

О дисперсионной зависимости плазмонов в сверхрешетке на основе бесщелевого графена с чередующейся скоростью Ферми

П. В. Ратников¹⁾

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 октября 2017 г.

После переработки 15 ноября 2017 г.

Рассматривается сверхрешетка на основе графена, образующаяся за счет периодической модуляции скорости Ферми. Такая модуляция возможна в графене, осажденном на полосчатую подложку из материалов с существенно отличающимися значениями статической диэлектрической проницаемости. Находится закон дисперсии плазмонов в такой системе в случае, когда уровень Ферми лежит в нижней минизоне. Также обсуждается вопрос о поглощении внешнего модулированного электромагнитного излучения за счет возбуждения плазмонов.

DOI: 10.7868/S0370274X17240109

1. Введение. В последние десять лет были получены многочисленные теоретические и экспериментальные результаты по электронным свойствам полосок графена шириной в несколько нанометров (нанополосок). Среди первых были работы по графеновым нанополоскам с использованием уравнения Дирака с соответствующими граничными условиями. Электронные свойства графеновых нанополосок сильно зависят от их размеров и геометрии краев. По своим транспортным свойствам графеновые нанополоски во многом схожи с углеродными нанотрубками, поскольку свободное движение носителей заряда в них также одномерно [1].

В предыдущей нашей работе [2] исследовался эффект размерного квантования в планарной квантовой яме, сделанной из нанополоски бесщелевого графена, окруженной по краям щелевыми модификациями графена. Открытие энергетической щели в спектре носителей заряда в графене возможно несколькими способами. Например, в гидрогенизированном графене (графане) она равна 5.4 эВ [3]. Использование щелевой модификации графена в качестве потенциальных барьеров открывает дополнительные возможности для инженерии энергетической щели (bandgap engineering) в углеродных материалах.

Эффект размерного квантования в планарных графеновых гетероструктурах может быть получен и в случае, когда изменяется только скорость Ферми как в одиночной квантовой яме [4], так и в сверхрешетке (СР) [5]. Подобный результат был получен для квантовых ям узкощелевых полупроводников, когда

изменяется только кейновский матричный элемент (эффективная масса носителей заряда) [6].

В данной статье рассматривается СР на основе бесщелевого графена, полученная чередованием областей с различными значениями скорости Ферми. В нашем случае *инженерия скорости Ферми* (Fermi velocity engineering) обусловлена использованием веществ с различными диэлектрическими проницаемостями, окружающих графен [5].

Согласно как теоретическим [7–9], так и экспериментальным работам [10–16], скорость Ферми сильно перенормируется за счет кулоновского взаимодействия и перенормированная скорость Ферми равна

$$v_F = v_{F0} \left[1 + \frac{\alpha^*}{4} \ln \frac{k_c}{k_F} \right], \quad (1)$$

где v_{F0} – исходная (затравочная) скорость Ферми, $v_{F0} = 0.85 \cdot 10^8$ см/с [13, 14], $\alpha^* = \tilde{e}^2 / \hbar v_{F0}$ – аналог постоянной тонкой структуры, $\tilde{e}^2 = e^2 / \epsilon_{\text{eff}}$ и $\epsilon_{\text{eff}} = (\epsilon + \epsilon') / 2$ – эффективная статическая диэлектрическая проницаемость, зависящая от значений статической диэлектрической проницаемости ϵ и ϵ' сред, окружающих графен (например, диэлектрическая подложка и вакуум), $k_F = \sqrt{4\pi n_{2D} / g}$ – волновой вектор Ферми (n_{2D} – двумерная концентрация носителей заряда, $g = g_s g_v$ – кратность вырождения, $g_s = 2$ и $g_v = 2$ – кратности вырождения по спину и по долинам, соответственно), k_c – ультрафиолетовое обрезание по k и по последним экспериментальным данным $k_c \approx 1.75 \text{ \AA}^{-1}$ [16].

Вообще говоря, необходимо также учесть в перенормировке скорости Ферми эффекты самоэкранировки (self-screening effects). При нулевом допирова-

¹⁾e-mail: ratnikov@lpi.ru

нии эти эффекты могут быть учтены в выражении (1) посредством замены [17]:

$$\alpha^* \rightarrow \frac{\alpha^*}{1 + \frac{\pi}{2}\alpha^*}. \quad (2)$$

Этот вывод хорошо согласуется с экспериментальными данными [13] для концентраций носителей заряда $n_{2D} \lesssim 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Далее мы работаем с n_{2D} такого порядка величины. Таким образом мы учитываем эффекты самоэкранировки при малых, но конечных концентрациях носителей заряда, как это было сделано в работе [16].

Создавая подложку из материалов с существенно различными диэлектрическими проницаемостями, оказывается возможным изменять в пространстве скорость Ферми в графене. В областях графена над материалом с меньшей ϵ перенормированная скорость Ферми будет больше, а в областях графена над материалом с большей ϵ она будет меньше. При периодическом чередовании таких областей возникает СР из бесщелевого графена с чередованием областей в нем с большей и меньшей скоростью Ферми. Один из возможных вариантов системы представлен на рис. 1.

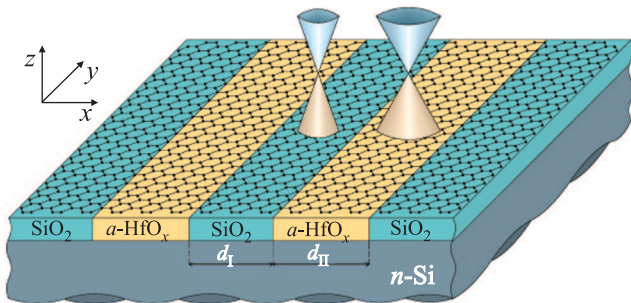


Рис. 1. (Цветной онлайн) Рассматриваемая система и локальное изменение дираковских конусов в графене. Аморфный оксид гафния ($a\text{-HfO}_x$) был выбран в качестве материала с большой статической диэлектрической проницаемостью. Пластика сильно допированного кремния n -типа ($n\text{-Si}$) используется как затвор

Отметим, что впервые идея управления скорости Ферми путем применения материалов подложки с различными ϵ была высказана в работе [18].

2. Эффективное описание носителей заряда. Для описания одноэлектронных свойств рассматриваемой СР ранее нами была применена модель с использованием уравнения Дирака с кусочно-постоянной скоростью Ферми [5]. Профиль скорости Ферми считался резким (рис. 2). Было выведено дис-

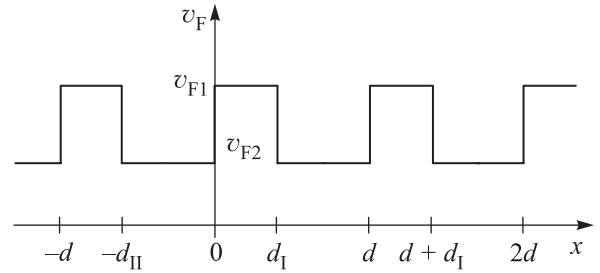


Рис. 2. Профиль скорости Ферми в рассматриваемой сверхрешетке: d_I – ширина полоски графена со скоростью Ферми v_{F1} и d_{II} – ширина полоски графена со скоростью Ферми v_{F2} , период сверхрешетки $d = d_I + d_{II}$

персионное соотношение методом матрицы переноса [19, 20] с использованием граничных условий [21]:

$$\sqrt{v_{F1}}\psi_n^{(1)} = \sqrt{v_{F2}}\psi_n^{(2)}$$

и условий Блоха [5]:

$$\psi_n^{(1)}(x+d) = \psi_n^{(1)}(x)e^{ik_x d} \text{ и } \psi_n^{(2)}(x+d) = \psi_n^{(2)}(x)e^{ik_x d},$$

где $\psi_n^{(1)}$ и $\psi_n^{(2)}$ – волновые функции носителей заряда в n -й сверхъячейке в областях со скоростью Ферми v_{F1} и v_{F2} , соответственно.

Нижняя электронная и верхняя дырочная мини-зоны касаются друг друга в дираковских точках – графен остается бесщелевым. Энергетическая поверхность имеет коническую форму вблизи дираковской точки (плюс для электронов, минус для дырок)

$$E(\mathbf{k}) \approx \pm \hbar v_F^* |\mathbf{k}| \quad (3)$$

с эффективной скоростью Ферми

$$v_F^* = \frac{v_{F1} v_{F2} d}{v_{F1} d_{II} + v_{F2} d_I}. \quad (4)$$

Здесь мы работаем с малыми концентрациями носителей заряда n_{2D} для получения большого контраста в профиле скорости Ферми рассматриваемой СР (наибольшей разницы между v_{F1} и v_{F2}). Это соответствует малым значениям волнового вектора Ферми k_F (см. (1)). Более того, мы полагаем

$$k_F \ll \frac{\pi}{d}.$$

Уровень Ферми $E_F = \pm \hbar v_F^* k_F$ лежит вблизи дираковской точки (при минимуме нижней электронной минизоны или при максимуме верхней дырочной минизоны). Поскольку в дальнейшем мы интересуемся законом дисперсии плазмонов, длинноволновых коллективных возбуждений, в этом случае приближение (3) работает хорошо вплоть до волнового вектора Ферми.

Во избежанием теплового “замытия” минизоны мы также предполагаем температуру достаточно низкой:

$$k_B T \ll |E_F|,$$

где k_B – постоянная Больцмана.

Эффективный гамильтониан с собственными значениями (3)

$$\hat{H}_{\text{эфф}} = v_F^* \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}},$$

где $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ – матрицы Паули и $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ – оператор импульса.

В нулевом приближении по взаимодействию функция Грина запишется в виде обратного оператора [22]:

$$\hat{G}_0(\mathbf{k}, \omega) = (\hbar\omega + \mu - \hat{H}_{\text{эфф}})^{-1},$$

где μ – химический потенциал (совпадает с энергией Ферми E_F). Нетрудно получить ответ

$$\hat{G}_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} \sum_{s=\pm} s \frac{\hbar\omega + \mu + \hbar v_F^* \boldsymbol{\sigma} \mathbf{k}}{\hbar\omega + \mu - s\epsilon_{\mathbf{k}} - i\delta \text{sgn}(\mu - s\epsilon_{\mathbf{k}})}, \quad (5)$$

где $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar v_F^* |\mathbf{k}|$ и $\delta \rightarrow +0$.

3. Поляризационный оператор. Поляризационный оператор представляется петлевой диаграммой (рис. 3) и дается выражением [23]:

$$\Pi(\mathbf{k}, \omega) = -i\hbar g d \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \int \frac{d\Omega}{2\pi} \text{Tr} \left\{ \hat{G}_0(\mathbf{q}, \Omega) \hat{G}_0(\mathbf{q} + \mathbf{k}, \Omega + \omega) \right\}$$

с функциями Грина (5).

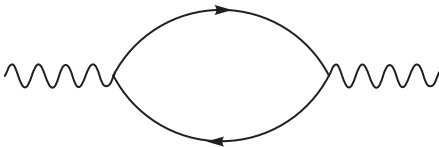


Рис. 3. Петлевая диаграмма

Мы интересуемся плазмонами, длинноволновыми коллективными возбуждениями, поэтому достаточно определить поляризационный оператор при малых волновых векторах $|\mathbf{k}| \ll k_F$ и малых частотах $|\omega| \ll |\mu|/\hbar$. После простых вычислений получаем лидирующий член [22, 23]:

$$\text{Re } \Pi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{gd|\mu|\mathbf{k}^2}{4\pi\hbar^2\omega^2}, \quad (6)$$

$$\text{Im } \Pi(\mathbf{k}, \omega) = \begin{cases} 0 & \text{при } v_F^* |\mathbf{k}| < |\omega| < 2|\mu|/\hbar, \\ \frac{gd\mathbf{k}^2}{16\hbar|\omega|} & \text{в остальных областях.} \end{cases}$$

4. Кулоновское взаимодействие. Напомним, что эффективными квантовыми барьерами являются области с большей скоростью Ферми (здесь для определенности $v_{F1} > v_{F2}$). Кулоновское взаимодействие в такой системе аналогично кулоновскому взаимодействию в системе параллельных квантовых нитей, лежащих параллельно друг другу в одной плоскости. Благодаря периодичности системы оно может быть записано в форме [23, 24]:

$$V(\mathbf{k}) = 2\tilde{e}^2 K_0 \left(\frac{d_{II}}{2} |k_y| \right) + 4\tilde{e}^2 \sum_{\nu=1}^{\infty} \cos(\nu k_x d) K_0(\nu |k_y| d), \quad (7)$$

где $K_0(x)$ – функция Макдональда.

В случае узких эффективных квантовых барьеров ($d_I \ll d_{II}$) в пределе $|k_y|d \ll 1$ выражение (7) упрощается [23, 24]:

$$V(\mathbf{k}) = 2\tilde{e}^2 \ln \frac{d}{\pi d_{II}} + \left[-2C - 2\psi \left(\frac{k_x d}{2\pi} + \frac{1}{2} \right) + \pi \tan \frac{k_x d}{2} \right] \tilde{e}^2 + o(k_y d), \quad (8)$$

где $C = 0.577\dots$ – постоянная Эйлера и $\psi(x)$ – ψ -функция Эйлера. Здесь $\tilde{e}^2 = e^2/\epsilon_{\text{эфф}}$ и эффективная статическая диэлектрическая проницаемость $\epsilon_{\text{эфф}} \approx (\epsilon + 1)/2$ определяется материалом с большей статической диэлектрической проницаемостью ϵ .

5. Дисперсионное соотношение плазмонов.

В приближении хаотических фаз закон дисперсии плазмонов определяется уравнением

$$1 - V(\mathbf{k})\Pi(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (9)$$

Подставляя выражение для поляризационного оператора (6) и кулоновского взаимодействия (7) в уравнение (9), находим дисперсионное соотношение плазмонов в виде

$$\omega_p(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{gd|\mu|}{4\pi\hbar^2} V(\mathbf{k})} |\mathbf{k}|. \quad (10)$$

Если выражение (8) применимо, можно записать простое аналитическое решение

$$\omega_p(\mathbf{k}) = v_p |\mathbf{k}|, \quad (11)$$

где

$$v_p = v_p \left[\ln \frac{d}{\pi d_{II}} - C - \psi \left(\frac{k_x d}{2\pi} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \text{tg} \frac{k_x d}{2} \right]^{1/2}$$

и

$$v_p = \sqrt{\frac{gd|\mu|\tilde{e}^2}{4\pi\hbar^2}}.$$

Дисперсионная кривая плазмона целиком лежит в области затухания $|\omega| < v_F^* |\mathbf{k}|$ (рис. 4), это происходит вследствие условия $|\mathbf{k}| \ll k_F \ll \pi/d$, а также из-за $\alpha^* \ll 1$, когда $\varepsilon_{\text{eff}} \gg 1$ (таким образом, $v_p \ll v_F^*$). Однако темп затухания плазмонов

$$\gamma = - \left. \frac{\text{Im } \Pi(\mathbf{k}, \omega)}{\frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re } \Pi(\mathbf{k}, \omega)} \right|_{\omega=\omega_p} = \frac{\pi \hbar \omega_p^2}{8 |\mu|}$$

мал по сравнению с частотой плазмона при условии $\hbar \omega_p \ll |\mu|$. Дисперсионная кривая плазмона лежит существенно ниже прямой $\omega = v_F^* |\mathbf{k}|$. Этот факт позволяет нам избежать расходимости поляризационного оператора при $\omega = v_F^* |\mathbf{k}|$. Во всех остальных областях $\Pi(\mathbf{k}, \omega)$ является регулярной функцией [22].

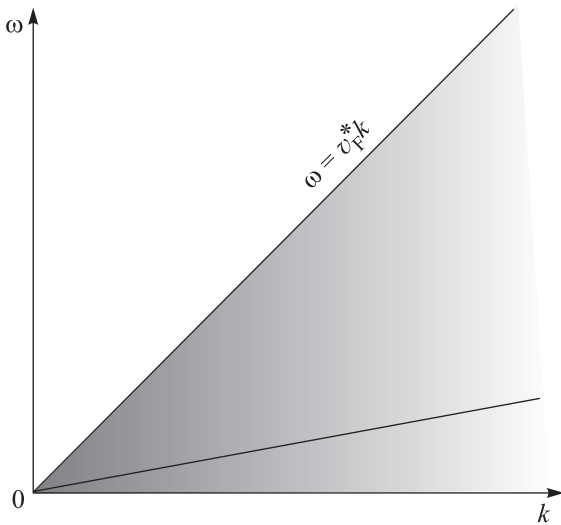


Рис. 4. Дисперсионная кривая плазмона $\omega_p(k)$ ($k = |\mathbf{k}|$) целиком лежит в области затухания под прямой $\omega = v_F^* k$

6. Интенсивность поглощения электромагнитного излучения. Интенсивность поглощения электромагнитных волн, промодулированных с периодом, равным длине плазменной волны, можно посчитать с использованием хорошо известной формулы:

$$Q = \frac{1}{2} \text{Re} \left(\sigma \tilde{\mathcal{E}} \mathcal{E}^* \right), \quad (12)$$

где σ – оптическая проводимость системы, $\tilde{\mathcal{E}}$ – электрическое поле плазменной волны, \mathcal{E} – электрическое поле электромагнитной волны, меняющееся с частотой $\omega \approx \omega_p$.

В оптической проводимости системы имеется два вклада: (i) проводимость Друде σ_{intra} , включающая внутриминизонные переходы, и (ii) член σ_{inter} , учитывающий межминизонные процессы. При малых

частотах $\hbar \omega \ll |E_F|$ лидирующим вкладом в σ является первый вклад, как в графене на однородной подложке [25]. Ниже подразумеваем, что $\sigma \approx \sigma_{\text{intra}}$.

Величина σ_{intra} легко находится из кинетического уравнения в τ -приближении (здесь и далее $\eta = \tau^{-1}$)

$$\sigma_{\text{intra}} = \frac{ige^2 |\mu|}{4\pi \hbar^2 (\omega + i\eta)}. \quad (13)$$

Из формулы (12) получаем интенсивность поглощения [23, 26]:

$$Q \simeq \sigma_0 \mathcal{E}_0^2 \frac{\eta^2 \omega^2}{(\omega^2 - \omega_p^2)^2 + \eta^2 \omega^2}, \quad (14)$$

где σ_0 – значение проводимости (13) в пределе нулевой частоты и \mathcal{E}_0 – амплитуда электрического поля электромагнитной волны.

7. Численные расчеты. В качестве примера возьмем СР, показанную на рис. 1. Для расчетов положим $d_I = 2.13$ нм и $d_{II} = 6.39$ нм (берем целое число элементарных ячеек графена в каждой из областей).

Численные расчеты зависимости энергии плазмонов $E_p = \hbar \omega_p$ от k_x были выполнены для двух значений $k_y = 10^4$ и 10^5 см⁻¹ и для трех значений концентрации носителей заряда $n_{2D} = 10^{10}$, $5 \cdot 10^{10}$ и 10^{11} см⁻² (рис. 5). Соответствующие значения перенормированной скорости Ферми были вычислены с использованием формулы (1) с подстановкой (2) и приведены в табл. 1 (значения статической диэлектрической проницаемости SiO₂ $\varepsilon = 3.9$ и *a*-HfO_x $\varepsilon = 30$). По формуле (4) были найдены соответствующие значения эффективной скорости Ферми в рассматриваемой СР $v_F^* = 1.12 \cdot 10^8$, $1.09 \cdot 10^8$ и $1.08 \cdot 10^8$ см/с.

Таблица 1. Перенормированная скорость Ферми (в единицах 10⁸ см/с) в графене на диэлектрических подложках при различных концентрациях носителей заряда n_{2D}

n_{2D}	10 ¹⁰ см ⁻²	5 · 10 ¹⁰ см ⁻²	10 ¹¹ см ⁻²
SiO ₂	1.43	1.36	1.33
<i>a</i> -HfO _x	1.04	1.02	1.01

Изменение в v_F^* весьма мало с изменением n_{2D} на порядок из-за большой $\varepsilon_{\text{eff}} \approx 15.5$. Поэтому изменение в E_p при изменении n_{2D} , в основном, обусловлены зависимостью $|\mu| \propto n_{2D}^{1/2}$, так что приближенно $E_p \propto n_{2D}^{1/4}$.

8. Заключение. В данной работе продемонстрирована возможность существования нового класса систем с использованием инженерии скорости Ферми в графене. Такие системы одновременно являются фотонными кристаллами и графеновыми сверхре-

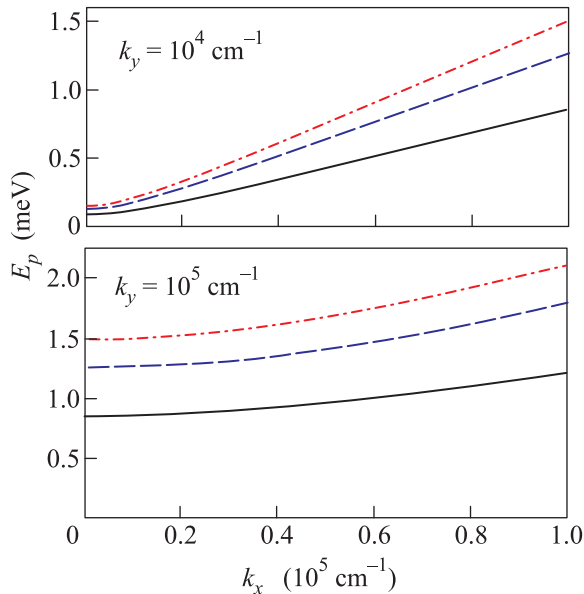


Рис. 5. (Цветной онлайн) Результаты численных расчетов зависимости энергии плазмонов E_p от компоненты квазиимпульса k_x при трех значениях концентрации носителей заряда $n_{2D} = 10^{10}$ (сплошные линии), $5 \cdot 10^{10}$ (пунктирные линии) и 10^{11} см^{-2} (штрихпунктирные линии). (а) и (б) – результаты для $k_y = 10^4$ и $k_y = 10^5 \text{ см}^{-1}$, соответственно

шетками с чередованием скорости Ферми. Такая модуляция возможна благодаря перенормировки скорости Ферми в энергетическом спектре бесщелевого графена. Мы указали на некоторые особенности коллективных возбуждений (плазмонов). В частности, плазменная частота становится линейной функцией волнового вектора почти во всей плазменной зоне.

Мы надеемся, что настоящая работа станет еще одним шагом по пути освоения инженерии скорости Ферми в графене. Был представлен вариант системы, где существенную роль играет диэлектрическая экранировка кулоновского взаимодействия носителей заряда в графене посредством расположения его на подложке из различных материалов. Дополнительной возможностью для изменения эффективной скорости Ферми является изменение параметров сверхрешетки d_I и d_{II} в соответствии с формулой (4).

Наконец, сама подложка является дифракционной решеткой. Поэтому данная система должна обладать весьма интересными оптическими свойствами, заслуживающими отдельного исследования.

Автор благодарен А.П. Силину и Д.Н. Собьянину за плодотворные обсуждения. Данное исследование поддержано Фондом развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (в части общей формулировки задачи) и Российским научным фондом, грант

16-12-10538 (в части вычисления поглощения электромагнитных волн).

1. T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 777 (2005).
2. П. В. Ратников, А. П. Силин, ЖЭТФ **141**, 582 (2012).
3. S. Lebegue, M. Klintonberg, O. Eriksson, and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **79**, 245117 (2009).
4. P. L. Pekh and A. P. Silin, Phys. Wave Phenom. **25**, 30 (2017).
5. П. В. Ратников, А. П. Силин, Письма в ЖЭТФ **100**, 349 (2014).
6. А. В. Колесников, А. П. Силин, ЖЭТФ **109**, 2125 (1996).
7. J. Gonzalez, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano, Nucl. Phys. B **424**, 595 (1994).
8. J. Gonzalez, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano, Phys. Rev. B **59**, 2474 (1999).
9. S. Das Sarma, E. H. Hwang, and W.-K. Tse, Phys. Rev. B **75**, 121406(R) (2007).
10. A. Bostwick T. Ohta, J. L. McChesney, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, Solid State Commun. **143**, 63 (2007).
11. Z. Q. Li, E. A. Henriksen, Z. Jiang, Z. Hao, M. C. Martin, P. Kim, H. L. Stormer, and D. M. Basov, Nature Phys. **4**, 532 (2008).
12. G. Li, A. Luican, and E. Y. Andrei, Phys. Rev. Lett. **102**, 176804 (2009).
13. D. C. Elias, R. V. Gorbachev, A. S. Mayorov, S. V. Morozov, A. A. Zhukov, P. Blake, L. A. Ponomarenko, I. V. Grigorieva, K. S. Novoselov, F. Guinea, and A. K. Geim, Nature Phys. **7**, 701 (2011).
14. C. Hwang, D. A. Siegel, S.-K. Mo, W. Regan, A. Ismach, Y. Zhang, A. Zettl, and A. Lanzara, Sci. Rep. **2**, 590 (2012).
15. J. Chae, S. Jung, A. F. Young, C. R. Dean, L. Wang, Yu. Gao, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Hone, K. L. Shepard, P. Kim, N. B. Zhitenev, and J. A. Stroscio, Phys. Rev. Lett. **109**, 116802 (2012).
16. T. Stauber, N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. **118**, 266801 (2017).
17. C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **93**, 197402 (2004).
18. П. В. Ратников, Письма в ЖЭТФ **87**, 343 (2008).
19. С. Г. Тиходеев, Письма в ЖЭТФ **53**, 162 (1991).
20. S. G. Tikhodeev, Sol. State Comm. **78**, 339 (1991).
21. А. П. Силин, С. В. Шубенков, ФТТ **40**, 1345 (1998).
22. V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, Rev. Mod. Phys. **84**, 1067 (2012).
23. П. В. Ратников, А. П. Силин, Письма в ЖЭТФ **102**, 823 (2015).
24. Е. А. Андрюшин, А. П. Силин, ФТТ **35**, 324 (1993).
25. Yu. V. Bludov, A. Ferreira, N. M. R. Peres, and M. I. Vasilevskiy, Int. J. Mod. Phys. B **27**, 1341001 (2013).
26. А. В. Чаплик, Письма в ЖЭТФ **100**, 288 (2014).