

# Фазовый переход сегнетоэлектрического типа в графене с хаббардовским взаимодействием

© М.Б. Белоненко, Н.Г. Лебедев, Н.Н. Янюшкина

Волгоградский государственный университет,  
Волгоград, Россия  
Entropique Inc.,  
London, N6J 3S2, ON, Canada  
E-mail: yana\_nn@inbox.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 25 мая 2011 г.)

Выявлено, что в графене с хаббардовским взаимодействием между электронами при приложении внешнего постоянного электрического поля возможно спонтанное появление электрического поля, перпендикулярного приложенному полю. Данный эффект можно связать с неравновесностью электронной подсистемы графена. Выявлены характеристики спонтанного поля в зависимости от параметров задачи.

Работа проведена в рамках реализации ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 годы (проект № НК-16(3)), а также поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты № 08-02-00663 и № 11-02-97054-Р\_поволжье\_a).

## 1. Введение

Фазовые переходы представляют собой одну из парадигм современной фундаментальной физики. Фазовый переход, в широком смысле, — переход вещества из одной фазы в другую при изменении внешних условий — температуры, давления, магнитного или электрического поля и т.д.; в узком смысле — скачкообразное изменение физических свойств при непрерывном изменении внешних параметров. Одно из важнейших мест во всем многообразии фазовых переходов занимает неравновесный фазовый переход, которому и будет посвящено настоящее исследование.

В [1,2] теоретически было показано, что в присутствии сильного электрического поля наблюдаются неравновесные фазовые переходы в электронном газе в проводниках с объемно центрированной кубической решеткой. Эффект проявляется в спонтанном возникновении поперечного поля  $E_y$ , играющего роль упорядочивающего параметра. Приложенное электрическое поле  $E_x$ , направленное вдоль оси симметрии кристалла, является управляющим параметром. Необходимым условием существования поперечного поля является неаддитивность электронного спектра:  $\varepsilon(\mathbf{p}) \neq \varepsilon(p_x) + \varepsilon(p_y) + \varepsilon(p_z)$ , где  $\mathbf{p}$  — текущий импульс электрона (например, когда используется приближение слабой связи, электронный спектр в объемно центрированной кубической решетке становится неаддитивным:  $\varepsilon(\mathbf{p}) \sim \cos(p_x a / 2\hbar) \cos(p_y a / 2\hbar) \cos(p_z a / 2\hbar)$ ), где  $a$  — постоянная решетки). Кроме того, спектр должен быть ограничен.

В настоящей работе мы исследуем возможность существования фазовых переходов в графене, что должно проявляться в появлении поперечной компоненты  $E_x$  в присутствии поля  $E_y$ , которое и будет играть роль управляющего параметра. Графен представляет собой структуру, состоящую из одного слоя атомов углерода,

и имеет плоскую гексагональную решетку. Большая подвижность электронов в графене и его уникальные электрофизические характеристики привлекают к нему внимание как к одной из альтернатив кремниевой базы современной микроэлектроники [3–6]. Заметим, что электромагнитные волны, распространяющиеся в углеродных структурах, становятся сильно нелинейными уже при относительно слабых полях. Обсуждаемые свойства углеродных структур вызвали как повышенный теоретический интерес, так и попытки применения в устройствах нелинейной оптики [7]. Нелинейность, согласно выводам, сделанным в этих работах, возникает вследствие изменения классической функции распределения электронов и непараболического закона дисперсии электронов. Необходимо отметить, что вне рассмотрения часто остаются собственно электронные свойства, которые могут проявляться в различных частях спектра. Так, например, кулоновское взаимодействие электронов может привести к изменению закона дисперсии и, следовательно, к изменению оптического отклика. Отметим, что наиболее простым методом учета кулоновского взаимодействия является способ, предложенный Шубиным и Вонсовским в 1934 г. (теперь это принято называть моделью Хаббарда [8,9]), когда учитывается только кулоновское отталкивание электронов, расположенных на одном узле решетки.

Суммируя вышесказанное, можно сделать вывод, что задача исследования отклика графена в магнитном поле с учетом хаббардовского взаимодействия представляется достаточно важной и актуальной.

## 2. Основные уравнения

Рассмотрим отклик графена на внешнее электрическое поле, приложенное вдоль оси  $x$ . Геометрия задачи представлена на рис. 1.

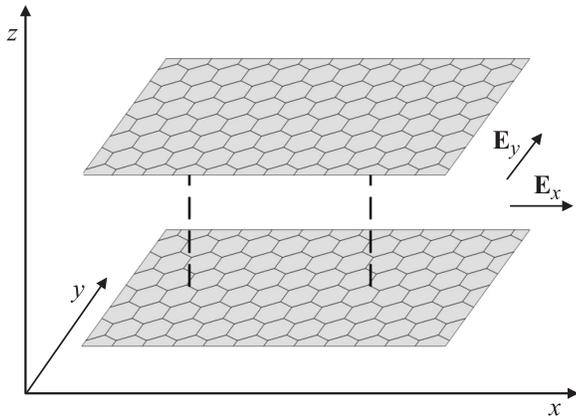


Рис. 1. Геометрия задачи.

Гамильтониан системы электронов можно записать в виде, предложенном Хаббардом [8,9]

$$H = H_0 + H_{\text{int}},$$

$$H_0 = \sum_{j\Delta\sigma} t_0 a_{j\sigma}^+ a_{j+\Delta\sigma} + h.c.,$$

$$H_{\text{int}} = U \sum_j a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{j-\sigma}^+ a_{j-\sigma},$$

где  $a_{j\sigma}^+$ ,  $a_{j\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов на узле  $j$  со спином  $\sigma$ ,  $t_0$  — интеграл перескока, определяемый перекрытием волновых функций электронов в соседних узлах,  $\Delta$  — вектор, связывающий соседние узлы в решетке,  $U$  — энергия кулоновского отталкивания электронов, находящихся на одном узле.

При помощи Фурье-преобразования

$$a_{n\sigma}^+ = \frac{1}{N^{1/2}} a_{j\sigma}^+ \exp(ijn),$$

$$a_{n\sigma} = \frac{1}{N^{1/2}} a_{j\sigma} \exp(-ijn), \quad (1)$$

которое диагонализует гамильтониан  $H_0$ , легко получить спектр электронов, описывающий свойства электронной подсистемы в отсутствие кулоновского отталкивания  $\varepsilon(\mathbf{p})$ .

Учет гамильтониана взаимодействия  $H_{\text{int}}$  был произведен в различных приближениях и различными способами в большом количестве работ, из которых упомянем только [10–13]. Основной результат, который следует из проведенного в этих работах анализа, состоит в том, что учет слагаемого, содержащего  $U$ , приводит к изменению спектра элементарных возбуждений модели. Так, две первоначально вырожденные (по проекциям спина  $\sigma$ ) зоны расщепляются на две невырожденные зоны со спектром, который описывается [10–13]

$$\varepsilon_h(\mathbf{p}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2} + \frac{U}{2} \mp \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{p}) - 2\varepsilon(\mathbf{p})U(1 - 2n_0) + U^2/2}, \quad (2)$$

где зависимость  $\varepsilon(\mathbf{p})$  следует задать применительно к конкретному случаю (см. ниже),  $n_0$  — среднее число электронов в узле.

Физически причина изменения спектра элементарных возбуждений достаточно прозрачна и состоит в рассеянии электронов на флуктуациях кулоновского поля, создаваемого электронами с другим спином, что и описывается  $H_{\text{int}}$ . Также отметим, что спектр, аналогичный (2), можно записать и в условиях электрон-фононного взаимодействия, если под величиной  $t_0$  понимать соответствующим образом перенормированную константу.

Учтем, что закон дисперсии, который описывает свойства графена без учета кулоновского взаимодействия электронов на одном узле, имеет вид [14]

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cos(ap_x) \cos\left(\frac{ap_y}{\sqrt{3}}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ap_y}{\sqrt{3}}\right)}, \quad (3)$$

где  $\gamma \approx 2.7$  eV,  $a = 3b/2\hbar$ ,  $b = 0.142$  nm расстояние между соседними атомами углерода в графене,  $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ . Разные знаки относятся к зоне проводимости и валентной зоне.

Уравнение движения может быть записано в виде [15]

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{E}. \quad (4)$$

С использованием калибровки:  $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$  мы получаем

$$p_x = p_0 E_x t,$$

$$p_y = p_0 E_y t.$$

Определим

$$v(p_x) = \frac{\partial \varepsilon_h(p_x, p_y)}{\partial p_x}, \quad v(p_y) = \frac{\partial \varepsilon_h(p_x, p_y)}{\partial p_y}.$$

Далее используем выражение для плотности тока, следующее из решения кинетического уравнения Больцмана [16]

$$j = \int_0^\infty v(\bar{p}(t)) \exp(-t) dt, \quad (5)$$

где  $j$  — плотность тока, время релаксации принято за единицу,  $\mathbf{p}(t)$  — решение уравнения (4) с начальными условиями, соответствующими минимуму  $E$ , что приведет к необходимости решить уравнение (4) для четырех начальных условий:  $ap_x = 0$ ;  $ap_x = \pi$ ;  $ap_y = \pi/3$ ;  $ap_y = 2\pi/3$ , а затем сложить все получившиеся значения для тока.

Закон дисперсии для графена можно представить в виде ряда:

$$\varepsilon(p_x, p_y) = \sum_{m,n} A_{mn} \cos(mp_x) \cos(np_y),$$

$$A_{mn} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon(p_x, p_y) \cos(mp_x) \cos(np_y) dp_x dp_y.$$

В итоге получаем выражение для  $x$ -компоненты плотности тока

$$j_x = q \sum_{m,n} A_{mn} \frac{m^2 E_x (n^2 E_y^2 - 1 - m^2 E_x^2)}{(1 + (nE_y + mE_x)^2)(1 + (nE_y - mE_x)^2)}. \quad (6)$$

Для данного приложенного поля  $E_y$  поперечное поле  $E_x$  определяется исходя из граничных условий. Далее мы полагаем отсутствие тока во внешней цепи

$$j_x = 0. \quad (7)$$

Это условие соответствует уравнению для поперечного поля  $E_x = E_x(E_y)$ . Уравнение (7) имеет два решения

$$E_x = 0,$$

$$\sum_{m,n} A_{mn} \frac{m^2 (n^2 E_y^2 - 1 - m^2 E_x^2)}{(1 + (nE_y + mE_x)^2)(1 + (nE_y - mE_x)^2)} = 0. \quad (8)$$

Необходимо отметить, что нами рассматриваются недиссипативные решения уравнений (7) и (8), т.е. без джоулева тепла, по аналогии с целочисленным квантовым эффектом Холла. В рассматриваемой модели существует щель в электронном спектре, и в случае низких температур механизм образования тепла вследствие электрон-фононного взаимодействия подавлен. При некоторых значениях параметров, входящих во второе уравнение (8), возникает поле, поперечное к приложенному полю. В этом случае имеем дело с неравновесным переходом первого рода. Существование поперечной компоненты является, возможно, простым примером самоорганизации в графене с хаббардовским взаимодействием.

Следует также подчеркнуть, что в рамках настоящей работы можно установить прямую связь между рассмотренной задачей и точно решаемой задачей Ваннье–Штарка об электроне в постоянном электрическом поле.

### 3. Результаты численного анализа

Типичная зависимость  $j_x$  от величины  $E_x$ , которая описывается в (8), представлена на рис. 2.

Здесь видно, что уравнение (8) имеет два корня, один из которых, как будет показано далее, соответствует неустойчивому решению.

Зависимость поперечной компоненты поля  $E_x$  от  $E_y$ , которая определяется как нулевое решение (8), показана на рис. 3.

Заметим, что спонтанное поперечное поле возникает не от нуля, а скачком от некоторой конечной величины, что будет соответствовать фазовому переходу первого рода. Возникновение данного поля, как и ранее, можно связать с сильной неравновесностью электронной подсистемы графена в присутствии внешнего поля.

На рис. 4 проиллюстрирована зависимость минимального значения компоненты поля  $E_y$ , при котором

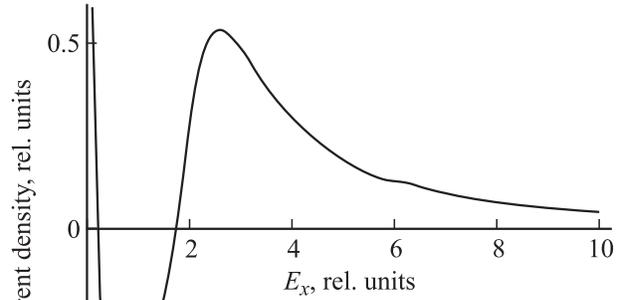


Рис. 2. Зависимость плотности тока от поля  $E_x$ , когда поле  $E_y$  фиксировано ( $E_y = 2.0$ ). Все величины приведены в безразмерных единицах.

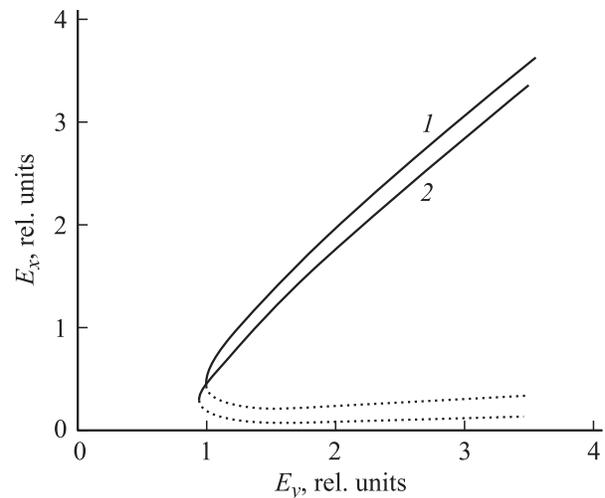


Рис. 3. Зависимость поля  $E_x$  от поля  $E_y$ : (1)  $U = 3, n = 0.1$ ; (2)  $U = 2, n = 0.1$ . Все величины — в безразмерных единицах.

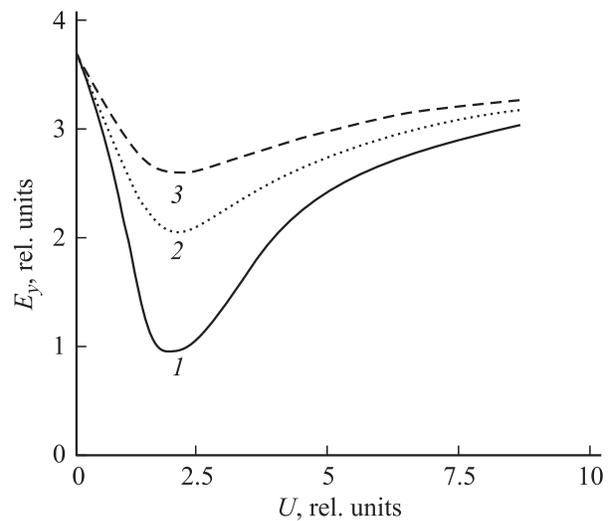
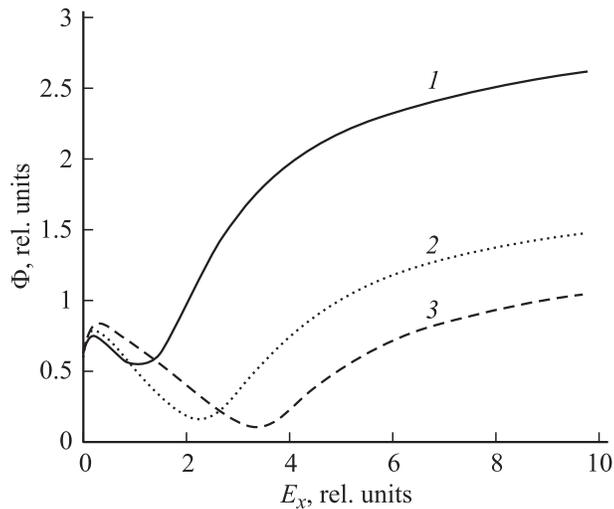


Рис. 4. Зависимость поля  $E_y$  от  $U$ : (1)  $n = 0.1$ ; (2)  $n = 0.2$ ; (3)  $n = 0.3$ . Все величины — в безразмерных единицах.



**Рис. 5.** Зависимость функции  $\Phi$  от  $E_x$  при фиксированном значении  $E_y$ : (1)  $E_y = 1.5$ ; (2)  $E_y = 2.5$ ; (3)  $E_y = 3.5$ . Все величины — в безразмерных единицах.

возникает поперечное электрическое поле, от  $U$  для разных значений  $n$ .

Отметим, что наиболее сильно, как и следовало ожидать, минимальная величина поля  $E_y$ , при котором возникает поперечное электрическое поле, зависит от энергии кулоновского отталкивания, что можно связать с более сильной „перестройкой“ одноэлектронного спектра при увеличении кулоновского отталкивания.

Возникающее спонтанно поперечное электрическое поле  $E_x$  может оказаться термодинамически неустойчивым, в отличие от всегда устойчивого решения для разомкнутой в направлении  $x$  цепи  $E_x = 0$ . Для исследования на устойчивость используем метод, описанный в [1], и введем функцию

$$\Phi(E_x) = \int_0^{E_x} j_x(E'_x) dE'_x + \text{const}, \quad E_y = \text{fixed}. \quad (9)$$

Данная функция обычно называется синергетическим потенциалом и выступает в роли аналога термодинамического потенциала для неравновесных задач. Согласно [1], условия устойчивости решения есть

$$\frac{d\Phi}{dE_x} = 0, \quad \frac{d^2\Phi}{dE_x^2} > 0. \quad (10)$$

Это фактически означает, что в данной неравновесной ситуации функция (9) достигает своего минимума в стационарном состоянии, таким образом, функция  $\Phi$  может выступать аналогом термодинамического потенциала для равновесных систем.

Зависимость „потенциала“  $\Phi$  от поля  $E_x$  для ряда значений  $E_y$  отображена на рис. 5.

Из проведенных расчетов видно, что функция  $\Phi$  имеет точку минимума и максимума. Отметим, что точка максимума соответствует меньшему по модулю ненулевому

решению (10), а точка минимума — большему по модулю решению, что в свою очередь, означает, что большее по модулю решение устойчиво. Отметим, что пунктирные ветви на рис. 3 соответствуют максимуму функции  $\Phi$  (неустойчивому решению), а сплошная — минимуму (устойчивому решению).

Данный переход, в котором спонтанно возникает электрическое поле, следует отнести к сегнетоэлектрическому типу, причем роль параметра порядка будет играть поперечное поле  $E_x$ , а аналогом температуры (управляющим параметром) будет выступать поле  $E_y$ .

## 4. Заключение

Сформулируем основные выводы настоящей работы.

1. Выявлено возникновение электрического поля, перпендикулярного приложенному внешнему электрическому полю, в графене с хаббардовским взаимодействием.

2. Минимальная величина приложенного поля, при котором возникает спонтанное поле в перпендикулярном направлении, определяется в основном величиной кулоновского потенциала.

3. Анализ синергетического потенциала показал, что возникающее состояние со спонтанным поперечным полем является устойчивым.

## Список литературы

- [1] Г.М. Шмелев, Е.М. Эпштейн. ФТТ **34**, 2565 (1992).
- [2] Е.М. Эпштейн, Г.М. Шмелев, И.И. Маглеванный. ФТТ **38**, 3478 (1996).
- [3] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. Science **306**, 666 (2004).
- [4] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. Nature **438**, 197 (2005).
- [5] Y. Zhang, J.W. Tan, H.L. Stormer, P. Kim. Nature **438**, 201 (2005).
- [6] S. Stankovich, D.A. Dikin, G.H.B. Dommett, K.M. Kohlhaas, E.J. Zimney, E.A. Stach, R.D. Piner, S.T. Nguyen, R.S. Ruoff. Nature **442**, 282 (2006).
- [7] А.М. Желтиков. Сверхкороткие импульсы и методы нелинейной оптики. Физматлит, М. (2006). 296 с.
- [8] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A276. **1365**, 238 (1963).
- [9] С.В. Вонсовский. Магнетизм. Наука, М. (1971). 1032 с.
- [10] Yu.A. Izyumov, B.M. Letfulov, E.V. Shipitsyn, K.A. Chao. Int. J. Mod. Phys. **21**, 3479 (1992).
- [11] Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин. Магнетизм коллективизированных электронов. Физматлит, М. (1994). 368 с.
- [12] Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. Наука, М. (1987). 264 с.
- [13] Ю.А. Изюмов. УФН **165**, 403 (1995).
- [14] P.R. Wallace. Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
- [15] Е.М. Epshtein, I.I. Maglevanny, G.M. Shmelev. Electric-field-induced magnetoresistance of lateral superlattice. J. Phys. Cond. Matter **8**, 4509 (1996).
- [16] F.G. Bass, A.P. Tetervov. Phys. Rep. **140**, 237 (1985).