

М.А.Рувінський¹, Б.М.Рувінський²

Акустичні фонони у 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

Розглянуто акустичні коливання в моделі двовимірної прямолінійної смужки графену. Розраховано дисперсійні криві обмежених акустичних фононів гібридних мод для різних ширин графенового квантового дроту.

Ключові слова: прямолінійний графеновий дріт, обмежені акустичні фонони.

Стаття постуила до редакції 10.12.2007; прийнята до друку 15.02.2008.

Вступ

Моноатомний шар вуглецевих атомів, що утворюють гексагональну двовимірну кристалічну ґратку (графен), у даний час є предметом інтенсивних досліджень [1-3]. Графен має велику механічну жорсткість, добру теплопровідність та електропровідність, що роблять його перспективним матеріалом для використання в різних приладових пристроях. Зокрема, його розглядають, як майбутню основу наноелектроніки і можливу заміну кремнію в інтегральних мікросхемах. Більшість робіт присвячено цікавим електронним властивостям безмежного графену як двовимірного газу безмасових діраківських ферміонів [2]. В [3] проведено порівняльне дослідження дисперсії фононів графіту і графену. Останній можна уявляти як одну площину графіту, відокремлену від об'ємного кристала.

В роботах [4-6] досліджені електронні стани в обмежених смужках графену. В [6] розглянуто різні моделі графенового дроту. На даний час немає детальних досліджень спектра акустичних фононів в моделі прямолінійного графенового дроту, який є необхідним для багатьох задач фізичної кінетики. В даній роботі згадана модель використовується для чисельного визначення законів дисперсії акустичних фононів при різних ширинах смужки графену.

1. Зміщення і напруження для акустичних коливань в моделі прямолінійної смужки графену

Розглянемо плоский графеновий дріт з необмеженою довжиною в напрямку осі x і шириною $2d$ в напрямку осі y ($-L/2 \leq x \leq L/2$, $-d \leq y \leq d$, $L \gg 2d$). Складові вектора зміщень u шукаємо у вигляді:

$$u_x = i \left(-\frac{\gamma}{k_1} A \cos(k_1 y) + \frac{1}{\gamma} k_2 B \cos(k_2 y) \right) e^{i\gamma(x-ct)}, \quad (1)$$

$$u_y = (A \sin(k_1 y) + B \sin(k_2 y)) e^{i\gamma(x-ct)}, \quad (2)$$

де $\gamma = 2\pi/\lambda$, λ – довжина хвилі, γ – складова хвильового вектора в напрямку осі x дроту, c – фазова швидкість звуку.

$$k_1^2 = \gamma^2 [(c/c_d)^2 - 1], \quad (3)$$

$$k_2^2 = \gamma^2 [(c/c_s)^2 - 1], \quad (4)$$

c_d і c_s – швидкості поздовжнього і поперечного звуку в необмеженому графені. Оскільки в нашій моделі ми вважаємо, що моношар графену жорстко пов'язаний з підкладкою в нормальному напрямку до площини графену, то складова зміщення $u_z=0$ [7]. Для ліній, які обмежують смужку в напрямку осі y , маємо «вільні» граничні умови, які вимагають нульових значень компонент тензора напружень

$$\sigma_{yy} = 0, \quad \sigma_{xy} = 0 \quad \text{при } y = \pm d. \quad (5)$$

Тензор напружень σ_{ik} визначається через тензор деформації $u_{,ik}$ згідно [8]

$$\sigma_{ik} = \frac{E}{1+\sigma} \left(u_{ik} + \frac{\sigma}{1-2\sigma} u_{||} u_{ik} \right), \quad (6)$$

де E – модуль Юнга, σ – коефіцієнт Пуассона; в (6) підсумовування відбувається за «німим» декартовим індексом l . Для випадку малих деформацій тензор деформації

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right). \quad (7)$$

З граничних умов (5) з урахуванням (6), (7) впливає лінійна система однорідних рівнянь для амплітуд A і B розглянутих мод акустичних коливань:

$$-A(\gamma^2 - k_2^2) \cos(k_1 d) + 2Bk_1 k_2 \cos(k_2 d) = 0, \quad (8)$$

$$2\gamma^2 A \sin(k_1 d) + B(\gamma^2 - k_2^2) \sin(k_2 d) = 0, \quad (9)$$

звідки маємо, що

$$B = -\frac{\sin(k_1 d)}{\sin(k_2 d)} \cdot \frac{2\gamma^2}{\gamma^2 - k_2^2} A. \quad (10)$$

II. Рівняння для законів дисперсії обмежених акустичних фоновів прямолінійної смужки графену

З умови квантування акустичних фоновних мод з вектором зміщення \mathbf{u}

$$\frac{1}{2Ld} \int_{-L/2-d}^{L/2} \int_{-d}^d dx dy (u_x^* u_x + u_y^* u_y) = \frac{\hbar}{2M\omega_\gamma} \quad (11)$$

знайдемо для амплітуди A_γ :

$$A_\gamma^2 = \frac{2\hbar}{M\omega_\gamma B_\gamma}, \quad (12)$$

де $\omega_\gamma = c\gamma$ – частота моди з хвильовим вектором γ , M – маса дроту. Вираз B_γ в (12) визначається формулами (П1)-(П3) роботи [9], де він відповідає у тривимірному випадку наближенню ширинних мод [10] прямокутного дроту.

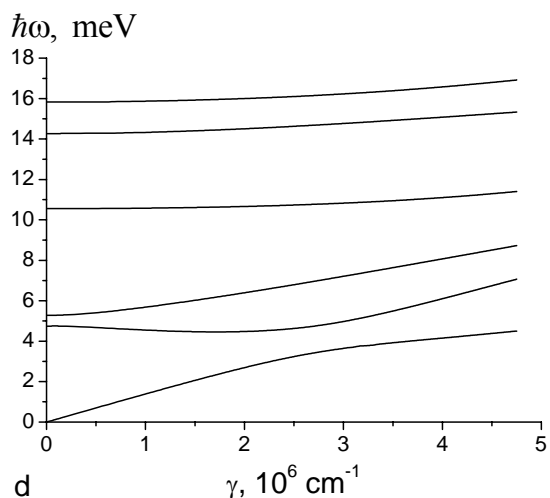
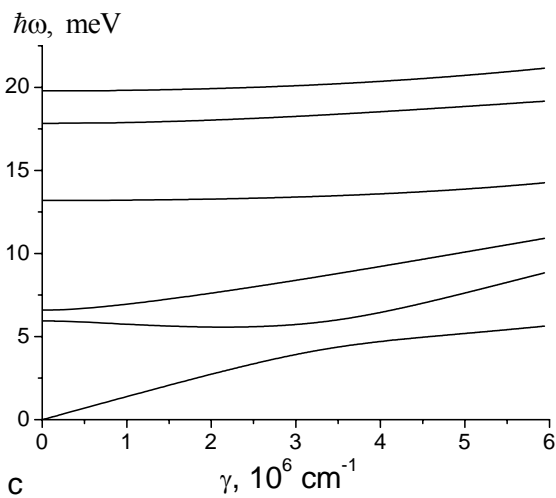
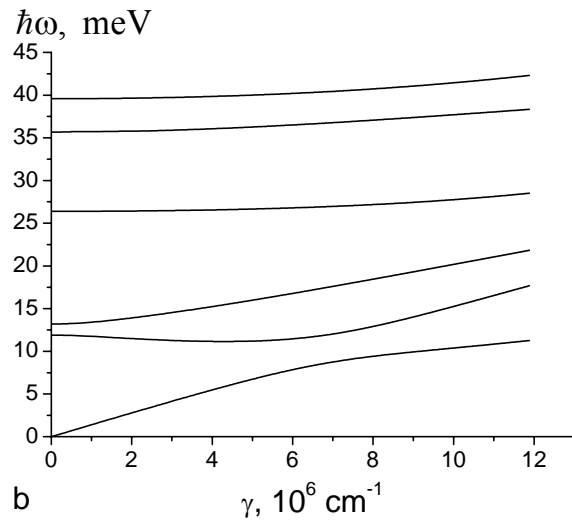
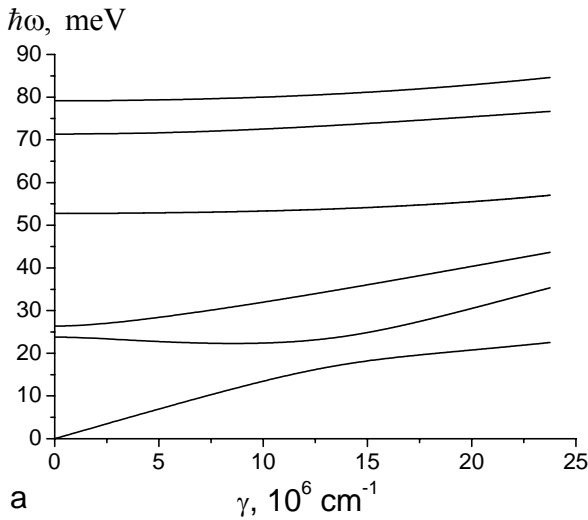


Рис. 1. Дисперсійні криві для найнижчих мод акустичних фоновів ($m = 1, 2, \dots, 6$) прямолінійної смужки графену при ширинах $2d$, рівних: а) 20Å , б) 40Å , в) 80Å , д) 100Å .

Закони дисперсії ω_γ визначимо з умови існування нетривіального розв'язку системи рівнянь (8), (9) для амплітуд A і B (при $k_2 \neq 0$). Дисперсійне рівняння має вигляд

$$\frac{\operatorname{tg}(\pi\sqrt{X-\Psi})}{\operatorname{tg}(\pi\sqrt{\delta X-\Psi})} = -\frac{\Psi\sqrt{X-\Psi}\sqrt{\delta X-\Psi}}{(0.5X-\Psi)^2}, \quad (13)$$

де

$$\omega_\gamma = \frac{\pi c_s}{d} \sqrt{X}, \quad \gamma = \frac{\pi}{d} \sqrt{\Psi}, \quad (14)$$

$$\delta = (c_s / c_d)^2 = (1 - 2\sigma) / 2(1 - \sigma). \quad (15)$$

Існують кратні розв'язки рівняння (13) для частоти обмежених фононів $\omega_{\gamma m} = c_m \gamma$ ($m = 1, 2, \dots$) при фіксованому γ з можливою дисперсією фазової швидкості $c_m(\gamma)$, характерною для гібридних мод, що поєднують одночасно поздовжні і поперечні складові вектора зміщень \mathbf{u} . На рис. 1 а, б, в, г наведено розраховані з (13)-(15) дисперсійні криві найнижчих мод ($m = 1, 2, \dots, 6$) гібридних акустичних фононів прямолінійної смужки графену з різними ширинами $2d = 20\text{\AA}, 40\text{\AA}, 80\text{\AA}, 100\text{\AA}$.

Чисельні значення швидкостей звуку для безмежного графену отримано нами з даних роботи [3]: $c_s = 1.28 \cdot 10^6$ см/с, $c_d = 2.12 \cdot 10^6$ см/с, $\delta = 0.36$, $\sigma \approx 0.22$.

Висновки

Визначені квантово-розмірні обмеження для акустичних фононів у прямолінійній смужці графену пов'язані з одночасним врахуванням поздовжніх і поперечних зміщень, з можливою дисперсією фазової швидкості при достатньо великих хвильових векторах і з істотною залежністю спектра фононів від ширини смужки.

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] K.S.Novoselov et al. Two-dimensional atomic crystals // *Pros.Natl.Acad.Sci.USA*. **102**, pp.10451-10453 (2005).
- [2] K.S.Novoselov et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene // *Nature*, **438**, pp.197-200 (2005).
- [3] L.Wirtz and A.Rubio. The phonon dispersion of graphite revisited // *arXiv: cond-mat/0404637v1*, pp. 1-26 (2004).
- [4] L.Brey and H.A.Fertig. Electronic States of Graphene Nanoribbons // *arXiv: cond-mat/0603107v1*, pp. 1-5 (2006).
- [5] F.Sols, F.Guinea and A.H.Castro Neto. Coulomb Blockade in Graphen Nanoribbons // *Phys.Rev.Lett.* **99**, pp.166803-1 – 166803-4 (2007).
- [6] A.V.Chaplik, T.Ya.Tudorovskiy. Spatially inhomogeneous states of charge carriers in graphene // *arXiv: cond-mat/0610705v4*, pp. 1-10 (2006).
- [7] М.А.Исакович. *Общая акустика*. Наука, М., 496с. (1973).
- [8] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. *Теория упругости*. Наука, М., 248с. (1987).
- [9] М.А.Рувинский, Б.М.Рувинский. Поглощение гиперзвука фононами в прямоугольной квантовой проволоке // *ФТТ*, **49**(11), сс.2076-2082 (2007).
- [10] R.W.Morse. The Velocity of Compressional Waves in Rods of Rectangular Cross Section // *J.Acoust.Am.*, **22**(2), pp. 219-223 (1950).

М.А.Рувинский¹, В.М.Рувинский²

Acoustic Phonons 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*

The acoustic vibrations into the model of two-dimensional straight-line graphene nanoribbon have been considered. The dispersion curves for the confined acoustic phonons of the hybrid modes for the different widths of graphene quantum wire have been calculated.