

12,18

## Особенности распространения плазмонов в графеновом бислое в условиях поперечного электрического поля

© Е.И. Кухарь<sup>1,2</sup>, С.В. Крючков<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Волгоградский государственный социально-педагогический университет, Волгоград, Россия

<sup>2</sup> Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия

E-mail: eikuhar@yandex.ru

Поступила в Редакцию 22 мая 2019 г.

В окончательной редакции 23 мая 2019 г.

Принята к публикации 3 сентября 2019 г.

Исследовано дисперсионное соотношение для плазменных волн в графеновом бислое. В приближении случайных фаз изучено влияние разности потенциалов между графеновыми слоями на кривизну дисперсионной линии для плазмонов. Показана возможность управления энергией и групповой скоростью плазмонов за счет изменения указанной разности потенциалов. Продемонстрирован немонотонный характер зависимости энергии плазмонов от напряжения между графеновыми слоями. Проанализирована температурная зависимость закона дисперсии плазмонов.

**Ключевые слова:** графеновый бислой, плазменные волны, плазмоны.

DOI: 10.21883/FTT.2020.01.48753.487

### Введение

Современные достижения как в области физики твердого тела [1], так и в области наноэлектроники [2] дают возможность для управления электронными свойствами различных низкоразмерных структур за счет изменения внешних электромагнитных (ЭМ) полей. Одной из основных целей электронной инженерии является создание электронных устройств с перестраиваемыми характеристиками. В настоящее время особое внимание исследователей направлено на так называемые двумерные (2D) дираковские (или графеноподобные) материалы. К ним относятся, например, графеновые структуры, силицен, германен, фосфорен и т.д. Тем не менее, бесщелевая зонная структура некоторых таких материалов (в том числе свободного графенового монослоя) делают их неприменимыми в области полупроводниковой наноэлектроники.

По сравнению с графеном для носителей заряда которого характерна линейная дисперсионная зависимость в окрестности дираковских точек ( $K$ ), носители заряда в графеновом бислое (биграфене) обладают ненулевой эффективной массой. Кроме того, имеется возможность возникновения энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости, если биграфен помещен в электрическое поле, силовые линии которого перпендикулярны его плоскости [3]. В такой ситуации электронные свойства биграфена определяются величиной разности потенциалов между графеновыми слоями. Эту разность потенциалов будем называть смещающим напряжением (СН). Последнее обстоятельство делает биграфен весьма перспективным материалом для нано-

электроники. В [3,4] показано, что минимум энергии электронов в биграфене с СН смещается из точки  $K$ , вблизи которой формируется область отрицательных эффективных масс. В [5–9] эта особенность зонной структуры подтверждена экспериментально.

Исследования плазменных волн и коллективных возбуждений, называемых плазмонами, в 2D-дираковских кристаллах актуальны как с фундаментальной, так и с практической точек зрения. Фундаментальный интерес объясняется тем фактом, что такие квантово-механические объекты как плазмоны не имеют аналогов в классической теории. Более того, учет взаимодействия носителей заряда в 2D-дираковских кристаллах с плазмонами в ряде ситуаций является определяющим для объяснения особенностей плазменных колебаний [10], формирования электрон-плазмонных [11,12] и магнитоплазмонных [13] комплексов. Практический интерес к таким объектам связан с возможностью увеличения быстродействия электронных устройств, использующих в своей работе плазмонную динамику [14,15]. Последнее объясняется тем фактом, что групповая скорость плазмонов превышает дрейфовую скорость электронов на несколько порядков.

Плазменные возбуждения в биграфене исследовались как в рамках гидродинамической модели [16], так и в приближении случайных фаз (ПСФ) [10,17–19]. В [20] проведен учет электрон-фононного взаимодействия. Плазменные колебания в биграфене без СН изучены в [17,18,21] в рамках ПСФ. В [19] рассчитан закон дисперсии для плазмонов в биграфене с собственной проводимостью, когда уровень Ферми находится строго в точке  $K$ . В этой ситуации плазмоны образуются только

при ненулевой температуре. Закон дисперсии плазмонов в биграфене с СН исследован в [10]. Однако в [10] предполагалось, что электронный газ является невырожденным (уровень Ферми лежал внутри запрещенной зоны). Кроме того, результаты [10] справедливы для малых значений СН:  $V_0 \equiv e\varphi \ll \varepsilon_{\perp}$ . Здесь  $\varepsilon_{\perp} \sim 0.39$  eV — интеграл перекрытия волновых функций ближайших атомов из разных графеновых слоев,  $\varphi = Ed$  — СН,  $E$  — напряженность поперечного электрического поля,  $d \sim 0.34$  nm — расстояние между графеновыми плоскостями. Ниже мы рассматриваем абсолютный ноль температуры как одну из возможных ситуаций, а также считаем, что уровень Ферми может попадать в зону проводимости биграфена. В такой ситуации электронный газ уже нельзя считать невырожденным, как это сделано в [10].

## 1. Закон дисперсии для плазмонов в биграфене

Считаем, что графеновые слои параллельны координатной плоскости  $xy$ . Квантово-механическое состояние электрона в биграфене вблизи точки  $K$  описывается четырехкомпонентным спинором  $\psi$ , компоненты которого отвечают двум подрешеткам графена и двум его слоям [3]. Спинор  $\psi$  удовлетворяет уравнению  $i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi$ , где гамильтониан  $\hat{H}$  в приближении сильной связи имеет следующий вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{V_0}{2} & v_F\hat{\pi} & \varepsilon_{\perp} & 0 \\ v_F\hat{\pi}^+ & \frac{V_0}{2} & 0 & 0 \\ \varepsilon_{\perp} & 0 & -\frac{V_0}{2} & v_F\hat{\pi}^+ \\ 0 & 0 & v_F\hat{\pi} & -\frac{V_0}{2} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $v_F$  — скорость Ферми,  $\hat{\pi} = \hat{p}_x + i\hat{p}_y$ . Собственные значения гамильтониана (1) равны [3]

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon_{\perp}^2}{2} + \frac{V_0^2}{4} + v_F^2 p^2 \mp F(\mathbf{p})}, \quad (2)$$

$$F(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\perp}^4}{4} + (\varepsilon_{\perp}^2 + V_0^2)v_F^2 p^2}.$$

Так, например, согласно (2) энергия в точке  $K$  для нижней дисперсионной ветви зоны проводимости равна  $\varepsilon_K = V_0/2$ . Далее полагаем, что электронный газ находится при абсолютном нуле температуры, а уровень Ферми лежит в зоне проводимости и не пересекает ее верхнюю дисперсионную ветвь. Это позволяет оставить в выражении (2) только верхние знаки.

В рамках ПСФ закон дисперсии для плазмонов находится из уравнения

$$1 - V(\mathbf{k})\Pi(\omega, \mathbf{k}) = 0, \quad (3)$$

где  $V(\mathbf{k}) = 2\pi e^2/k$  — потенциал неэкранированного взаимодействия электронов, которое предполагается куло-

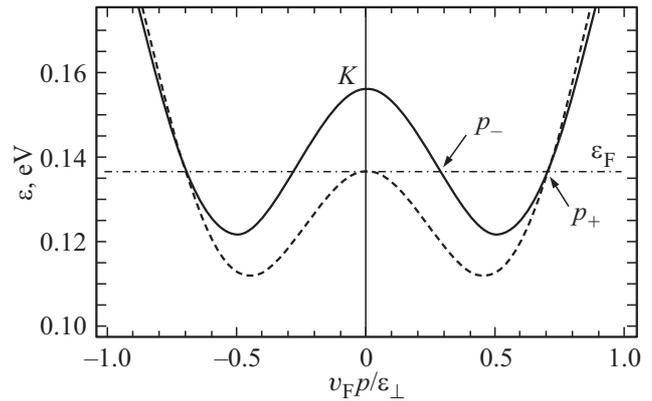


Рис. 1. Нижняя дисперсионная ветвь зоны проводимости биграфена с СН. Сплошная линия —  $V_0 = 312$  meV, пунктирная линия —  $V_0 = 273$  meV.

новским [18,22],  $\Pi(\omega, \mathbf{k})$  — поляризационный оператор, вычисляемый по формуле

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = i \int G(\varepsilon_1, \mathbf{p}_1) G(\varepsilon_2, \mathbf{p}_2) \frac{d\varepsilon d^2\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (4)$$

$G(\varepsilon, \mathbf{p})$  — причинная функция Грина для электрона,  $\mathbf{p}_{1,2} = \mathbf{p} \pm \hbar\mathbf{k}/2$ ,  $\varepsilon_{1,2} = \varepsilon \pm \hbar\omega/2$ . Считая температуры предельно низкими, получаем после некоторых преобразований следующее выражение:

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\theta(2\varepsilon_F - \Delta_g)}{2\pi\hbar^2} \left[ \frac{p_+}{|v_+|} \left( \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - v_+^2 k^2}} - 1 \right) + \frac{p_-}{|v_-|} \left( \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - v_-^2 k^2}} - 1 \right) \theta(V_0 - 2\varepsilon_F) \right]. \quad (5)$$

Здесь  $v = \partial_p \varepsilon(p)$ ,  $v_{\pm} = v(p_{\pm})$ ,  $p_{\pm}$  — корни уравнения  $\varepsilon(p) = \varepsilon_F$  ( $p_+$  лежит в области положительных эффективных масс,  $p_-$  лежит в области отрицательных эффективных масс, рис. 1),  $\varepsilon(p)$  — электронный спектр (2), взятый с верхними знаками,  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми,  $\theta(x)$  — ступенчатая функция,  $\Delta_g$  — энергетическая щель.

Известно, что в длинноволновом приближении закон дисперсии плазмонов в 2D-структурах имеет вид  $\omega_{\mathbf{k}} \propto \sqrt{k}$ , где  $\mathbf{k}$  — волновой вектор плазмона. Коэффициент пропорциональности определяет групповую скорость плазменных волн и зависит от электронных свойств материала. Данный коэффициент является функцией СН и пропорционален кривизне дисперсионной линии плазмонов при  $k = 0$ . Его вычисление является основной задачей в настоящей работе. Укажем на некоторые отличия решаемой здесь задачи от уже рассмотренных в предыдущих исследованиях. Во-первых, в отличие от [17–19,21] мы изучаем биграфен с СН. Во-вторых, в случае предельно низких температур мы

используем более общее выражение для электронного спектра, справедливое при  $V_0 \sim \varepsilon$ , что позволяет в более широких пределах менять параметр  $V_0$  по сравнению с [10]. В-третьих, в отличие от [10,19] здесь считается, что уровень Ферми располагается в зоне проводимости.

В длинноволновом приближении вместо (5) приходим к следующему выражению:

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = \frac{k^2 \theta(2\varepsilon_F - \Delta_g)}{4\pi \hbar^2 \omega^2} (p_+ v_+ + p_- |v_-| \theta(V_0 - 2\varepsilon_F)). \quad (6)$$

С помощью соотношения (3) находим энергию плазмона

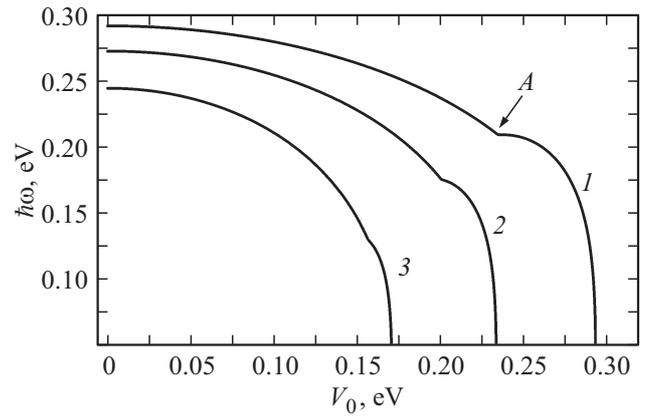
$$\hbar\omega = e\theta(2\varepsilon_F - \Delta_g) \sqrt{\frac{k}{2} (p_+ v_+ + p_- |v_-| \theta(V_0 - 2\varepsilon_F))}. \quad (7)$$

Считаем далее, что уровень Ферми фиксирован и определяется концентрацией  $n_0$  носителей заряда в зоне проводимости при  $V_0 = 0$ . Значения концентраций  $n_0$  берутся по порядку величины равными тем, что использовались в недавних экспериментах [7,14]. Например,  $n_0 = 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , что соответствует  $\varepsilon_F = 100 \text{ meV}$ . Зависимости энергии плазмона от параметра  $V_0$ , построенные по формуле (7) для фиксированного значения волнового числа, показаны на рис. 2 и 3 сплошными линиями. Из рисунков видно, что энергия  $\hbar\omega$ , а вместе с тем и кривизна дисперсионной линии для плазмонов, меняются с изменением СН. Возможность такого эффекта предсказана в [10] для невырожденного электронного газа. Однако результаты, полученные в [10], справедливы для  $V_0 \ll \varepsilon_{\perp}$ .

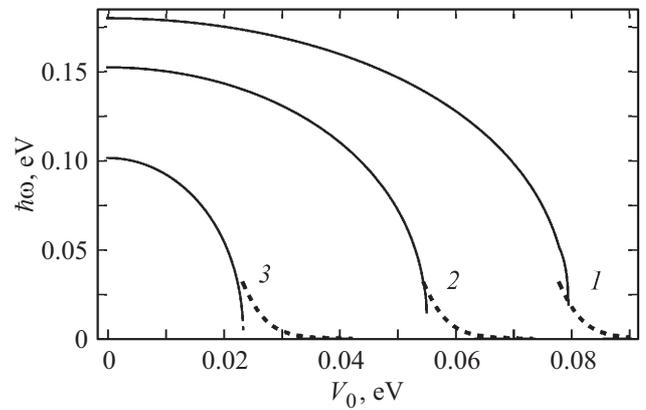
Из рис. 2 видна точка излома *A* для функции  $\hbar\omega(V_0)$ , которая, согласно (7), достигается при  $V_0 = 2\varepsilon_F$ . Для наблюдения этого эффекта необходимо, чтобы при начальном (минимальном) значении СН уровень Ферми был выше значения  $\varepsilon_K$ . В [10] уровень Ферми лежал внутри запрещенной зоны, а электронный газ полагался невырожденным, так что появление точки излома для функции  $\hbar\omega(V_0)$  не могло быть предсказано в рамках теории [10]. Действительно, в [10] плазменная частота при фиксированном значении волнового числа монотонно убывала с ростом СН.

## 2. Влияние температуры на дисперсионную линию плазмонов

Если температура близка к абсолютному нулю, то, как видно из графиков, представленных на рис. 2 и 3, при  $\Delta_g > 2\varepsilon_F$  происходит подавление плазменных колебаний. Действительно, в этом случае уровень Ферми оказывается внутри запрещенной зоны. Однако при ненулевых температурах концентрация электронов в зоне проводимости остается отличной от нуля, даже



**Рис. 2.** Зависимость энергии плазмона от параметра  $V_0$ . 1 —  $\varepsilon_F = 117 \text{ meV}$ , 2 —  $\varepsilon_F = 100 \text{ meV}$ , 3 —  $\varepsilon_F = 78 \text{ meV}$ .



**Рис. 3.** Зависимость энергии плазмона от параметра  $V_0$  (случай  $V_0 \ll \varepsilon_{\perp}$ ). 1 —  $\varepsilon_F = 39 \text{ meV}$ , 2 —  $\varepsilon_F = 27 \text{ meV}$ , 3 —  $\varepsilon_F = 12 \text{ meV}$ . Пунктирные линии соответствуют температуре 10 К.

если уровень Ферми располагается ниже дна этой зоны. Это приводит к размытию границы существования плазменных колебаний на графике зависимости  $\hbar\omega(V_0)$ . Для анализа температурной зависимости плазменной частоты, воспользуемся приближенным выражением для гамильтониана [23]:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{V_0}{2} & \frac{v_F^2 (\hat{\pi}^+)^2}{\varepsilon_{\perp}} \\ \frac{v_F^2 (\hat{\pi})^2}{\varepsilon_{\perp}} & -\frac{V_0}{2} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Несмотря на приближенную форму, гамильтониан (8) широко используется в аналитических расчетах в тех случаях, когда выполняется условие  $V_0 \ll \varepsilon_{\perp}$  (например, [24–26]). Собственные значения (8) равны

$$\varepsilon = \frac{V_0}{2} \left( 1 + \frac{2v_F^2 p^4}{\varepsilon_{\perp}^2 V_0^2} \right). \quad (9)$$

Считаем теперь, что система имеет конечную температуру. В длинноволновом приближении имеем

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{k^2}{4\pi\hbar^2\omega^2} \int \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} v(\varepsilon) p(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (10)$$

Используя статистику Ферми–Дирака, получаем вместо (10)

$$\Pi(\omega, \mathbf{k}) = \frac{k^2 T}{\pi\hbar^2\omega^2} \ln\left(1 + e^{\frac{2\varepsilon_F - V_0}{2T}}\right). \quad (11)$$

С помощью (3) находим энергию плазмона

$$\hbar\omega = e \sqrt{2Tk \ln\left(1 + e^{\frac{2\varepsilon_F - V_0}{2T}}\right)}. \quad (12)$$

Зависимости энергии плазмона от температуры вблизи границы подавления плазменных колебаний, построенные по формуле (12) для фиксированного значения волнового числа, показаны на рис. 3 пунктирными линиями.

### 3. Заключение

Выше исследовано влияние СН на дисперсионную линию для плазмонов в биграфене. При этом в противоположность [10] использовалось более общее выражение для электронного спектра биграфена, учитывающее в отличие от [17–19,20] поперечное электрическое поле и справедливое и для случая  $V_0 \sim \varepsilon_{\perp}$ . Зависимость энергии плазмона  $\hbar\omega$  от СН имеет немонотонный характер. Причиной появления точки излома А (рис. 2) является наличие области отрицательных эффективных масс в окрестности точки К (рис. 1). Действительно, энергетическая щель увеличивается с ростом СН, что приводит к смещению вверх по энергии области отрицательных эффективных масс и приближению к уровню Ферми. Пока вся эта область остается ниже уровня Ферми, ее электроны не участвуют в формировании плазменных колебаний, и вклад в них дают только носители из области положительных эффективных масс (электроны с импульсом  $p_+$ ). Как только уровень Ферми пересекает область отрицательных эффективных масс, в выражении (7) появляются дополнительные слагаемые, связанные с вкладом носителей заряда с импульсом  $p_-$ . Это приводит к возрастанию плазменной частоты при фиксированном значении волнового числа  $k$ . Вклад электронов с импульсами  $p_-$  становится возможным при конечном значении СН  $V_{0A}$ , соответствующем точке излома А для функции  $\hbar\omega(V_0)$ .

Для наблюдения особенностей плазменных колебаний, описанных выше, уровень Ферми должен превышать энергию электронов в точке К при начальном значении СН. Отметим, что в [10] электронный газ считался невырожденным, а уровень Ферми лежал внутри запрещенной зоны. Таким образом, появление точки излома для функции  $\hbar\omega(V_0)$  не может быть предсказано в рамках теории [10].

В заключение отметим, что  $\varepsilon_F < \varepsilon_{\perp}$ . Параметр  $\varepsilon_{\perp}$  равен минимуму энергии для верхней дисперсионной ветви электронов в зоне проводимости, что оправдывает использование только верхних знаков в формуле (2).

### Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках проектной части государственного задания, код проекта: 3.2797.2017/4.6.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] M. Hofmann, W.-Y. Chiang, T.D. Nguyen, Y.-P. Hsieh. *Nanotechnology* **26**, 335607 (2015).
- [2] X. Guo, W. Wang, H. Nan, Y. Yu, J. Jiang, W. Zhao, J. Li, Z. Zafar, N. Xiang, Zhonghua Ni, W. Hu, Y. You, Zhenhua Ni. *Optica* **3**, 1066 (2016).
- [3] E. McCann, M. Koshino. *Rep. Prog. Phys.* **76**, 056503 (2013).
- [4] E.V. Castro, K.S. Novoselov, S.V. Morozov, N.M.R. Peres, J.M.B. Lopes dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A.K. Geim, A.H. Castro Neto. *J. Phys. Condens. Matter* **22**, 175503 (2010).
- [5] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, E. Rotenberg. *Science* **313**, 951 (2006).
- [6] Z.Q. Li, E.A. Henriksen, Z. Jiang, Z. Hao, M.C. Martin, P. Kim, H.L. Stormer, D.N. Basov. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 037403 (2009).
- [7] K.F. Mak, C.H. Lui, J. Shan, T.F. Heinz. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 256405 (2009).
- [8] L.M. Malard, J. Nilsson, D.C. Elias, J.C. Brant, F. Plentz, E.S. Alves, A.H. Castro Neto, M.A. Pimenta. *Phys. Rev. B* **76**, 201401(R) (2007).
- [9] А.В. Елецкий, И.М. Искандарова, А.А. Книжник, Д.Н. Красиков. *УФН* **181**, 233 (2011); [A.V. Eletsii, I.M. Iskandarova, A.A. Knizhnik, D.N. Krasikov. *Phys. Usp.* **54**, 227 (2011).].
- [10] П.В. Бадикова, С.Ю. Глазов. *Изв. РАН. Сер. физ.* **81**, 59 (2017); [P.V. Badikova, S.Yu. Glazov. *Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys.* **81**, 51 (2017).].
- [11] A. Bostwick, F. Speck, T. Seyller, K. Horn, M. Polini, R. Asgari, A.H. MacDonald, E. Rotenberg. *Science* **328**, 999 (2010).
- [12] P.K. Pyatkovskiy, T. Chakraborty. *Phys. Rev. B* **93**, 085145 (2016).
- [13] Y.E. Lozovik, A.A. Sokolik. *Nanoscale Res. Lett.* **7**, 134 (2012).
- [14] A.N. Grigorenko, M. Polini, K.S. Novoselov. *Nature Photonics* **6**, 749 (2012).
- [15] F. Peragut, L. Cerutti, A. Baranov, J.P. Hugonin, T. Taliercio, Y. De Wilde, J.J. Greet. *Optica* **4**, 1409 (2017).
- [16] N.M. Hassan, V.V. Mkhitarian, E.G. Mishchenko. *Phys. Rev. B* **85**, 125411 (2012).

- [17] G. Borghi, M. Polini, R. Asgari, A.H. MacDonald. Phys. Rev. B **80**, 241402(R) (2009).
- [18] R. Sensarma, E.H. Hwang, S. Das Sarma. Phys. Rev. B **82**, 195428 (2010).
- [19] S. Das Sarma, Q. Li. Phys. Rev. B **87**, 235418 (2013).
- [20] T. Low, F. Guinea, H. Yan, F. Xia, P. Avouris. Phys. Rev. Lett. **112**, 116801 (2014).
- [21] P.M. Krstajic, F.M. Peeters. Phys. Rev. B **88**, 165420 (2013).
- [22] S. Das Sarma, E.H. Hwang. Phys. Rev. Lett. **102**, 206412 (2009).
- [23] A.V. Rozhkov, A.O. Sboychakov, A.L. Rakhmanov, F. Nori. Phys. Rep. **648**, 1 (2009).
- [24] M. Barbier, P. Vasilopoulos, F.M. Peeters. Phys. Rev. B **82**, 235408 (2010).
- [25] M. Killi, S. Wu, A. Paramekanti. Phys. Rev. Lett. **107**, 086801 (2011).
- [26] F. Sattari, E. Faizabadi. Int. J. Mod. Phys. B **27**, 1350024 (2013).

*Редактор Е.Ю. Флегонтова*