18,09

Магнитопоглощение эллиптически поляризованного электромагнитного излучения графеном: приближение времени релаксации и метод Монте-Карло

© С.В. Крючков^{1,2}, Е.И. Кухарь¹, Д.В. Завьялов²

¹ Волгоградский государственный социально-педагогический университет, Волгоград, Россия ² Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия E-mail: eikuhar@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 14 марта 2014 г. В окончательной редакции 10 декабря 2014 г.)

Показано, что ширина линии циклотронного поглощения в щелевом графене отлична от нуля даже в отсутствие рассеяния электронов. Аналитически определена функциональная зависимость ширины линии циклотронного поглощения от температуры, применимая для щелевого графена в отсутствие столкновений. Численно рассчитана мощность эллиптически поляризованной электромагнитной волны, поглощаемая графеном в присутствии постоянного магнитного поля. Численный эксперимент, использующий метод Монте-Карло, подтверждает аналитические вычисления, основанные на уравнении Больцмана.

Работа поддержана грантом РФФИ № 15-42-02137 р_поволжье_а и программой Минобрнауки России на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках базовой части государственного задания № 2014/411 (код проекта 522).

1. Введение

Повышенный интерес к изучению нелинейного электромагнитного (ЭМ) отклика графеновых структур связан с возможностями их использования в оптоэлектронике [1–12]. Исследования влияния магнитного поля на кинетические свойства графена дают информацию об эффективной массе, концентрации, подвижности, времени свободного пробега носителей заряда [1,13,14]. Статическая магнитопроводимость графена изучена в [15–17]. Влияние высокочастотного излучения на осцилляции Шубникова-де Гааза в графене исследовано в [18].

Правомерность использования приближения времени релаксации (τ -приближения) для квазиклассического описания магнитотранспорта в графене показана в [17] в численном эксперименте. Моделирование, выполненное в [17], использовало метод Монте-Карло учитывающий рассеяние носителей заряда на акустических и оптических фононах.

Изучение циклотронного резонанса также является важным для диагностики кинетических свойств 2D-электронных систем [19]. В [20–27] влияние магнитного поля на оптическую проводимость графена исследовано в рамках линейной теории ЭМ-отклика. Теория высокочастотной проводимости графена, учитывающая электрон-фононное взаимодействие, развита в [25]. В [27] рассчитана температурная зависимость высокочастотной магнитопроводимости бесщелевого графена. В случае неквантующего магнитного поля вычисления в [27] основаны на кинетическом уравнении Больцмана, записанном в τ -приближении и решаемом в линейном приближении по напряженности электрического поля E ЭМ-волны.

Результаты экспериментального исследования циклотронного резонанса в однослойном графене опубликованы в рботах [14,28–30], где показано, что ширина линии циклотронного резонанса имеет ненулевое значение даже для чистого графена. Этот факт теоретически обсуждался в [31], где показано, что теория линейного ЭМ-отклика неприменима для описания циклотронного поглощения в бесщелевом графене.

В [31] выполнен анализ уравнения движения, записанного для одного электрона с линейным законом дисперсии, в условиях постоянного магнитного поля с напряженностью $\mathbf{H} \neq \mathbf{0}$ и синусоидального электрического поля. При этом процессами рассеяния пренебрегалось. Такая ситуация соответствовала движению электрона в бесщелевом чистом графене. Вычисления показали, что ЭМ-отклик в бесщелевом графене является существенно нелинейным даже в случае слабого внешнего электрического поля ($E \ll H v_{\rm F}/c$, где $v_{\rm F}$ — скорость на поверхности Ферми). Математически этот результат являлся следствием сингулярности силы Лоренца в уравнении движения. Согласно [31], ширина линии циклотронного резонанса отлична от нуля даже в отсутствие процессов рассеяния. Это отличает графен от 2D-систем с параболической зоной [19]. Как следует из [31], ненулевая ширина линии циклотронного поглощения в графене не связана непосредственно с процессами рассеяния и определяется непараболичностью закона дисперсии.

В [31] проведен также анализ движения нескольких электронов в ненулевом магнитном поле (48 частиц). Однако в действительности мы имеем дело с макроскопическим ансамблем электронов с различными начальными импульсами. Следовательно, теория должна быть основана на кинетическом уравнении, учитывающем процессы рассеяния и действие ЭМ-полей на электронную подсистему в целом. Более того, наличие щели в графене приводит к следующей ситуации. Во-первых, согласно теории транспортных явлений [32,33], если время τ и полуширина щели графена Δ удовлетворяют неравенству $ev_F E \tau \ll \Delta$, то динамику электрона можно считать линейной. Во-вторых, как показано далее, для щелевого графена линейная теория ЭМ-отклика также демонстрирует наличие ненулевой ширины линии циклотронного поглощения в случае, если частота столкновений $v = \tau^{-1}$ стремится к нулю (хотя в отличие от [27,31] сила Лоренца в уравнении движения уже не является сингулярной в случае малых значений амплитуд импульса электрона). Отметим, что возможность появления щели в зонной структуре графена исследована в [2,3].

Ширина линии циклотронного поглощения ЭМ-излучения щелевым графеном

Пусть графеновый слой нанесен на подложку (например, SiC или *h*-BN). Вектор напряженности магнитного поля **H** перпендикулярен графеновой плоскости xy, которая подвергается действию эллиптически поляризованного ЭМ-излучения так, что вектор напряженности электрического поля **E** осциллирует с частотой ω в плоскости xy

$$\mathbf{E} = E_0 \{\cos \omega t, \cos(\omega t - \varphi)\}.$$

Наличие подложки приводит к тому, что в зонной структуре графена возникает щель [2,3]

$$\varepsilon(p) = \sqrt{\Delta^2 + v_{\rm F}^2 p^2},\tag{1}$$

где Δ — полуширина щели в графене.

Для электрона, движущегося с импульсом p_1 в поле ЭМ-волны с частотой ω , условием циклотронного резонанса будет равенство $\omega_c(p_1) = \omega$. Если мы имеем дело с ансамблем частиц, то наиболее интенсивно ЭМ-энергия поглощается теми электронами, импульсы которых лежат вблизи значения p_1 . Таким образом, для графена оценка ширины линии циклотронного поглощения δH может быть проведена с помощью следующей формулы: $\delta H \sim c\omega\delta\varepsilon(\mathbf{p}_1)/ev_{\rm F}^2$. Здесь $\delta\varepsilon = \delta\varepsilon_{\tau} + \delta\varepsilon_T$ неопределенность энергии, $\delta\varepsilon_{\tau} \sim \hbar/\tau$ — неопределенность энергии, связанная с процессами рассеяния, $\delta\varepsilon_T \sim T$ — уширение энергии, связанное с тепловым движением при конечных температурах *T*. В результате имеем

$$\delta H \sim \frac{c\omega}{ev_{\rm F}^2} \left(\frac{\hbar}{\tau} + T\right).$$
 (2)

Из формулы (2) видно, что ширина линии циклотронного поглощения отлична от нуля даже в отсутствие столкновений (при $\tau = \infty$).

Теперь перейдем к количественному изучению. Поглощаемая мощность единицы поверхности вычисляется с помощью формулы $Q = \langle \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \rangle$, где усреднение проводится по периоду осцилляций вектора **E**; **j** — вектор плотности тока, возникающего под действием указанных полей. Квазиклассический подход, основанный на кинетическом уравнении Больцмана, приводит к результату [26]. После некоторых преобразований имеем $Q = Q_+ + Q_-$, где

$$Q_{\pm} = \frac{e^{2}E_{0}^{2}(1 \pm \sin \varphi)}{2\omega} \times \sum_{\mathbf{p}} \frac{f_{0}(\mathbf{p})\omega\tau\eta}{1 + (\omega_{c} \mp \omega)^{2}\tau^{2}} \left(1 + \frac{p^{2}}{2\beta} \frac{1 + (\omega^{2} - \omega_{c}^{2})\tau^{2}}{1 + (\omega_{c} \mp \omega)^{2}\tau^{2}}\right),$$
(3)

 $\eta = p^{-1} \partial_p \varepsilon, \beta = (\partial_p^2 \varepsilon - \eta)^{-1} p^2 \eta, \omega_c = e H \eta / c$. Квазиклассический подход применим для описания динамики электрона в магнитном поле, если ларморовский радиус много больше длины волны де Бройля: $\sqrt{c \hbar / e H} \gg \lambda_B$. Для носителей заряда в графене длина волны де Бройля имеет порядок $\lambda_B \sim \hbar v_F / \Delta$ [14]. Подложки SiC и *h*-BN приводят к появлению в графене щели, полуширина которой равна 0.13 и 0.053 eV соответственно [2,3]. В этих случаях квазиклассическое описание справедливо, если напряженность магнитного поля удовлетворяет неравенству $H \ll 20$ T. Далее будем рассматривать магнитные поля $H \sim 1$ T.

Используя (1), определим для графена $\eta = v_F^2/\varepsilon$, $\beta = -\varepsilon^2/v_F^2$. Следует отметить, что формула (3) для поглощаемой мощности справедлива для любой двумерной структуры, закон дисперсии которой определяется абсолютным значением квазиимпульса **р**. Например, для полупроводниковой структуры с квадратичным законом дисперсии формула (3) дает известный результат [34].

Можно показать, что если температура T удовлетворяет неравенству $T \gg n_0 \hbar^2 v_{\rm F}^2 / \Delta$ ($n_0 = 10^{10} \, {\rm cm}^{-2}$ поверхностная концентрация носителей заряда в графене [4]), то электронный газ в графене является невырожденным. Для численных значений параметров Δ и n_0 , указанных выше, температура невырожденного электронного газа должна удовлетворять неравенству $T \gg 10 \, {\rm K}$. В этом случае в качестве равновесной функции распределения $f_0(\varepsilon)$ берется функция распределения Больцмана. Тогда

$$Q_{\pm} = \frac{\Delta^2 Q_0}{T(T+\Delta)} \int_{1}^{\infty} \frac{\omega \tau}{z^2 + (\Omega_c \mp \omega z)^2 \tau^2} \times \left(1 - \frac{z^2 - 1}{2z^2} \frac{z^2 - (\Omega_c^2 - \omega^2 z^2) \tau^2}{z^2 + (\Omega_c \mp \omega z)^2 \tau^2}\right) e^{-\frac{\Delta}{T}(z-1)} z^2 dz,$$
(4)

где $Q_0 = e^2 n_0 v_{\rm F}^2 E_0^2 (1 \pm \sin \varphi) / 2\omega \Delta$, $\Omega_c = e H v_{\rm F}^2 / c \Delta$.

Рассмотрим для определенности ЭМ-волну, поляризованную по кругу ($\varphi = \pi/2$). Вычислим интеграл в (4)

при $\omega \tau = \infty$. В результате получим

$$Q = \frac{\pi Q_0}{\omega} \left(\Omega_c + \frac{\Omega_c^2 - \omega^2}{2\Omega_c} \right) \theta(\Omega_c - \omega) e^{-\frac{\Lambda}{T} \left(\frac{\Omega_c}{\omega} - 1 \right)}, \quad (5)$$

где $\theta(x) - \theta$ -функция. Обозначим $\chi = ev_F^2 \delta H/c \Delta \omega$, где δH — ширина линии циклотронного поглощения, определяемая как разность напряженностей магнитного поля, для которых значение Q(H) в 2 раза меньше резонансного значения. С помощью (5) находим, что χ является решением следующего уравнения:

$$\chi - \frac{T}{\Delta} \ln \left(3 + 3\chi + \frac{2}{1+\chi} \right) = 0. \tag{6}$$

Решение (6) легко определить в виде ряда по степеням T/Δ

$$\delta H = \frac{c\,\omega T\ln 5}{ev_{\rm F}^2} \left(1 + \frac{T}{5\Delta} + \frac{2 + 19\ln 5}{50}\frac{T^2}{\Delta^2} + \dots\right).$$
 (7)

Как видно из (7), в чистом графене ($\omega \tau = \infty$) ширина линии циклотронного резонанса отлична от нуля. Результат (7) в линейном приближении по температуре *T* находится в согласии с качественной оценкой (2). Отметим, что формула (7) получена впервые и справедлива только для щелевой модификации графена, помещенного в поле ЭМ-волны, амплитуда которой удовлетворяет условию $ev_F E_0 \tau \ll \Delta$.

3. Численный анализ циклотронного поглощения щелевым графеном

Определим зависимость мощности лазерного излучения, поглощаемой графеном, от напряженности магнитного поля без использования приближения времени релаксации. Для этой цели используем прямое численное моделирование методом Монте-Карло [35,36]. Рассеивателями носителей тока будем считать фононы (как акустические, так и оптические). Считаем, что в промежутках между столкновениями электрон движется в магнитном поле и поле ЭМ-волны согласно классическим уравнениям движения. Время *t_i* движения электрона до *i*-го столкновения определяется с помощью уравнения

$$r = 1 - \exp\left(\int_{0}^{t_{i}} W(\mathbf{p}(t')) dt'\right), \tag{8}$$

где r — равномерно распределенное на интервале (0, 1) случайное число, $W(\mathbf{p})$ — полная вероятность рассеяния электрона с импульсом **р**. Время пробега разбивается на малые интервалы длительностью Δt , и интеграл в (8) заменяется интегральной суммой согласно методу трапеций. Затем данная интегральная сумма, изменение

импульса электрона и перемещение электрона вычисляются на каждом интервале в цикле до тех пор, пока не выполнится следующее условие:

$$-\ln(r) \leq \frac{\Delta t}{2} \sum_{i} \left(W(\mathbf{p}_i) + W(\mathbf{p}_{i-1}) \right).$$
(9)

Тот момент времени t_i , при котором условие (9) выполнено в первый раз, считается моментом времени столкновения. Значение t_i запоминается для определения среднего времени между столкновениями, знание которого необходимо для дальнейшего сравнения результатов численного и аналитического расчетов. Механизм рассеяния определяется с помощью равномерно распределенной на интервале (0, 1) случайной величины *s* исходя из неравенств

$$\begin{cases} \frac{W_{\text{opt}}(\mathbf{p})}{W_{\text{ac}}(\mathbf{p}) + W_{\text{opt}}(\mathbf{p})} \geq s & (\text{оптические фононы}), \\ \frac{W_{\text{opt}}(\mathbf{p})}{W_{\text{ac}}(\mathbf{p}) + W_{\text{opt}}(\mathbf{p})} < s & (\text{акустические фононы}), \end{cases}$$
(10)

где $W_{ac}(\mathbf{p})$ и $W_{opt}(\mathbf{p})$ — вероятности рассеяния на акустических и оптических фононах соответственно [17],

$$W_{\rm ac}(\mathbf{p}) = \frac{TD_{\rm ac}^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{2\hbar^3 \rho v_s^2 v_{\rm F}^2},\tag{11}$$

$$W_{\rm opt}(\mathbf{p}) = \frac{D_{\rm opt}^2}{4\hbar^2 \rho \omega_0 v_{\rm F}^2} \begin{cases} \varepsilon(\mathbf{p}) - \hbar \omega_0, & \varepsilon(\mathbf{p}) - \hbar \omega_0 \ge \Delta, \\ 0, & \varepsilon(\mathbf{p}) - \hbar \omega_0 < \Delta, \end{cases}$$
(12)

 $D_{\rm ac}$ — константа деформационного потенциала, ρ — поверхностная плотность материала, v_s — скорость звука в графене, $D_{\rm opt}$ — константа взаимодействия с оптическими фононами, ω_0 — частота оптического фонона.

В итоге численно рассчитывается среднее значение величины $\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}$, по которой находится зависимость мощности Q ЭМ-излучения, поглощаемой единицей площади графена, от напряженности магнитного поля H, и определяется ширина линии циклотронного поглощения.

В численном эксперименте использовались следующие значения параметров [37]: $\rho = 7.7 \cdot 10^{-8} \text{ g/cm}^2$, $v_s = 10^6 \text{ cm/s}$, T = 300 K, $\omega_0 = 2.56 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$. Для определения зависимости ширины линии циклотронного поглощения от среднего времени между столкновениями константы D_{ac} , D_{opt} варьировались в пределах 5–30 eV и $10^9 - 5 \cdot 10^9 \text{ eV/cm}$ соответственно.

Зависимость ширины линии циклотронного поглощения от среднего времени между столкновениями показана на рис. 1 (T = 300 K, значение χ_{min} отвечает ширине линии, выраженной в безразмерных единицах, в отсутствие столкновений). Сплошная линия соответствует расчету, выполненному в τ -приближении, пунктирная линия — численному расчету методом Монте-Карло. Как видно из рисунка, ширина линии отлична от нуля даже в случае редких столкновений ($\chi_{min} \neq 0$). Различие



Рис. 1. Зависимость ширины линии циклотронного поглощения от среднего времени между столкновениями. *T* = 300 К. Сплошная линия — аналитический расчет, пунктирная — численный эксперимент.



Рис. 2. Зависимость ширины линии циклотронного поглощения от температуры в отсутствие столкновений. $\Delta = 0.13$ eV. Сплошная линия — аналитический расчет, пунктирная — численный эксперимент.

значений ширины линии в отсутствие столкновений ($\omega \tau \gg 1$), найденных с использованием τ -приближения и метода Монте-Карло, составляет 5%, что приблизительно совпадает с ошибкой численного расчета. Отклонение численного результата от аналитического расчета можно объяснить также тем, что в теоретических вычислениях не учитывалась зависимость времени между столкновениями от магнитного поля. Анализ, выполненный в [17], показал, что ошибка, вызванная этим приближением в случае постоянного электрического поля ($\omega = 0$), составляет 5–10%.

На рис. 2 показана зависимость ширины линии циклотронного поглощения от температуры в отсутствие столкновений. Сплошная линия соответствует аналитическому расчету (см. (7)), пунктирная — численному эксперименту. Из рисунка видно, что поведение δH с изменением температуры, полученное аналитически в пределе $\omega \tau = \infty$, также подтверждается численными расчетами.

4. Заключение

Таким образом, показано, что линейная теория ЭМ-отклика, основанная на кинетическом уравнении Больцмана, объясняет уширение δH линии циклотронного поглощения для щелевой модификации графена. Это уширение связано не только с процессами рассеяния. Оно связано также с непараболичностью закона дисперсии графена (1). Поскольку для графена значение δH определяется не только параметром $\omega \tau$, при конечных температурах ($T \neq 0$) формула Друде становится неприменимой для описания циклотронного резонанса в квазиклассическом пределе. В этом случае мощность, поглощаемая щелевым графеном, определяется формулой (4). При абсолютном нуле температуры (T = 0) формула (4) совпадает с формулой Друде, если в качестве циклотронной массы рассматривать величину $\Delta/v_{\rm F}^2$.

Список литературы

- M.L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski, C. Berger, W.A. de Heer. Phys. Rev. Lett. 97, 266 405 (2006).
- [2] A. Mattausch, O. Pankratov. Phys. Rev. Lett. **99**, 076802 (2007).
- [3] S.Y. Zhou, G.-H. Gweon, A.V. Fedorov, P.N. First, W.A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A.H. Castro Neto, A. Lanzara. Nature Mater. 6, 770 (2007).
- [4] Л.А. Фальковский. УФН 178, 923 (2008).
- [5] S.A. Mikhailov. Physica E 40, 2626 (2008).
- [6] J. Nilsson, A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres. Phys. Rev. B 78, 045 405 (2008).
- [7] D.S.L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler, T. Chakraborty. Adv. Physics 59, 261 (2010).
- [8] E.V. Castro, K.S. Novoselov, S.V. Morozov, N.M.R. Peres, J.M.B. Lopes dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A.K. Geim, A.H. Castro Neto. J. Phys.: Cond. Matter 22, 175 503 (2010).
- [9] D. Bolmatov, C.-Y. Mou. Physica B **405**, 2896 (2010).
- [10] V. Apalkov, T. Chakraborty. Phys. Rev. B 86, 035401 (2012).
- [11] G. Konstantatos, M. Badioli, L. Gaudreau, J. Osmond, M. Bernechea, F.P. Garcia de Arquer, F. Gatti, F.H.L. Koppens. Nature Nanotechnol. 7, 363 (2012).
- [12] S.V. Kryuchkov, E.I. Kukhar', D.V. Zav'yalov. Phys. Wave Phenom. 21, 207 (2013).
- [13] E.A. Henriksen, Z. Jiang, L.-C. Tung, M.E. Schwartz, M. Takita, Y.-J. Wang, P. Kim, H.L. Stormer. Phys. Rev. Lett. 100, 087403 (2008).
- [14] A.M. Witowski, M. Orlita, R. Stepniewski, A. Wysmolek, J.M. Baranowski, W. Strupinski, C. Faugeras, G. Martinez, M. Potemski. Phys. Rev. B 82, 165 305 (2010).
- [15] S.G. Sharapov, V.P. Gusynin. Phys. Rev. B 71, 125 124 (2005).
- [16] С.В. Крючков, Е.И. Кухарь. ФТТ 54, 189 (2012).
- [17] S.V. Kryuchkov, E.I. Kukhar', D.V. Zav'yalov. Physica E 53, 124 (2013).
- [18] S.V. Kryuchkov, E.I. Kukhar'. Physica B 445, 93 (2014).
- [19] I.A. Dmitriev, A.D. Mirlin, D.G. Polyakov. Phys. Rev. Lett. 91, 226 802 (2003).

- [20] N.M.R. Peres, F. Guinea, A.H. Castro Neto. Phys. Rev. B 73, 125 411 (2006).
- [21] V.P. Gusynin, S. G. Sharapov. Phys. Rev. B 73, 245411 (2006).
- [22] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, J.P. Carbotte. J. Phys.: Cond. Matter 19, 026 222 (2007).
- [23] T. Morimoto, Y. Hatsugai, H. Aoki. Phys. Rev. B 78, 073 406 (2008).
- [24] Y. Barlas, R. Cote, K. Nomura, A.H. Mac Donald. Phys. Rev. Lett. 101, 097 601 (2008).
- [25] A. Pound, J.P. Carbotte, E.J. Nicol. Phys. Rev. B 85, 125422 (2012).
- [26] U. Briskot, I.A. Dmitriev, A.D. Mirlin. Phys. Rev. B 87, 195 432 (2013).
- [27] А.Ю. Озерин. Письма в ЖЭТФ 98, 943 (2014).
- [28] Z. Jiang, E.A. Henriksen, L.C. Tung, Y.-J. Wang, M.E. Schwartz, M.Y. Han, P. Kim, H.L. Stormer. Phys. Rev. Lett. 98, 197 403 (2007).
- [29] R.S. Deacon, K.-C. Chuang, R.J. Nicholas, K.S. Novoselov, A.K. Geim. Phys. Rev. B 76, 081 406(R) (2007).
- [30] L.G. Booshehri, C.H. Mielke, D.G. Rickel, S.A. Crooker, Q. Zhang, L. Ren, E.H. Haroz, A. Rustagi, C.J. Stanton, Z. Jin, Z. Sun, Z. Yan, J.M. Tour, J. Kono. Phys. Rev. B 85, 205407 (2012).
- [31] S.A. Mikhailov. Phys. Rev. B 79, 241 309(R) (2009).
- [32] F.G. Bass, A.P. Tetervov. Phys. Rep. 140, 237 (1986).
- [33] M.M. Glazov, S.D. Ganichev. Phys. Rep. 535, 101 (2014).
- [34] К. Зеегер. Физика полупроводников. Мир, М. (1977). 616 с.
- [35] R.W. Hockney, J.W. Eastwood. Computer simulation using particles. Taylor & Francis Group, N.Y. (1988). 540 p.
- [36] И.М. Соболь. Численные методы Монте-Карло. Наука, М. (1973). 311 с.
- [37] E.H. Hwang, S. Das Sarma. Phys. Rev. B 77, 115449 (2008).