

УДК 537.311.322-0.22.532:530.145, 538.911

О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко

*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 13, Новосибирск, 630090, Россия*

*Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия*

otkach@list.ru, vtkach@isp.nsc.ru

**ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ К БЕСПОРЯДКУ
ГРАФЕНОПОДОБНЫХ РЕШЕТОК КВАНТОВЫХ ТОЧЕК И АНТИТОЧЕК
В ДВУМЕРНОМ ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ ***

Мы сравниваем трехмерную электростатику полупроводниковых структур с графеноподобными решетками квантовых точек и антиточек, сформированными в плоскости двумерного электронного газа. При заданной постоянной решетки, форма потенциала может быть подстроена таким образом, что обе решетки имеют минимальный спектр с выраженной второй дираковской особенностью, не перекрытой другими состояниями. Однако чувствительность решетки квантовых точек к ошибкам технологии остается более высокой, поскольку источники беспорядка на поверхности структуры в случае квантовых точек находятся над потенциальными ямами, заполненными электронами, а в случае антиточек – над потенциальными горбами (областями обеднения), где нет электронов. Таким образом, решетка антиточек оказывается более предпочтительной для получения полупроводникового искусственного графена.

Ключевые слова: двумерная сверхрешетка, гексагональная симметрия, мини-зоны, искусственный графен, дираковские особенности, гетероструктура, двумерный электронный газ, фигурный затвор, антиточки, квантовые точки, экранировка, критический беспорядок, суперкомпьютерные расчеты.

Успехи в изучении графена [1; 2] вновь возродили интерес к двумерным сверхрешеткам с периодом 100–200 нм в высокоподвижном двумерном электронном газе (ДЭГ) полупроводниковых гетероструктур GaAs/AlGaAs [3; 4]. Были предложены два способа электростатического формирования искусственного «графена» в ДЭГ. В одном случае для этого использовалась решетка типа пчелиных сот из туннельно связанных квантовых точек [3], в другом – треугольная решетка антиточек [4]. Такие электростати-

ческие двумерные кристаллы создаются для того, чтобы изучать квазиультарелятивистскую физику и безмассовые дираковские фермионы при энергиях на три порядка ниже, чем в графене. Но при одинаковом периоде сверхрешеток первый способ явно проигрывал второму. Так, в случае квантовых точек требовалось поддерживать энергию Ферми и искусственную модуляцию потенциала в ДЭГ на уровне 1 мэВ, а ширина первой дираковской особенности минимального спектра по оценкам была еще в 10

* Работа поддержана проектом РНФ № 14-22-00143.

Расчеты выполнялись на МВС-10П Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (Москва) с использованием Intel Xeon Phi.

Мы признательны О. П. Сушкову и И. С. Терехову за полезные дискуссии, Д. Г. Бакшееву за помощь в расчетах.

Ткаченко О. А., Ткаченко В. А. Чувствительность к беспорядку графеноподобных решеток квантовых точек и антиточек в двумерном электронном газе // Вестн. Новосиб. гос. ун-та. Серия: Физика. 2016. Т. 11, № 1. С. 80–87.

раз меньше. Заметим, что в этом проекте вторая дираковская особенность перекрывалась другими состояниями мини-зонного спектра и была недоступна для наблюдения. Напротив, во втором проекте эта особенность была явно выражена и имела ширину около 1 мэВ, при этом требовалась модуляция потенциала в ДЭГ порядка 10 мэВ. Трудной проблемой этих проектов был остаточный беспорядок, потому что для получения высокоподвижного ДЭГ предлагалось использовать обычную технологию модуляционно-легированных структур с большим (десятки нанометров) расстоянием между слоями легирования и ДЭГ. Как показали недавние расчеты, при этом флуктуационный примесный потенциал даже в однородном ДЭГ имеет масштаб в несколько миллиэлектрон-вольт [5]. Физики и технологи уже четверть века пытаются справиться с проблемой беспорядка, формируя двумерные электростатические сверхрешетки в самом чистом материале GaAs/AlGaAs. Искусственные рельефы и фигурные затворы на поверхности твердотельных структур, создаваемые методами нанолитографии, почти точно повторяют заданные шаблоны. Планарные ошибки составляют всего несколько нанометров, но примесные флуктуации потенциала в ДЭГ разрушают мини-зонный спектр. Поэтому мини-зонные эффекты в электростатических двумерных решетках до сих пор не наблюдались [6]. По счастью, примесные флуктуации подавлены в субмикронных системах с затворно-индуцированным ДЭГ [7]. Для этого используются два затвора, что позволяет отказаться от легирования структуры и отдельно управлять уровнем Ферми (концентрацией электронов) и амплитудой модуляции потенциала в ДЭГ. Недавно с учетом этого приема оптимизирован антиточечный проект искусственного графена, и расчетом выяснена роль технологического беспорядка в структуре, т. е. нанометровых ошибок в геометрии затворов [8].

В настоящей работе сообщается, что аналогичным образом оптимизирована решетка квантовых точек. В итоге вычислительных экспериментов определены параметры структуры и значения затворных напряжений, при которых в решетке квантовых точек есть вторая дираковская особенность, почти столь же широкая, что и в оптимизированной решетке антиточек. При этом в отличие

от исходного предложения [3] квантовые точки находятся не в туннельном, а в открытом режиме. Кроме мини-зонных спектров, для двух типов решеток сравниваются флуктуации удерживающего потенциала. Заметим, что флуктуации имеют сложную форму, и пока неизвестно, как найти проводимость решеток, но расчет кондактанса квантового резонатора, заполненного решеткой, отчасти компенсирует этот недостаток теории. Такое моделирование доступно лишь на основе расчетов 3D электростатики структур методом Томаса – Ферми и решения задачи 2D квантового рассеяния [7–10], например, методом рекурсивных функций Грина [11]. Соединение этих методов многократно испытано на субмикронных структурах при объяснении экспериментальных результатов [7; 9; 10], и возможна его проверка самосогласованным методом Хартри в случае идеально периодических решеток [8; 12].

Изученные здесь полупроводниковые структуры с двумя металлическими затворами и затворно-индуцированным ДЭГ схематически показаны на рис. 1. Отсутствие легирования обеспечивает подавление примесного беспорядка. Затвор на поверхности полупроводника имеет периодическую решетку отверстий и отделен от верхнего затвора тонким диэлектриком с высокой диэлектрической проницаемостью. Такой диэлектрик необходим для эффективной экранировки заряда поверхностных состояний на границе полупроводник-диэлектрик. Кроме того, поток электрической индукции от верхнего затвора эффективно проходит через отверстия и создает под ними в плоскости ДЭГ требуемые квантовые точки либо антиточки при подходящих затворных напряжениях V_{pg} и V_{tg} . Одно из напряжений предполагается притягивающим (создающим затворно-индуцированный ДЭГ), а другое – отталкивающим электроны. В случае антиточек решетка отверстий является треугольной, а напряжение V_{tg} – отталкивающим. В случае квантовых точек V_{tg} является притягивающим, а решетка имеет вид пчелиных сот (рис. 1, б, в).

Для количественного сопоставления результатов расчетов размер элементарных ячеек в этих двух решетках принимается одинаковым, и, следовательно, одинакова зона Бриллюэна (рис. 1, г). В каждой из структур отверстия могут быть не совсем

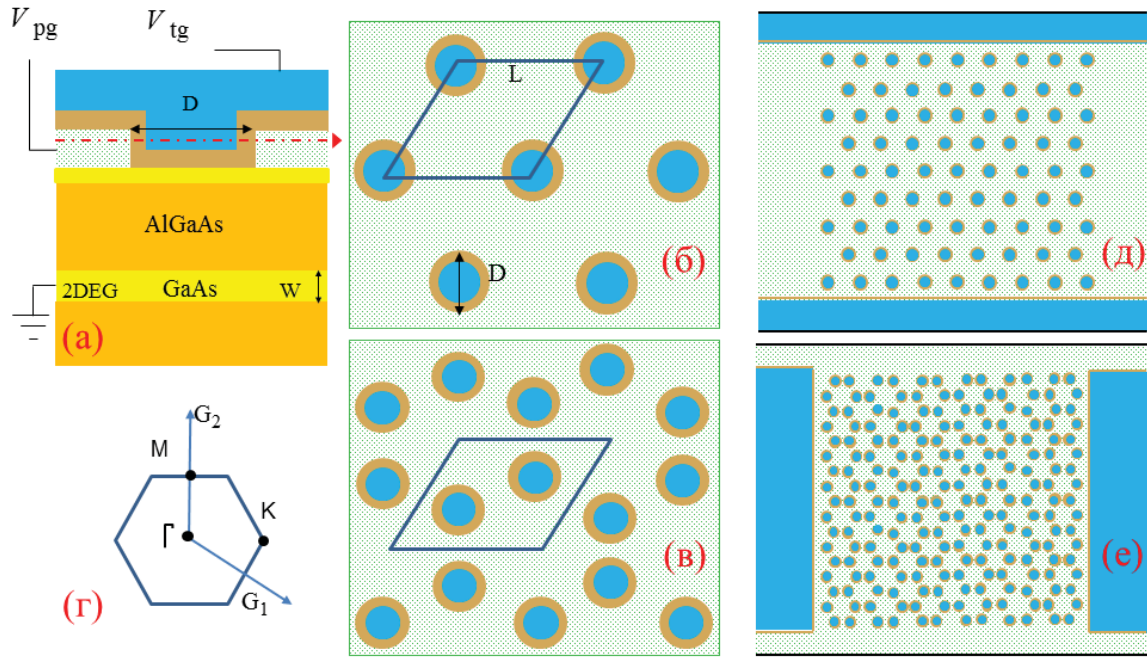


Рис. 1. Схемы структур в разрезе по вертикали (а) и в плоскости обозначенной штрихпунктирной стрелкой (б, в, д, е). Структуры с антиточками (б, д) и с квантовыми точками (в, е). Ромбы: б, в – элементарная ячейка решеток; z – зона Бриллюэна. Затворные системы квантовых резонаторов с решетками в широком волноводе (д, е) (волновод направлен по горизонтали)

одинаковыми и случайно сдвинутыми от идеальных положений (для имитации ошибок технологии). Чтобы узнать отклик ДЭГ на эти ошибки, мы изучаем квантовые резонаторы в широком электронном волноводе с затворно-индуцированным ДЭГ. Широкий электронный канал с плавным подъемом потенциала на краях создается по-разному для решеток антиточек и квантовых точек. В первом случае канал образуется под длинной полоской нижнего затвора, которая покрыта более широкой продольной полоской верхнего (рис. 1, д). Во втором случае канал образуется под полоской верхнего затвора, расположенного вдоль Н-образной более широкой полосы нижнего (рис. 1, е). В этих случаях анализировалось влияние беспорядка на удерживающий потенциал и кондактанс резонаторов. В результате вычислительных экспериментов найдены наиболее удачные параметры структур, достижимые на современном уровне технологии: расстояние между затворами или толщина диэлектрика $d = 5$ нм, толщина перфорированного затвора $h = 20$ нм и расстояние от поверхности полупроводника до двумерного газа $Z_{2\text{DEG}} = 37$ нм, период решетки $L =$

$= 130$ нм, диаметр отверстий в затворе $D = 60$ нм (случай антиточек) и 50 нм (случай квантовых точек). Уровень случайного варьирования радиусов и положений центров отверстий задавался в пределах 5 нм. Предельно большой размер квантового резонатора был 6×6 мкм². Оптимизация параметров проводилась для структуры с антиточками в [8], а для структуры с квантовыми точками в [12].

Исходя из строения структуры и значений V_{pg} , V_{tg} решались трехмерное уравнение Пуассона и двумерное уравнение Шредингера [8; 12]. В подходе Томаса – Ферми электронная концентрация в уравнении Пуассона вычисляется в локальном приближении по двумерной квазиклассической плотности состояний. Далее с найденным эффективным 2D потенциалом решается уравнение Шредингера, и в случае периодических решеток находится мини-зонный энергетический спектр (закон дисперсии). В более точном подходе Хартри для периодической решетки можно самосогласованно решать уравнение Пуассона и уравнение Шредингера, вычисляя концентрацию электронов интегрированием плотности вероятности по подзонам,

частично или полностью занятым электронами [8; 12].

На рис. 2, а показано, что использование методов Хартри и Томаса – Ферми дает близкие потенциалы в случае периодических графеноподобных систем антиточек.

Соответственно мини-зонные спектры, найденные по этим потенциалам одинаковы с точностью до слабого сдвига. Из результатов этого и других сравнений следует, что электронная экранировка внешних полей, создаваемых затворами, одинаково хорошо

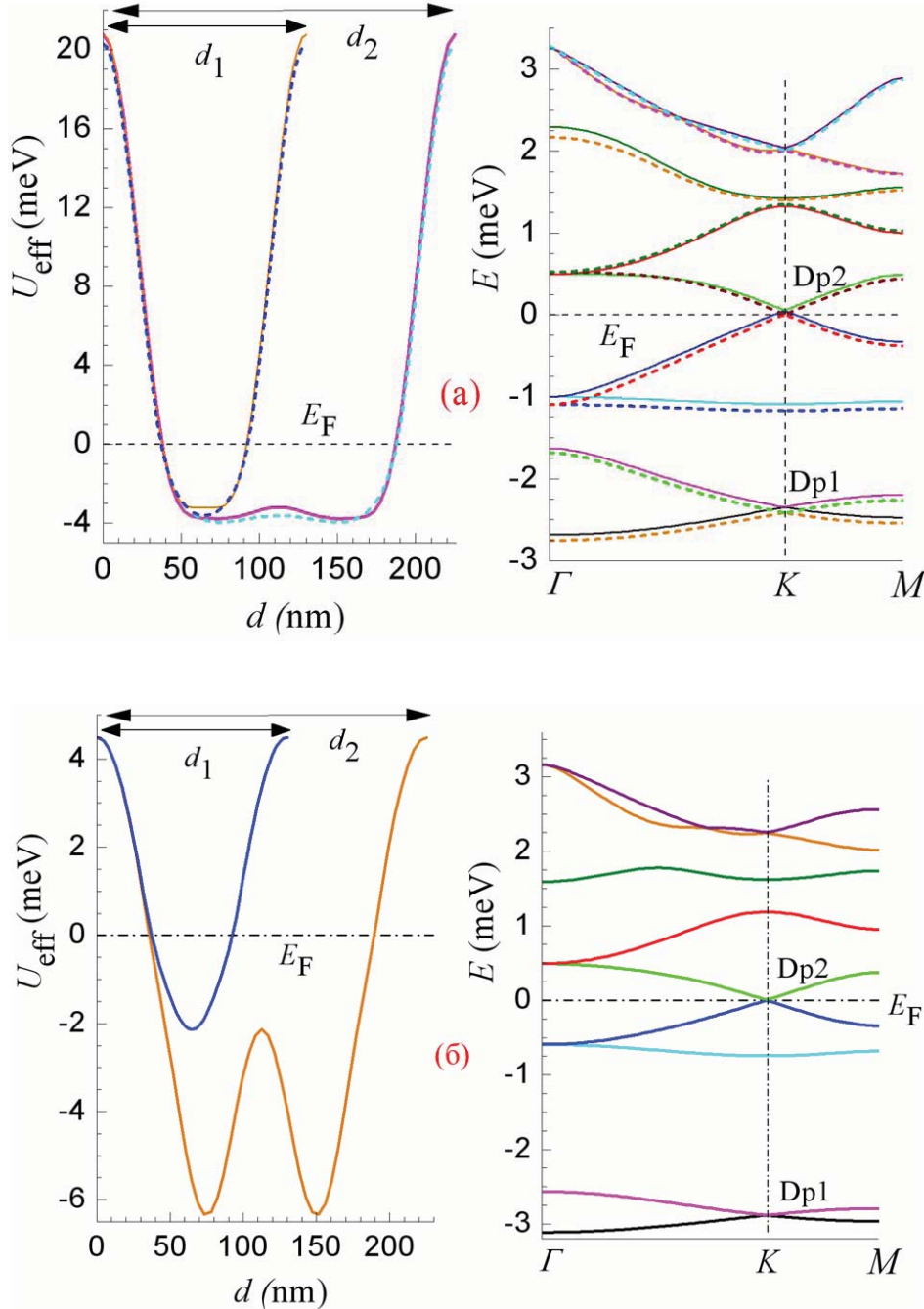


Рис.2. Пример сравнения методов Хартри (сплошные линии) и Томаса – Ферми (пунктир) при расчете удерживающих потенциалов и зонных спектров для решетки антиточек (а). В данном случае $V_{\text{tg}} = 400$ мВ; $V_{\text{pg}} = 840,5$ мВ (Хартри) и $V_{\text{pg}} = 842,7$ мВ (Томас – Ферми). Расчет по Томасу – Ферми потенциала и спектра в случае решетки квантовых точек для оптимальных $V_{\text{pg}} = 742$ мВ, $V_{\text{tg}} = 1225$ мВ (б). Потенциалы показаны для сечений вдоль диагоналей элементарной ячейки решеток. Зависимости энергии от квазиимпульса даны для направлений $\Gamma - K$ и $K - M$ зоны Бриллюэна

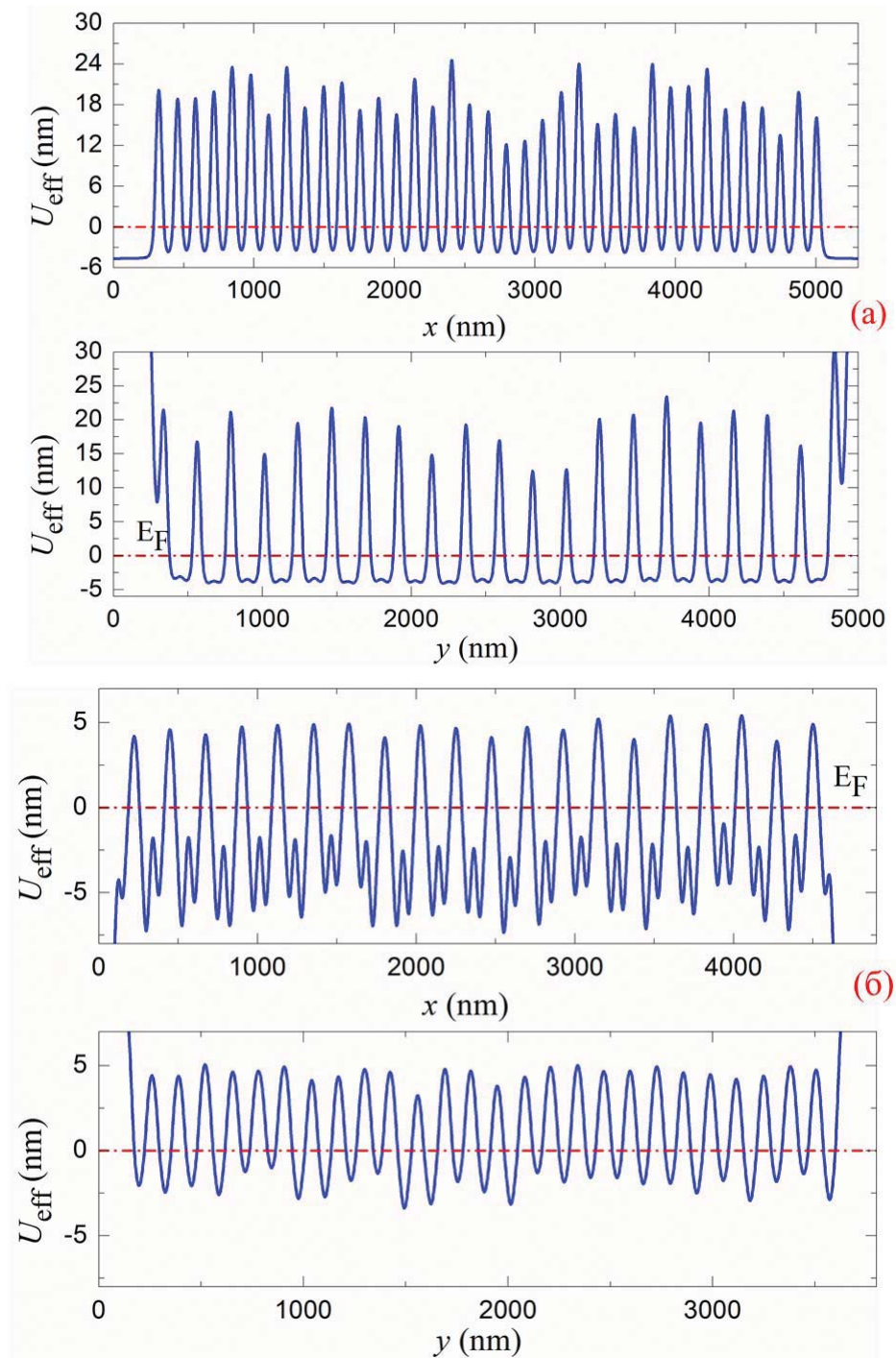


Рис. 3. Примеры удерживающего потенциала для сечений через центр квантового резонатора, направленных вдоль x и поперек y широкого канала. Расчет с учетом уровня беспорядка 5 нм в радиусах и положении отверстий в затворе: a – решетка антиточек, $V_{\text{tg}} = 400$ мВ, $V_{\text{pg}} = 841$ мВ; b – решетка квантовых точек, $V_{\text{pg}} = 742$ мВ, $V_{\text{tg}} = 1225$ мВ

описывается двумя разными приближениями, когда речь идет о близости экспериментально интересной второй дираковской особенности к уровню Ферми. Очевидным (но не достаточным) условием сохранения этой особенности при беспорядке является от-

сутствие больших флуктуаций внешних полей по сравнению с их регулярной модуляцией. При этом условии механизм электронной экранировки случайных и регулярных внешних полей будет одинаковым. Следовательно, метод Томаса – Ферми дол-

жен быть надежен также при учете беспорядка в больших квантовых резонаторах, заполненных электронными решетками.

Рисунок 2, б показывает, что для решетки с квантовыми точками в наноструктуре из рис. 1, в можно подобрать затворные напряжения так, что под отверстиями в нижнем затворе возникают открытые квантовые точки (седловые точки потенциала лежат ниже уровня Ферми E_F), и в мини-зонном спектре периодической решетки присутствует вторая дираковская особенность, не перекрытая другими состояниями, что резко отличается от попытки создания графеноподобной системы туннельно связанных квантовых точек [3]. Соответственно концентрация электронов может быть увеличена в 4 раза, что важно для подавления беспорядка с помощью электронной экранировки. Из сравнения верхней и нижней частей рис. 2 видно, что вторая дираковская особенность в спектре решетки квантовых точек при использованных напряжениях является столь же широкой, что и в случае решетки антиточек.

При моделировании больших квантовых резонаторов, встроенных в широкий электронный волновод, эффективный потенциал вычисляется в модели Пуассона – Томаса – Ферми на прямоугольной сетке для данной пары значений V_{pg} , V_{tg} с учетом реальных условий формирования резонатора включая краевые эффекты и беспорядок в геометрии затворов [8; 12]. Для найденного потенциала вычисляется кондактанс решетки методом рекурсивных функций Грина [11]. На рис. 3, а, б показан пример моделирования электростатики двух разных структур с беспорядком 5 нм в радиусах и положении отверстий в нижнем из затворов. Видно, что в случае оптимизированной решетки антиточек (см. рис. 3, а) флуктуации потенциала в электронных каналах, т. е. где $U_{eff} < 0 = E_F$, почти полностью подавлены. Заметим, что этот полезный эффект электронной экранировки ослабляется при отходе от оптимальных параметров структуры (например, при увеличении глубины залегания ДЭГ) и с увеличением беспорядка [8]. Из рис. 3, а ясно, что в барьерах флуктуации достигают нескольких миллиэлектрон-вольт. Таким образом, масштаб данных флуктуаций *не меньше*, чем было бы из-за примесного беспорядка в структурах с легированием [5]. Примесные флуктуации были бы большими

и в электронных каналах, но в моделируемой структуре они подавлены отсутствием легирования. Флуктуации потенциала из-за неодинаковости отверстий в затворе, как можно предвидеть из квантовой механики, не столь важны для электронного транспорта через резонатор с антиточками, поскольку в барьерах нет электронов ($U_{eff} > E_F$). В случае оптимизированной решетки квантовых точек отклик эффективного потенциала на беспорядок является качественно иным: флуктуации в барьерах на порядок ослаблены по сравнению с антиточечным вариантом и теперь флуктуациям больше подвергаются потенциальные ямы, нежели барьеры (рис. 3, б).

Рисунок 4 дополнительно проясняет эту ситуацию. Он показывает распределение флуктуаций потенциала $\delta U = U^{disord} - U^{ideal}$ для решеток квантовых точек и антиточек. Постоянная решетки одинакова: 130 нм. Расчеты выполнены для уровня беспорядка в радиусах и смещениях центров отверстий в затворе $\delta r = 5$ нм. Мы проверили, что для беспорядка 2,5 нм распределения оказываются в 2 раза уже. Распределение флуктуаций потенциала для решетки антиточек имеет высокий узкий центральный пик и широкие низкие крылья. По сути, это сумма двух распределений для флуктуаций в потенциальных барьерах и в электронных каналах под уровнем Ферми.

Флуктуации в барьерах сильные, потому что источник беспорядка находится прямо над антиточкой, и к тому же они плохо

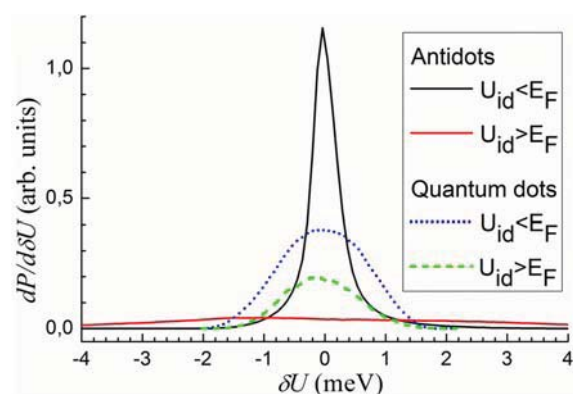


Рис. 4. Сравнение статистик флуктуаций эффективного потенциала $\delta U_{eff} = U^{disord} - U^{ideal}$ отдельно для случаев U^{ideal} меньше и больше E_F в решетках антиточек либо квантовых точек при тех же параметрах структуры, что и на рис. 3

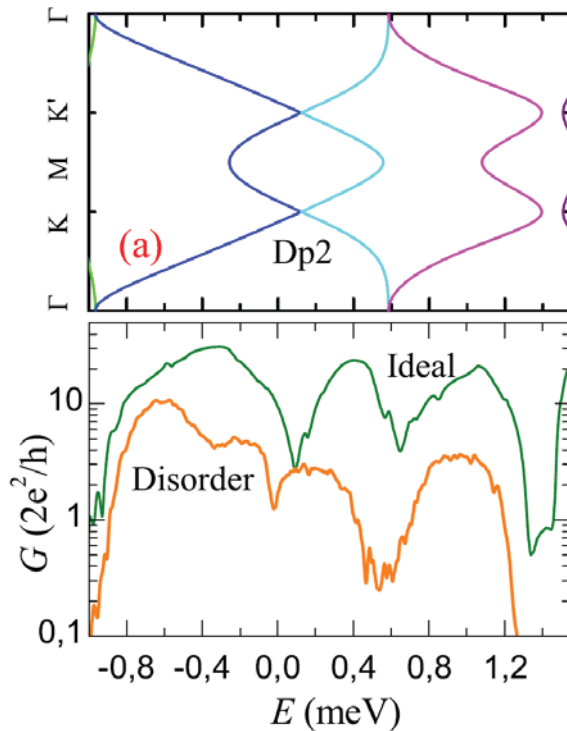


Рис. 5. Фрагмент зонного спектра на интервале по энергии, содержащем вторую точку Дирака (Dp2), в случае структуры с периодической решеткой антиоточек (а). Кондактанс резонатора с идеализированным и реалистичским потенциалами в случае решетки антиоточек (б). $V_{ig} = 400$ мВ, $V_{pg} = 841$ мВ, беспорядок 2,5 нм в радиусах и положении отверстий в затворе

экранируются. Флуктуации в каналах, напротив, экранируются гораздо лучше. Что касается решетки квантовых точек, то распределение флуктуаций потенциала в области, заполненной электронами, шире, чем в барьерах. Это подтверждает очевидное правило, по которому флуктуации под источниками беспорядка (отверстиями в затворе) сильнее, чем в областях между ними. В решетке квантовых точек опасные флуктуации при $U_{eff} < E_F$ достигают 1 мэВ уже при беспорядке 2,5 нм, они соизмеримы с шириной второй дираковской особенности (см. рис. 2, б) и разрушают мини-зонный спектр. Напротив, в случае антиоточек при беспорядке 2,5 нм флуктуации потенциала при $U_{eff} < E_F$ незначительны. Следовательно, можно ожидать сохранения особенностей мини-зонного спектра в электронном транспорте.

Из рис. 5 видно, что это предсказание выполняется: вторая дираковская особенность, которая находится возле уровня Ферми, сохраняется в кондактансе кванто-

вого резонатора при данном уровне беспорядка. Более того, видно совпадение по энергии всех четырех Γ , K особенностей спектра с провалами кондактанса для идеализированных структур и небольшое смещение точки Дирака в случае беспорядка.

Нужно заметить, что для определения критического уровня беспорядка, который для решетки антиоточек составляет $\delta r = 2,5$ нм, а для решетки квантовых точек оказывается еще меньше, требуется выполнять расчеты электростатического потенциала с шагом, меньшим, чем δr , чтобы не усиливать влияние беспорядка при недостаточной аппроксимации на прямоугольной сетке круглых отверстий в затворе. Нелинейное уравнение Пуассона решалось методом простых итераций. Ускорение расчетов достигалось с помощью Intel Xeon Phi и Open MP. Для больших задач использовалась двумерная декомпозиция трехмерной области, и вычисления проводились на нескольких узлах кластерной суперЭВМ с помощью MPI.

Итак, расчетами исследованы и оптимизированы конструкции структур с графеноподобными решетками двух типов в затворно-индуцированном ДЭГ. Выяснено, что мини-зонные спектры оптимальных строго периодических решеток антиоточек и квантовых точек сходны. Однако вторая дираковская особенность менее чувствительна к ошибкам технологии в случае антиоточек, чем в случае квантовых точек. Следовательно, решетка антиоточек является более удачным вариантом для получения полупроводникового искусственного графена. Обе системы с оптимальными и иными параметрами могут быть сделаны однотипными операциями в одном холловском мостике, и, если предсказания подтвердятся измерениями, это станет первой реализацией рукотворного 2D квантового кристалла и сильной проверкой качества нанoeлектронных технологий.

Заметим, что для создания полупроводникового искусственного графена требуются технологии ультравысокого качества, и несколько групп в мире при сотрудничестве технологов, экспериментаторов и теоретиков из разных стран активно работают над решением этой сложной проблемы [3; 4]. Задача авторов данной публикации состояла в том, чтобы поддержать начатые теоретические и экспериментальные исследования реалистичским численным моделированием полупроводниковых структур и наносистем.

Список литературы

1. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I. V., Firsov A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science*. 2004. Vol. 306. No. 5696. P. 666–669.
2. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Katsnelson M. I., Grigorieva I. V., Dubonos S. V., Firsov A. A. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene // *Nature*. 2005. Vol. 438. No. 7065. P. 197–200.
3. Gibertini M., Singha A., Pellegrini V., Polini M., Vignale G., Pinczuk A., Pfeiffer L. N., West K. W. Engineering artificial graphene in a two-dimensional electron gas // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. No. 24. P. 241406 (1–4).
4. Nádovnik L., Orlita M., Goncharuk N. A., Smrcka L., Novak V., Jurka V., Hruska K., Vyborny Z., Wasilewski Z. R., Potemski M., Vyborny K. From laterally modulated two-dimensional electron gas towards artificial graphene // *New J. Phys.* 2012. Vol. 14. P. 053002 (1–16).
5. Barthelemy P., Vandersypen L. M. K. Quantum Dot Systems: a versatile platform for quantum simulations // *Annalen der Physik*. 2013. Bd. 525. Nu. 10–11. S. 808–826.
6. Ткаченко О. А., Ткаченко В. А. Полупроводниковый искусственный графен: эффекты в слабых магнитных полях // *Письма в ЖЭТФ*. 2014. Т. 99, вып. 4. С. 231–236.
7. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Baksheyev D. G., Pyshkin K. S., Harrell R. H., Linfield E. H., Ritchie D. A., Ford C. J. B. Electrostatic potential and quantum transport in a one-dimensional channel of an induced two-dimensional electron gas // *J. Appl. Phys.* 2001. Vol. 89. No. 9. P. 4993–5000.
8. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Terkhov I. S., Sushkov O. P. Effects of Coulomb screening and disorder on artificial graphene based on nanopatterned semiconductor // *2D Materials*. 2015. Vol. 2. P. 014010 (1–12).
9. Ткаченко О. А., Ткаченко В. А., Кwon З. Д., Латышев А. В., Асеев А. Л. Интроскопия квантовых нанoeлектронных устройств // *Российские нанотехнологии*. 2010. Т. 5. С. 117–127.
10. Ткаченко О. А., Ткаченко В. А. Суперкомпьютерное моделирование полупроводниковых квантовых наносистем // *Вычислительные методы и программирование*. 2012. Т. 13. С. 253–262.
11. Cresti A., Farchioni R., Grosso G., Parravicini G. P. Keldysh-Green function formalism for current profiles in mesoscopic systems // *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 68. No. 7. P. 075306 (1–8).
12. Ткаченко О. А., Ткаченко В. А. Моделирование графеноподобных полупроводниковых наносистем // *Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики – 2015: Тр. Междунар. конф., посвящ. 90-летию со дня рождения академика Гурия Ивановича Марчука / Ин-т вычислительной математики и математической геофизики СО РАН [Электронный ресурс]*. Новосибирск: Абвей, 2015. Электрон. опт. диск. С. 664–670. ISBN 978-5-9905347-2-8.

Материал поступил в редколлегию 01.12.2015

О. А. Tkachenko, V. A. Tkachenko

*Institute of Semiconductor Physics of SB RAS
13 Acad. Lavrentiev Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation
Novosibirsk State University
2 Pirogov Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation
otkach@list.ru, vtkach@isp.nsc.ru*

SENSITIVITY TO DISORDER OF GRAPHENE-LIKE LATTICES OF QUANTUM DOTS AND ANTIDOTS IN TWO-DIMENSIONAL ELECTRON GAS

We compare three-dimensional electrostatics of semiconductor structures with graphene-like lattices of quantum dots and antidots formed in the plane of the two dimensional electron gas. With lattice constant fixed, the shape of the potential may be tuned so that both lattices have miniband spectrum where the second Dirac feature is pronounced and not overlaid by the other states. We show that the lattice of quantum dots is more sensitive to fabrication imperfections, because sources of the disorder are located directly above the electronic channels. Thus the lattices of antidots should be preferred semiconductor artificial graphene candidates.

Keywords: two-dimensional superlattices, hexagonal symmetry, minibands, artificial graphene, Dirac features, heterostructure, two-dimensional electron gas, patterned gate, antidots, quantum dots, screening, critical disorder, high performance computing.