж напрямку 45° щодо x

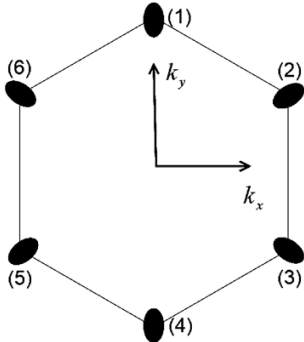


Рис. 8. Нумерація мінімумів у деформованому ДГ

Надалі використовуватимемо стандартний “друдівський” вираз для питомої провідності, враховуючи те, що концентрація носіїв для 2D випадку має розмірність $[м^{-2}]$, а сама питома провідність – $[Ом]$ (див., наприклад, [16]):

$$\sigma_i^{(\nu)} = \frac{e^2 n^{(\nu)}}{m_i} \langle \tau_\rho \rangle, \quad (15)$$

де $n^{(\nu)}$ – концентрація носіїв заряду в ν -й долині, $\langle \tau_\rho \rangle$ – середній час релаксації, можливу анізотропію якого ми обговоримо пізніше.

Струм j можна виразити, звівши всі тензори провідності $\sigma^{(\nu)}$ до одних осей координат. Тоді

$$j = \sum_{\nu=1}^M \sigma^{(\nu)} E = \sigma E, \quad (16)$$

де тензор σ є сумою тензорів $\sigma^{(\nu)}$.

У випадку, що ми розглядаємо, є шість мінімумів енергії, яким у недеформованому БГ відповідають дві еквівалентні долини (лише третина кожного з мінімумів належить першій зоні Бріллюена). Оскільки зі зсувом графенових шарів еквівалентність долин порушується, ми здійснюємо в (12) підсумовування за всіма 6-ма мінімумами, маючи на увазі, що кінцевий результат необхідно потому ділити на 3 (рис. 8).

Вважаємо, що ізоенергетичні поверхні біля дна зони провідності є еліпсами (межі застосовності такого наближення обговорено вище). Спочатку розглянемо кожен еліпс окремо у власній системі координат і запишемо відповідні тензори провідності, попередньо привівши їх до головних осей. З урахуванням нумерації мінімумів (рис. 8), та пам’ятаючи, що зсув шарів ДГ один щодо одного ділить шістьку мінімумів на набір 2-х і 4-х еквівалентних мінімумів (рис. 4), одержуємо

$$\begin{aligned} \sigma^{(1)} = \sigma^{(4)} &= \begin{pmatrix} \sigma_{11}^{(1)} & 0 \\ 0 & \sigma_{22}^{(1)} \end{pmatrix}, \\ \sigma^{(2)} = \sigma^{(3)} = \sigma^{(5)} = \sigma^{(6)} &= \begin{pmatrix} \sigma_{11}^{(2)} & 0 \\ 0 & \sigma_{22}^{(2)} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17)$$

Оскільки еліпси 1, 4 та 2, 3, 5, 6 еквівалентні, то й тензори провідності, що їм відповідають, мають однаковий вигляд.

Необхідно записати тензори провідності $\sigma^{(\nu)}$ у одній системі координат (X, Y, Z) . Оберімо для цього систему координат, у якій записані $\sigma^{(1)}$ і $\sigma^{(4)}$.

Це означає, що ці два тензори залишаються без змін, а решта перепишуться в іншому вигляді, за відповідними правилами перетворення компонент тензорів при переході від однієї системи координат до іншої:

$$A'_{ik} = \alpha_{i'l} \alpha_{k'm} A_{lm}, \quad (18)$$

де α_{ij} – косинуси кутів між відповідними осями координат. Запишемо відповідні компоненти тензорів $\sigma^{(2,3,5,6)}$ у системі координат (X, Y, Z) :

$$\begin{aligned} \sigma'_{11} &= \alpha_{1'1}^2 \sigma_{11} + \alpha_{1'2}^2 \sigma_{22}, \\ \sigma'_{12} &= \alpha_{1'1} \alpha_{2'1} \sigma_{11} + \alpha_{1'2} \alpha_{2'2} \sigma_{22}, \\ \sigma'_{21} &= \alpha_{2'1} \alpha_{1'1} \sigma_{11} + \alpha_{2'2} \alpha_{1'2} \sigma_{22}, \\ \sigma'_{22} &= \alpha_{2'1}^2 \sigma_{11} + \alpha_{2'2}^2 \sigma_{22}. \end{aligned} \quad (19)$$

Тоді повний тензор електропровідності запишеться як:

$$\sigma = 2\sigma^{(1,4)} + 4\sigma'^{(2,3,5,6)}, \quad (20)$$

де компоненти тензорів $\sigma'^{(2,3,5,6)}$ записуються через компоненти тензорів $\sigma^{(2,3,5,6)}$ з урахуванням (19).

Формула для визначення σ_{ii} для кожного еліпса має стандартний вигляд (15). До цієї формули входить концентрація, що виражається через 2D густину станів $D_{(\nu)}(E)$ для виродженого електронного газу відомим чином [16]:

$$n = \sum_{1,4} \int_0^{E_f} D_{1,4}(E) dE + \sum_{2,3,5,6} \int_0^{E_f} D_{2,3,5,6}(E) dE, \quad (21)$$

де E_f – енергія Фермі, а для 2D густини станів з урахуванням анізотропії ефективної маси в області енергій, нижчих від другого квантованого рівня [16] і в припущенні анізотропного квадратичного зонного спектра маємо

$$D_{(\nu)} = \frac{2 \left(m_l^{(\nu)} m_t^{(\nu)} \right)^{1/2}}{\pi \hbar^2}. \quad (22)$$

З урахуванням (15), (17), (18), (19), (21), (22) та значень ефективних мас, наведених у таблиці, тензор (20) в єдиній системі координат (X, Y, Z) запишеться як:

1. Випадок без зсуву:

$$\sigma = \frac{e^2 \langle \tau_\rho \rangle E_f}{\pi \hbar^2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad (23)$$

має місце стандартна ізотропна провідність ДГ.

2. Зсув паралельно осі x :

$$\sigma = \frac{e^2 \langle \tau_\rho \rangle E_f}{\pi \hbar^2} \begin{pmatrix} 2,14 & 0 \\ 0 & 1,88 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

у провідності виникає помітна анізотропія, зумовлена індукованою зсувом анізотропією зонного спектра, провідність уздовж осі x вища.

3. Зсув паралельно осі y :

$$\sigma = \frac{e^2 \langle \tau_\rho \rangle E_f}{\pi \hbar^2} \begin{pmatrix} 1,94 & 0 \\ 0 & 2,07 \end{pmatrix}, \quad (25)$$

так само виникає анізотропія, проте в цьому випадку провідність більша вздовж осі y .

4. Зсув уздовж напрямку 45° щодо осі x :

$$\sigma = \frac{e^2 \langle \tau_\rho \rangle E_f}{\pi \hbar^2} \begin{pmatrix} 2,05 & 0 \\ 0 & 1,96 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Таким чином, найбільша анізотропія провідності (порядку 10%) виникає при зсуві вздовж осі x . При зсуві за двома іншими напрямками значення анізотропії приблизно вполовину менші.

Досі ми вважали, що час релаксації не залежить від напрямку. Це припущення потребує окремого обговорення. При розсіянні носіїв на заряджених домішках підкладки у випадку порівняно невисоких концентрацій (коли можна використовувати наближення ефективної маси) час τ_p визначається модифікованою формулою (A16) роботи [13]:

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{(m_l m_t)^{1/2}}{\hbar} v_f^2 I. \quad (27)$$

Тут $v_f = 10^8$ см/с, I – безрозмірний інтеграл, що залежить від конкретного вигляду розсіювального потенціалу, його екранування, кореляції розташування таких потенціалів та відносної концентрації домішок у підкладці, на яких відбувається розсіяння. Додаткове урахування анізотропії часу розсіяння за (27) приблизно вдвічі збільшує анізотропію провідності, що впливає з (23)–(26). Проте межі застосовності самої формули (27) досі залишаються дискусійними, як і загалом питання про механізми розсіяння носіїв у ДГ [11–13].

4. Висновки

У рамках методу сильного зв'язку нами досліджено трансформацію зонного спектра двошарового графену (ДГ) зі зсунутими один щодо одного графеновими шарами. Показано, що в усьому діапазоні експериментально актуальних значень зсуву ДГ залишається матеріалом з нульовою забороненою зоною. Проте розташування точок дотикання зони провідності і валентної зони при цьому суттєво залежить від напрямку зсуву площин одна щодо одної. Це є наслідком зниження симетрії системи, що включає ґратку з базисом, під впливом зсуву площин одна щодо одної.

Наслідком зсуву є поява суттєвої анізотропії зон, яка, в свою чергу, приводить до суттєвої (порядку 10–20%) анізотропії провідності ДГ. Може бути обговорене застосування такої анізотропії в чутливих сенсорах механічних напружень. Іншим шляхом застосування є генерація в анізотропному багатодолинному ДГ суто долинного струму за умови рівності нулеві середнього електронного спіну й електронного струму (так звана “долинотроніка” – “valleytronics”, див. [17, 18]). Можливість такої генерації при прямих підзонних і внутрішньозонних оптичних переходах у напівпровідникових квантових ямах була вперше обговорена в [19]. Механізм “розрізнення” зон у недеформованому графені поляризованим світлом (з використанням “природної” анізотропії – “викривлення” – зонного спектра при високих енергіях, що відповідають переходові у видимому діапазоні), запропоновано в [20]. Одна з можливих схем експериментальної генерації “долинного” струму в графені описана в [21]. Генерацію долинних струмів у деформованому одношаровому графені теоретично розглянуто в [22]. Необхідно очікувати, що такі ефекти у деформованому ДГ спостерігати буде простіше, оскільки анізотропія зонного спектра тут має місце вже при невеликих кінетичних енергіях носіїв.

Наголосимо, що наші результати отримано в кількох наближеннях, межі застосовності яких зазначено вище. Насамперед, ми нехтували розкриттям щілини при прикладенні електричної напруги вздовж осі z , що накладає обмеження на величину “легування” графену затвором (до 10^{11} см $^{-2}$). По-друге, використання наближення еліпсоподібних зон змушує нас розглядати кінетичні енергії носіїв більші 10 меВ, для яких зони вже не мають трьох

бічних мінімумів [2]. Нарешті, наближення незмінності міжплощинної відстані в 0,34 нм накладає очевидне обмеження на величину зсуву (кут θ повинен не перевищувати 6°).

При більших деформаціях (що виллюються вренгі-решт у гібридну sp^2 – sp^3 -гібридизацію й появу енергетичної щілини між зоною провідності й валентною зоною, [23, 24]) слід вийти за межі використаного тут простого наближення моделі сильного зв'язку [8].

Робота була підтримана Державним фондом фундаментальних досліджень України (грант 53.2/006). Автори вдячні Т.В. Ліннік за важливе й корисне обговорення.

1. S. Das Sarma, S. Adam, E.H. Hwang, and E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407 (2011).
2. E. McCann and V.I.Falko, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 086805 (2006).
3. E. McCann, *Phys. Rev. B* **74**, 161403 (2006).
4. V.M. Pereira, A.H. Castro Neto, and N.M.R. Peres, *Phys. Rev. B* **80**, 045401 (2009).
5. D.A. Gradinar, H. Schomreus, and V.I. Falko, *Phys. Rev. B* **85**, 165429 (2012).
6. J.M.B. Lopes dos Santos, N.M.R. Peres, and A.H. Castro Neto, *Phys. Rev Lett.* **99**, 256802 (2007).
7. C.J. Tabert and E.J. Nicol, *Phys. Rev. B* **87**, 121402 (2013).
8. S.H. Lee, C.W. Chiu, Y.H. Ho, and M.F. Lin, *Synth. Met.* **160**, 2435 (2010).
9. H. Raza and E.C. Kan, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 102202 (2009).
10. S. Adam and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **76**, 115436 (2008).
11. S. Das Sarma, E.H. Hwang, and E. Rossi, *Phys. Rev. B* **81**, 161407 (2010).
12. S. Xiao, J.-Y. Chen, S. Adam et al, *Phys. Rev. B* **82**, 041406 (2010).
13. H. Xu, T. Heizel, and I.V. Zozulenko, *Phys. Rev. B* **84**, 115409 (2011).
14. T.L. Linnik, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 205302 (2012).
15. В.П. Савчин, Р.Я. Шавур. *Електронне перенесення в напівпровідниках і напівпровідникових структурах* (ЛНУ ім.І.Франка, Львів, 2008).
16. Ю.А. Кругляк, Н.Ю. Кругляк, М.В. Стріха, *Сенсорна електроніка і мікросистемні технології* **3(9)**, № 4, 5 (2012).
17. D. Xiao, W. Yao, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 236809 (2007).
18. A. Rycerz, J. Tworzydło, and C.W.J. Beenakker, *Nature Phys.* **3**, 172 (2007).
19. S.A. Tarasenko and E.L. Ivchenko, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **81**, 292 (2005).

20. L.E. Golub, S.A. Tarasenko, M.V. Entin, and L.I. Magarill, *Phys. Rev. B* **84**, 195408 (2011).
21. Y. Jiang, T. Low, K. Chang, M. Katsnelson, and F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 046601 (2013).
22. T.L. Linnik, unpublished.
23. V.I. Gavrilenko, N.I. Klyui, V.G. Litovchenko, and V.E. Strelmskii, *Phys. Status Solidi B* **145**, 209 (1988).
24. V.G. Lytovchenko, M.V. Strikha, and M.I. Klyui, *Ukr. J. Phys.* **56**, 175 (2011).

Одержано 11.11.13

В.Г. Литовченко, А.И. Курчак, М.В. Стриха

АНИЗОТРОПИЯ
ПРОВОДИМОСТИ ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА
ПРИ ОТНОСИТЕЛЬНОМ СМЕЩЕНИИ ЕГО СЛОЕВ

Резюме

В рамках метода сильной связи исследована трансформация зонного спектра двухслойного графена (ДГ) со сдвинутыми один относительно другого графеновыми слоями. Показано, что во всем диапазоне экспериментально актуальных значений сдвига ДГ остается материалом с нулевой запрещенной зоной, однако размещение точек соприкосновения зоны проводимости и валентной зоны при этом существенно зависит от направления сдвига плоскостей одна относительно другой. Следствием сдвига является появление существенной анизотропии зон, которая, в свою оче-

редь, приводит к существенной (порядка 10–20%) анизотропии проводимости ДГ. Обсуждено возможное применение такой анизотропии в чувствительных сенсорах механических напряжений и для генерации в анизотропном многодолинном ДГ чисто долинного тока при условии равенства нулю среднего электронного спина и электронного тока.

V.G. Lytovchenko, A.I. Kurchak, M.V. Strikha

ANISOTROPY
OF CONDUCTIVITY IN BILAYER GRAPHENE
WITH RELATIVELY SHIFTED LAYERS

Summary

A transformation of the band structure in bilayer graphene (BLG) with relatively shifted layers has been studied in the framework of the tight-binding model. BLG is demonstrated to remain a zero-gap material in the whole range of experimentally attainable shifts, but the positions of contact points between the conduction and valence bands depend substantially on the shift direction. The shift results in a considerable anisotropy of the band spectrum, which is, in turn, responsible for a substantial (10–20%) anisotropy of the conductivity in BLG. A possibility of using this anisotropy in high-sensitive sensors of a mechanical tension and for the generation of a purely valley current in multivalley anisotropic BLG in the case where both the average spin and the average current of electrons are equal to zero is discussed.