

М.А.Рувінський¹, Б.М.Рувінський²

Міжзонне поглинання гіперзвуку в прямолінійних смужках графену

¹ Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул.Шевченка, 57, м.Івано-Франківськ, 76000, Україна,

² Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу,
вул.Карпатська, 15, м.Івано-Франківськ, 76000, Україна,
bruvinsky@gmail.com

Теоретично розглянуто міжзонний механізм електронного поглинання гіперзвуку в прямолінійних смужках графену. Визначено коефіцієнти поглинання обмежених акустичних фононів гіперзвуку з урахуванням законів дисперсії діраківських електронних станів. Проведено порівняння з випадком внутрішньозонного електронного поглинання гіперзвуку в прямолінійних смужках графену.

Ключові слова: прямолінійний графеновий дріт, обмежені акустичні фонони, міжзонне електронне поглинання гіперзвуку.

Стаття поступила до редакції 08.06.2008; прийнята до друку 15.12.2008.

Вступ

Двовимірні кристали графену є представниками нових матеріалів, особливо важливих для розвитку мікро- і наноелектроніки у посткремнієву еру [1]. Достатньо згадати вже перші реалізовані прототипи майбутніх пристроїв на основі графену (польові транзистори з балістичним транспортом при кімнатній температурі, газові сенсори з екстремальною чутливістю, одноелектронний транзистор, рідкокристалічні дисплеї і сонячні батареї з графеном в якості прозорого провідного електроду, спіновий транзистор і багато інших). З точки зору теорії графен є об'єктом "релятивістської" фізики твердого тіла, оскільки носії заряду в ньому описуються релятивістським рівнянням Дірака [2], а не рівнянням Шредінгера. Крім величезної кількості робіт, присвячених унікальним електронним властивостям безмежного графену, актуальними стають також дослідження обмежених структур графену. В роботі [3] розглянуто різні моделі графенового дроту. В [4] розраховано дисперсійні криві обмежених акустичних фононів гібридних мод для різних ширин графенового квантового дроту (в моделі прямолінійної смужки).

У зв'язку з широким використанням акустичних методів у фізиці твердого тіла і зростанням ролі квантової акустики [5-7] мезоскопічних і наноструктурних матеріалів в [8] досліджено поглинання гіперзвуку при

внутрішньозонних електронних переходах в прямолінійних смужках графену. Метою даної роботи є визначення коефіцієнтів електронного поглинання найнижчої моди гіперзвуку при межзонних переходах в прямолінійному графеновому дроті.

I. Модель графенового дроту

Як і в роботах [3,4,8], використаємо модель плоского графенового дроту з необмеженою довжиною в напрямку осі x і шириною $2d$ в напрямку осі y ($-L/2 \leq x \leq L/2$, $-d \leq y \leq d$, $L \gg 2d$). Припускаємо існування для носіїв заряду в згаданій моделі одновимірної симетричної потенціальної ями: $w(y) = -w_0$ при $|y| \leq d$ і $w(y) = 0$ при $y < -d$, $y > d$ ($w_0 > d$). В околі точок зони Бріллюена \mathbf{K} і \mathbf{K}' для визначення поведінки носіїв заряду в графені маємо [2] релятивістське рівняння Дірака з нульовою ефективною масою. Розгляд цього рівняння при наявності одновимірної симетричної потенціальної ями $w(y)$ призводить [3] до появи зв'язаних електронних станів в напрямку осі y , а в напрямку осі x має місце трансляційний рух електрона з хвильовим вектором \mathbf{k} . Хвильова функція носіїв заряду з енергією $E_{\mathbf{k},S}$ біля \mathbf{K} -точки є двокомпонентним спінором:

$$\Psi_{K,S}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \begin{pmatrix} s\Psi_{1s}(y) \\ e^{i\theta_{ks}}\Psi_{2s}(y) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

де $s = +1$ відповідає зоні провідності, а $s = -1$ – валентній зоні; $\Psi_{1s}(y) = A_{1s}e^{\chi_s y}$ при $y < -d$, $\Psi_{1s}(y) = A_{3s}e^{-\chi_s y}$ при $y > d$, $\Psi_{1s}^{(y)} = X_{1s}(y)$ при $|y| \leq d$, $\chi_s = \sqrt{k^2 - (E_{K,S}/\hbar u)^2}$,

$$\Psi_{2s}(y) = \frac{\hbar u}{E_{K,S} + w_0} \left(\frac{\partial \Psi_{1s}}{\partial y} + k\Psi_{1s} \right), \quad (2)$$

$$X_{1s}(y) = B_{1s} \sin(q_s y) + B_{2s} \cos(q_s y), \quad (3)$$

$$q_s = \sqrt{[(E_{K,S} + w_0)/\hbar u]^2 - k^2}, \quad (4)$$

$u = v_F \approx 10^8 \text{ м/с}$ – характерна для графену фермієвська швидкість.

При визначенні ролі міжзонних електронних

переходів найбільш важливим виявляється граничний вираз [3], отриманий аналітично для закону дисперсії носіїв заряду в моделі прямолінійної смужки графену. Цей випадок відповідає лінійному закону дисперсії

$$E_{k,s} = s\hbar|\mathbf{k}|\tilde{v}_F \quad (5)$$

при $|\mathbf{k}| \ll q_0$, де $\tilde{v}_F = u|\cos(2q_0 d)|$, $\cos(2q_0 d) \neq 0$, $q_0 = w_0/\hbar u$.

В роботах [4,8] визначені для моделі прямолінійного графенового дроту найнижчі моди обмежених акустичних фононів з частотою $\omega_\gamma = c_\gamma \gamma$ і хвильовим вектором γ в напрямку осі x дроту. Гамільтоніан взаємодії електрона з найнижчою модою гіперзвуку, відмінний від нуля при $|y| \leq d$, має вигляд [8]:

$$\hat{H} = E_a \text{div } \hat{\mathbf{u}}(x,y,t) = E_a A_\gamma \frac{\omega_\gamma^2}{c_d^2 k_1} \cos(k_1 y) \left[\hat{b}_\gamma e^{i\gamma(x-c_\gamma t)} + \text{h.c.} \right], \quad (6)$$

де E_a – константа деформаційного потенціалу, $\hat{\mathbf{u}}$ – квантовий вектор зміщень [4], \hat{b}_γ і \hat{b}_γ^\dagger – оператори знищення і народження фононів; $k_1 = \gamma \sqrt{(c_\gamma/c_d)^2 - 1}$, A_γ – амплітуда відповідної моди, що визначається формулою (12) в [4], c_d – швидкість поздовжнього звуку в необмеженому графені. Екранування електрон-фононної взаємодії вільними носіями заряду враховано в [8].

II. Поглинання гіперзвуку електронами при міжзонних переходах в прямолінійних смужках графену

При $\gamma \ell \gg 1$, де ℓ – середня довжина вільного пробігу електрона в напрямку осі дроту, коефіцієнт поглинання гіперзвуку визначається загальним виразом:

$$\alpha = \frac{2\pi}{\hbar c_\gamma} g_s g_v \sum_{k,s,k',s'} \left| \langle k',s' | \hat{H} | k,s \rangle \right|^2 (f_{k,s} - f_{k',s'}) \cdot \delta(E_{k',s'} - E_{k,s} - \hbar\omega_\gamma), \quad (7)$$

$$|k,s\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \begin{pmatrix} X_{1s}(y) \\ e^{i\theta_{k,s}} X_{2s}(y) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$X_{2s}(y) = \frac{\hbar u}{E_{k,s} + w_0} \left(\frac{\partial X_{1s}}{\partial y} + kX_{1s} \right), \quad (9)$$

g_s і g_v – спінове і долинне виродження ($g_s = g_v = 2$), $f_{k,s}$ – функція розподілу Фермі-Дірака для носіїв заряду зони s . Нижче ми наводимо остаточні результати для коефіцієнта α електронного поглинання гіперзвуку в

прямолінійній смужці графену при міжзонному переході $s = -1 \rightarrow s' = 1$ для лінійного (5) закону дисперсії носіїв заряду.

Тоді при

$$E_{k,1}(k) = \hbar|\mathbf{k}|\tilde{v}_F, \quad |\mathbf{k}| \ll q_0, \quad \cos(2q_0 d) \neq 0, \quad c_\gamma > \tilde{v}_F = u|\cos(2q_0 d)|, \quad \gamma d \ll 1 \quad (10)$$

отримаємо:

$$\alpha = \frac{E_a^2 G_{\gamma 1}(\xi) (\gamma d)^2 \omega_\gamma^3}{2 \hbar c_\gamma \rho a d B_\gamma (c_d^2 k_1)^2} \left(\frac{c_\gamma^2}{\tilde{v}_F} - 1 \right) F_1(\xi) [f(-\hbar \tilde{v}_F \gamma^{(-)}) - f(\hbar \tilde{v}_F \gamma^{(+)})] \cdot 8.686 \text{ dB/cm}, \quad (11)$$

$$\gamma^{(-)} = \frac{\gamma}{2} \left(\frac{c_\gamma}{\tilde{v}_F} - 1 \right), \quad \gamma^{(+)} = \frac{\gamma}{2} \left(\frac{c_\gamma}{\tilde{v}_F} + 1 \right), \quad \xi = q_0 d, \quad (12)$$

$$F_1(\xi) = \frac{(\sin^4 2\xi)(1 - \varphi_1^{(+)} \varphi_1^{(-)})^2}{\xi^2 |\cos(2\xi)| (\sin^2 \xi + \varphi^{(+2)}) (\sin^2 \xi + \varphi^{(-2)})}, \quad (13)$$

$$\varphi_1^{(\pm)} = \frac{|\cos(2\xi)| \cos \xi \pm (|\sin(2\xi)| \pm 1) \sin \xi}{|\cos(2\xi)| \sin \xi \mp (|\sin(2\xi)| \pm 1) \sin \xi}, \quad (14)$$

$$f(E) = \left[\exp\left(\frac{E - \mu}{\theta}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad \theta = k_B T, \quad G_{\gamma 1}(\xi) = \left(\frac{\gamma}{\gamma + \tilde{K}_{\gamma 1}} \right)^2, \quad (15)$$

вираз B_γ в (11) визначається формулами (П1)-(П3) роботи [7], а $\tilde{K}_{\gamma 1}$ – формулами (18) і (16) в [8]; ρ – об'ємна густина маси графену, a – товщина моноатомного шару, k_B – стала Больцмана, T – абсолютна температура. Хімічний потенціал електронного газу графену з лінійним законом дисперсії $E_{k,1}$ при достатньо низьких температурах [8] $\mu_0 = \pi \hbar \tilde{v}_F n_s d$, де n_s – поверхнева концентрація електронів графену. Як і в [8], при $\gamma \sim (10^5 - 10^6) \text{ cі}^{-1}$ екрануванням електрон-фононної взаємодії можна нехтувати для випадку лінійного закону дисперсії носіїв заряду.

Зауважимо, що міжзонний механізм поглинання гіперзвуку внаслідок законів

збереження енергії та імпульсу має місце лише при $c_\gamma > \tilde{v}_F$, в той час як внутрішньозонний механізм [8] – при $c_\gamma < \tilde{v}_F$. Оскільки завжди $(c_\gamma / u) \ll 1$, то для прояву міжзонного механізму при лінійному законі дисперсії (5) електронів повинна виконуватись умова

$$0 < |\cos(2q_0 d)| < (c_\gamma / u). \quad (16)$$

При малих глибинах ями w_0 і ширинах $2d$ смужки графену, коли $\xi = q_0 d \rightarrow 0$, міжзонне поглинання гіперзвуку взагалі є неможливим, на відміну від внутрішньозонного механізму [8].

В іншому граничному випадку [3] при $|\mathbf{k}| \ll q_0$, $\gamma d \ll 1$ і точному виконанню рівності

$$\cos(2q_0 d) = 0, \quad (17)$$

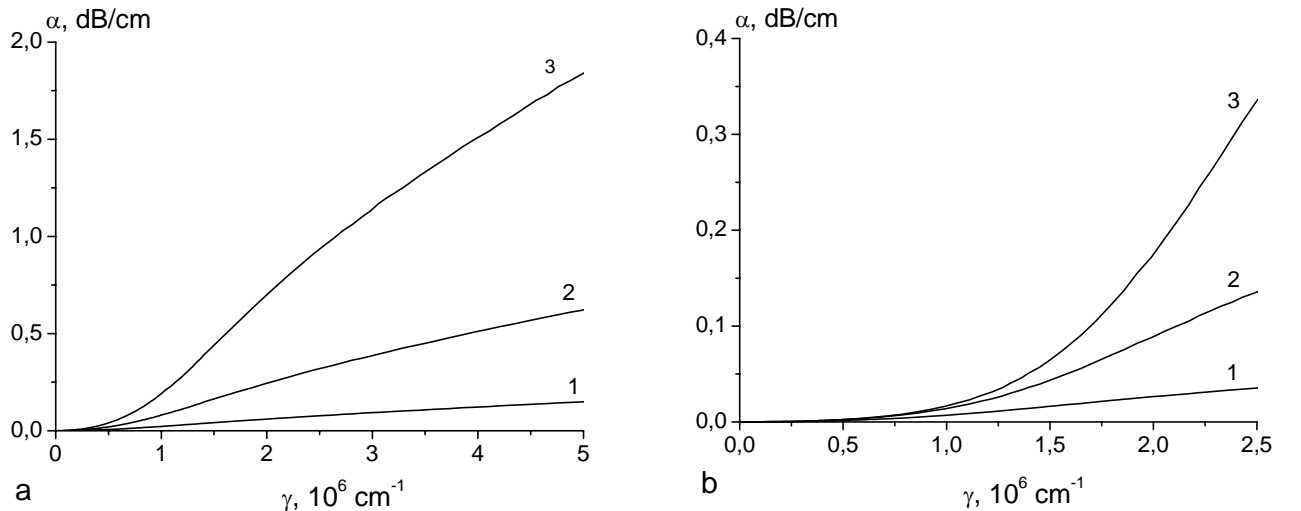


Рис. 1. Коефіцієнт міжзонного поглинання гіперзвуку найнижчої моди в графеновому дроті $\alpha(\gamma)$ при значеннях $\cos(2\xi)$: 1 – 0.002, 2 – 0.003, 3 – 0.004 і напівширинах дроту: а – 10Å, б – 20Å ($n_s = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, $T = 4.2 \text{ K}$).

коли має місце квадратичний закон дисперсії електронів (з енергетичною щільною w_0)

$$E_{k,1} = \frac{\hbar^2 k^2 u^2}{w_0}, \quad E_{k,-1} = -w_0 - \frac{\hbar^2 k^2 u^2}{w_0}, \quad (18)$$

у прийнятому наближенні міжзонним поглинанням можна нехтувати, оскільки результат врахування законів збереження при абсорбції акустичного фонона суперечить умові (17), в той час як внутрішньозонне поглинання для даного випадку є істотним [8].

На рис. 1 показано спектральну залежність коефіцієнта міжзонного поглинання $\alpha(\gamma)$, згідно (10)-(15) з урахуванням (16), для смужки графену при $d = 10\text{\AA}, 20\text{\AA}, E_a = 5\text{ eV}, n_s = 10^{13}\text{ нн}^{-2}, T = 4.2\text{K}, \rho = 2.16\text{ а/нн}^3, a = 3.34\text{ \AA}$ і різних значеннях $\xi = q_0 d$ при умові (16). При розглянутих актуальних значеннях γ коефіцієнт міжзонного

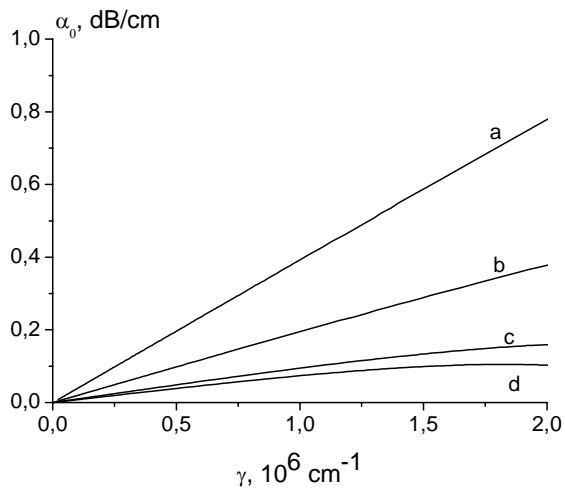


Рис. 2. Коефіцієнт міжзонного поглинання гіперзвуку найнижчої моди в графеновому дроті $\alpha_0(\gamma)$ при значенні $\cos(2\xi) = 0.004$ і напівширинах дроту: a – 10\AA , b – 20\AA , c – 40\AA , d – 50\AA ($n_s=0, \mu=0, T=0$).

поглинання гіперзвуку монотонно зростає з γ . При екстраполяції формули (11) на область $\gamma d \geq 1$ $\alpha(\gamma)$ досягає максимуму, а потім зменшується. Слід відзначити також зменшення міжзонного поглинання з ростом d при фіксованих однакових значеннях $\cos 2\xi = \cos 2q_0 d$, коли зменшується $q_0 = w_0 / \hbar u$, тобто глибина потенціальної ями w_0 графенового дроту. Для сталої ширини дроту $2d$ міжзонне поглинання зменшується при збільшенні глибини потенціальної ями (рис. 1). На рис. 2 показано залежність $\alpha_0(\gamma)$ при $T=0$ і $\mu=0$, коли рівень Фермі знаходиться в діраківській точці [1,2]. В цьому випадку міжзонне поглинання гіперзвуку переважає внутрішньозонне поглинання.

Висновки

В моделі прямолінійної смужки графену розглянуто міжзонне поглинання гіперзвуку для випадку граничних законів дисперсії діраківських електронних станів. Показано, що прояв міжзонного механізму є істотним для певного граничного випадку лінійного закону дисперсії при достатньо жорстких умовах, пов'язаних з глибиною потенціальної ями і шириною графенового дроту. Отримані спектральні залежності міжзонного поглинання гіперзвуку свідчать про важливу роль квантово-розмірних обмежень для електронів і фононів дроту. При низьких температурах в моделі прямолінійної смужки графену, крім внутрішньозонного механізму поглинання гіперзвуку, слід враховувати також і міжзонний механізм, при експериментальному дослідженні якого виникає, зокрема, можливість визначення глибини потенціальної ями графенового дроту

Рувінський М.А. – д.ф.-м.н., професор кафедри фізики і хімії твердого тіла.

Рувінський Б.М. – к.ф.-м.н., доцент кафедри фізики новітніх технологій.

- [1] A.K.Geim and K.S.Novoselov. The rise of graphene // *Nature materials*, **6**, pp. 183-191 (2007).
- [2] K.S.Novoselov et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene // *Nature*, **438**, pp.197-200 (2005).
- [3] Т.Я.Тудоровский, А.В.Чаплик. Пространственно неоднородные состояния носителей заряда в графене // *Письма в ЖЭТФ*, **84** (11), сс. 735-739 (2006).
- [4] М.А.Рувінський, Б.М.Рувінський. Акустичні фонони у прямолінійних смужках графену // *Фізика і хімія твердого тіла*, **9**(2), сс. 309-311 (2008).
- [5] В.Л.Гуревич. *Кинетика фононных систем*. Наука, М., 400с. (1980).
- [6] С.Г.Алексеев, Ю.В.Гуляев, И.М.Котелянский, Г.Д.Мансфельд. Некоторые тенденции развития акустоэлектроники сверхвысоких частот // *УФН*, **175**(8), сс. 895-900 (2005).
- [7] М.А.Рувинский, Б.М.Рувинский. Поглощение гиперзвука фононами в прямоугольной квантовой проволоке // *ФТТ*, **49**(11), сс.2076-2082 (2007).
- [8] М.А.Рувінський, Б.М.Рувінський. Електронний механізм поглинання гіперзвуку в прямолінійних смужках графену // *Фізика і хімія твердого тіла*, **9**(3), сс. 472-478 (2008).

М.А.Рувинський¹, В.М.Рувинський²

Interband Hypersonic Attenuation in Straight-Line Graphene Nanoribbons

¹ *Vasyl Stefanyk' Precarpathian National University,
57 Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine*

² *Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas,
15, Carpatska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine,
bruvinsky@gmail.com*

Interband electron mechanism of hypersonic attenuation in a straight-line graphene nanoribbons has been considered theoretically. The attenuation coefficients of confined acoustic phonons of hypersound with taking into account the dispersion laws of Dirac electron states have been determined. The comparison with the intraband electron mechanism of hypersonic attenuation in the straight-line graphene nanoribbons has been fulfilled.