

Абсолютная отрицательная проводимость в графене с хаббардовским взаимодействием в присутствии магнитного поля

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

Волгоградский государственный университет,
Волгоград, Россия

E-mail: mbelonenko@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 13 января 2010 г.)

На основании метода среднего электрона в случае низких температур рассчитаны вольт-амперные и гаусс-амперные характеристики для графена с хаббардовским взаимодействием электронов. Проведен анализ полученных характеристик в зависимости от частоты внешнего переменного электрического поля и величины магнитного поля. Выявлен участок с абсолютной отрицательной проводимостью.

Работа проведена в рамках реализации ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 гг. (проект № НК-16(3)), а также поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 08-02-00663).

1. Введение

На возможность появления отрицательной проводимости в неравновесной электронной системе, т.е. на ситуацию, когда ток течет в направлении, противоположном электрическому полю, по-видимому, впервые указал Кремер в конце 1950-х годов [1]. Механизм абсолютной отрицательной проводимости в двумерной электронной системе, помещенной в магнитное и переменное электрическое поля, который связан с рассеянием на примесях двумерных электронов, сопровождающихся поглощением фотонов переменного поля, был предложен в [2]. Состояние с отрицательной проводимостью является неустойчивым, система распадается на домены, а измеряемое макроскопическое сопротивление становится равным нулю, что делает данное состояние весьма привлекательным с точки зрения экспериментальных приложений. Несмотря на интерес, вызванный данными теоретическими работами, экспериментальные доказательства существования этого эффекта появились только в 2002 г. [3].

Вместе с тем в последнее время особое внимание исследователей привлекает новый углеродный материал — графен, представляющий собой один слой атомов углерода и имеющий плоскую гексагональную структуру. Большая подвижность электронов в графене и его уникальные электрофизические характеристики привлекают к нему внимание как одной из альтернатив кремниевой базы современной микроэлектроники [4–7]. Заметим, что электромагнитные волны, распространяющиеся в углеродных структурах, становятся сильно нелинейными уже при относительно слабых полях, что влечет за собой возможность распространения в углеродных нанотрубках и графене электромагнитных уединенных волн, которые являются аналогами солитонов или даже солитонами. Обсуждаемые свойства углеродных структур вызвали как повышенный теоретический интерес, так и попытки применения в устройствах нелинейной оптики [8]. В работах [9,10] изучались вопросы, связанные с нелинейным

откликом углеродных нанотрубок на электромагнитное поле. Нелинейность, согласно выводам, сделанным в этих работах, возникает вследствие изменения классической функции распределения электронов и непараболического закона дисперсии электронов. Возможность существования солитонов и зависимость их параметров от параметра углеродных нанотрубок были установлены в [11–13]. Отметим, что в данных работах существенным было то, что электронная подсистема описывалась в рамках кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации, что требует микроскопического обоснования. Необходимо отметить, что вне рассмотрения часто остаются собственно электронные свойства, которые могут проявляться в оптической части спектра. Так, например, кулоновское взаимодействие электронов может привести к изменению закона дисперсии и, следовательно, оптического отклика. Отметим, что наиболее простым способом учета кулоновского взаимодействия является предложенный Хаббардом [14,15], когда принимается во внимание только кулоновское отталкивание электронов, расположенных на одном узле решетки. Кроме того, возможна ситуация, когда, управляя спектром носителей заряда (к примеру, приложенным магнитным полем), можно управлять важными характеристиками электронной подсистемы, в том числе и проводимостью. С физической точки зрения причина этого состоит в явлении, аналогичном эффекту Холла, — отклонении движущихся под действием электромагнитного поля импульса электронов внешним магнитным полем. Заметим, что в последнее время данная тематика вызывает повышенный интерес исследователей [16,17].

В связи с этим возникает задача исследования отклика двумерной электронной системы с учетом хаббардовского взаимодействия и внешнего магнитного поля на приложенное внешнее электрическое поле в условиях, когда амплитуда внешнего переменного поля не мала и теория линейного отклика неприменима. Суммируя

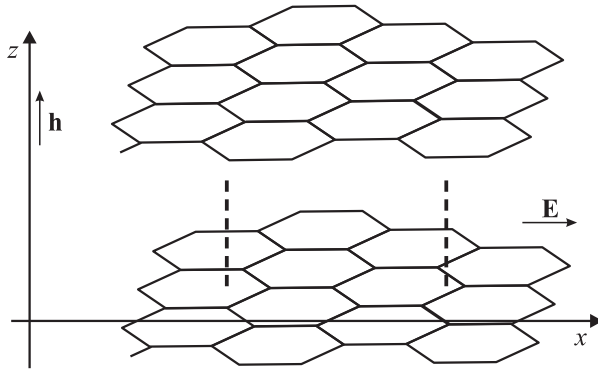


Рис. 1. Геометрия задачи.

указанное выше, 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 , в геометрии, когда магнитное поле перпендикулярно слоям графена (рис. 1).

Гамильтониан системы электронов можно записать в виде, предложенном Хаббардом [14,15],

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

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

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

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

При помощи Фурье-преобразования

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

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

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

Учет гамильтониана взаимодействия H_{int} был произведен в различных приближениях и разными способами

в достаточно большом количестве работ, из которых упомянем только [16–19]. Основной результат, который следует из проведенного в данных работах анализа, состоит в том, что учет слагаемого, содержащего U , приводит к изменению спектра элементарных возбуждений модели. Так, две первоначально вырожденные (по проекциям спина σ) зоны расщепляются на две невырожденные зоны со спектром, который описывается выражением [16–19]

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

где $\varepsilon(\mathbf{p})$ задается далее формулой (3), 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_{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 [20]

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

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

Для определения тока воспользуемся полуклассическим приближением [21], взяв закон дисперсии (2) из квантово-механической модели и описывая эволюцию ансамбля частиц классическим кинетическим уравнением Больцмана в приближении времен релаксации

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \left(-\frac{q}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + qhv_y \right) \frac{\partial f}{\partial p_x} + \left(-\frac{q}{c} \frac{\partial A_y}{\partial t} - qhv_x \right) \frac{\partial f}{\partial p_y} = \frac{F_0 - f}{\tau}, \quad (4)$$

где h — приложенное к образцу магнитное поле, параллельное оси z ; для электрического поля выбрана кулоновская калибровка $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \partial \mathbf{A} / \partial t$, причем $\mathbf{A} = (A_x, 0, 0)$, а $v_x = \partial E / \partial p_x$, $v_y = \partial E / \partial p_y$, F_0 — равновесная функция распределения Ферми: $F_0 = 1 / (1 + \exp(E(\mathbf{p}) / k_B T))$, T — температура, k_B — постоянная Больцмана. Отметим, что, согласно [9], время релаксации τ можно оценить примерно как 10^{-12} s . Запишем выражение для компоненты тока $j_\alpha(z, t)$ ($\alpha = x, y$)

$$j_\alpha = q \int dp v_\alpha f. \quad (5)$$

Воспользуемся далее методом „среднего электрона“ [22–24], в котором можно выразить ток через решение классических уравнений движения для электрона в заданных полях $A_x = A_0 \cos(\omega t)$

$$\begin{aligned} \frac{dp_x}{dt} &= qA_0 \cos(\omega t) - qhv_y, \\ \frac{dp_y}{dt} &= qhv_x \end{aligned} \quad (6)$$

с начальными условиями $p_x|_{t=0} = p_{x0}$, $p_y|_{t=0} = p_{y0}$. В рассматриваемом для простоты случае низких (нулевых) температур этот метод дает выражение

$$j_\alpha = q \int e^{-t} v_\alpha(p_x, p_y) dt, \quad (7)$$

где p_x, p_y — решения уравнения (6) с некими начальными условиями, а за единицу времени взято время релаксации τ . Здесь низкие температуры понимаются в смысле выполнения условия $k_B T \ll \Delta$, что позволяет избавиться от усреднения в методе „среднего электрона“ по начальным импульсам. Отметим, что в случае высоких температур в формуле (7) необходимо использовать решения уравнений (6) с произвольными начальными условиями, а потом произвести усреднение с равновесной функцией распределения, в которой роль импульсов будут играть начальные условия для p_x, p_y .

Отметим, что в классическом варианте метода „среднего“ электрона в качестве начальных условий выбирались $p_{x0} = p_{y0} = 0$, что было связано с тем, что наименьшие значения энергии $\epsilon(p)$ в задачах, рассматриваемых в [22–24], соответствовали центру зоны Бриллюэна. В нашем случае необходимо рассмотреть решения уравнений (6) с начальными условиями, соответствующими минимуму $\mathbf{E}(\mathbf{p})$, что даст необходимость решать уравнения (6) 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. Отметим также, что поскольку описывается случай предельно низких температур и в методе „среднего“ электрона необходимо учитывать только начальные условия, соответствующие минимуму энергии $\mathbf{E}(\mathbf{p})$, можно не рассматривать вклад в энергию, связанный со спиновыми уровнями электронов в магнитном поле $\pm \hbar h/2$, т.к. выбирается состояние с наименьшей энергией и данная добавка не дает вклада в скорости v_x, v_y .

В общем случае для закона дисперсии, задаваемого рядом (2), получить решение затруднительно во всем диапазоне переменного электрического и постоянного магнитного полей. Для косинусоидального закона дисперсии и для параболического закона дисперсии известны, например, решения, приведенные в [22,24]. Поскольку в данном случае получить такое решение представляется затруднительным, было проведено дальнейшее численное исследование уравнений (6), которое было получено без каких-либо ограничений на величины переменного электрического и постоянного магнитного полей.

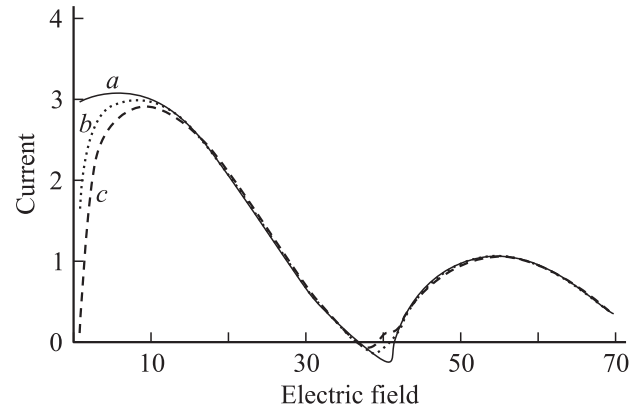


Рис. 2. Вольт-амперные характеристики графена для различных магнитных полей. Для кривой *b* магнитное поле в 3 раза больше, чем для кривой *a*; для кривой *c* в 5 раз больше, чем для кривой *a*. По оси абсцисс отложена амплитуда переменного электрического поля в относительных единицах, по оси ординат — ток в относительных единицах.

3. Результаты численного анализа

Исследуемые уравнения решались численно при помощи метода Рунге–Кутты восьмого порядка с начальными условиями $ap_x = 0$, $ap_x = \pi$, $ap_y = \pi/3$, $ap_y = 2\pi/3$.

Так, вольт-амперная характеристика для частоты $\omega = 1/\tau$ и различных величин магнитного поля представлена на рис. 2.

Из приведенной зависимости видно, что помимо обычного участка с отрицательной дифференциальной проводимостью, который свойствен всем веществам с периодическим законом дисперсии, на вольт-амперной характеристике присутствует участок с абсолютной отрицательной проводимостью, что можно связать с неравновесностью системы электронов в графене, обусловленной в первую очередь сильной непараболическостью закона дисперсии. Отметим также, что подобное состояние будет неустойчивым и приведет к разбивке графена на домены, подробное рассмотрение которых выходит за рамки настоящей работы. Уменьшение участка с абсолютным отрицательным сопротивлением с ростом магнитного поля можно связать с общим уменьшением тока при увеличении магнитного поля, что качественно можно понять, рассматривая классическое действие силы Лоренца, которая отклоняет электроны, распространяющиеся в направлении x .

Гаусс-амперная характеристика для частоты $\omega = 1/\tau$ и различных величин переменного электрического поля представлена на рис. 3.

Как видно из приведенной зависимости, величина тока слабо зависит от напряженности магнитного поля и определяется величиной переменного электрического поля, что согласуется с данными, приведенными на рис. 2. Отметим также немонотонную зависимость величины тока от амплитуды переменного поля, что тоже согласуется с данными, приведенными выше.

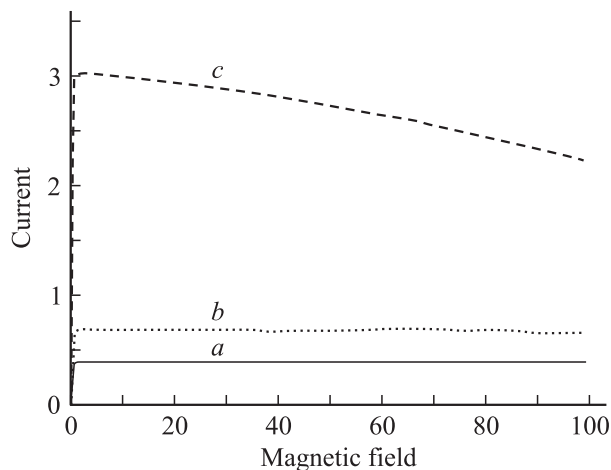


Рис. 3. Гаусс-амперные характеристики графена для различных переменных электрических полей (в безразмерных единицах). Для кривой *b* амплитуда переменного поля в 3 раза больше, чем для кривой *a*; для кривой *c* в 10 раз меньше, чем для кривой *a*. По оси абсцисс отложена величина постоянного магнитного поля в относительных единицах, по оси ординат ток в относительных единицах.

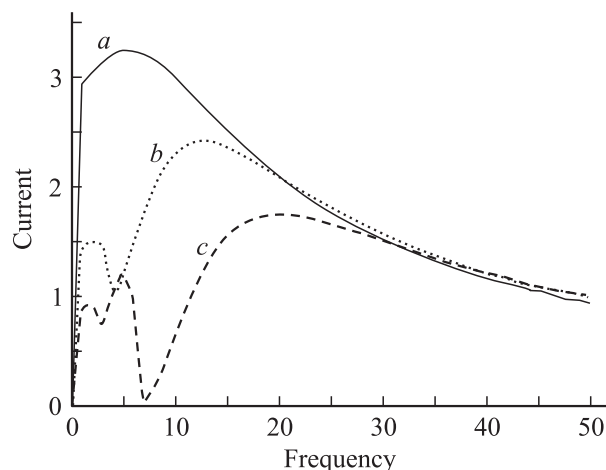


Рис. 4. Зависимость тока от частоты для различных переменных электрических полей. Для кривой *b* амплитуда переменного поля в 3 раза больше, чем для кривой *a*; для кривой *c* в 5 раз больше, чем для кривой *a*. По оси абсцисс отложена частота (в единицах $1/\tau$), по оси ординат — ток в относительных единицах.

Зависимость тока от частоты внешнего переменного электрического поля при неизменном магнитном поле для разных амплитуд внешнего переменного электрического поля приведена на рис. 4.

Согласно приведенным данным, в графене также возможно состояние с нулевой проводимостью, которое возникает с ростом амплитуды переменного электрического поля. На наш взгляд, данное явление имеет тот же механизм, что и возникновение участков с абсолютной отрицательной проводимостью на вольт-амперной характеристике, но может иметь большие возможности для

практических применений в силу устойчивости данного состояния.

Таким образом, используя метод „среднего“ электрона удастся исследовать проводимость графена в магнитном поле без каких-либо ограничений на амплитуду приложенных полей. Выявленные состояния с абсолютной отрицательной проводимостью будут вести к разбиению графенового листа на домены и появлению в итоге устойчивых состояний с нулевым сопротивлением, что может оказаться перспективным для практических применений.

4. Заключение

В заключение сформулируем основные выводы настоящей работы.

- 1) Предложен метод вычисления вольт-амперной и гаусс-амперной характеристик для графена в случае приложенных сильных электрических и магнитных полей.
- 2) В графене в присутствии постоянного магнитного поля, приложенного в направлении, перпендикулярном плоскости графена, возможны состояния с абсолютной отрицательной проводимостью.
- 3) Проводимость графена в присутствии магнитного поля сильно зависит от частоты внешнего электрического поля и, в частности, возможны состояния с нулевой проводимостью.
- 4) Проводимость в графене определяется в основном амплитудой внешнего переменного электрического поля и более слабо зависит от амплитуды приложенного постоянного магнитного поля.

Список литературы

- [1] H. Krömer. *Phys. Rev.* **109**, 1856 (1958).
- [2] В.И. Рыжий. *ФТТ* **11**, 2577 (1969).
- [3] В.И. Рыжий. *УФН* **175**, 205 (2005).
- [4] 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).
- [5] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. *Nature* **438**, 197 (2005).
- [6] Y. Zhang, J.W. Tan, H.L. Stormer, P. Kim. *Nature* **438**, 201 (2005).
- [7] 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).
- [8] А.М. Желтиков. *Сверхкороткие импульсы и методы нелинейной оптики*. Физматлит, М. (2006). 296 с.
- [9] S.A. Maksimenko, G.Ya. Slepyan. In: *Handbook of nanotechnology. Nanometer structure: theory, modeling, and simulation*. SPIE press, Bellingham (2004). P. 145.
- [10] G.Ya. Slepyan, S.A. Maksimenko, V.P. Kalosha, J. Herrmann, E.E.B. Campbell, I.V. Hertel. *Phys. Rev. A* **60**, R 777 (1999).
- [11] М.Б. Белоненко, Е.В. Demushkina, N.G. Lebelev. *J. Rus. Laser Res.* **27**, 457 (2006).

- [12] М.Б. Белоненко, Н.Г. Лебедев, Е.В. Демущкина. ФТТ **50**, 367 (2008).
- [13] M.B. Belonenko, N.G. Lebedev, O.Yu. Tuzalina. J. Rus. Laser Res. **30**, 102 (2009).
- [14] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
- [15] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **285**, 542 (1965).
- [16] Yu.A. Izyumov, B.M. Letfulov, E.V. Shipitsyn, K.A. Chao. Int. J. Mod. Phys. **21**, 3479 (1992).
- [17] Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин. Магнетизм коллективизированных электронов. Физматлит, М. (1994). 368 с.
- [18] Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. Наука, М. (1987). 264 с.
- [19] Ю.А. Изюмов. УФН **165**, 403 (1995).
- [20] P.R. Wallace. Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
- [21] В.М. Поляновский. ФТП **14**, 1215 (1980).
- [22] Э.М. Эпштейн. Изв. вузов. Радиофизика **22**, 373 (1979).
- [23] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. Физика полупроводников. Наука, М. (1990). 865 с.
- [24] G.M. Shmelev, E.M. Epshtein, M.B. Belonenko. Current oscillations in a superlattice under non-quantizing electric and magnetic fields. ArXiv: 0905.3457v2(2009).