Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 9, с. 616 – 620 © 2022 г. 10 ноября

Диаграммы Ванье для полупроводникового искусственного графена

О. А. Ткаченко[+1)], *В. А. Ткаченко*[+*], *Д. Г. Бакшеев*[*], *О. П. Сушков*[×]

[+]*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

[*]*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия*

[×]*University of New South Wales, 2052 Sydney, Australia*

Поступила в редакцию 19 сентября 2022 г.
После переработки 19 сентября 2022 г.
Принята к публикации 21 сентября 2022 г.

Промоделирован квантовый транспорт в полупроводниковых гексагональных решетках антиточек с периодом 80 нм и коротковолновым беспорядком. Вычислены карты плотности состояний DoS как функции от напряженности магнитного поля B и концентрации электронов n (диаграммы Ванье) для нескольких амплитуд модуляции потенциала, сравнимых или существенно больше энергии Ферми. Глубокие провалы плотности состояний на картах имеют вид лучей положительного, нулевого и отрицательного наклона. Помимо веера лучей, разделяющих первый и второй, второй и третий уровни Ландау, на картах есть лучи им параллельные, сдвинутые по вертикали и горизонтали на целое число характерных значений концентрации n_0 и магнитного поля B_0. Показано, что знак и величина наклона лучей DoS соответствуют центрам плато квантованных холловских сопротивлений R_{xy}. Яркими проявлениями решетки на картах $R_{xy}(n, B)$ являются реплики первого и второго плато R_{xy} и осцилляции R_{xy} между отрицательными и положительными значениями при фиксированном магнитном поле или концентрации, что говорит о смене дырочного и электронного типа носителей.

DOI: 10.31857/S1234567822210091, EDN: lhuotl

В настоящее время активно создаются и изучаются искусственные материалы и системы, подобные естественному графену, с дираковским конусом в законе дисперсии, но в другом диапазоне параметров [1–4]. Гексагональные решетки антиточек с периодом 80–120 нм, сформированные с помощью нанолитографии в высокоподвижном двумерном электронном газе (ДЭГ) гетероструктур GaAs/AlGaAs, называют полупроводниковым искусственным графеном (ПИГ) [4, 5]. В ПИГ интересны две точки Дирака: первая возникает при пересечении двух нижних минизон, и вторая – при пересечении четвертой и пятой минизон [6–9]. Было показано, что в отсутствие беспорядка квантование Ландау–Дирака возникает вблизи точки Дирака в очень слабых магнитных полях $B < 10$ мТл [5]. Однако до сих пор не было сообщений о наблюдении точек Дирака в квантовом транспорте ПИГ. Главной помехой в этом является беспорядок [9, 10], и пока присутствие точек Дирака в ПИГ подтверждено только изучением фотолюминисценции при межзонных переходах в квантовой яме GaAs при $B = 0$ [4]. Тем не менее, проявления магнито-электрического минизонного спектра решетки или бабочки Хофштадтера [11] были зарегистрированы на квадратной решетке с периодом около 100 нм, когда энергия Ферми E_F во много раз превосходила амплитуду модуляции V [12]. Для высоких уровней Ландау наблюдалось немонотонное поведение холловского сопротивления, при этом беспорядок хорошо экранировался.

Для появления хорошо определенного дираковского конуса в ПИГ высота барьеров потенциала в антиточках должна существенно превышать уровень Ферми. Влияние беспорядка в этом случае становится сильным и может разрушать дираковскую точку [9]. Как показывают измерения, от амплитуды периодической модуляции зависят наблюдаемые эффекты [13]. Так, при слабой модуляции видны только эффекты магнитного пробоя [14, 15], и с ростом амплитуды модуляции они пропадают. Расчеты квантового транспорта в ПИГ без учета беспорядка показали, что в окрестности точек Дирака при низких магнитных полях снизу и сверху по концентрации от нулевого уровня Ландау формируются плато дырочной и электронной проводимости [5]. Недавно без учета беспорядка промоделированы магнитоэлектрические минизоны и краевые состояния в ПИГ при больших магнитных полях [16]. Интегральную картину влияния решетки можно получить, если построить карты DoS(n, B) в зависимости от магнит-

[1)]e-mail: otkach@list.ru

ного поля и концентрации носителей, т.е. диаграммы Ванье [17]. Примером могут служить экспериментально изученные графеновые сверхрешетки, имеющие период около 15 и 35 нм и демонстрирующие клонирование основной дираковской точки и бабочку Хофштадтера [1–3].

В настоящей работе мы представляем вычисленные диаграммы Ванье для разных амплитуд модуляции полупроводниковой решетки антиточек с учетом коротковолнового беспорядка. Расчеты холловского сопротивления R_{xy} показывают тесную связь $\mathrm{DoS}(n,B)$ с $R_{xy}(n,B)$. Вычисленные карты плотности состояний помогут прогнозировать результаты измерений и дать оценку реальных уровней модуляции и беспорядка.

Мы используем в расчетах аналитическое задание потенциала $U(\mathbf{r})$ гексагональной решетки на квадрате размером 2–3 мкм: $U(\mathbf{r}) = V_d(\mathbf{r}) + V_0 \sum \cos(\mathbf{g_i}\cdot\mathbf{r})$, где L – период решетки, V_0 определяет амплитуду модуляции потенциала, а функция $V_d(\mathbf{r})$ задает беспорядок. Векторы обратной решетки определяются как

$$\mathbf{g}_1 = g_0(1, 1/\sqrt{3}), \tag{1}$$

$$\mathbf{g}_2 = g_0(0, 2/\sqrt{3}), \tag{2}$$

$$\mathbf{g}_3 = \mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_2 = g_0(1, -1/\sqrt{3}), \tag{3}$$

$$g_0 = 2\pi/L.$$

Подобно работе [15], функция $V_d(\mathbf{r}) = \delta \cdot V_r$ задает случайную добавку к потенциалу решетки в каждом сайте дискретной сетки ($h_x = h_y = 8$ нм), где величина V_r определяет амплитуду беспорядка, а δ – случайное число в диапазоне от -0.5 до 0.5. В работе [9] было показано, что зонный спектр решетки зависит только от безразмерной амплитуды модуляции потенциала $w_0 = 0.5V_0/E_0$, где характерная энергия $E_0 = \frac{8\pi^2}{9}\frac{\hbar^2}{m^* L^2}$. Для эффективной массы в GaAs $m^* = 0.067 m_e$ и периода решетки $L = 80$ нм характерная энергия равна $E_0 = 1.56$ мэВ. При низкой модуляции, $w_0 < 1$, третья и более высокие минизоны решетки налагаются на вторую минизону. С ростом модуляции минизоны поднимаются и расправляются, при $w_0 = 1.5$ уже сформированы третья плоская зона и вторая точка Дирака [9].

При рассмотрении решеток вводят характерные значения концентрации n_0 и магнитного поля B_0, где n_0 определяется как отношение двух частиц на площадь ячейки $n_0 = 2/(\sqrt{3}L^2/2)$, а B_0 соответствует значению, при котором магнитный поток, пронизывающий ячейку решетки $\phi = B\sqrt{3}L^2/2$, равен кванту $\phi_0 = h/e$. Отметим, что n_0 совпадает с концентрацией в первой точке Дирака $n_0 = n_{1D}$. Для периода $L = 80$ нм $B_0 \approx 0.75$ Тл и $n_0 \approx 3.6 \cdot 10^{10}$ см$^{-2}$.

Потенциал на полосе за пределами выделенной квадратной области принимался однородным и равным минимальному значению потенциала решетки в отсутствие беспорядка. Затем решалась задача одночастичного двумерного квантового рассеяния электронных волн, падающих слева и справа на обозначенный квадрат. В результате решения этой задачи методом рекурсивных функций Грина [18] вычислялись зависимости локальной плотности состояний DoS от энергии E и перпендикулярного магнитного поля B. Интегрированием $\mathrm{DoS}(E)$ на большом интервале по энергии вплоть до E_F можно находить зависимость $n(E_F)$ при заданном B [19]. Было показано, что задание малой мнимой части энергии в определении функции Грина позволяет эффективно сгладить интерференционные осцилляции $\mathrm{DoS}(E)$ без потери точности расчета концентрации. Дополнительно, с малым шагом менялся параметр B от нуля до режима квантового эффекта Холла. Таким образом были построены карты $\mathrm{DoS}(E,B)$, $\mathrm{DoS}(n,B)$ и определены зависимости $E_F(n,B)$. В этих расчетах период решетки был фиксирован $L = 80$ нм, для амплитуд модуляции $w_0 = 0.1, 0.25, 0.5, 1$ использован локальный беспорядок $V_r = 2$ мэВ, а для $w_0 = 1.5$ – $V_r = 5$ мэВ.

На рисунках 1 и 2 изображены карты, на которых желтым цветом показаны максимальные значения плотности состояний, а темным цветом минимальные значения. На этих картах можно наблюдать переход от веера уровней Ландау ($w_0 = 0.1$) до установления почти периодической картины ($w_0 = 1$) в области низких значений концентрации ($n < 2n_0$) и магнитного поля ($B < 2B_0$). В расчетах полная модуляция менялась от 1.4 мэВ ($w_0 = 0.1$) до 21.1 мэВ ($w_0 = 1.5$), циклотронная частота $\hbar\omega_c$ от 0 до 3.46 мэВ при 2 Тл.

На первых двух картах модуляция сравнительно слабая и мы видим уровни Ландау (Шубниковские осцилляции) – горбы DoS; провалы DoS между ними расходятся лучами из нуля по концентрации и магнитному полю. Провалы DoS отвечают либо краевым состояниям (наклонные линии), когда электроны внутри решетки отсутствуют и двигаются только вдоль края решетки, либо запрещенным зонам в решетке, когда электроны вовсе не входят в образец (горизонтальные линии). Наклон $k = \widetilde{n}/\widetilde{B}$ темных линий в безразмерных переменных $\widetilde{n} = n/n_0$, $\widetilde{B} = B/B_0$ прямо связан с квантованным кондактансом $G = kG_0$ или холловским сопротивлением $R_{xy} = 1/kR_0$, где $G_0 = 2e^2/h$, а $R_0 = 1/G_0$: тем-

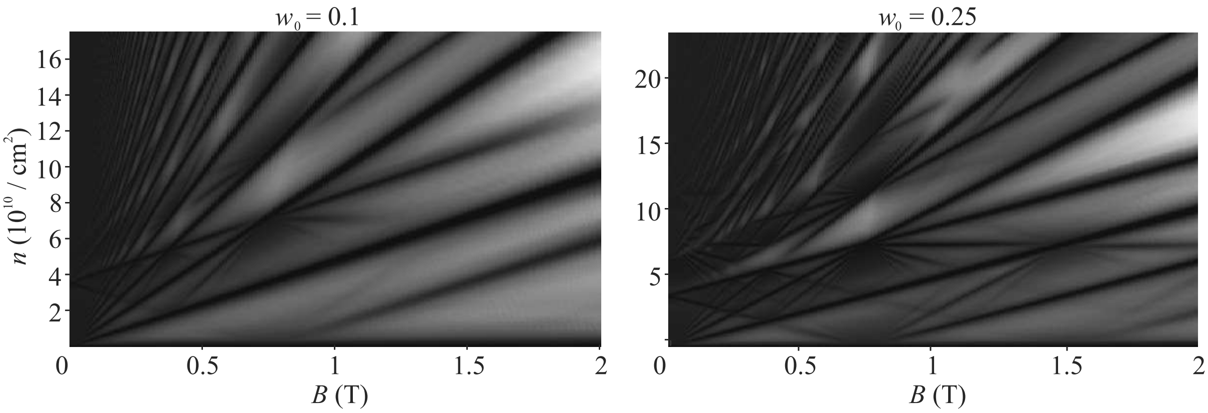

Рис. 1. (Цветной онлайн) Карты DoS(n, B) для решетки с модуляцией $w_0 = 0.1$, 0.25

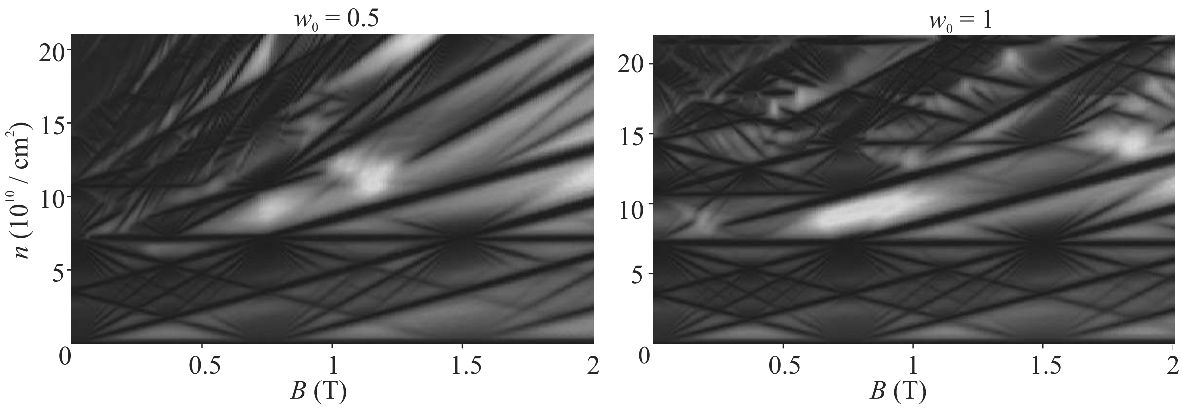

Рис. 2. (Цветной онлайн) Карты DoS(n, B) для решетки с модуляцией $w_0 = 0.5$, 1

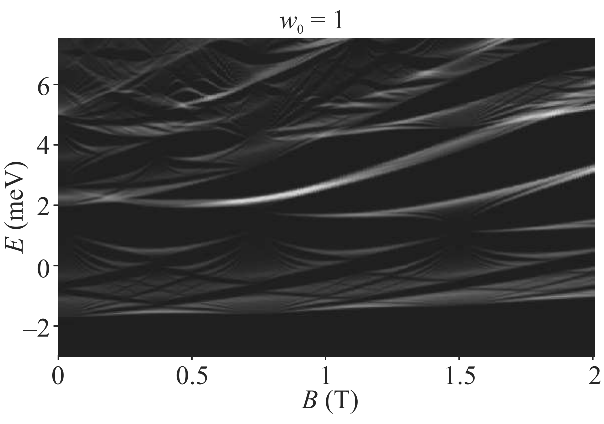

Рис. 3. Цветной онлайн) Карта DoS(E, B) для $w_0 = 1$

ные линии определяют центры плато квантованных значений кондактанса или сопротивлений. Сами плато R_{xy}, как показывают наши расчеты, всегда шире провалов DoS. Звездочки лучей DoS отвечают отстраиванию уровней Ландау от краев зон и выходят из точек на карте, координаты которых кратны характерным значениям концентрации n_0 и магнитного поля решетки B_0.

Отметим особенности графиков. Для $w_0 = 0.1$ из точки Дирака $(n_0, 0)$ выходят луч с наклоном вверх $(k = 1)$ и луч вниз $(k = -1)$, луч вниз выражен гораздо хуже. Точки $(2n_0, B_0)$, $(3n_0, B_0)$ являются центрами лучей разных наклонов, из точки $(0, B_0)$ выходит луч с наклоном $+1$. Появляются линии параллельные основным лучам, разделяющим уровни Ландау. Например, луч с наклоном $k = 2$, который сверху входит в точку $(3n_0, B_0)$, можно продолжить вниз до первой точки Дирака. Для $w_0 = 0.25$, 0.5, карта лучей становится более четкой. Поскольку лучи отвечают центрам плато холловского сопротивления, картина квантового Холла должна быть совершенно необычной и содержать три или четыре повторения первого плато $R_{xy} = R_0$. Хотя для $w_0 = 0.1{-}0.5$ в законе дисперсии при $B = 0$ нет щели запрещенных энергий, горизонтальный луч, который сначала появляется из точки $(2n_0, B_0)$ при $w_0 = 0.1{-}0.25$, распространяется в сторону слабых и сильных магнитных полей при $w_0 = 0.5$. Щель может замываться

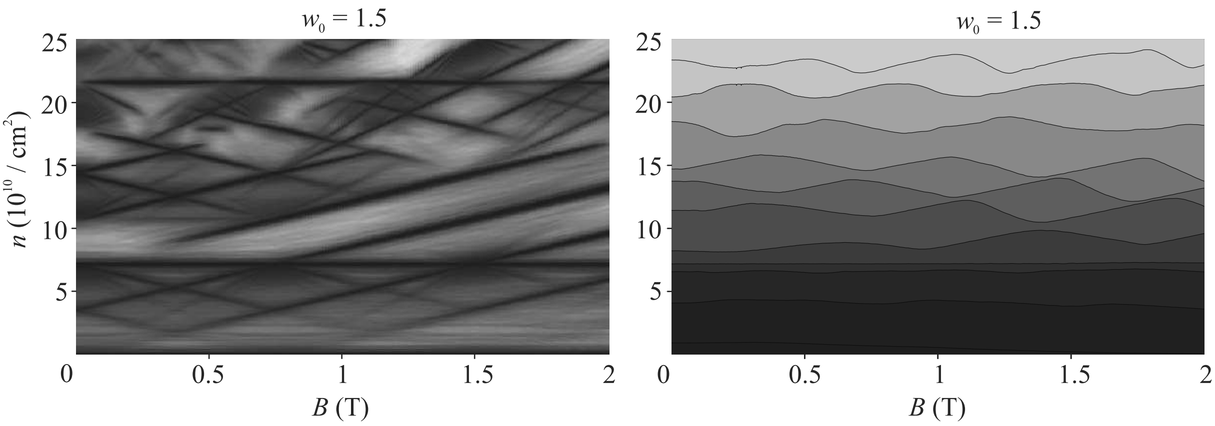

Рис. 4. (Цветной онлайн) Карты $\mathrm{DoS}(n, B)$ (слева) и карта $E_F(n, B)$ (справа) для $w_0 = 1.5$ при $V_r = 5$ мэВ

беспорядком, но она проявляется в расчетах как область высоких сопротивлений.

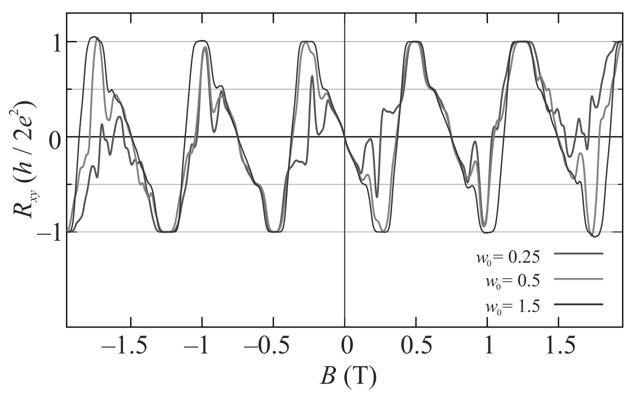

Рис. 5. (Цветной онлайн) $R_{xy}(B)$ для $w_0 = 0.25$, 0.5, 1.5, при постоянной концентрации $n = 6 \cdot 10^{10}$ см$^{-2}$ и беспорядке $V_r = 2$ мэВ

При $w_0 = 1$ между второй и третьей минизонами уже есть запрещенная зона, она видна на карте DoS как горизонтальный луч из точки $(2n_0, 0)$. Карта в диапазоне концентраций ниже $2n_0$ выглядит по магнитному полю почти периодично с периодом B_0. Из второй точки Дирака $(4n_0, 0)$ выходят два луча с наклоном ± 1 и лучи вниз с наклонами -3, -5, -7, которые говорят о квантовании Ландау–Дирака. При более высоких концентрациях из-за наложения разных минизон решетки ясная структура пропадает. Третья минизона решетки (плоская) характеризуется высокой плотностью состояний, она выделена яркой полоской DoS, которая идет от точки ($E = 2$ мэВ, $B = 0$) на рис. 3. Картина $\mathrm{DoS}(E, B)$ на плоскости (E, B) – это аналог бабочки Хофштадтера, рассчитанной почти на трех периодах по B_0 для решетки конечного размера с полной модуляцией 14 мэВ и с учетом беспорядка. При пересчете энергии в соответствующую концентрацию области с низким значением DoS сжимаются в узкие полосы, а области с высоким DoS расширяются, и вся криволинейная картина $\mathrm{DoS}(E, B)$ расправляется в серию прямых линий на плоскости (n, B) (аналог диаграммы Ванье).

На рисунке 4 при $w_0 = 1.5$ после заполнения 6 минизон в магнитном поле появляется еще одна горизонтальная линия, идущая из точки $n = 6n_0 = 21.65 \cdot 10^{10}$ см$^{-2}$. Сильный по амплитуде беспорядок $V_r = 5$ мэВ замывает тонкую структуру DoS. Доминируют лучи с наклонами ± 1, а веер обычных уровней Ландау исчез. В правой части рис. 4 показана карта энергии Ферми $E_F(n, B)$. Цветовая гамма карты $E_F(n, B)$ соответствует изменению энергии от -4 мэВ (темный цвет) до 8 мэВ (желтый). $E_F(B)$ при постоянной n почти периодически осциллирует.

Холловские сопротивления вычислялись с помощью программы Kwant [20] при таком же задании потенциала и беспорядка, в четырехтерминальной постановке. Сверху и снизу к правой и левой боковым граням квадрата с решеткой подходят два горизонтальных канала, через которые происходит рассеяние электронов. Четырехтерминальные сопротивления восстанавливаются по формулам Бьютиккера по вычисляемым в системе коэффициентам прохождения между контактами [21].

На рисунке 5 показан пример расчета холловского сопротивления для $n = 6 \cdot 10^{10}$ см$^{-2}$ для трех амплитуд модуляции при беспорядке $V_r = 2$ мэВ. При этой концентрации с ростом магнитного поля последовательно пересекаются полосы провалов DoS с отрицательным и положительным наклонами ± 1, при этом пилообразным образом меняется $R_{xy}(B)$. Плато $R_0/2$, $R_0/3$ не проявляются здесь из-за их узости. Области отрицательного холловского сопротивления свидетельствуют о дырочном типе проводимости. Поведение $R_{xy}(B)$ согласуется с картами $\mathrm{DoS}(n, B)$ и становится более выраженным с ростом модуляции. При $w_0 = 1.5$ кривая $R_{xy}(B)$ пересекает нуль почти точно при $jB_0/2$, где $j = 1, 2, 3, 4, 5$. Дополнительное замечание относится к типу беспорядка. Даже сильный коротковолновый беспорядок, учтенный в данных расчетах, не разрушает плато квантованных значений холловского сопротивления. Влияние длинноволнового беспорядка оказывается гораздо более сильным. Он возникает из-за немного разных размеров отверстий в затворе, задающим решетку антиточек. Мы обнаружили в расчетах, что беспорядок этого типа разрушает квантование холловского сопротивления в низких магнитных полях $B < 0.5B_0$ (значения R_{xy} уменьшаются, но знак сохраняется) и подавляет решеточные эффекты в сильных магнитных полях $B_0 < B < 3B_0$.

Итак, для полупроводникового искусственного графена вычислены зависимости $\mathrm{DoS}(E, B)$, $\mathrm{DoS}(n, B)$, $E_F(n, B)$ для амплитуды модуляции потенциала, сравнимой или больше энергии Ферми. Полученные карты являются наглядным и емким представлением квантования Ландау–Дирака, бабочки Хофштадтера и магнито-электрических осцилляций уровня Ферми. Показано, что на картах (n, B) веер уровней Ландау с ростом модуляции решетки транформируется в ячеистую сеть, образованную набором параллельных линий разных наклонов и противоположных знаков. Особенностью ПИГ является чередование типов носителей: дырочного и электронного, в результате чего холловское сопротивление $R_{xy}(B)$ осциллирует между отрицательными и положительными значениями. Результаты моделирования могут помочь интерпретации измерений магнитотранспорта в решетках. Примером в этом отношении являются диаграммы Ванье, которые были получены емкостными измерениями DoS в короткопериодных графеновых сверхрешетках [2, 3].

Данная работа выполнена с использованием ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН и при поддержке Российского научного фонда, грант # 19-72-30023.

Авторы благодарны за стимулирующее обсуждение коллегам, прежде всего, О. Клочану, Д. К. Ванг, З. Е. Криксу, А. Р. Гамильтону из Университета Нового Южного Уэльса, Австралия.

1. L. A. Ponomarenko, R. V. Gorbachev, G. L. Yu et al. (Collaboration), Nature **497**, 594 (2013).
2. G. L. Yu, R. V. Gorbachev, J. S. Tu et al. (Collaboration), Nature physics **10**, 525 (2014).
3. C. Forsythe, X. Zhou, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Pasupathy, P. Moon, M. Koshino, P. Kim, and C. R. Dean, Nature Nanotech. **13**, 566 (2018).
4. L. Du, Z. Liu, S. J. Wind, V. Pellegrini, K. W. West, S. Fallahi, L. N. Pfeiffer, M. J. Manfra, and A. Pinczuk, Phys. Rev. Lett. **126**, 106402 (2021).
5. O. A. Tkachenko and V. A. Tkachenko, JETP Lett. **99**, 204 (2014).
6. C.-H. Park and S. G. Louie, Nano Lett. **9**, 1793 (2009).
7. M. Gibertini, A. Singha, V. Pellegrini, M. Polini, G. Vignale, A. Pinczuk, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Phys. Rev. B **79**, 241406(R) (2009).
8. L. Nádvorník, M. Orlita, N. A. Goncharuk, L. Smrčka, V. Novák, V. Jurka, K. Hruška, Z. Výborný, Z. R. Wasilewski, M. Potemski, and K. Výborný, New J. Phys. **14**, 053002 (2012).
9. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, I. S. Terekhov, and O. P. Sushkov, 2D Materials **2**, 014010 (2015).
10. О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Физика **11**, 80 (2016).
11. D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976).
12. C. Albrecht, J. H. Smet, K. von Klitzing, D. Weiss, V. Umansky, and H. Schweizerd, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **20**, 143 (2003).
13. D. Q. Wang, D. Reuter, A. D. Wieck, A. R. Hamilton, and O. Klochan, Appl. Phys. Lett. **117**, 032102 (2020).
14. C. Albrecht, J. H. Smet, D. Weiss, K. von Klitzing, R. Hennig, M. Langenbuch, M. Suhrke, U. Rössler, V. Umansky, and H. Schweizer, Phys. Rev. Lett. **83**, 223470 (1999).
15. J. Schluck, J. Feilhauer, K. Pierz, H. W. Schumacher, D. Kazazis, U. Gennser, and T. Heinzel, Phys. Rev. B **98**, 165415 (2018).
16. Z. E. Krix and O. P. Sushkov, Phys. Rev. B **101**, 245311 (2020).
17. G. H. Wannier, Phys. Status Solidi B **88**, 757 (1978).
18. A. Cresti, R. Farchioni, G. Grosso, and G. P. Parravicini, Phys. Rev. B **68**, 075306 (2003).
19. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, D. G. Baksheev, and O. P. Sushkov, JETP Lett. **112**, 186 (2020).
20. C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal, New J. Phys. **16**, 063065 (2014).
21. M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).