

# Абсолютная отрицательная проводимость в примесном графене в присутствии магнитного поля

© М.Б. Белоненко, Н.Г. Лебедев\*, Н.Н. Янюшкина\*<sup>†</sup>, М.М. Шакирзянов<sup>+</sup>

Волгоградский институт бизнеса (лаборатория нанотехнологий),  
400048 Волгоград, Россия

\* Волгоградский государственный университет,  
400062 Волгоград, Россия

<sup>+</sup> Казанский физико-технический институт, Казанский научный центр Российской академии наук,  
420029 Казань, Россия

(Получена 18 января 2010 г. Принята к печати 9 ноября 2010 г.)

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

## 1. Введение

На возможность появления отрицательной проводимости в неравновесной электронной системе, т.е. на ситуацию, когда ток идет в направлении, противоположном электрическому полю, по-видимому, впервые указал Кремер в конце 1950-х годов [1]. Механизм абсолютной отрицательной проводимости (АОП) в двумерной электронной системе, помещенной в магнитное и переменное электрическое поля, который связан с рассеянием на примесях двумерных электронов, сопровождающимся 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 упомянутыми 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, состоящий из одного слоя атомов углерода и имеющий плоскую гексагональную структуру. Большая подвижность электронов в графене и его уникальные электрофизические характеристики привлекают к нему внимание как к одной из альтернатив кремнию — базовому материалу 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 параметров углеродных нанотрубок были установлены в работах [11–13]. В данных работах было существенным, что электронная подсистема описывалась в рамках кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации, для чего требуется микроскопическое обоснование. Необходимо отметить, что вне рассмотрения часто остаются собственно электронные свойства, которые могут проявляться в оптической части спектра. Так, например, введение примеси может привести к изменению закона дисперсии и, следовательно, к изменению оптического отклика. Отметим, что наиболее простой учет примесей и взаимодействия электронов графена с электронами примеси возможно осуществить в виде, предложенном Андерсоном [14,15], когда учитывается только гибридизация электронных подсистем. Кроме того, возможна ситуация, когда, управляя спектром носителей заряда, например, 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, — в отклонении движущихся под действием электромагнитного поля электронов внешним магнитным полем. Заметим, что в последнее время данная тематика вызывает повышенный интерес исследователей [16].

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

<sup>†</sup> E-mail: yana@inbox.ru

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

## 2. Основные уравнения

Рассмотрим отклик графена на внешнее электрическое поле  $\mathbf{E}$ , приложенное вдоль оси  $x$ , в геометрии, когда магнитное поле перпендикулярно слоям графена (рис. 1).

Рассмотрим гамильтониан периодической модели Андерсона в виде, удобном для рассмотрения электронного спектра в графене [17,18]:

$$\begin{aligned}
 H &= H_h + H_{im} + H_{hyb}, \\
 H_h &= - \sum_{j\Delta\sigma} t_\Delta (a_{j\sigma}^+ b_{j+\Delta\sigma} + b_{j+\Delta\sigma}^+ a_{j\sigma}) \\
 &\quad + U \sum_j (a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{j-\sigma}^+ a_{j-\sigma} + b_{j\sigma}^+ b_{j\sigma} b_{j-\sigma}^+ b_{j-\sigma}), \\
 H_{im} &= \sum_j (\varepsilon d_{j\sigma}^+ d_{j\sigma} + \varepsilon d_{j-\sigma}^+ d_{j-\sigma} + U_1 d_{j\sigma}^+ d_{j\sigma} d_{j-\sigma}^+ d_{j-\sigma}), \\
 H_{hyb} &= V \sum_{j\sigma} (a_{j\sigma}^+ d_{j\sigma} + d_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}), \quad (1)
 \end{aligned}$$

где  $a_{j\sigma}^+$ ,  $a_{j\sigma}$ ,  $b_{j\sigma}^+$ ,  $b_{j\sigma}$  — операторы рождения, уничтожения электронов со спином  $\sigma$  на двух взаимодуальных подрешетках углерода, так что электроны совершают лишь прыжки между подрешетками;  $t_\Delta$  — интеграл перескока между соседними узлами в подрешетках;  $U$  — константа кулоновского отталкивания электронов, оказавшихся на одном узле;  $d_{j\sigma}^+$ ,  $d_{j\sigma}$  — операторы рождения, уничтожения примесных электронов со спином  $\sigma$ ;  $\varepsilon$  — уровень энергии примесей;  $U_1$  — константа кулоновского отталкивания электронов примеси;  $V$  — интеграл перекрытия между волновыми функциями электронов примеси и  $\pi$ -электронов углерода,

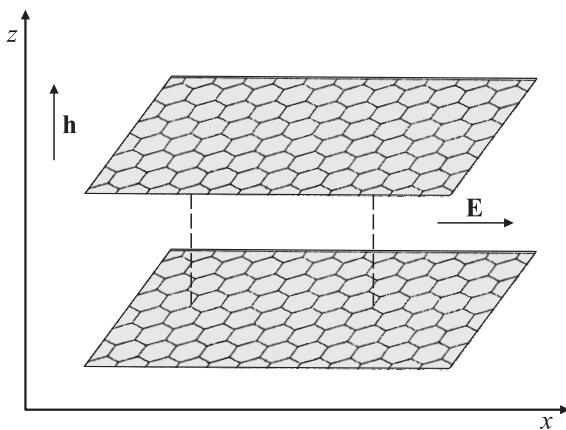


Рис. 1. Геометрия задачи.

образующих зоны. Значения таких параметров, как  $t_\Delta$ ,  $U$ ,  $U_1$ ,  $V$ , оценивались, например, при помощи квантово-химического полуэмпирического метода MNDO [13] из расчетов электронного строения углеродных структур. Так, оценки показали, что типичные величины для этих параметров есть  $t_\Delta \approx 2$  эВ,  $U \approx 12$  эВ,  $U_1 \approx 12$  эВ,  $V \approx 2$  эВ. Поскольку свойства модели, описываемой гамильтонианом Андерсона, достаточно сложные, мы будем использовать следующее приближение: считаем, что  $U \rightarrow \infty$  и все средние значения пространственно однородны. Отметим, что приближение  $U \rightarrow \infty$  хорошо согласуется с квантово-механическими расчетами для графеноподобных структур. В этом приближении гамильтониан (1) можно записать в виде [19,20]

$$H = \sum_{k\sigma} E_\sigma(k) C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma}, \quad (2)$$

где  $C_{k\sigma}^+$ ,  $C_{k\sigma}$  — операторы рождения, уничтожения элементарных возбуждений (с моментом  $k$  и спином  $\sigma$ ), а  $E_\sigma(k)$  — спектр, который согласно [19,20] может быть представлен как

$$\begin{aligned}
 E_\sigma(k) &= \frac{1}{2} \left[ \varepsilon(k) + \varepsilon - n^\sigma \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{[-\varepsilon(k) + \varepsilon - n^\sigma]^2 + 4(1 - n_\sigma^{im})|V|^2} \right]. \quad (3)
 \end{aligned}$$

Здесь  $V$  — параметр гибридизации,  $\varepsilon(k)$  — спектр электронов графена, определяемый диагонализированным гамильтонианом  $H_h$ , а  $n^\sigma$  и  $n_\sigma^{im}$  — параметры, определяемые из условия устойчивости задачи.

Учтем, что закон дисперсии, который описывает свойства графена, без учета кулоновского взаимодействия электронов на одном узле имеет вид [21]

$$\varepsilon(k) = \gamma \sqrt{1 + 4 \cos(ap_x) \cos(ap_y/\sqrt{3}) + 4 \cos^2(ap_y/\sqrt{3})}, \quad (4)$$

где  $\gamma \approx 2.7$  эВ,  $a = 3b/2\hbar$ ,  $b = 0.142$  нм — расстояние между соседними атомами углерода в графене,  $k = (p_x, p_y)$ . Согласно [19,20], условия устойчивости можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 n^\sigma &= \sum_{k,v} A_v^{-\sigma} F(E_{-\sigma v}(k)), \\
 n_\sigma^{im} &= \sum_{k,v} B_v^\sigma F(E_{\sigma v}(k)), \\
 A_v^\sigma &= (-1)^v \frac{|v|^2}{2Q_\sigma(k)}, \\
 B_v^\sigma &= (-1)^v \frac{E_{\sigma v} - \varepsilon(k)}{2Q_\sigma(k)}, \\
 E_{\sigma v} &= \frac{1}{2} \left[ \varepsilon(k) + \varepsilon - n^\sigma \right. \\
 &\quad \left. + (-1)^v \sqrt{[-\varepsilon(k) + \varepsilon - n^\sigma]^2 + 4(1 - n_\sigma^{im})|v|^2} \right], \\
 Q_\sigma(k) &= \frac{1}{2} \sqrt{[-\varepsilon(k) + \varepsilon - n^\sigma]^2 + 4(1 - n_\sigma^{im})|v|^2}.
 \end{aligned} \quad (5)$$

Для определения тока воспользуемся полуклассическим приближением [22], взяв закон дисперсии (2) из квантово-механической модели и описывая эволюцию ансамбля частиц классическим кинетическим уравнением Больцмана в приближении времен релаксации:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \left(-\frac{q}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + qhv_y\right) \frac{\partial f}{\partial p_x} + \left(-\frac{q}{c} \frac{\partial A_y}{\partial t} - qhv_x\right) \frac{\partial f}{\partial p_y} = \frac{F - f}{\tau}, \quad (6)$$

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  $v_x = \partial E / \partial p_x$ ,  $v_y = \partial E / \partial p_y$ ,  $F$  есть равновесная функция распределения Ферми,  $F(E) = 1/[1 + \exp(E/k_B T)]$ ,  $T$  — температура,  $k_B$  — постоянная Больцмана. Время релаксации  $\tau$  можно оценить, согласно [9], как  $\sim 10^{-12}$  с. Запишем выражение для компоненты тока  $j_\alpha(z, t)$  ( $\alpha = x, y$ ):

$$j_\alpha = q \int dp v_\alpha f. \quad (7)$$

Воспользуемся далее методом „среднего электрона“ [23–25], в котором можно выразить ток через решение классических уравнений движения для электрона в заданных полях  $A_x = A_0 \cos(\omega t)$ :

$$\frac{dp_x}{dt} = qA_0 \cos(\omega t) - qhv_y, \quad \frac{dp_y}{dt} = qhv_x \quad (8)$$

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

$$j_\alpha = q \int e^{-t} v_\alpha(p_x, p_y) dt, \quad (9)$$

где  $p_x, p_y$  — решения уравнения (8) с некими начальными условиями, а за единицу времени взято время релаксации  $\tau$ . Здесь низкие температуры понимаются в смысле выполнения условия  $k_B T \ll \gamma$ , что позволяет избавиться от усреднения в методе „среднего электрона“ по начальным импульсам. Отметим, что в случае высоких температур в формуле (9) необходимо использовать решения уравнений (8) 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  $p_{x0} = p_{y0} = 0$  в связи с тем, что наименьшие значения энергии  $\epsilon(p)$  в задачах, рассматриваемых в [23–25], соответствовали центру зоны Бриллюэна. В нашем случае необходимо рассмотреть решения уравнений (8) с

начальными условиями, соответствующими минимуму  $\mathbf{E}$ , что даст необходимость решать уравнения (8) 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 рассматривается случай предельно низких температур и в методе „среднего электрона“ необходимо учитывать только начальные условия, соответствующие минимуму энергии  $\mathbf{E}$ , можно не рассматривать вклад энергии, связанной со спиновыми уровнями электронов в магнитном поле  $\pm \hbar h/2$ , поскольку 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 [23]. Поскольку в данном случае получить такое решение представляется затруднительным, было проведено дальнейшее численное исследование уравнений (8), не содержащих каких-либо ограничений на величины переменного электрического и постоянного магнитного полей.

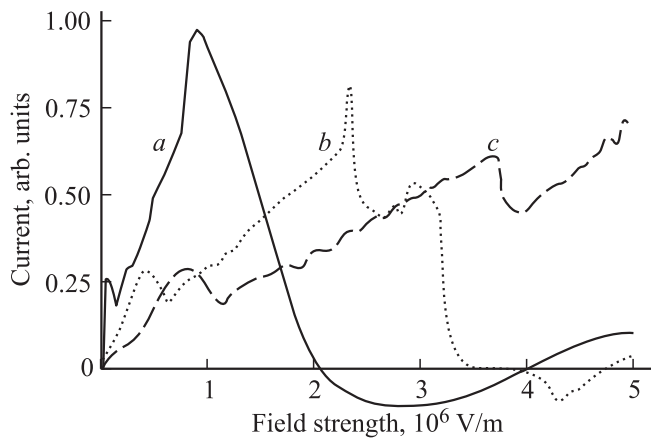
### 3. Результаты численного анализа

Исследуемые уравнения решались численно при помощи метода Рунге–Кутты 8-го порядка с начальными условиями  $ap_x = 0, ap_x = \pi, ap_y = \pi/3, ap_y = 2\pi/3$ . Вольт-амперные характеристики для частоты  $\omega = 1/\tau$  и разных величин магнитного поля представлены на рис. 2.

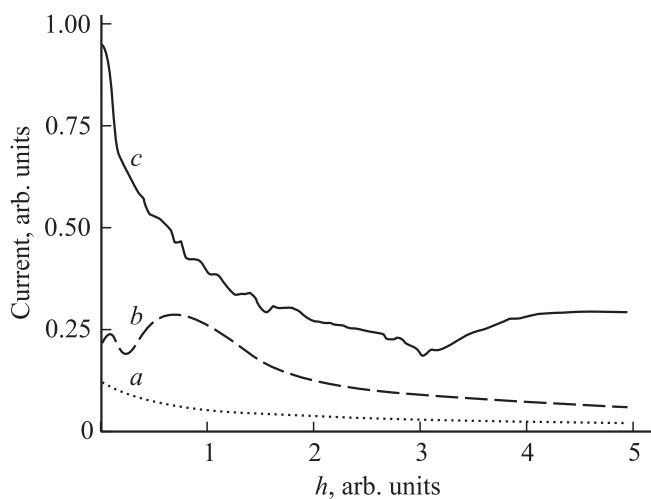
Из приведенных зависимостей видно, что помимо обычного участка с отрицательной дифференциальной проводимостью, который свойствен всем веществам с периодическим законом дисперсии, присутствует участок с абсолютной отрицательной проводимостью, что можно связать с неравновесностью системы электронов в примесном 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 данной 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-амперные характеристики для частоты  $\omega = 1/\tau$  и разных величин переменного электрического поля представлены на рис. 3.

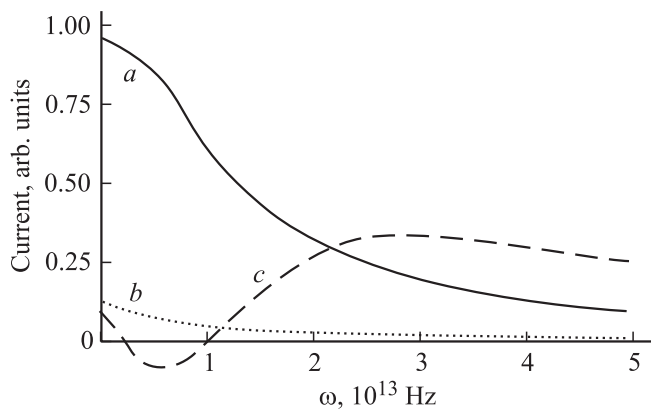
Как видно из приведенных зависимостей, величина тока определяется в основном величиной переменного



**Рис. 2.** Вольт-амперные характеристики графена при разных магнитных полях. Отношение магнитных полей: 3 для  $b/a$ , 5 для  $c/a$ .



**Рис. 3.** Гаусс-амперные характеристики графена при разных амплитудах переменного электрического поля. Отношение амплитуд переменного электрического поля: 3 для  $b/a$ , 10 для  $c/a$ .



**Рис. 4.** Зависимости тока от частоты при разных амплитудах переменного электрического поля. Отношение амплитуд переменного электрического поля: 10 для  $a/b$ , 5 для  $c/a$ .

электрического поля, что согласуется с данными, приведенными на рис. 2. Отметим также немонотонную зависимость величины тока от амплитуды переменного поля, что также согласуется с данными, приведенными выше. Падение величины тока с ростом амплитуды магнитного поля, можно, как и ранее, связать с действием силы Лоренца.

Зависимости тока от частоты внешнего переменного электрического поля при неизменном магнитном поле и для разных амплитуд внешнего переменного электрического поля приведены на рис. 4.

Согласно приведенным данным, в графене также возможно состояние с нулевой и отрицательной проводимостью, которое возникает с ростом амплитуды переменного электрического поля. На наш взгляд, данное явление (нулевая проводимость) имеет тот же механизм, что и возникновение участков с абсолютной отрицательной проводимостью на вольт-амперной характеристике, но может иметь большие перспективы для практических применений в силу устойчивости данного состояния.

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

#### 4. Заключение

В заключение сформулируем основные выводы из данной работы.

— Предложен метод вычисления вольт-амперной и гаусс-амперной характеристик для графена с примесями с гибридизированными электронами в случае приложенных сильных электрических и магнитных полей.

— В примесном графене в присутствии постоянного магнитного поля, приложенного в направлении, перпендикулярном плоскости графена, возможны состояния с абсолютной отрицательной проводимостью.

— Проводимость примесного графена в присутствии магнитного поля сильно зависит от частоты внешнего электрического поля, и, в частности, возможны состояния с нулевой проводимостью.

— Проводимость в графене определяется в основном амплитудой внешнего переменного поля и более слабо зависит от амплитуды приложенного постоянного магнитного поля.

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 (грант № 08-02-00663).

## Список литературы

- [1] H. Krömer. Phys. Rev., **109**, 1856 (1958).
- [2] В.И. Рьжий. ФТТ, **11**, 2477 (1969).
- [3] В.И. Рьжий. 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* (М., Физматлит, 2006).
- [9] S.A. Maksimenko, G.Ya. Slepuyan. In: *Handbook of nanotechnology. Nanometer structure: theory, modeling, and simulation* (Bellingham, SPIE Press, 2004) p. 145.
- [10] G.Ya. Slepuyan, S.A. Maksimenko, V.P. Kalosha, J. Herrmann, E.E.B. Campbell, I.V. Hertel. Phys. Rev. A, **60**, R777 (1999).
- [11] M.B. Belonenko, E.V. Demushkina, N.G. Lebedev. J. Russian Laser Research, **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. Russian Laser Research, **30**, 102 (2009).
- [14] P.W. Anderson. Phys. Rev., **124**, 41 (1961).
- [15] С.Г. Овчинников, Л.Е. Якимов. ФТТ, **45** (8), 1409 (2003).
- [16] Yu.A. Izyumov, B.M. Letfulov, E.V. Shipitsyn, K.A. Chao. Int. J. Mod. Phys., **21**, 3479 (1992).
- [17] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, E. Rotenberg. Science, **313**, 951 (2006).
- [18] A. Nagashima, K. Nuka, H. Itoh, I. Ichinokawa, C. Oshima, S. Otani. Surf. Sci., **291**, 93 (1993).
- [19] Ю.А. Изюмов, Д.С. Алексеев. ФТТ, **97**, 18 (2004).
- [20] Ю.А. Изюмов, Н.И. Чашин. ФТТ, **97**, 5 (2004).
- [21] P.R. Wallace. Phys. Rev., **71**, 622 (1947).
- [22] В.М. Поляновский. ФТП, **14**, 1215 (1980).
- [23] Э.М. Эпштейн. Изв. вузов. Радиофизика, **22**, 373 (1979).
- [24] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1990).
- [25] G.M. Shmelev, E.M. Epshtein, M.B. Belonenko. arXiv: 0905.3457v2(2009).

Редактор Л.В. Шаронова

## Absolute negative conductivity of graphene with impurities in magnetic field

M.B. Belonenko, N.G. Lebedev\*, N.N. Yanyushkina\*, M.M. Shakirzyanov<sup>+</sup>

Volgograd Institute of Business  
(Laboratory of Nanotechnologies),  
400048 Volgograd, Russia

\* Volgograd State University,  
400062 Volgograd, Russia

<sup>+</sup> Kazan Physical-Technical Institute,  
Kazan Scientific Centre  
of Russian Academy of Sciences,  
420029 Kazan, Russia

**Abstract** Current–voltage and gauss-ampere characteristics for graphene with Anderson interaction were obtained in the case of low temperatures by the average electron method. The analysis of these characteristics was carried out depending on frequency of the external alternating electric field and on the magnetic field. The region of the absolute negative conductivity was found.