

Электронный транспорт в резонансно-туннельных композитных диаманоподобных наноструктурах

Гришаков К.С.^{1,2}, Грекова А.А.^{1,2}, Маслов М.М.^{1,2}, Катин К.П.^{1,2}

ingo.tyan2@mail.ru

¹ НИЯУ «МИФИ», Москва, Россия

² АНО НИИ НПМ, Москва, Россия

В данной работе исследуется возможность реализации эффекта резонансного туннелирования в диаманоподобных композитных Gr/BN наноструктурах. Диаманты образуются в результате механического или химического сращивания графеновых слоев (Gr), допированных водородом, таким образом все атомы углерода в такой системе sp^3 -гибридизованы [1]. Кроме классических углеродных диаманов известны также структуры, построенные аналогичным образом из гексагонального нитрида бора (BN). В рассматриваемых структурах за счет чередования Gr/BN слоев, имеющих разную ширину запрещенной зоны, создается типичная для наблюдения эффекта резонансного туннелирования двухбарьерная наноструктура, в которой электронный транспорт происходит через так называемые резонансные уровни энергии. Если энергия электронов, налетающих на резонансно-туннельную наноструктуру, совпадает с энергией резонансного уровня, то коэффициент прохождения через достигает своего максимального значения. При отклонении от резонанса величина коэффициента прохождения быстро уменьшается. Это приводит к наличию на вольтамперной характеристике резонансно-туннельных наноструктур области отрицательной дифференциальной проводимости.

Для проведения расчетов электронного транспорта в данной работе использовалась методика неравновесных функций Грина, реализованная в рамках приближения сильной связи, основанного на методе теории функционала электронной плотности, в программе dftb+. Данный подход позволяет проводить расчеты только статических характеристик резонансно-туннельных наноструктур. При этом наибольший интерес представляют динамические характеристики, в том числе для исследования перспектив применения таких структур для генерации и усиления электромагнитного излучения в ТГц диапазоне частот. Поэтому нами был использован подход, позволяющий перевести расчеты электронного транспорта в более простую модель, основанную на самосогласованном решении системы уравнений Шредингера и Пуассона с открытыми граничными условиями. Параметры для упрощенной модели (величина разрыва зона проводимости на границе Gr/BN диаманов [2], эффективная масса электронов и диэлектрическая проницаемость) находились из расчетов в теории функционала плотности. В результате проведенных расчетов показано, что в диаманоподобных композитных Gr/BN наноструктурах могут наблюдаться эффекты резонансного туннелирования. Исследованы особенности статических вольтамперных характеристик таких структур от параметров.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00179.

Ссылки

1. L.A. Chernozatonskii, K.P. Katin, V.A. Demin, M.M. Maslov, Applied Surface Science (2021), **537**, 148011.
2. H.-P. Komsa, E. Arola, E. Larkins, T.T. Rantala, J. Phys.: Condens. Matter (2008), **20**, 315004.