

УДК 535.215

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ГРАФЕНЕ

© 2019 г. И. В. Капаев<sup>1</sup>, \*, Г. М. Казарян<sup>1</sup>, В. Л. Саввин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”,  
физический факультет, Москва, Россия

\*E-mail: kapaev.13@mail.ru

Электроника для детектирования и приема инфракрасного или оптического излучения развивается достаточно высокими темпами. Исследования, связанные с преобразованием терагерцевого излучения в электрический ток является важной задачей для поиска новых, перспективных способов преобразования солнечной энергии и энергии теплового излучения, конструкции новых ИК-детекторов и других целей.

DOI: 10.1134/S0367676519010113

Технологический уровень развития производства электронных приборов позволяет изготавливать структуры антенны, характерный размер которых сравним с длиной волны электромагнитного излучения в оптическом диапазоне. Этим обусловлена идея применения хорошо известных и проработанных устройств (ректенн) для преобразования инфракрасного и видимого излучения в энергию электрического тока [1–5].

Актуальность применения ректенн для сбора оптического или инфракрасного излучения можно обосновать следующими положениями. Эффективность полупроводниковых элементов ограничена теоретически пределом Шокли–Квейснера. Этот предел составляет примерно 33% для однопереходных фотоэлементов. Использование ректенн может позволить улучшить этот показатель. Кроме того, в инфракрасном диапазоне получаемая при помощи полупроводниковых устройств мощность существенно меньше эквивалентной мощности шума в данном диапазоне. Преимуществом ректенн также является то, что их спектральные свойства определяются не материалами, а структурой. Это позволяет производить гораздо более тонкую настройку этих устройств, чем полупроводниковых фотоэлементов. Создание эффективных ректенн в терагерцевом диапазоне длин волн осложняется из-за отсутствия эффективных выпрямляющих устройств: диодов. Одним из многообещающих диодов является новый тип диода – геометрический диод [6–9].

Геометрический диод (рис. 1) представляет собой электронное устройство, в котором текущий через него ток контролируется его геометрией и обладает низкими значениями сопротивления и

емкости, необходимыми для работы в терагерцевом диапазоне длин волн. Принцип работы геометрического диода состоит в следующем. Заряженные частицы дрейфуют в проводнике под действием внешнего напряжения, отталкиваясь от его границ и узлов кристаллической решетки. Если геометрия проводника имеет ассиметричный вид, как, например, на рис. 1, и длина свободного пробега частиц достаточно велика, то эти частицы с большей вероятностью проходят в одну сторону. В упрощенном случае столкновения можно считать упругими [10, 11].

Для такого устройства очень важно, чтобы ширина перешейка, соединяющего различные части диода, имела порядок длины свободного пробега носителей заряда. В противном случае ассиметричность вольт-амперной характеристики будет почти незаметна. Учитывая, что размер изготавливаемых структур ограничен технологически, можно утверждать, что в материале диода эта длина должна быть достаточно велика. Кроме того,

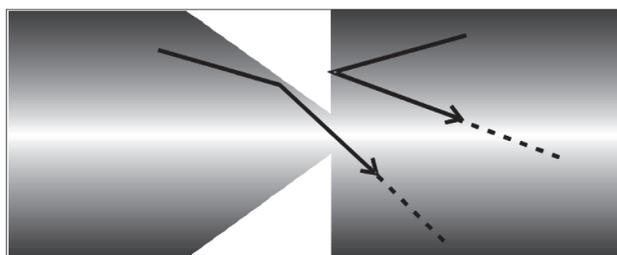


Рис. 1. Схема геометрического диода с баллистическими траекториями движения носителей заряда.

перешеек должен выдерживать высокие значения плотности тока, до значений  $10^6 \text{ А} \cdot \text{см}^{-2}$ . В первых исследованиях в области геометрических диодов в качестве материала использовали различные металлы. Однако выяснилось, что при комнатной температуре длина свободного пробега в металлах имеет значения не больше 50 нм [1]. Следовательно, перешеек такого диода должен быть крайне тонок. Уменьшение толщины слоя металла позволяет увеличить длину свободного пробега электронов в нем, но при этом неприемлемо уменьшается проводимость.

Лабораторные экземпляры геометрических диодов, выполненные из металлов и предназначенные для работы на оптических частотах, оказались крайне ненадежны и не обладали четко выраженными амплитудно-частотными характеристиками [4].

В последних исследованиях предлагается использовать вместо металлов графен, так как в нем длина свободного пробега электронов может достигать 1 мкм. При этом сохраняется хорошее значение подвижности электронов. Также было установлено, что графен способен выдерживать достаточно большие величины плотности тока, вплоть до  $10^8 \text{ А} \cdot \text{см}^{-2}$ .

Графен идеально подходит для работы в терагерцевом диапазоне из-за высокой подвижности носителей заряда при комнатной температуре и независимости поглощения излучения от частоты. Тем более высококачественные образцы графена поддерживают слабозатухающие плазменные волны [12]. Возможный диапазон работы простирается до значения в 176 ТГц, соответствующего длине волны в 1.7 мкм.

Графен — это двумерный материал толщиной в один атом, состоящий из атомов углерода, объединенных в гексагональную решетку и расположенных в вершинах правильных шестиугольников. То есть, графен — это двумерная структура, из чего проистекают некоторые необычные его свойства. Так, например, графен при комнатной температуре обладает намного большей теплопроводностью, чем другие структуры из углерода, такие как фуллерен и алмаз. Измеренные значения —  $5000 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ , что примерно в 5 раз выше, чем аналогичное значение для графита, который состоит из большого числа слоев [4, 12].

Графен также обладает необычными механическими свойствами. Он крайне легкий, но в то же время прочный и гибкий. Этот материал, может быть, растянут на 20% своей длины, прежде чем разрушится. Электроны в графене ведут себя как безмассовые квазичастицы. Подвижность электронов в графене достигает значений  $(1.5-4) \cdot 10^4 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$  при значениях плотности носителей заряда до  $10^{13} \text{ см}^{-2}$  при комнатной температуре. Значение сопротивления материала при этом  $10^{-6} \text{ Ом} \cdot \text{см}$ .

Важной особенностью также является возможность управления величиной химического потенциала или уровнем Ферми с помощью приложенного внешнего электрического поля. Скорость движения электронов в графене приблизительно равна  $v_f = 10^6 \text{ м/с}^{-1}$ , т.е. скорости Ферми.

Еще одна уникальная особенность графена — это его коническая зонная структура, которая позволяет контролировать концентрацию носителей заряда с помощью приложенного внешнего напряжения. Кроме того, в графене нет запрещенной зоны между валентной зоной и зоной проводимости.

В дираковских точках концентрации дырок и электронов равны между собой. Основной тип носителей заряда в графене может меняться под действием приложенного поля. Приложенное на затвор напряжение индуцирует в слой графена заряд, при этом ферми-уровень плавно поднимается из валентной зоны в зону проводимости, меняя основной тип носителей заряда с дырок на электроны (рис. 2). Можно использовать эту особенность для регулировки полярности в геометрических диодах.

Низкое значение емкости является отчасти результатом особой структуры поля между обеими частями стреловидного диода. Для расчета емкости диода была создана особая модель с удаленной частью в области перешейка. Расчетное значение емкости  $C = 3.6 \cdot 10^{-18} \text{ Ф}$  и за счет этого исключительно малое значение константы  $RC$ .

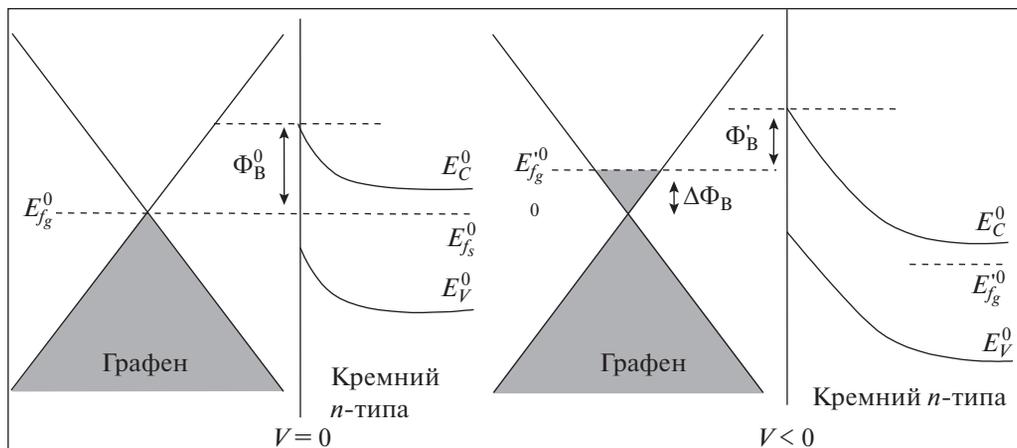
Измеренное сопротивление практического образца геометрического диода на частоте в 28 ТГц имело значение  $\sim 1 \text{ кОм}$  [4].

Быстродействие диода  $\tau$  можно оценить по следующей формуле:

$$\tau = \frac{L}{v_f},$$

где  $L$  — длина диода,  $v_f$  — скорость Ферми. На эту величину не оказывают влияния паразитные емкости, в отличие от диода Шоттки. Следовательно, значение быстродействия можно оценить как 250 фс. Это примерное время пролета носителя заряда между двумя электродами. Тогда величина, обратная быстродействию, будет равна 4 ТГц. Носители заряда расположены по всему объему образца графена, так что диод отреагирует на смену полярности напряжения быстрее указанного времени.

Описываемый подход основан на модели Друде, которую исследователи до сих пор применяют для описания электро-химических свойств графена. Моделирование выполнялось с помощью метода Монте-Карло, который успешно применяется для решения схожих задач транспорта в полупроводниковых материалах.



**Рис. 2.** Зонная структура контакта графена и кремния  $n$  – типа в равновесии (слева);  $E_c$ ,  $E_{f_s}$ ,  $E$  – зона проводимости, ферми-уровень и валентная зона кремния соответственно;  $F_{f_g}^0$  – равновесный ферми-уровень в графене;  $\Phi_B^0 = E_c - F_{f_g}^0$  высота барьера.  $F_{f_g}'$  и  $F_{f_s}'$  – ферми уровень при обратном смещении (справа); сдвиг вверх уровня Ферми в графене приводит к понижению барьера Шоттки, определяемого уже как  $\Phi_B' = \Phi_B - \Delta\Phi_B$ .

Согласно модели Друде, носители заряда в полупроводниках и металлах хаотически движутся внутри кристаллической решетки, пока не рассеиваются на узлах или других квазичастицах. После рассеяния электрон продолжает свое движение в произвольно направлении.

Процесс движения заряженных частиц представляет собой случайное блуждание или цепь Маркова. Появление внешнего потенциала накладывает на процесс блуждания свой отпечаток. Если нужно оценить значения тока через диод в какой-то момент времени, следует, рассматривая весь ансамбль частиц, оценить какое их количество за определенный промежуток времени окажется на электроде.

Эту задачу можно свести к комбинаторной задаче, в которой при заданном потенциале  $\phi(U)$  нужно оценить количество электронов, попавших на электрод за определенный промежуток времени. Решением такой задачи является рассмотрение всего множества возможных состояний  $X$  изучаемого ансамбля частиц при указанном потенциале, затем поиск наиболее вероятных состояний  $E$  и оценка протекающего тока  $I$  на основании этих наиболее вероятных состояний.

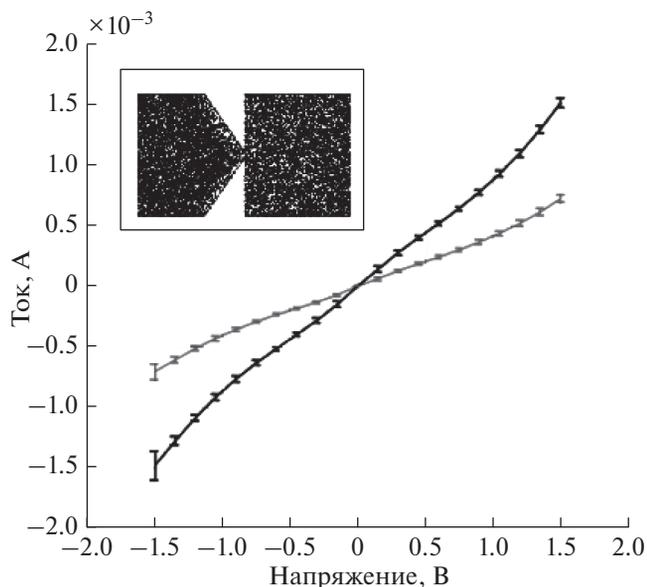
Также поиск наиболее вероятных состояний можно свести к поиску интеграла, который составляет подобласть в многомерном множестве всех возможных состояний ансамбля.

Модель представляет собой геометрическое поле, внутри которого осуществляют движение электроны. При приложении электрического поля на хаотическое движение электронов возникает дрейфовое движение в направлении, противоположном

действию электрического поля. Значение дрейфовой скорости определяется по формуле  $v_d = \mu E$ , т.е. при значениях подвижности, характерных для реальных физических систем, получаем значение на 2 порядка меньшее, нежели скорость хаотического движения, которая, как следует из уравнения Вейля, должна составлять  $v_F = \frac{c}{300} \approx 10^6 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$ . Тем не менее, несмотря на такую разницу, модель Друде все же позволяет получить вольт-амперную характеристику ожидаемой формы. В ходе вычислений в модели электрическое поле полагаем однородным.

Результатом работы программы на самом высоком уровне является вольт-амперная характеристика. Данная зависимость тока от напряжения может быть построена при множестве различных параметров физической системы. Разработанная численная модель транспорта заряженных частиц в двумерной структуре показала хорошее соответствие с доступными экспериментальными результатами в приближении идеальных контактов с электродами. Проведенный анализ полученных данных в результате численного моделирования показал, что величина угла раскрытия стреловидной части не оказывает существенного влияния на асимметрию вольт-амперной характеристики (рис. 3).

Положительно на величину тока геометрического диода из графена влияет концентрация носителей заряда, которая может регулироваться с помощью напряжения затвора и в основном зависит от качества образца. При этом, значения тока зависят от концентрации линейно и могут достигать десятков миллиампер.



**Рис. 3.** Вольт-амперная характеристика, полученная в результате численного моделирования; во вкладке — визуализация динамики частиц носителей заряда в геометрическом диоде.

Среди исследованных параметров особое влияние на асимметрию вольт-амперной характеристики оказывает диспропорция в частях с различ-

ной геометрией диода. В результате оптимизации показано, что предпочтительнее является трапециевидная форма вместо стреловидной геометрии предложенного устройства для усиления выпрямляющих свойств.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бу К.Т.Ч., Саввин В.Л., Казарян Г.М., Пеклевский А.В.* // Космонавтика и ракетостроение. 2017. № 2 (95). С. 70.
2. *Moddel G., Sachit G.* Rectenna Solar Cells. New York: Springer. 2013. P. 43.
3. *Zhu Z., Joshi S., Moddel G.* // IEEE J. selected topics in quantum electronics. 2014. Т. 20. V. 6. P. 1.
4. *Huang Z., Li X., Mahboub M. et al.* // Nano Lett. 2015. V. 15(8). P. 5552.
5. *Ruhle S.* // Solar Energy. 2016. V. 130. P. 139.
6. *De Vos A.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 1980. V. 13. P. 839.
7. *Dimroth F., Grave M., Beutel P. et al.* // Progress in Photovoltaics. 2014. V. 22. P. 277.
8. *Gedney D.* // IEEE Trans. Antennas Propagat. 1996. V. 44. P. 1630.
9. *Kazemi H., Shinohara K., Nagy G. et al.* // Infrared Technol. and Appl. XXXIII. 2007. V. 6542.
10. *Zhu Z.* // 37th IEEE Photovoltaic Spec. Conf. 2011. P. 2120.
11. *Castro A.H., Peres N.M., Novoselov K.S. et al.* // Rev. of Modern Phys. 2009. V. 81. P. 109.
12. *Кругляк Ю.А.* // Sci. Rise. 2015. V. 2. № 2(7). P. 94.