Доклады БГУИР
Т. 21, № 5 (2023)

Doklady BGUIR
V. 21, № 5 (2023)



http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2023-21-5-20-24

Оригинальная статья Original paper

УДК 538.915:537.312.8

# КРОССОВЕР СЛАБАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ – СЛАБАЯ АНТИЛОКАЛИЗАЦИЯ В ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛАХ СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

В. А. ЗАЙЦЕВ, Д. А. ПОДРЯБИНКИН, В. В. МЕЛЬНИКОВА, А. Л. ДАНИЛЮК, С. Л. ПРИЩЕПА

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (г. Минск, Республика Беларусь)

Поступила в редакцию 22.05.2023

© Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 2023 Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 2023

**Аннотация.** Изучены закономерности проявления слабой локализации и антилокализации в графене с усиленным спин-орбитальным взаимодействием, а также в топологическом изоляторе со щелью в поверхностных состояниях, индуцируемой магнитными примесями. Установлены параметры, характеризующие проявление слабой локализации, антилокализации и кроссовера между ними. Определены квантовые поправки к проводимости графена в единицах  $e^2/h = 38,64$  мкСм для различных соотношений между характерными временами сбоя фазы (расфазировки) и спин-орбитального рассеяния. Установлено, что при относительно большом времени спин-орбитального рассеяния, не менее  $10^{-10}$  с, оно не влияет на поправку к проводимости, и ее значение определяется временем расфазировки и временами междолинного и внутридолинного рассеяния. Влияние спин-орбитального рассеяния заключается в подавлении слабой антилокализации. Оно приводит к перевороту спина электрона проводимости при упругом рассеянии, интерференционная картина слабой локализации усложняется за счет перемешивания спиновых состояний. Знак квантовой поправки зависит от того, какое спиновое состояние дает больший вклад.

**Ключевые слова:** графен, дихалькогениды переходных металлов, топологические изоляторы, слабая локализация, антилокализация, магнетосопротивление, спин-орбитальное взаимодействие, фаза Берри.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Благодарность.** Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант Ф23МЭ-038).

Для цитирования. Кроссовер слабая локализация — слабая антилокализация в двумерных материалах со спин-орбитальным взаимодействием / В. А. Зайцев [и др.] // Доклады БГУИР. 2023. Т. 21, № 5. С. 20–24. http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2023-21-5-20-24.

# WEAK LOCALIZATION – WEAK ANTILOCALIZATION CROSSOVER IN TWO-DIMENSIONAL MATERIALS WITH SPIN-ORBIT INTERACTION

ULADZIMIR A. ZAITSAU, DENIS A. PODRYABINKIN, VIOLETTA V. MELNIKOVA, ALEXANDER L. DANILYUK, SERGHEJ L. PRISCHEPA

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (Minsk, Republic of Belarus)

Submitted 22.05.2023

**Abstract.** In this paper, the patterns of manifestation of weak localization and antilocalization in graphene with enhanced spin-orbit interaction, as well as in a topological insulator with a gap in surface states induced by magnetic impurities are studied. The parameters characterizing the manifestation of weak localization, antilocalization

Доклады БГУИР
Т. 21, № 5 (2023)

Doklady BGUIR
V. 21, № 5 (2023)

and crossover between them are established. Quantum corrections to the conductivity of graphene are determined in units of  $e^2/h = 38.64~\mu S$  for various ratios between the characteristic dephasing time and spin-orbit scattering time. It has been established that with a relatively long spin-orbit scattering time, not less than  $10^{-10}$  s, it does not affect the correction to conductivity and its value is determined by the dephasing time and the times of intervalley and intravalley scattering. The effect of the spin-orbit scattering is to suppress weak antilocalization. It leads to a spin flip of the conduction electron during elastic scattering, and the interference pattern of weak localization becomes more complicated due to the mixing of spin states. The sign of the quantum correction depends on which spin state contributes the most.

**Keywords:** graphene, transition metal dichalcogenides, topological insulators, weak localization, antilocalization, magnetoresistance, spin-orbit interaction, Berry phase.

**Conflict of interests.** The authors declare no conflict of interests.

**Gratitude.** The work was supported financially by the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (grant  $\Phi$ 23M $\ni$ -038).

**For citation.** Zaitsau U. A., Podryabinkin D. A., Melnikova V. V., Danilyuk A. L., Prischepa S. L. (2023) Weak Localization – Weak Antilocalization Crossover in Two-Dimensional Materials with Spin-Orbit Interaction. *Doklady BGUIR*. 21 (5), 20–24. http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2023-21-5-20-24 (in Russian).

#### Введение

Двумерные материалы (2D-материалы) в настоящее время активно исследуются для создания новой элементной базы микро- и наноэлектроники, сенсоров, фотодетекторов и других приборов обработки информации [1]. Решением проблемы дальнейшего увеличения эффективности и быстродействия полевых транзисторов, являющихся базовыми элементами современной твердотельной электроники, может стать применение полупроводниковых 2D-материалов. Такие транзисторы лишены некоторых отрицательных эффектов, проявляющихся в традиционных МДП-транзисторах при уменьшении их размеров. Современный уровень технологий позволяет формировать 2D-материалы на традиционных для микроэлектроники подложках и создавать на них МДП-транзисторные структуры, хотя на этом пути еще предстоит решить ряд проблем.

Наряду с неоспоримыми преимуществами использования 2D-материалов в твердотельной электронике, актуальным остается описание зарядовых эффектов в изготовленных на их основе МДП-транзисторах и выявление в них механизмов переноса носителей заряда, обусловленных квантовыми эффектами, рассеянием и особенностями зонной структуры [2]. В этом случае особое внимание уделяется исследованию магнетосопротивления (МС) и квантовых поправок, характеризующих слабую локализацию (СЛ) и слабую антилокализацию (САЛ), поскольку они важны для управления спинами электронов в двумерных материалах, таких как графен, дихалькогениды переходных металлов, топологические изоляторы и других, что представляет большой интерес как для фундаментальной физики, так и для приложений в спинтронике и спинорбитронике. МС в графене во многом регулируется спин-орбитальным взаимодействием (СОВ), которое является релятивистским эффектом, описывающим взаимодействие спинового магнитного момента электрона с магнитным полем, возникающим вследствие движения электрона в неоднородном электрическом поле. СОВ в идеальном графене - слабый эффект по причине относительно низкой скорости электронов в атомах углерода. Кроме того, первый порядок атомной спин-орбитальной связи исчезает из-за регулярного расположения атомов углерода [3]. Усилить СОВ в графене можно за счет примеси атомов тяжелых элементов (Au, Pt, Pb), магнитных примесей (Fe, Co, Ni), расположения графена на подложках ферромагнетиков, создания локальных градиентов магнитного поля с использованием микромагнитов [4]. В результате усиления СОВ в графене возникает возможность генерации и управления спиновым током.

Топологические изоляторы характеризуются защищенными поверхностными и краевыми состояниями, которые формируются в диэлектрических материалах с инвертированной зонной структурой, обусловленной сильным СОВ. Поверхностные состояния трехмерных топологических изоляторов имеют спиральную спиновую структуру Дирака и устойчивы к возмущениям, инвариантным к обращению времени. Это экстраординарное свойство ярко иллюстрируется отсутствием обратного рассеяния на немагнитных примесях и САЛ фермионов Дирака [5]. Нарушение симметрии обращения времени легированием магнитными примесями создает топологи-

Доклады БГУИР
Т. 21, № 5 (2023)

DOKLADY BGUIR
V. 21, № 5 (2023)

ческие магнитоэлектрические эффекты, которые объясняются единой картиной эволюции фазы Берри с энергетической щелью, индуцируемой магнитными примесями [6].

В статье рассмотрено моделирование процессов слабой локализации и антилокализации в таких двумерных материалах, как графен и топологический изолятор.

### Модель слабой локализации

Количественно соотношение СЛ/САЛ в графене вызвано взаимодействием различных механизмов рассеяния, в которые обычно включают время рассеяния с нарушением фазы  $\tau_{\phi}$  (расфазировка), время междолинного рассеяния  $\tau_{i}$  и время рассеяния с нарушением внутридолинной симметрии  $\tau_{*}$ . При наличии СОВ учитывается время спин-орбитального рассеяния  $\tau_{SO}$ . Квантовая поправка с учетом СОВ для проводимости графена записывается в виде [7]

$$\Delta\sigma(B) = \frac{-e^2}{2\pi h} \left[ -F\left(\frac{B}{B_{\phi} + B_i}\right) - 2F\left(\frac{B}{B_{\phi} + B_{SO}}\right) + 4F\left(\frac{B}{B_{\phi} + B_* + B_{SO}}\right) + 2F\left(\frac{B}{B_{\phi} + 2B_i + B_{SO}}\right) + F\left(\frac{B}{B_{\phi} + 2B_*}\right) \right],\tag{1}$$

В топологических изоляторах слабая локализация и антилокализация описываются формулой Лу-Ши-Чена (Lu-Shi-Shen) [8]

$$\Delta\sigma(B) = \sum_{i=0,1} \frac{\alpha_i e^2}{\pi h} \left[ \Psi\left(\frac{l_B^2}{l_{\varphi i}^2} + \frac{1}{2}\right) - \ln\left(\frac{l_B^2}{l_{\varphi i}^2}\right) \right],\tag{2}$$

где  $l_B=[\hbar/(4eB)]^{1/2}$  — магнитная длина;  $1/l_{\phi i}^2=1/l_{\phi}^2+1/l_i^2$ ;  $l_{\phi}$  — длина фазовой когерентности;  $\alpha_i, l_i$ — коэффициент и корректирующая длина соответственно (i=0,1), которые являются явными функциями соотношения  $\Delta/2E_F$ ;  $\Delta$  — щель в поверхностных состояниях, индуцируемая магнитными примесями;  $E_F$  — энергия Ферми, отсчитываемая от точки Дирака.

В пределе САЛ  $\alpha_0 = 0$ ,  $\alpha_1 = -0.5$ , а в пределе СЛ  $\alpha_0 = 0.5$ ,  $\alpha_1 = 0$ . Значения параметров  $l_i$  и  $\alpha_i$  связаны следующими соотношениями [8]:

$$l_{0}^{2} = l_{e}^{2} a^{4} \left( a^{4} + b^{4} - a^{2} b^{2} \right) \left[ b^{4} \left( a^{2} - b^{2} \right)^{2} \right]^{-1};$$

$$l_{1}^{2} = l_{e}^{2} \left( a^{4} + b^{4} \right)^{2} \left[ a^{2} b^{2} \left( a^{2} - b^{2} \right)^{2} \right]^{-1};$$

$$\alpha_{1} = -a^{4} b^{4} \left[ \left( a^{4} + b^{4} \right) \left( a^{4} + b^{4} - a^{2} b^{2} \right) \right]^{-1};$$

$$\alpha_{0} = \left( a^{4} + b^{4} \right) \left( a^{2} - b^{2} \right)^{2} \left[ 2 \left( a^{4} + b^{4} - a^{2} b^{2} \right)^{2} \right]^{-1},$$
(3)

где  $l_e$  – длина свободного пробега;  $a = \cos(\theta/2)$ ;  $b = \sin(\theta/2)$ ;  $\cos(\theta) = \Delta/2E_F$ .

Система уравнений (3) приводит к тому, что квантовая поправка (2) определяется только соотношением  $\Delta/2E_F$  и очень слабо зависит от длин  $l_e$  и  $l_{\odot}$ .

# Результаты расчетов

Квантовые поправки к проводимости графена в единицах  $e^2/h=38,64$  мкСм получены с использованием выражения (1) для различных соотношений между характерными временами. Установлено, что при относительно большом времени спин-орбитального рассеяния  $\tau_{SO}$ , не менее  $10^{-10}$  с, оно не влияет на поправку к проводимости, и ее значение определяется временем расфазировки и временем междолинного и внутридолинного рассеяний. При этом, если  $\tau_{\phi} << \tau_i$ ,  $\tau_{\phi} << \tau_*$ , наблюдается характерное подавление СЛ в магнитном поле и отрицательное МС, т. е. проявляется САЛ. При  $\tau_{\phi} = 10^{-12}$  с и отсутствии междолинного рассеяния (большое  $\tau_i$ ) время  $\tau_*$  не оказы-

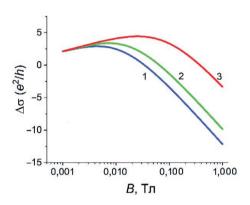
Доклады БГУИР
Т. 21, № 5 (2023)

DOKLADY BGUIR
V. 21, № 5 (2023)

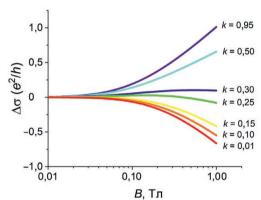
вает существенного влияния вплоть до  $10^{-12}$  с. При  $\tau_*=10^{-13}$  с возникает кроссовер от СЛ к САЛ при  $B\approx 0,1$  Тл. Другое поведение поправки наблюдается при уменьшении  $\tau_i$ , если  $\tau_*>\tau_\phi$ . В этом случае происходит только снижение САЛ, но СЛ не возникает.

Влияние времени спин-орбитального рассеяния  $\tau_{SO}$  заключается в подавлении САЛ (рис. 1). Оно приводит к перевороту спина электрона проводимости при упругом рассеянии, и интерференционная картина СЛ усложняется за счет перемешивания спиновых состояний. Знак квантовой поправки зависит от того, какое спиновое состояние дает больший вклад. Зависимость проводимости от магнитного поля существенно различна для синглетного и триплетного спиновых состояний. В слабом магнитном поле основную роль играет синглетный вклад, что дает СЛ. По мере роста напряженности магнитного поля и насыщения полевой зависимости синглетного вклада возрастает роль триплетного вклада, что приводит к появлению сначала экстремума в МС, а затем САЛ.

Расчеты квантовых поправок для топологического изолятора проводили с помощью (2) и (3) при значениях  $l_e=90$  нм,  $l_\phi=100$  нм в зависимости от соотношения  $k=\Delta/2E_F$  (рис. 2), определяемого величиной щели в поверхностных состояниях, инициируемой магнитными примесями, по отношению к энергии Ферми.



**Рис. 1.** Квантовые поправки к проводимости графена при  $\tau_{\phi}=10^{-12}$  с,  $\tau_{i}=10^{-9}$  с,  $\tau_{*}=10^{-12}$  с для  $\tau_{SO}$ , с:  $1-10^{-11}$ ;  $2-10^{-12}$ ;  $3-10^{-13}$  **Fig. 1.** Quantum corrections to the conductivity of graphene at  $\tau_{\phi}=10^{-12}$  s,  $\tau_{i}=10^{-9}$  s,  $\tau_{*}=10^{-12}$  s for  $\tau_{SO}$ , s:  $1-10^{-11}$ ;  $2-10^{-12}$ ;  $3-10^{-13}$ 



**Рис. 2.** Квантовые поправки к проводимости топологического изолятора при  $l_e$  = 90 нм,  $l_{\phi}$  = 100 нм и отношении k = 0,01–0,95 **Fig. 2.** Quantum corrections to topological insulator conductivity at  $l_e$  = 90 nm,  $l_{\phi}$  = 100 nm and ratio k = 0.01–0.95

Как можно видеть из рис. 2, при  $k{\to}0$ , т. е. в отсутствие щели, наблюдается САЛ. Появление щели в поверхностных состояниях топологического изолятора ведет к подавлению САЛ. При  $k=\Delta/2E_F=0.95$  превалирует СЛ, а при промежуточных величинах  $k=\Delta/2E_F=0.22-0.27$  наблюдается кроссовер СЛ/САЛ с ростом индукции магнитного поля.

## Заключение

- 1. Изучены закономерности проявления слабой локализации и антилокализации в графене с усиленным спин-орбитальным взаимодействием, а также в топологическом изоляторе со щелью в поверхностных состояниях, индуцируемой магнитными примесями. Установлены параметры, характеризующие проявление слабой локализации, антилокализации и кроссовера между ними.
- 2. Полученные результаты могут быть использованы для проектирования элементной базы энергоэффективных приборов обработки информации на основе полевых транзисторов с каналами из двумерных материалов.

# Список литературы / References

- 1. Mingsheng X., Tao L., Minmin S., Hongzheng C. (2013) Graphene-Like Two-Dimensional Materials. *Chemical Reviews*. 113 (5), 3766–3798.
- 2. Makovskaya T. I., Danilyuk A. L., Krivosheeva A. V., Shaposhnikov V. L., Borisenko V. E. (2020) Charge Properties of the MOS Transistor Structure with the Channel Made from a Two-Dimensional Crystal. *Russian Microelectronics*. 49 (7), 507–515.

Доклады БГУИР
Т. 21, № 5 (2023)

Doklady BGUIR
V. 21, № 5 (2023)

3. Wakamura T., Guéron S., Bouchiat H. (2021) Novel Transport Phenomena in Graphene Induced by Strong Spin-Orbit Interaction. *Comptes Rendus Physique*. 22 (S4), 145–162.

- 4. Wakamura T. et al. (2019) Spin-Orbit Interaction Induced in Graphene by Transition Metal Dichalcogenides. *Physical Review Letters*. 99 (24), 245402.
- 5. Zhang T. et al. (2009) Experimental Demonstration of Topological Surface States Protected by Time-Reversal Symmetry. *Physical Review Letters*. 103, 266803.
- 6. Liu Q. et al. (2009) Magnetic Impurities on the Surface of a Topological Insulator. *Physical Review Letters*. 102 (15), 156603.
- 7. McCann E., Fal'ko V. I. (2012)  $z \rightarrow -z$  Symmetry of Spin-Orbit Coupling and Weak Localization in Graphene. *Physical Review Letters*. 108, 166606.
- 8. Lu H. Z., Shi J. R., Shen S. Q. (2011) Competition between Weak Localization and Antilocalization in Topological Surface States. *Physical Review Letters*. 107 (7), 076801.

# Вклад авторов / Authors' contribution

Авторы внесли равный вклад в написание статьи / The authors contributed equally to the writing of the article.

# Сведения об авторах

**Зайцев В. А.,** аспирант кафедры микро- и наноэлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники

Подрябинкин Д. А., к. ф.-м. н., с. н. с. Центра наноэлектроники и новых материалов научно-исследовательской части Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники

**Мельникова В. В.,** магистрант кафедры микрои наноэлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники

**Данилюк А. Л.,** к. ф.-м. н., доцент, доцент кафедры микро- и наноэлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники

**Прищепа С. Л.,** д. ф.-м. н., профессор, профессор кафедры защиты информации Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники

# Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь, г. Минск, ул. П. Бровки, 6 Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники Тел.: +375 17 293-22-24

E-mail: t-rex-1995@mail.ru

Зайцев Владимир Александрович

### Information about the authors

**Zaitsau** U. A., Postgraduate at the Department of Micro- and Nanoelectronics of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

**Podryabinkin D. A.,** Cand. of Sci., Senior Researcher at the Center for Nanoelectronics and New Materials of R&D Department of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

**Melnikova V. V.,** Master's Student at the Department of Micro- and Nanoelectronics of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

**Danilyuk A. L.,** Cand. of Sci., Associate Professor, Associate Professor at the Department of Micro- and Nanoelectronics of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

**Prischepa S. L.,** Dr. of Sci. (Phys. and Math.), Professor, Professor at the Department of Information Security of the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

### Address for correspondence

220013, Republic of Belarus, Minsk, P. Brovki St., 6 Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics Tel.: +375 17 293-22-24

E-mail: t-rex-1995@mail.ru Zaitsau Uladzimir Alexandrovich