

# Численное моделирование эффекта выпрямления тока, индуцированного электромагнитной волной в графене

© Д.В. Завьялов<sup>¶</sup>, С.В. Крючков, Т.А. Тюлькина

Волгоградский государственный педагогический университет,  
400131 Волгоград, Россия

(Получена 28 июля 2009 г. Принята к печати 26 октября 2009 г.)

С использованием прямого численного моделирования методом Монте-Карло изучен эффект возникновения постоянной (перпендикулярной тянущему постоянному электрическому полю) составляющей тока в ситуации, когда на образец графена нормально к его поверхности падает эллиптически поляризованная электромагнитная волна. Исследована зависимость тока от частоты падающей электромагнитной волны и сдвига фаз между ее компонентами.

## 1. Введение

В последнее время значительный интерес вызывает исследование электронных свойств нового перспективного материала нанoeлектроники — графена [1–10]. Примечательно, что даже в квазиклассической ситуации в графене можно ожидать проявления интересных эффектов. Например, в [10] с использованием квазиклассического подхода предсказан эффект возникновения постоянной составляющей тока, перпендикулярной тянущему постоянному электрическому полю, в ситуации, когда на образец графена нормально к его поверхности падает эллиптически поляризованная электромагнитная волна (геометрию задачи смотри на рис. 1, где  $E_1 = E_{10} \cos(\omega t)$ ,  $E_2 = E_{20} \cos(\omega t + \varphi)$  — составляющие напряженности переменного электрического поля,  $\mathbf{k}_0$  — волновой вектор,  $E_c$  — напряженность постоянного электрического поля). Было показано, что величина постоянного тока зависит от разности фаз компонент эллиптической волны вдоль осей координат  $x$ ,  $y$ . Интеграл столкновений уравнения Больцмана был выбран в простейшем виде, соответствующем постоянной частоте столкновений. Возникает естественный вопрос, не является ли данный эффект следствием специфического выбора модели столкновительного члена. В настоящей работе сделана попытка обосновать эффект [10] без использования модели постоянной частоты столкновений, путем прямого численного моделирования с помощью метода Монте-Карло [11,12]. Рассеивателями носителей тока считались фононы (как акустические, так и оптические).

## 2. Описание метода

Считаем, что в промежутках между актами рассеяния электрон в электрическом поле  $\mathbf{E}$  движется согласно уравнению движения

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E}(t). \quad (1)$$

Время движения электрона до очередного столкновения определяется из решения уравнения

$$r = \int_0^t W(\mathbf{p}(t')) \exp\left[\int_0^{t'} W(\mathbf{p}(t'')) dt''\right] dt', \quad (2)$$

где  $r$  — равномерно распределенное на интервале  $[0,1]$  случайное число,  $W(\mathbf{p})$  — полная вероятность рассеяния электрона с импульсом  $\mathbf{p}$ . Для того чтобы избежать решения громоздкого уравнения (2), при определении времени пробега используется стандартный прием, предложенный Ризом [12], который заключается во введении процесса саморассеяния. Вероятность саморассеяния из состояния  $\mathbf{p}$  в состояние  $\mathbf{p}'$  определяется как

$$W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = W_0(\mathbf{p})\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (3)$$

Из (3) видно, что состояние электрона при таком рассеянии не меняется, поэтому саморассеяние не имеет физического значения и величина  $W_0(\mathbf{p})$  может быть выбрана произвольно. Включив вероятность (3) в уравнение (2), получим

$$r = \int_0^t \left[ W(\mathbf{p}(t')) + W_0(\mathbf{p}(t')) \right] \times \exp\left( \int_0^{t'} \left[ W(\mathbf{p}(t'')) + W_0(\mathbf{p}(t'')) \right] dt'' \right) dt'. \quad (4)$$

Выбрав  $W_0(\mathbf{p})$  в виде  $W_0(\mathbf{p}') = \Gamma - W(\mathbf{p}(t'))$ , где  $\Gamma$  — некоторая постоянная, приводим уравнение для определения времени очередного свободного пробега электрона к виду

$$r = 1 - \exp(-\Gamma t). \quad (5)$$

Величина  $\Gamma$  должна быть достаточно большой, чтобы в интересующей нас области импульсного пространства величина  $W_0(\mathbf{p})$  была больше нуля.

<sup>¶</sup> E-mail: sed@fizmat.vspu.ru

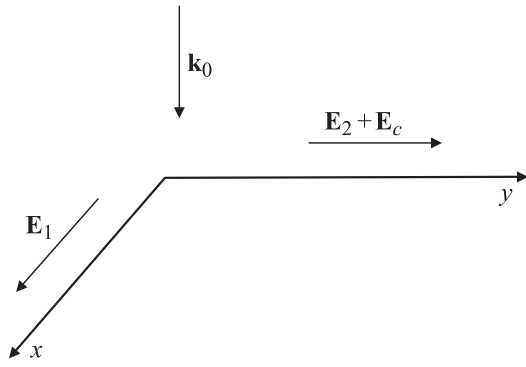


Рис. 1. Геометрия задачи.

Разыграв время свободного пробега, вычисляем очередное значение перемещения вдоль осей координат. Далее определяем механизм рассеяния с помощью равномерно распределенной на интервале  $[0, \Gamma]$  случайной величины  $s$  исходя из неравенств

$$\begin{cases} W_{\text{opt}}(\mathbf{p}) > s, & \text{оптические фононы,} \\ W_{\text{ac}}(\mathbf{p}) + W_{\text{opt}}(\mathbf{p}) > s > W_{\text{opt}}(\mathbf{p}), & \text{акустические фононы,} \\ W_{\text{ac}}(\mathbf{p}) + W_{\text{opt}}(\mathbf{p}) < s, & \text{саморассеяние.} \end{cases} \quad (6)$$

Здесь  $W_{\text{opt}}(\mathbf{p})$  — вероятность рассеяния на оптических фононах,  $W_{\text{ac}}(\mathbf{p})$  — вероятность рассеяния на акустических фононах. Из (6) следует, что величина  $\Gamma$  должна быть не очень большой, чтобы саморассеяние встречалось как можно реже. Далее с помощью выражений для вероятности рассеяния из состояния  $\mathbf{p}$  в состояние  $\mathbf{p}'$  рассчитываются импульсы после столкновения, и процесс начинается заново для нового шага.

Кроме описанного выше метода определения времени свободного пробега нами применялся также следующий прием. Уравнение (2) можно свести к виду

$$r = 1 - \exp \left[ \int_0^t W(\mathbf{p}(t')) dt' \right]. \quad (7)$$

Время „опыта“ разбивалось на малые промежутки длительностью  $\Delta t$ , и интеграл в (7) заменялся интегральной суммой по методу трапеций. Далее в цикле рассчитывались на каждом шаге  $\Delta t$  приращение импульса электрона, его перемещение и значение интегральной суммы, до тех пор пока не выполнится условие

$$-\ln(r) \leq \frac{\Delta t}{2} \sum_i [W(\mathbf{p}_i) + W(\mathbf{p}_{i-1})]. \quad (8)$$

Момент времени, в который впервые выполняется (8), является моментом столкновения. После этого с помощью равномерно распределенной на интервале  $[0,1]$  случайной величины  $s$  определялся механизм рассеяния

по правилу

$$\begin{cases} \frac{W_{\text{opt}}(\mathbf{p})}{W_{\text{ac}}(\mathbf{p}) + W_{\text{opt}}(\mathbf{p})} \geq s, & \text{оптические фононы,} \\ \frac{W_{\text{opt}}(\mathbf{p})}{W_{\text{ac}}(\mathbf{p}) + W_{\text{opt}}(\mathbf{p})} \leq s, & \text{акустические фононы.} \end{cases} \quad (9)$$

Далее с помощью выражений для вероятности рассеяния из состояния  $\mathbf{p}$  в состояние  $\mathbf{p}'$  рассчитываются импульсы после столкновения, и процесс начинается заново для следующего шага.

Моделирование по обоим методам сравнивалось. Сравнение показало совпадение (в пределах погрешности) результатов вычислений по этим алгоритмам. Погрешность вычисления оценивалась по величине стандартного отклонения тока следующим образом: количество опытов и количество столкновений в опыте брались такими, чтобы тройное стандартное отклонение тока было как минимум на порядок меньше характерных средних величин тока, полученных в результате моделирования. Добавим, что второй метод оказался в 2–3 раза менее затратным по использованному компьютерному времени.

Рассчитаем далее вероятности рассеяния электрона на акустических и оптических фононах.

### 3. Вероятность рассеяния на акустических фононах

Вероятность рассеяния электрона в единицу времени из состояния с импульсом  $\mathbf{p}$  в состояние  $\mathbf{p}'$  дается выражением [13]

$$\begin{aligned} W_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1 + \cos \phi}{2} |C_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar}|^2 \\ &\times \left\{ (N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} + 1) \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \hbar\omega_q] \right. \\ &\left. + N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} \delta[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') + \hbar\omega_q] \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь  $\phi$  — угол между векторами  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$ ,  $|C_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar}|^2$  — квадрат модуля матричного элемента электрон-фононного взаимодействия,  $\omega_q$  — частота фонона. В случае акустических фононов  $|C_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar}|^2 = \hbar q D_a^2 / (2\rho s^2 L^2)$ , где  $D_a$  — константа деформационного потенциала,  $q$  — модуль волнового вектора фонона,  $\rho$  — поверхностная плотность материала,  $s$  — скорость звука в графене,  $L$  — линейный размер основной области кристалла,  $N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar}$  — планковская функция распределения фононов. В дальнейшем будет рассматриваться динамика носителей тока при комнатной температуре ( $T = 300$  К). В этом случае  $\hbar\omega_q/kT \ll 1$  ( $k$  — постоянная Больцмана) и функцию распределения акустических фононов можно взять в виде  $N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} = kT/\hbar\omega_q$ . Кроме того, в силу условия  $s \ll v_f$  ( $v_f$  — фермиевская скорость) рассеяние на акустических фононах можно

считать упругим и пренебречь энергией фонона в аргументах  $\delta$ -функций в (10). С учетом вышесказанного формула (10) преобразуется к виду

$$W_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} = \frac{2\pi D_a^2 kT}{\rho s^2 \hbar L^2} \frac{1 + \cos \phi}{2} \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')). \quad (11)$$

Для нахождения вероятности рассеяния электрона с импульсом  $\mathbf{p}$  на акустических фононах в единицу времени проинтегрируем (11) по конечному импульсу (при этом перейдем к безразмерному импульсу по правилу  $v_f \mathbf{p}/kT \rightarrow \mathbf{p}$ ). В результате получим

$$W_p = v_a \sqrt{p^2 + \left(\frac{\Delta}{kT}\right)^2}. \quad (12)$$

В (12) введено обозначение  $v_a = (kTD_a)^2 / (2\rho s^2 \hbar^3 v_f^2)$ . При типичных значениях параметров ( $D_a \approx 18$  эВ,  $T = 300$  К)  $v_a \approx 2.34 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$ .

#### 4. Вероятность рассеяния на оптических фононах

Исходим из общей формулы (10). Фононы будем считать бездисперсионными ( $\omega_q = \omega_0 = \text{const}$ ) с энергией  $\hbar\omega_0 = 160$  мэВ [14]. При температуре  $T = 300$  К имеем отношение  $\hbar\omega_0/kT \approx 6$  и соответственно  $N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} \ll 1$ . Таким образом, вторым слагаемым в фигурных скобках в (10) можно пренебречь и заменить множитель  $N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} + 1$  в первом слагаемом единицей. Кроме того, в случае оптических фононов  $|C_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar}|^2 = \hbar D_o^2 / (2\rho\omega_0 L^2)$ , где  $D_o$  — константа взаимодействия с оптическими фононами. Таким образом, с учетом вышесказанного формула (10) для оптических фононов примет вид

$$W_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} = \frac{\pi D_o^2}{\rho\omega_0 L^2} \frac{1 + \cos \phi}{2} \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \hbar\omega_0). \quad (13)$$

Проинтегрировав (13) по конечному импульсу, найдем вероятность рассеяния электрона на оптических фононах в единицу времени (при этом перейдем к безразмерному импульсу по тому же правилу, что и в случае акустических фононов). В результате получим

$$W_p = \begin{cases} v_o \left[ \sqrt{p^2 + \left(\frac{\Delta}{kT}\right)^2} - \beta \right] & \text{при } \sqrt{p^2 + \left(\frac{\Delta}{kT}\right)^2} - \beta \geq \frac{\Delta}{kT} \\ 0 & \text{при } \sqrt{p^2 + \left(\frac{\Delta}{kT}\right)^2} - \beta < \frac{\Delta}{kT}. \end{cases} \quad (14)$$

Здесь  $\beta = \hbar\omega_0/kT$ ,  $v_o = kTD_o^2 / (4v_f^2 \rho\omega_0 \hbar^2)$ . При типичных значениях параметров ( $D_o \approx 1.4 \cdot 10^9$  эВ/см,  $T = 300$  К)  $v_o \approx 2.67 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$ .

#### 5. Результаты моделирования

Численное исследование показало, что предсказанный в [10] эффект имеет место только при учете неупругости в столкновениях электрона с нерегулярностями кристаллической решетки. Если оптические фононы выключались из рассмотрения и моделирование проводилось только с использованием в качестве рассеивателей акустических фононов (рассеяние на которых считалось упругим), то средний по времени ток, перпендикулярный тянущему постоянному электрическому полю, был равен нулю. Это в свою очередь говорит о том, что простейший член столкновений (в приближении постоянной частоты столкновений) учитывает в какой-то мере неупругие механизмы рассеяния, необходимые для возникновения описываемого эффекта. Последнее также ясно из того, что при расчете джоулева тепла в модели интеграла столкновений с постоянной частотой релаксации оно получается пропорциональным частоте столкновений.

Таким образом, даже простейший выбор члена столкновений позволяет качественно судить об эффектах, связанных с переносом заряда в графене и обязанных своим существованием неаддитивности энергетического спектра носителей тока в нем.

Тем не менее отметим, что результаты моделирования не полностью совпали с результатами расчета, проведенного в [10]. На рис. 2 представлены зависимости средней составляющей тока  $\langle j_x \rangle$ , перпендикулярной тянущему постоянному электрическому полю, от частоты электромагнитной волны при различных значениях фазового сдвига  $\phi$ . Из них видно, что при увеличении частоты поведение  $\langle j_x \rangle$  зависит от  $\phi$ , что находится в противоречии с результатами [10], где отмечалось монотонное падение  $\langle j_x \rangle$  с ростом частоты. Кроме того, выявился следующий эффект: в [10] было предсказано, что за-

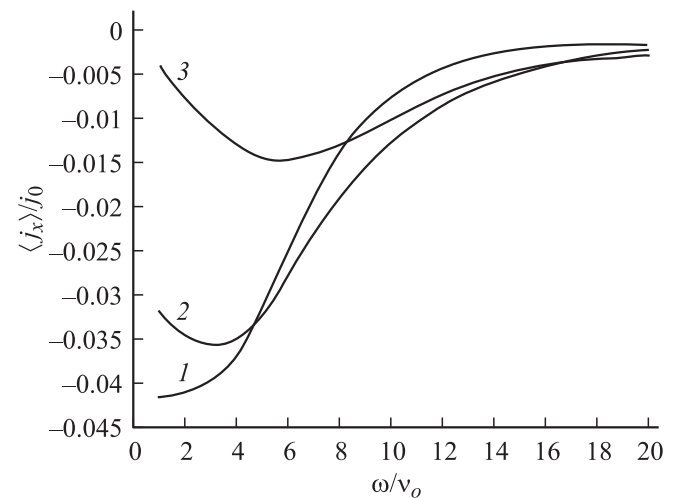


Рис. 2. Типичные зависимости средней составляющей тока  $\langle j_x \rangle$  от частоты электромагнитной волны при различных значениях фазового сдвига:  $\phi = 0$  (1),  $\pi/4$  (2),  $\pi/2$  (3).

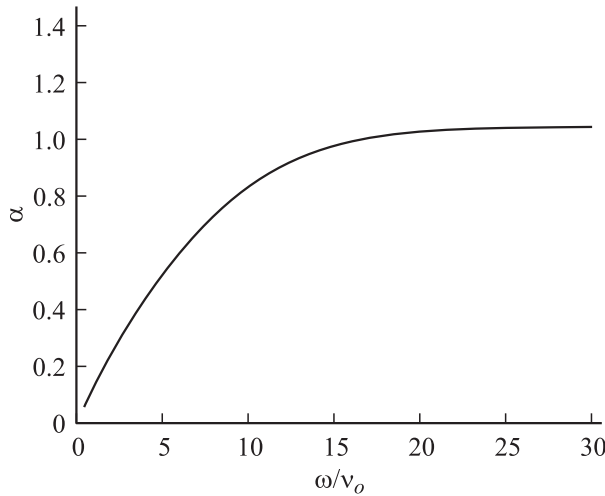


Рис. 3. Характерная зависимость  $\alpha(\omega)$ .

зависимость  $\langle j_x \rangle$  от сдвига фаз  $\varphi$  компонент падающей электромагнитной волны должна иметь вид

$$\langle j_x \rangle = j_0 \cos \varphi, \quad (15)$$

где  $j_0$  — некоторая постоянная, зависящая от других параметров задачи. Однако моделирование показало, что такая зависимость имеет несколько иной вид:

$$\langle j_x \rangle = j_0 \cos(\varphi + \alpha), \quad (16)$$

где  $\alpha$  зависит от частоты падающей электромагнитной волны, но не зависит от напряженностей электрических полей (по крайней мере в пределах статистических погрешностей моделирования такой зависимости выявлено не было). Сказанное означает, что модель интеграла столкновений с постоянной частотой релаксации не полностью учитывает особенности рассеяния в графене в задачах, где решающую роль играет неупругое рассеяние. Для прояснения сути вопроса нами было проведено сравнение результатов моделирования по методу Монте-Карло с результатами, полученными при расчете с одной из простейших моделей интегралов столкновений, в которых явно делается попытка разделения процессов столкновения на упругие и неупругие, а именно с интегралом столкновений в виде [15]:

$$I_c = \frac{f(\mathbf{p}) - F(\mathbf{p})}{\tau_1} + \frac{f(\mathbf{p}) - f(-\mathbf{p})}{2\tau_2}, \quad (17)$$

где  $F(\mathbf{p})$  — равновесная функция распределения,  $\tau_1, \tau_2$  — константы. Расчеты с интегралом (17) показали, что исследуемая зависимость имеет вид (15), а не (16). Можно сделать вывод, что использование простейших интегралов столкновений не вполне корректно описывает процессы рассеяния носителей тока в графене, по крайней мере в задачах, где основной вклад в исследуемый эффект дает неупругое рассеяние.

Отметим также, что в [10] дано макроскопическое объяснение зависимости (15). Более корректным будет,

на наш взгляд, следующее объяснение. Вектор  $\mathbf{j}_x$  может быть построен из векторов  $\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2, \mathbf{E}_c$  и их производных по времени следующим образом:

$$\mathbf{j}_x = \left\langle \lambda_1 [\mathbf{E}_1 [\mathbf{E}_2 \mathbf{E}_c]] + \lambda_2 \left[ \frac{d\mathbf{E}_1}{dt} [\mathbf{E}_2 \mathbf{E}_c] \right] + \lambda_3 \left[ \mathbf{E}_1 \left[ \frac{d\mathbf{E}_2}{dt} \mathbf{E}_c \right] \right] \right\rangle. \quad (18)$$

где  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$  — некоторые константы, зависящие от параметров среды и частоты электромагнитной волны, а угловые скобки означают усреднение по периоду электромагнитной волны. Отметим, что выражение (18) написано в низшем неисчезающем порядке по напряженностям полей. Если подставить в (18) выражения для электромагнитных полей и произвести усреднение, то можно получить формулу

$$\langle j_x \rangle = j_0 \cos \left\{ \varphi - \arctg \left[ \frac{\omega(\lambda_2 - \lambda_3)}{\lambda_1} \right] \right\}. \quad (19)$$

Сравнивая (16) и (19), видим, что  $\alpha = -\arctg[\omega(\lambda_2 - \lambda_3)\lambda_1^{-1}]$ . На рис. 3 приведена характерная зависимость  $\alpha(\omega)$ . Из рисунка видно, что  $\alpha$  монотонно растет с ростом частоты электромагнитного поля  $\omega$  и при частотах  $\omega/v_0 \approx 30$  переходит к насыщению.

Сделаем некоторые численные оценки. При типичных значениях параметров графена ( $n \approx 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ,  $v_f = 10^8 \text{ см/с}$ ), частоте волны  $\omega \approx 10^{13} \text{ с}^{-1}$ , напряженностях электрических полей  $E_{10}, E_{20}, E_c \approx 1 \text{ CGS}$  и при комнатных температурах поверхностная плотность тока  $j_x \approx 10^{-6} \text{ А/см}$ , что представляется вполне измеримой величиной.

Работа проводилась в рамках программы Министерства образования и науки „Развитие научного потенциала высшей школы“. Работа поддержана грантом РФФИ № 10-02-97001-р\_поволжье\_a.

## Список литературы

- [1] S.A. Mikhailov. Europhys. Lett., **79**, 27 002 (2007).
- [2] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. Rev. Mod. Phys., **81**, 109 (2009). arXiv: 0709.1163v2 Cond-Mat. **1**, 1163 (2007).
- [3] K.S. Novoselov, A.K. Ceim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov. Nature, **438**, 197 (2005).
- [4] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H.L. Stormer, P. Kim. Nature, **438**, 201 (2005).
- [5] Z. Jiang, E.A. Henriksen, L.C. Tung, Y.-J. Wang, M.E. Schwartz, M.Y. Han, P. Kim, H.L. Stormer. Phys. Rev. Lett., **98**, 197 403 (2007).
- [6] K.Y. Bliokh. Phys. Lett., **344**, 127 (2005).
- [7] C.-H. Park et al., Nature Phys., **4**, 213 (2008).
- [8] M. Barbier, F.M. Peeters, P. Vasilopoulos, J.M. Pereira, jr. Phys. Rev. B, **77**, 115 446 (2008).
- [9] F. Guinea, M.I. Katsnelson, M.A.H. Vozmediano. Phys. Rev. B, **77**, 075 422 (2008).
- [10] Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, Э.В. Марчук. Письма ЖТФ, **34**, 21 (2008).

- [11] Р. Хокни, Дж. Иствуд. *Численное моделирование методом частиц* (М., Мир, 1987).
- [12] И.М. Соболев. *Численные методы Монте-Карло* (М., Наука, 1973).
- [13] F.T. Vasko, V. Ryzhii. Phys. Rev. B, **77**, 195 433 (2008). arXiv: 0801.3476 v2.
- [14] S. Fratini, F. Guinea. Phys. Rev. B, **77**, 195 415 (2008).
- [15] Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, А.П. Тетервов. *Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками* (М., Наука, 1989).

*Редактор Л.В. Шаронова*

## **Numerical simulation of the current rectification effect induced by an electromagnetic wave in grafene**

*D.V. Zavyalov, S.V. Kryuchkov, T.A. Tyul'kina*

Volgograd State Pedagogical University,  
400131 Volgograd, Russia

**Abstract** Using the direct numerical modeling by the Monte Carlo method it was studied the effect of appearance of the direct current which is perpendicular to the draw electric field, in the case when elliptically polarized electromagnetic wave propagates normally to the surface of graphene. The dependences of the current on the frequency of the incident wave and on the phase displacement between the components of this wave was obtained.