

М.А. Рувінський¹, Б.М. Рувінський²

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

Проведено узагальнення результатів попередніх робіт авторів з теорії динамічної провідності плоского прямолінійного графенового дроту. Для внутрішньозонної провідності розглянуто випадок біполярного зразка. Для міжзонної провідності докладно досліджено вплив класичних розмірних ефектів дзеркально-дифузного механізму відбивання носіїв заряду, виявлений для міжзонного струму в кубічному наближенні за амплітудою змінного електричного поля. Розрахунки проведено без обмежень на співвідношення між шириною дроту і довжиною вільного пробігу носіїв струму, а довжина дроту набагато більша за його ширину.

Ключові слова: прямолінійна смужка графену, динамічна провідність (внутрішньозонна і міжзонна), дифузне і дзеркальне відбивання носіїв струму.

Стаття постуила до редакції 15.07.2010; прийнята до друку 15.12.2010.

Вступ

Нещодавно ряд теоретичних і експериментальних робіт [1-4] було присвячено динамічній провідності необмеженого графену. Останній являє собою моноатомний шар вуглецевих атомів, що утворюють безмежну гексагональну кристалічну ґратку з двовимірним газом безмасових діраківських ферміонів. В роботах авторів [5,6] було розглянуто монополярну внутрішньозонну провідність обмеженого графену в моделі плоскої прямолінійної смужки («графенового дроту») з врахуванням класичних розмірних ефектів. В [7] для біполярного зразка в межах тієї ж моделі досліджено міжзонну провідність. При цьому повний міжзонний струм $\Gamma^{\text{inter}}(t) \approx (G_0^{\text{inter}} + G_2^{\text{inter}})U_0 e^{-i\omega t}$, де G_0^{inter} пов'язано з диференціальною провідністю необмеженого графену [1], а $G_2^{\text{inter}} \propto U_0^2$ враховує вплив змішаного дзеркально-дифузного механізму розсіяння носіїв заряду від бічних меж прямолінійної смужки графену (коли її довжина набагато більша за ширину); U_0 - амплітуда змінної напруги частоти ω на кінцях дроту.

Метою даної роботи є узагальнення результатів [5,6] розрахунку внутрішньозонної інтегральної провідності для випадку біполярного графенового дроту і докладний аналіз міжзонної інтегральної провідності, пов'язаної з коефіцієнтом нелінійності G_2^{inter} [7].

I. Внутрішньозонна інтегральна провідність і хімічний потенціал біполярного графенового дроту

Як і в [5-7], розглянуто модель плоского прямолінійного графенового дроту з великою довжиною L в напрямку осі x і шириною $2d$ в напрямку осі y ($L \gg 2d$, $-L/2 \leq x \leq L/2$, $-d \leq y \leq d$). Однорідне і змінне з частотою ω електричне поле направлено вздовж осі x дроту

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

Квантовий розгляд внутрішньозонної провідності призводить до тих самих результатів, що і квазікласичне кінетичне рівняння [8], яким ми скористались в роботах [5,6]. Для біполярного випадку густина струму при внутрішньозонних переходах визначається через нерівноважні відхилення електронів зони провідності і електронів валентної зони (або дірок) від рівноважної фермієвської функції розподілу

$$f_0(\epsilon) = (\exp[(\epsilon - \mu)/k_B T] + 1)^{-1} \quad (2)$$

для електронів провідності з енергією $\epsilon = u|\vec{p}| = uv$ поблизу «діраківських» точок K і K' [1], μ - хімічний потенціал, $u \approx 10^8$ см/с - характерна для графену фермієвська швидкість, k_B - стала Больцмана, T - абсолютна температура (для електронів валентної

зони в (2) $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$, $\mu \rightarrow -\mu$). Нерівноважні частини функцій розподілу носіїв заряду визначались з кінетичного рівняння Больцмана в наближенні часу релаксації τ і лінійного відгуку на змінне електричне поле \dot{E} при врахуванні дифузного [5] і дзеркально-дифузного [6,9] розсіяння від бічних меж дроту. При цьому для випадку електронів у валентній зоні слід провести заміну: $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$, $\mu \rightarrow -\mu$, $\dot{p} \rightarrow -\dot{p}$ (при умові, що час релаксації τ і коефіцієнт дзеркальності α вважати однаковими в обох зонах, $0 \leq \alpha \leq 1$). Внаслідок неоднорідності нерівноважних доданок до фермієвських функцій вздовж ширини дроту проінтегровано густину струму по ширині дроту і знайдено інтегральну внутрішньозонну провідність G^{intra} , яка визначає повний внутрішньозонний струм

$$\Gamma^{intra}(t) = G^{intra} U_0 e^{-i\omega t}, \quad (3)$$

де $U_0 = E_0 L$ - амплітуда напруги на кінцях дроту. Для монополярного зразка [5,6] інтегральна провідність пропорційна деякій характерній величині G_0 (див., напр., формулу (15) в [6]). Виявляється, що для біполярного зразка мають місце ті ж самі формули, що і в [5,6] для інтегральної внутрішньозонної провідності тільки з іншим виразом \bar{G}_0^{intra} . Для біполярного випадку

$$\bar{G}_0^{intra} = \frac{e^2}{\hbar} \cdot \frac{2k_B T d^2}{\pi \hbar u L} \ln \left(2 \operatorname{ch} \frac{\mu}{2k_B T} \right). \quad (4)$$

Хімічний потенціал у наближенні необмеженого графену визначається з умови [1]:

$$n_0 = \frac{2}{\pi(\hbar u)^2} \int_0^\infty \varepsilon [f_0(\varepsilon - \mu) - f_0(\varepsilon + \mu)] d\varepsilon, \quad (5)$$

де n_0 - концентрація електронів і дірок. З (5) і (2) отримано рівняння

$$n_0 = \frac{2}{\pi(\hbar u)^2} \left\{ \frac{\mu^2}{2} + (k_B T)^2 \times \left[\frac{\pi^2}{6} + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m^2} \exp \left(-\frac{m\mu}{k_B T} \right) \right] \right\}, \quad (6)$$

звідки при достатньо низьких температурах $k_B T \ll \mu$

$$\mu \approx \hbar u \sqrt{\pi n_0}, \quad (7)$$

а при високих температурах $k_B T \gg \mu$

$$\mu \approx \frac{\pi(\hbar u)^2 n_0}{4 \ln 2 \cdot k_B T}, \quad (8)$$

що узгоджується з результатами робіт [1,2]. Зауважимо, що в даній задачі додаткове врахування класичних розмірних ефектів при визначенні хімічного потенціалу призводить до поправок більш високого

порядку малості для інтегральної провідності G^{intra} , де вони вже були враховані у першому наближенні.

В роботах [5,6] детально проаналізовані залежності $(G/G_0)^{intra}$ від коефіцієнта дзеркальності α , безрозмірної частоти змінного електричного поля $\Omega = \omega d / u$ і безрозмірної оберненої довжини вільного пробігу \mathbf{l} носіїв заряду $q = d / \mathbf{l} \equiv d / u\tau$ для монополярного зразка. У біполярному випадку для відношення $(\bar{G}/\bar{G}_0)^{intra}$ мають місце ті ж самі залежності.

II. Міжзонна інтегральна провідність біполярного графенового дроту

Вплив класичних розмірних ефектів на міжзонну інтегральну провідність визначається коефіцієнтом нелінійності $G_2^{inter} \propto U_0^2$, загальний вираз якого отримано в [7]:

$$G_2^{inter} = \frac{8i(eu)^4}{(\pi\hbar)^2 v^2 \omega L^3} U_0^2 \sum_{k=1}^2 \int_{-d}^d dy \int \left(\frac{p_x}{p} \right)^2 \left(\frac{p_y}{p} \right)^2 \times \frac{\varepsilon f_0''(\varepsilon)}{[\hbar^2(\omega + i\delta)^2 - 4\varepsilon^2]} \left[1 - \frac{(1-\alpha)e^{-vt_k}}{1 - \alpha e^{-vt_0}} \right]^2 \gamma(t_k) d^2 \mathbf{p}, \quad (9)$$

e - елементарний заряд, $v = \frac{1}{\tau} - i\omega$, $\delta \rightarrow +0$;

$$t_1 = \frac{y-d}{v_y} \text{ при } 0 \leq y \leq d, \quad p_y < 0, \quad v_y = u p_y / p; \quad (10)$$

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

$$\gamma(t_k) = \begin{cases} 1 & \text{їдє } t_k \geq 0, \\ 0 & \text{їдє } t_k < 0. \end{cases} \quad (11)$$

Повний міжзонний струм

$$\Gamma^{inter}(t) = G^{inter} U_0 e^{-i\omega t}, \quad (12)$$

де

$$G^{inter} = G_0^{inter} + G_2^{inter}. \quad (13)$$

В межах розглянутої моделі перший доданок G_0^{inter} пропорційний диференціальній провідності необмеженого графену [1,2]. Наведемо нижче отримані остаточно вирази для $\operatorname{Re} G^{inter}$ та $\operatorname{Im} G^{inter}$ при $d \geq \mathbf{l}$ (ця умова використовувалась при визначенні G_2^{inter}). При достатньо низьких температурах $k_B T \ll \mu$

$$[(\hbar\omega)^2 - (2\mu)^2]^2 \gg 8(k_B T)^2 [(\hbar\omega)^2 + (2\mu)^2]$$

$$\operatorname{Re} G^{inter} = \frac{e^2}{4\hbar} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctg \frac{(\hbar\omega - 2\mu)}{2k_B T} - \frac{16(euE_0)^2 \mu \hbar \omega^2}{\pi(\omega^2 + \Gamma^2)^2 \cdot [(\hbar\omega)^2 - (2\mu)^2]^2} \left[\Gamma + \frac{4(1-\alpha)(3+\alpha)u}{15\pi d} \cdot \frac{(\omega^2 - 3\Gamma^2)}{(\omega^2 + \Gamma^2)} \right] \right\} \frac{2d}{L}, \quad (14)$$

$$\text{Im } G^{\text{inter}} = -\frac{e^2}{4\hbar} \left\{ \frac{1}{2\pi} \ln \frac{(\hbar\omega + 2\mu)^2}{[(\hbar\omega - 2\mu)^2 + (2k_B T)^2]} + \frac{2 \cdot (2euE_0)^2 \mu \hbar\omega}{\pi(\omega^2 + \Gamma^2)^2 \cdot [(\hbar\omega)^2 - (2\mu)^2]^2} \times \left[\omega^2 - \Gamma^2 - \frac{8(1-\alpha)(3+\alpha)\Gamma u}{15\pi d} \cdot \frac{(3\omega^2 - \Gamma^2)}{(\omega^2 + \Gamma^2)} \right] \right\} \frac{2d}{L}, \quad (15)$$

де $\Gamma = 1/\tau$ – обернений час релаксації носіїв заряду. При $[(\hbar\omega)^2 - (2\mu)^2]^2 \ll 8(k_B T)^2 [(\hbar\omega)^2 + (2\mu)^2]$ в знаменниках (14) і (15) слід провести заміну

$$[(\hbar\omega)^2 - (2\mu)^2]^2 \rightarrow -8(k_B T)^2 [(\hbar\omega)^2 + (2\mu)^2].$$

При високих температурах $k_B T \gg \mu$ одержимо:

$$\text{Re } G^{\text{inter}} = \frac{e^2}{4\hbar} \left\{ \text{th} \left(\frac{\hbar\omega}{4k_B T} \right) - \frac{2 \cdot (2euE_0)^2 Q(\omega, T)}{\pi \hbar (\omega^2 + \Gamma^2)^2} \left[\Gamma + \frac{4(1-\alpha)(3+\alpha)u}{15\pi d} \cdot \frac{(\omega^2 - 3\Gamma^2)}{(\omega^2 + \Gamma^2)} \right] \right\} \frac{2d}{L}, \quad (16)$$

$$\text{Im } G^{\text{inter}} = -\frac{e^2}{4\hbar} \left\{ P(\omega, T) + \frac{4 \cdot (euE_0)^2 Q(\omega, T)}{\pi \hbar \omega (\omega^2 + \Gamma^2)^2} \left[\omega^2 - \Gamma^2 - \frac{8(1-\alpha)(3+\alpha)\Gamma u}{15\pi d} \cdot \frac{(3\omega^2 - \Gamma^2)}{(\omega^2 + \Gamma^2)} \right] \right\} \frac{2d}{L}, \quad (17)$$

де

$$P(\omega, T) = \begin{cases} \frac{8k_B T}{\pi \hbar \omega} \left[\ln 2 + 6\zeta(3) \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^2 \right] & \text{їдє } \hbar\omega \gg 4k_B T, \\ \frac{\hbar\omega}{2\pi k_B T} \ln \left(\frac{4k_B T}{\hbar\omega} \right) & \text{їдє } \hbar\omega \ll 4k_B T, \end{cases} \quad (18)$$

$\zeta(3) \approx 1.20$ – значення дзета-функції Рімана;

$$Q(\omega, T) = \begin{cases} \frac{k_B T}{(2\hbar\omega)^2} \left[\ln 2 + 9\zeta(3) \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^2 \right] & \text{їдє } \hbar\omega \gg 2k_B T, \\ -\frac{1}{32k_B T} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \cdot \ln \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right) \right] & \text{їдє } \hbar\omega \ll 2k_B T. \end{cases} \quad (19)$$

Основним механізмом релаксації носіїв заряду у необмеженому графені є заряджені домішкові

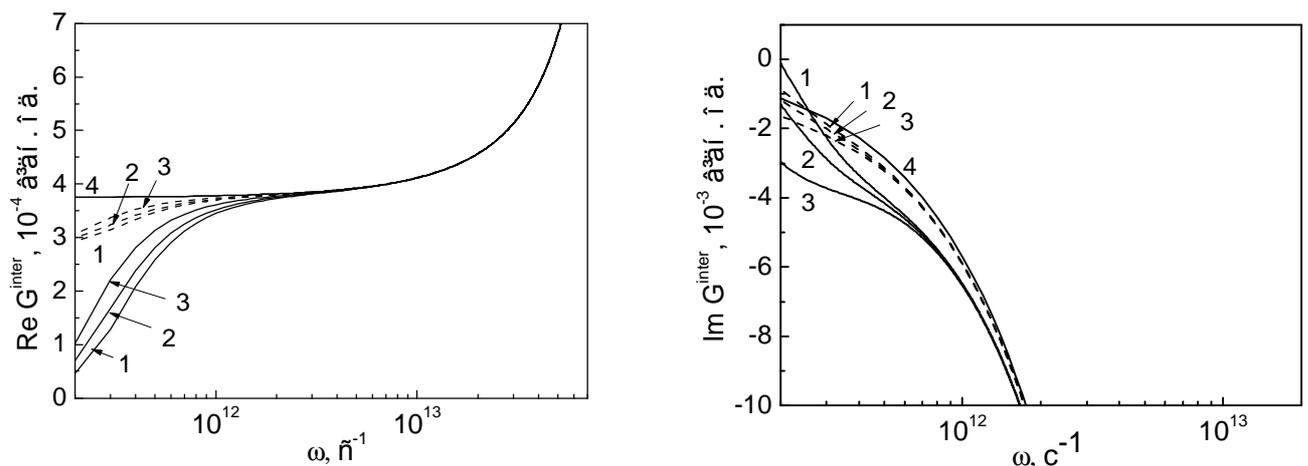


Рис. 1 Частотні залежності, згідно (14), (15), $\text{Re } G^{\text{inter}}$ (a) і $\text{Im } G^{\text{inter}}$ (b) в одиницях $(e^2/4\hbar)$ при значеннях коефіцієнта дзеркальності $\alpha = 0,0$ (лінія 1), $0,5$ (лінія 2), $1,0$ (лінія 3) для графенового дроту з густиною носіїв $n_0 = 10^{11} \text{нї}^{-2}$ при температурі $T = 5\text{К}$, якій відповідає значення хімічного потенціалу $\mu = 3,66 \cdot 10^{-2} \text{Å}$.

Ширина дроту $2d = 5 \cdot 10^{-4} \text{нї}$, довжина дроту $L = 5 \cdot 10^{-3} \text{нї}$, $\Gamma = 10^{11} \text{с}^{-1}$. Амплітуда напруженості електричного поля $E_0 = 100 \text{В/см}$ (пунктирні лінії), 200В/см (суцільні лінії). Лінія 4 – у відсутності електричного поля.

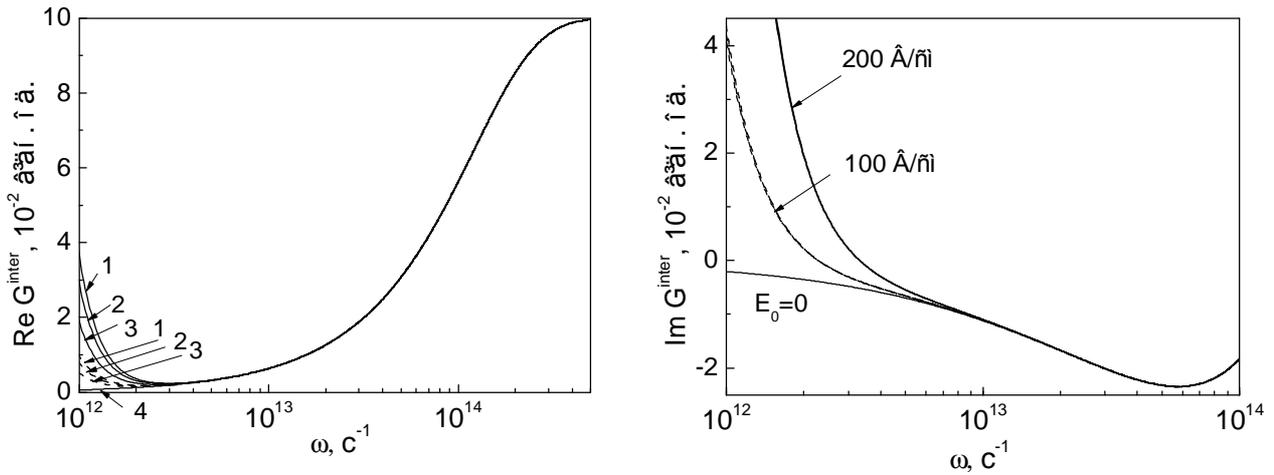


Рис. 2 Частотні залежності, згідно (16), (19), $\text{Re } G^{\text{inter}}$ (a) і $\text{Im } G^{\text{inter}}$ (b) в одиницях $(e^2/4h)$ при значеннях коефіцієнта дзеркальності $\alpha = 0,0$ (лінія 1), $0,5$ (лінія 2), $1,0$ (лінія 3) для графенового дроту з густиною носіїв $n_0 = 10^{10} \text{ нї}^{-2}$ при температурі $T = 300\text{K}$, якій відповідає значення хімічного потенціалу $\mu = 1,90 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$. Ширина дроту $2d = 5 \cdot 10^{-4} \text{ нї}$, довжина дроту $L = 5 \cdot 10^{-3} \text{ нї}$, $\Gamma = 10^{11} \text{ с}^{-1}$. Амплітуда напруженості електричного поля $E_0 = 100 \text{ В/см}$ (пунктирні лінії), 200 В/см (суцільні лінії). Лінія 4 – у відсутності електричного поля.

центри [1]. При нехтуванні екрануванням вільними носіями $\Gamma(\omega) \propto 1/\omega$. Для випадку нейтральних короткодіючих центрів і електрон-фононної взаємодії $\Gamma(\omega) \propto \omega$ [4,10]. В обох випадках нейтральних і заряджених дефектів $\Gamma(\omega)$ обернено пропорційна концентрації дефектів на одиницю площі.

З отриманих формул (14)-(19) випливає, що в межах прийнятих наближень і розглянутої моделі $\text{Re } G^{\text{inter}}$ не залежить від коефіцієнта дзеркальності α при умові, що $\omega^2 = 3\Gamma^2$, а для $\text{Im } G^{\text{inter}}$ відповідна умова має вигляд: $\omega^2 = (1/3)\Gamma^2$. Класичні розмірні ефекти міжзонної інтегральної провідності виявляються в електричних полях у квадратичному наближенні ($G_2^{\text{inter}} \propto E_0^2$), а для зміни міжзонного струму – в кубічному наближенні за амплітудою змінного поля

$$\Delta G_2^{\text{inter}} \propto G_2^{\text{inter}} E_0 \propto E_0^3. \quad (20)$$

На рис. 1 представлено, згідно (14), (15), частотні залежності $\text{Re } G^{\text{inter}}$ (1a) і $\text{Im } G^{\text{inter}}$ (1b) в одиницях $(e^2/4h)$ для різних значень коефіцієнта дзеркальності α для графенового дроту і амплітуд змінного електричного поля E_0 при температурі $T = 5 \text{ K}$ і концентрації електронів і дірок $n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Рис. 2 ілюструє відповідні залежності $\text{Re } G^{\text{inter}}$ (2a) і $\text{Im } G^{\text{inter}}$ (2b), згідно (16)-(19), при температурі $T = 300 \text{ K}$ і концентрації $n_0 = 10^{10} \text{ см}^{-2}$. $\text{Re } G^{\text{inter}}$ при $T = 5 \text{ K}$ (рис. 1a) та $T = 300 \text{ K}$ (рис. 2a), $\text{Im } G^{\text{inter}}$ при $T = 5 \text{ K}$ (рис. 1b) істотно залежать від

α при частотах $\omega \leq (10^{12} - 10^{13}) \text{ с}^{-1}$. При $T = 300 \text{ K}$ $\text{Im } G^{\text{inter}}$ (рис. 2b) при частотах $\omega \geq (10^{12} - 10^{14}) \text{ с}^{-1}$ практично не залежить від α . Вплив змінного електричного поля E_0 на $\text{Re } G^{\text{inter}}$ та $\text{Im } G^{\text{inter}}$ є суттєвим при частотах $\omega \leq (10^{11} - 10^{13}) \text{ с}^{-1}$, причому при $T = 5 \text{ K}$ $\text{Re } G^{\text{inter}}$ та $\text{Im } G^{\text{inter}}$ спадають з ростом E_0 , а при $T = 300 \text{ K}$ – зростають. У розглянутій області достатньо слабких електричних полів (на рис. 1 і 2 наведені випадки для амплітуд змінного електричного поля $E_0 = 100 \text{ В/см}$ та 200 В/см) вплив механізмів дзеркально-дифузного розсіяння зменшується з ростом частоти змінного електричного поля.

Висновки

Вплив класичних розмірних ефектів, зумовлених дзеркально-дифузним механізмом відбивання носіїв заряду від бічних меж біполярного графенового дроту, на внутрішньозонну інтегральну провідність є суттєвим, якісно подібним до випадку монополярного дроту [5,6] і незалежним від амплітуди змінного електричного поля. Для міжзонної інтегральної провідності цей вплив виявляється через нерівноважні функції розподілу другого порядку [7], пропорційні квадрату амплітуди змінного електричного поля. В обох випадках інтегральні провідності залежать від частоти змінного поля, оберненого часу релаксації носіїв заряду, коефіцієнта дзеркальності і розмірів

плоского прямолінійного графенового дроту, довжина якого вважається набагато більшою за його ширину.

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

Рувінський Б.М. – к.ф.-м.н., доцент кафедри загальної та прикладної фізики.

- [1] Л.А.Фальковский. Оптические свойства допированных графеновых слоев // *ЖЭТФ*, **133**(3), сс.663-669 (2008).
- [2] Л.А.Фальковский. Оптические свойства графена и полупроводников типа A_4B_6 // *УФН*, **178**(9), сс.923-934 (2008).
- [3] K.F.Mak, M.Y.Sfeir, Y.Wu et al. Measurement of the Optical Conductivity of Graphene // *Phys. Rev. Lett.*, **101**, pp. 196405-1 – 196405-4 (2008).
- [4] E.G.Mishchenko. Dynamic Conductivity in Graphene beyond Linear Response // *Phys. Rev. Lett.*, **103**, pp. 246802-1 – 246802-4 (2009).
- [5] М.А.Рувінський, Б.М.Рувінський. Високочастотна внутрішньозонна провідність прямолінійної смужки графену // *Фізика і хімія твердого тіла*, **10**(3), сс.529-537 (2009).
- [6] 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).
- [7] М.А.Рувінський, Б.М.Рувінський. Міжзонна динамічна провідність прямолінійної смужки графену // *Фізика і хімія твердого тіла*, **11**(2), сс.288-291 (2010).
- [8] А.А.Абрикосов. *Основы теории металлов*. Наука, М., 520с. (1987).
- [9] И.А.Кузнецова, Р.Р.Хадчукаев, А.А.Юшканов. Влияние поверхностного рассеяния носителей заряда на высокочастотную проводимость тонкой цилиндрической полупроводниковой проволоки // *ФТТ*, **51** (10), сс. 2022-2027 (2009).
- [10] С.-Н.Park, F.Giustino, M.L.Cohen and S.G.Louie. Velocity Renormalization and Carrier Lifetime in Graphene from the Electron-Phonon Interaction // *Phys. Rev. Lett.*, **99**, pp.086804-1 – 086804-4 (2007).

М.А. Ruvinskii¹, В.М. Ruvinskii²

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 generalization of results of the previous authors' works on theory of dynamic conductivity of the plane straight-line graphene wire has been fulfilled. The case of the bipolar sample has been considered for the intraband conductivity. For the interband conductivity the influence of the classical dimensional effects of specular-diffuse mechanism of charge carriers reflection has been investigated in detail and has been revealed for the interband current in the cubic approximation on amplitude of the alternating electric field. The calculations have been fulfilled at arbitrary relation between the wire width and free path length of charge carriers and the wire length is much greater than it width.