ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 11, № 2 (2010) С. 288-291

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 11, № 2 (2010) P. 288-291

PACS numbers: 78.67.-n, 78.66.-w

ISSN 1729-4428

М.А.Рувінський[1], Б.М.Рувінський[2]

Міжзонна динамічна провідність прямолінійної смужки 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

Розв‘язано задачу про високочастотну міжзонну провідність плоского прямолінійного графенового дроту при врахуванні класичних розмірних ефектів відбивання носіїв заряду від бічних меж дроту. Розрахунки проведені при довільному співвідношенні між шириною дроту і довжиною вільного пробігу носіїв заряду (довжина дроту набагато більша за його ширину). При цьому індукований струм $I(t)=(G_0U_0+G_2U_0^3+...)e^{-i\omega t}$ з наступними непарними поправками за амплітудою U_0 напруги на кінцях дроту.

Ключові слова: прямолінійна смужка графену, високочастотна міжзонна провідність, дифузне і дзеркальне відбивання носіїв струму.

Стаття поступила до редакції 12.02.2010; прийнята до друку 15.03.2010.

Вступ

В роботах [1,2] було докладно розглянуто високочастотну внутрішньозонну провідність обмеженого графену в моделі плоскої прямолінійної смужки графену і враховано вплив класичних розмірних ефектів, пов‘язаних з механізмом дзеркально-дифузного відбивання носіїв заряду. Метою даної роботи є дослідження в межах цієї ж моделі міжзонної провідності, обумовленої переходами електронів з валентної зони в зону провідності та зворотними переходами. Міжзонна провідність у необмеженому графені [3] є домінуючою при більш високих частотах або низьких температурах, внаслідок відсутності енергетичної щілини між зонами графену. При частотах змінного електричного поля $\omega > k_BT/\hbar$, де k_B – стала Больцмана, T – абсолютна температура, $\hbar = h/2\pi$, h – стала Планка, міжзонна провідність має в граничному випадку універсальний характер, незалежний від параметрів електронного спектра. В даній роботі проведено дослідження впливу класичних розмірних ефектів на міжзонну інтегральну провідність плоского прямолінійного графенового дроту.

I. Рівняння для матриці гістини і міжзонні переходи в графеновому дроті

Розглянемо модель [1,2] плоского прямолінійного графенового дроту з великою довжиною L в напрямку осі x і шириною $2d$ в напрямку осі y ($L \gg 2d$, $-L/2 \le x \le L/2$, $-d \le y \le d$). Однорідне і змінне з частотою ω електричне поле

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t) \qquad (1)$$

напрямлено вздовж осі x дроту і викликає в ньому появу високочастотного струму густини $\vec{j}$. Гамільтоніан системи поблизу "діраківських" точок у псевдоспіновому просторі підграток має вигляд

$$\hat{H} = u\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{p}} + i\frac{eu}{\omega}\hat{\sigma}_x E_x , \qquad (2)$$

де $\hat{\vec{\sigma}}$ – матриці Паулі, $u \approx 10^6$ м/с – характерна для графену фермієвська швидкість, $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$, e – заряд електрона. Оператор густини струму

$$\hat{\vec{j}} = eu\hat{\vec{\sigma}} . \qquad (3)$$

Квантове рівняння руху для статистичного оператора $\hat{\rho}$ (матриці густини)

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}=\hat{H}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{H} \qquad (4)$$

запишемо для матричних елементів міжзонних переходів

$$i\hbar\frac{\partial\rho_{12}}{\partial t}=(H_{11}-H_{22})\rho_{12}+(\rho_{22}-\rho_{11})H_{12}, \qquad (5)$$

де "1" – індекс стану електрона в зоні провідності, а "2" – у валентній зоні. За базисну систему функцій обираємо власні функції оператора

$$\hat{H}_0=u\vec{\sigma}\vec{p} \qquad (6)$$

при відсутності зовнішнього електричного поля:

$$|\vec{p},s\rangle=\frac{1}{\sqrt{2dL}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}s\\ e^{i\varphi_p}\end{pmatrix}, \qquad (7)$$

$s=+1$ для стану 1 (електрона в зоні провідності) і $s=-1$ для стану 2 (електрона у валентній зоні), $p_x=p\cos\varphi_p$, $p_y=p\sin\varphi_p$. Оператор взаємодії з електричним полем

$$\hat{V}(t)=i\frac{eu}{\omega}\hat{\sigma}_x E_0\exp(-i\omega t) \qquad (8)$$

в (2) розглядаємо як мале збурення. При цьому

$$H_{\alpha\alpha}\approx(H_0)_{\alpha\alpha}=sup=s\varepsilon \quad (s=\pm1),$$

$$H_{11}-H_{22}\approx 2\varepsilon, \qquad (9)$$

$$H_{\alpha\beta}=V_{\alpha\beta}(t)=(-1)^{\alpha}\frac{eu}{\omega}\cdot\frac{p_y}{p}E_0e^{-i\omega t} \ (\alpha\neq\beta=1,2).$$

Матричні елементи ρ_{11} і ρ_{22} в (5) відповідають внутрішньозонним переходам. У наближенні врахування лінійного відгуку за часовим множником $e^{-i\omega t}$ вважаємо ρ_{11} і ρ_{22} незалежними від часу. Тоді з (5), (9) маємо

$$\rho_{\alpha\beta}(t)=\frac{(\rho_{\beta\beta}-\rho_{\alpha\alpha})}{[\hbar\omega+2\varepsilon(-1)^{\alpha}]}V_{\alpha\beta}(t) \quad (\alpha\neq\beta). \qquad (10)$$

Діагональні елементи матриці густини ρ_{11} і ρ_{22} мають зміст внутрішньозонних функцій розподілу стаціонарного нерівноважного стану. Враховуючи класичні розмірні ефекти дзеркально-дифузного розсіяння [1,2], знайдемо нерівноважну функцію $\rho_{11}(\vec{r},\vec{p})$ електронів в зоні провідності у вигляді:

$$\rho_{11}(\vec{r},\vec{p})=f_0(\varepsilon)+f_1(\vec{r},\vec{p})+f_2(\vec{r},\vec{p}), \qquad (11)$$

де $f_{1,2}(\vec{r},\vec{p})$ – нерівноважні відхилення ρ_{11} від рівноважної фермієвської функції розподілу $f_0(\varepsilon)=(\exp[(\varepsilon-\mu)/k_BT]+1)^{-1}$,

причому $f_1\propto E_0$, а $f_2\propto E_0^2$. Функція f_1 отримана в [1,2] з квазікласичного кінетичного рівняння Больцмана [4] методом характеристик [5]:

$$f_{1k}=-\frac{eup_x}{\nu p}E_0\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\left[1-\frac{(1-\alpha)e^{-\nu t_k}}{1-\alpha e^{-\nu t_0}}\right],\ k=1,2, \qquad (12)$$

де α – коефіцієнт дзеркальності (ймовірність дзеркального відбивання), $0\le\alpha\le1$,

$$\nu=\frac{1}{\tau}-i\omega;\ t_k\ge0,\ t_0>0;$$

$$t_1=\frac{y-d}{v_y} \ \text{ при } \ 0\le y\le d,\ \ p_y<0; \qquad (13)$$

$$t_2=\frac{y+d}{v_y} \text{ при } -d\le y\le0,\ p_y>0;\ t_0=2d/|v_y|,$$

τ – час релаксації електронів. Для випадку електронів у валентній зоні при визначенні $\rho_{22}(\vec{r},\vec{p})$ в (11)-(13) слід провести заміну: $\varepsilon\to-\varepsilon$, $\mu\to-\mu$, $\vec{p}\to-\vec{p}$ (при умові, що час релаксації і коефіцієнт дзеркальності вважати однаковими в обох зонах). Нерівноважну добавку f_2 можна знайти з кінетичного рівняння, враховуючи отриманий вираз для f_1:

$$-i\omega f_2+\vec{v}\frac{\partial f_2}{\partial\vec{r}}+eE_0\frac{\partial f_1}{\partial p_x}=-\frac{f_2}{\tau}, \qquad (14)$$

$$f_{2k}=-\frac{eE_0}{\nu}\frac{\partial f_{1k}}{\partial p_x}\left[1-\frac{(1-\alpha)e^{-\nu t_k}}{1-\alpha e^{-\nu t_0}}\right],\ k=1,2. \qquad (15)$$

II. Міжзонна густина струму та інтегральна провідність графенового дроту

Матричні елементи оператора міжзонної густини струму (3) за власними функціями (7)

$$(j_x)_{\alpha\beta}=(-1)^{\beta}\frac{ieup_y}{p}\frac{1}{2dL} \quad (\alpha\neq\beta=1,2). \qquad (16)$$

Зауважимо, що матриці (9)-(12), (15), (16) є діагональними в імпульсному представленні для електронів обох зон. Тому визначення статистичного середнього від міжзонної густини струму відбувається за формулою:

$$\langle j_x\rangle=Sp\hat{\rho}\hat{j}_x=\sum_{\vec{p}}\sum_{\alpha,\beta;\alpha\neq\beta}\rho_{\alpha\beta}(j_x)_{\beta\alpha}. \qquad (17)$$

Використовуючи (9), (10), (16) і (17), отримаємо

$$\langle j_x\rangle=g_sg_v\sum_{\vec{p}}i\frac{2e^2u^2}{\omega dL}\left(\frac{p_y}{p}\right)^2\frac{\varepsilon(\rho_{22}-\rho_{11})}{[(\hbar\omega)^2-4\varepsilon^2]}E_0e^{-i\omega t}, \quad (18)$$

де враховано спінове і долинне виродження (g_s і g_v, $g_s=g_v=2$).

При підстановці в (18) рівноважної частини функцій розподілу

$$\rho_{22}^{(0)}-\rho_{11}^{(0)}=f_0(-\varepsilon)-f_0(\varepsilon) \qquad (19)$$

та інтегруванні по куту двовимірного вектора $\vec{p}$ і переходу до змінної $\varepsilon=up$ з обходом полюса в (18) $[(\hbar\omega)^2-4\varepsilon^2]^{-1}$ при $\omega\to\omega+i\delta$ $(\delta\to+0)$ отримаємо відомий результат [3] для міжзонної диференціальної провідності $\sigma(\omega)$ необмеженого графену, знайдений методом температурних функцій Гріна. Отже, в цьому наближенні (19) класичні розмірні ефекти графенового дроту в межах розглянутої моделі не виявляються.

Нерівноважні добавки f_1 і f_2 згідно (11)-(13), (15) до фермієвських функцій $f_0(-\varepsilon)$ і $f_0(\varepsilon)$ є неоднорідними вздовж ширини дроту. При визначенні їх впливу проінтегруємо в (18) по ширині дроту і знайдемо інтегральну міжзонну провідність.

При

$$\rho_{22}^{(1)}-\rho_{11}^{(1)}=f_{1k}(y,-\mathbf{p},-\varepsilon)-f_{1k}(y,\mathbf{p},\varepsilon) \qquad (20)$$

і врахуванні (12), (13) і (18) перша нерівноважна добавка до повного струму

$$\Delta I_1 = G_1 U_0 e^{-i\omega t}, , \qquad (21)$$

де $U_0 = E_0 L$ – амплітуда напруги на кінцях дроту. Відповідна міжзонна інтегральна провідність

$$G_1=\frac{4i(eu)^3}{(\pi\mathbf{h})^2\nu\omega L^2}U_0\sum_{k=1}^{2}\int_{-d}^{d}dy\int\frac{p_x}{p}\left(\frac{p_y}{p}\right)^2\frac{\varepsilon f_0^{/}(\varepsilon)}{[\mathbf{h}^2(\omega+i\delta)^2-4\varepsilon^2]}\left[1-\frac{(1-\alpha)e^{-\nu t_k}}{1-\alpha e^{-\nu t_0}}\right]\gamma(t_k)d^2\mathbf{p}, \qquad (22)$$

$$\gamma(t_k)=\begin{cases}1 \text{ при } t_k\geq 0,\\ 0 \text{ при } t_k<0.\end{cases} \qquad (23)$$

Внаслідок інтегрування в (22) непарної функції p_x в симетричних межах маємо, що $G_1 = 0$, тобто лінійна за напругою U_0 нерівноважна функція розподілу (20) не впливає на повний міжзонний струм в графеновому дроті $(\Delta I_1 = 0)$.

Покладаючи в (18) другу нерівноважну добавку

$$\rho_{22}^{(2)}-\rho_{11}^{(2)}=f_{2k}(y,-\mathbf{p},-\varepsilon)-f_{2k}(y,\mathbf{p},\varepsilon) \qquad (24)$$

і враховуючи (15), (12), (13), знайдемо наступну поправку у міжзонний струм графенового дроту

$$\Delta I_2 = G_2 U_0 e^{-i\omega t}, \qquad (25)$$

де

$$G_2=\frac{4i(eu)^4}{(\pi\mathbf{h})^2\nu^2\omega L^3}U_0^2\sum_{k=1}^{2}\int_{-d}^{d}dy\int\left(\frac{p_x}{p}\right)^2\left(\frac{p_y}{p}\right)^2\frac{\varepsilon f_0^{//}(\varepsilon)}{[\mathbf{h}^2(\omega+i\delta)^2-4\varepsilon^2]}\left[1-\frac{(1-\alpha)e^{-\nu t_k}}{1-\alpha e^{-\nu t_0}}\right]^2\gamma(t_k)d^2\mathbf{p}. \qquad (26)$$

З (26) випливає, що $G_2 \neq 0$ і $G_2 \propto U_0^2$.

Висновки

Вплив класичних розмірних ефектів, обумовлених змішаним дзеркально-дифузним механізмом розсіяння носіїв заряду від бічних меж прямолінійної смужки графену (коли довжина її набагато більша за ширину), на міжзонну динамічну провідність виявляється через нерівноважні функції розподілу другого порядку, пропорційні квадрату амплітуди напруги U_0 на кінцях смужки. Індукований міжзонний струм $I(t) = I_0(U_0)e^{-i\omega t}$, , де $I_0(U_0) = G_0U_0 + G_2U_0^3 + ...$ з наступними вищими членами розкладу за непарними степенями амплітуди змінної напруги.

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] М.А. Рувінський, Б.М. Рувінський. Високочастотна внутрішньозонна провідність прямолінійної смужки графену // *Фізика і хімія твердого тіла*, **10**(3), сс.529-537 (2009).

[2] М.А. Рувінський, Б.М.Рувінський. Вплив дзеркально-дифузного механізму відбивання носіїв заряду на високочастотну внутрішньозонну провідність прямолінійної смужки графену // *Фізика і хімія твердого тіла*, **10**(4), сс.757-762 (2009).

[3] Л.А. Фальковский. Оптические свойства допированных графеновых слоев // *ЖЭТФ*, **133**(3), сс.663-669 (2008).

[4] А.А. Абрикосов. *Осовы теории металлов*. Наука, М., 520с. (1987).

[5] В.И. Смирнов. *Курс высшей математики*. Т.4. ГИТТЛ, М., 812с. (1957).

M.A.Ruvinskii[1], B.M.Ruvinskii[2]

Interband Dynamic Conductivity of Straight-Line Graphene Ribbon

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

The problem of high-frequency interband conductivity of plane straight-line graphene wire has been solved with taking into account the classical dimensional effects of charge carriers from the lateral wire borders. The calculations have been fulfilled at arbitrary relations between the wire width and free path length of charge carriers (the wire length is much greater than its width). At this the induced current $I(t) = (G_0U_0 + G_2U_0^3 + ...)e^{-i\omega t}$ with the following odd corrections in point of voltage amplitude U_0 on the wire ends.