

18
Примесный графен в квантующем магнитном поле: холловская проводимость

© А.В. Пак¹, М.Б. Белоненко^{2,3}

¹ Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

² Волгоградский институт бизнеса, Волгоград, Россия

³ Entropic Inc., London, Canada

E-mail: pak.anastasia@gmail.com

(Поступила в Редакцию 10 июля 2012 г.

В окончательной редакции 10 октября 2012 г.)

В примесном графене в низкоэнергетическом приближении во внешнем магнитном поле, приложенном в направлении, перпендикулярном его плоскости, рассчитан энергетический спектр электронов, соответствующий уровням Ландау. На основании полученного дисперсионного соотношения для электронов примесного графена построена зависимость электрической проводимости от величины магнитного поля. Проанализировано поведение этой характеристики для разных значений параметров примеси, таких как потенциал гибридизации и энергия адсорбированного атома.

Работа проведена в рамках реализации госконтракта Министерства образования и науки № 14.740.11.0374, а также поддержана РФФИ (грант № 11-02-97054).

1. Введение

Графен вызывает большой интерес ученых не только благодаря перспективам использования в микроэлектронике будущего [1,2], но и из-за необычных эффектов, которые можно отнести к фундаментальной науке. Так, например, дробный и целочисленный квантовый эффект Холла в графене [3] проявляет другие закономерности, чем в хорошо изученном двумерном электронном газе. Уникальность физических характеристик графена, в частности эффекта Холла в нем, обусловлена необычным (релятивистским) законом дисперсии квазичастиц, которые переносят электрический ток [4].

Также из квантово-механических расчетов хорошо известно, что магнитное поле, приложенное к проводнику, заставляет электроны проводимости двигаться (в рамках квазиклассического рассмотрения) в ограниченной области пространства с дискретным и равномерно распределенным набором энергий. Такие проквантованные орбиты называются уровнями Ландау. Эти уровни в графене распределены неравномерно, поскольку электроны проводимости ведут себя в нем как безмассовые фермионы, скорость которых не зависит от их энергии. В частности, недавно впервые экспериментально удалось зафиксировать уровни Ландау в графене [5]. Полученные результаты прекрасно согласуются с теоретическими предсказаниями [6,7]. Необходимо только отметить, что в реальности наиболее вероятным будет получение именно примесного графена, поэтому в настоящей работе внимание уделено именно его изучению.

2. Основные уравнения

Гамильтониан для графена в длинноволновом приближении будет иметь следующий вид:

$$H = v_F(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y), \tag{1}$$

где v_F — скорость Ферми, σ_x, σ_y — матрицы Паули, p_x, p_y — компоненты квазиимпульса [8]. Отметим, что гамильтониан (1) записан вблизи одной из дираковских точек K и действует в пространстве волновых функций $\psi = (\psi_A, \psi_B)$, где ψ_A, ψ_B — волновые функции электрона, локализованного на A - и B -подрешетках соответственно. Учтем, что рядом с атомами подрешеток A, B могут находиться примеси, и запишем соответствующий гамильтониан в пространстве волновых функций $\psi = (\psi_A, \psi_B, \varphi_A, \varphi_B)$, где φ_A, φ_B — волновые функции электрона, локализованного на примеси, которая находится вблизи атома графена из A -, B -подрешетки соответственно. В этом пространстве гамильтониан будет иметь вид

$$H = \begin{pmatrix} 0 & v_F(p_x - ip_y) & V & 0 \\ v_F(p_x + ip_y) & 0 & 0 & V \\ V & 0 & \epsilon_a & 0 \\ 0 & V & 0 & \epsilon_a \end{pmatrix}, \tag{2}$$

где V — потенциал гибридизации электронов примеси и электронов графена, ϵ_a — энергия атома примеси относительно уровня Ферми.

Мы исследовали ситуацию, когда к графену перпендикулярно его плоскости приложено внешнее магнитное поле \mathbf{B} . Была выбрана калибровка $\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A}$;

$A = (-By, 0, 0)$ и учтено, что при введении электромагнитного поля импульс необходимо заменить на обобщенный импульс: $p \rightarrow p - qA/c$, где q — заряд электрона, c — скорость света (далее принята за единицу). Заметим, что $p_\alpha = -i\hbar\partial_\alpha$, и сделаем подстановку для волновых функций

$$\psi \rightarrow \varphi \exp(ikx). \quad (3)$$

Далее представим масштаб в направлении y в безразмерном виде путем ввода „магнитной длины“ $l_m = \sqrt{\hbar/qB}$: $y = l_m\bar{y}$. Введем операторы

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{y} + \partial/\partial\bar{y}), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{y} - \partial/\partial\bar{y}),$$

которые удовлетворяют коммутационным соотношениям $[a, a^+] = 1$, запишем окончательно гамильтониан в виде [9]

$$H = \begin{pmatrix} 0 & ha & V & 0 \\ ha^+ & 0 & 0 & V \\ V & 0 & \varepsilon_a & 0 \\ 0 & V & 0 & \varepsilon_a \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Заметим, что операторы $a^+(a)$ являются операторами рождения (уничтожения), $h = v_F\sqrt{2eB}$; следовательно, гамильтониан (4) можно диагонализировать в базисе волновых функций

$$\varphi = (a_1|n\rangle, a_2|n-1\rangle, a_3|n\rangle, a_4|n-1\rangle),$$

где $|n\rangle$ — собственная функция гармонического осциллятора, соответствующая n -му энергетическому уровню, и $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$. При таком выборе системы собственных функций задача о нахождении энергетического спектра сводится к нахождению собственных значений матрицы гамильтониана

$$H = \begin{pmatrix} 0 & h_n\sqrt{n} & V & 0 \\ h_n\sqrt{n} & 0 & 0 & V \\ V & 0 & \varepsilon_a & 0 \\ 0 & V & 0 & \varepsilon_a \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Легко убедиться, что энергетический спектр задачи будет задаваться следующими соотношениями, которые соответствуют четырем уровням Ландау в примесном графене:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\varepsilon_a + \frac{1}{2}\varepsilon_n + \frac{1}{2}(\varepsilon_a^2 - 2\varepsilon_a\varepsilon_n + \varepsilon_n^2 + 4V^2)^{1/2} \\ \frac{1}{2}\varepsilon_a + \frac{1}{2}\varepsilon_n - \frac{1}{2}(\varepsilon_a^2 - 2\varepsilon_a\varepsilon_n + \varepsilon_n^2 + 4V^2)^{1/2} \\ \frac{1}{2}\varepsilon_a - \frac{1}{2}\varepsilon_n + \frac{1}{2}(\varepsilon_a^2 + 2\varepsilon_a\varepsilon_n + \varepsilon_n^2 + 4V^2)^{1/2} \\ \frac{1}{2}\varepsilon_a - \frac{1}{2}\varepsilon_n - \frac{1}{2}(\varepsilon_a^2 + 2\varepsilon_a\varepsilon_n + \varepsilon_n^2 + 4V^2)^{1/2} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Здесь $\varepsilon_n = \hbar\omega_c\sqrt{n}$, $n = 0, 1, 2, \dots$, ω_c — циклотронная частота, $\omega_c = v_F\sqrt{\frac{2eB}{\hbar}}$ [10], где e — заряд электрона, B — индукция внешнего магнитного поля.

Формула Кубо для расчета проводимости имеет следующий вид [11]:

$$\chi_{ij} = \frac{e^2\hbar}{\Omega} \sum_{pn \neq p'n'} \frac{(f_{pn} - f_{p'n'}) \text{Im}(\langle pn|v_i|p'n'\rangle\langle p'n'|v_j|pn\rangle)}{(E_{pn} - E_{p'n'})(E_{pn} - E_{p'n'} + i\delta^+)}, \quad (7)$$

где $\delta^+ \rightarrow 0^+$, Ω — поверхность Берри [12], E_{pn} — энергетические уровни рассматриваемой системы, f_{pn} — функция распределения Ферми–Дирака, имеющая вид

$$f_{pn} = \frac{1}{\exp[\beta(E_n(p) - \mu)] + 1},$$

μ — химический потенциал.

В представлении Гейзенберга оператор скорости будет иметь вид

$$v_j = \frac{1}{i\hbar} [r_j, H], \quad j = \{x, y, z\}.$$

В матричном представлении операторы скорости v_x и v_y имеют следующий вид:

$$v_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad v_y = i \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

В нашей задаче $E_y = 0$, $\mathbf{E} = (0, E, 0)$.

3. Результаты численного анализа

Найденные зависимости недиагональной проводимости χ_{xy} от величины магнитного поля были проанализированы численно. Так, на рис. 1 представлена типичная зависимость проводимости от величины индукции магнитного поля для различных значений энергии примесных атомов.

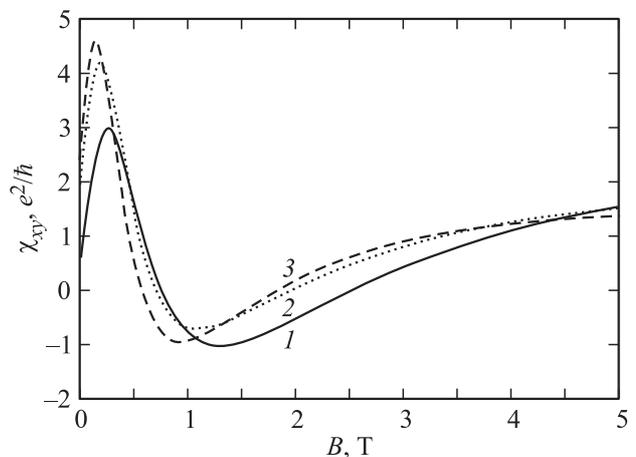


Рис. 1. Зависимость проводимости от величины индукции магнитного поля для значений энергии примесных атомов $\varepsilon_a = -4$ (1), -5 (2) и -6 eV (3).

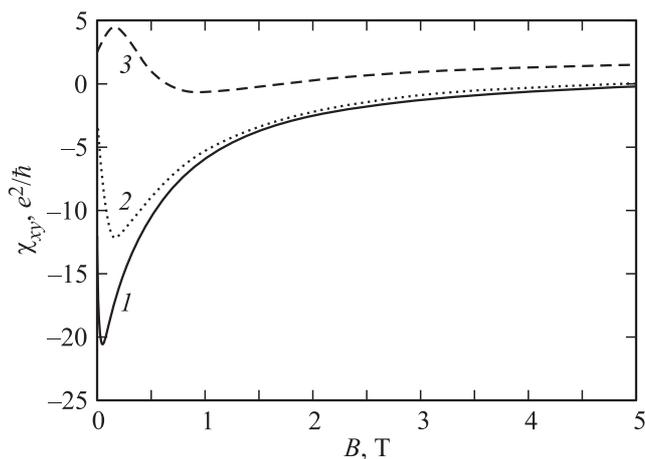


Рис. 2. Зависимость проводимости от величины индукции магнитного поля для значений потенциала гибридизации примесного атома и атома графеновой решетки $V = -0.5$ (1), -0.7 (2) и -1.43 eV (3).

Отметим, что такой характер проводимости связан с движением электронов в магнитном поле и сложным характером уровней Ландау (6). Участок с отрицательной проводимостью, на наш взгляд, имеет ту же природу, что и описанный в работах [9,10], и связан с переходами между уровнями Ландау.

Зависимость проводимости от величины индукции магнитного поля для различных значений потенциала гибридизации примесного атома представлена на рис. 2.

Отметим, что характер зависимости аналогичен представленному на рис. 1. Участок с отрицательной проводимостью также определяется механизмом, описанным в работах [9,10], и связан с переходами между уровнями Ландау. Более сильное влияние потенциала гибридизации на проводимость можно связать с изменением подвижности электронов и строением уровней Ландау согласно (6). Отметим, что аналогичные эффекты наблюдались и в других системах со сложным электронным спектром [11,12].

4. Заключение

Сформулируем основные выводы, полученные в настоящей работе.

1. В примесном графене в присутствии постоянного внешнего магнитного поля, приложенного в направлении, перпендикулярном плоскости графена, вычислены положения уровней Ландау.

2. С учетом уровней Ландау в примесном графене была исследована зависимость электрической проводимости от индукции магнитного поля. Наличие примесей оказывает существенное влияние на данную характеристику.

3. При увеличении потенциала гибридизации электронных облаков графена и атома примеси участок с

отрицательной проводимостью уменьшается, что может быть связано с влиянием магнитного поля на гибридные уровни системы электроны проводимости–электроны примеси.

Список литературы

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. *Nature* **438**, 197 (2005).
- [3] J.N. Fuchs, P. Lederer. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 016 803 (2007).
- [4] M.L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 266 405 (2006).
- [5] D.L. Miller, K.D. Kubista, G.M. Rutter, M. Ruan, W.A. de Heer, P.N. First, J.A. Stroscio. *Science* **324**, 924 (2009).
- [6] F. Guinea, A.H. Castro Neto, N.M. Peres. *Phys. Rev. B* **73**, 245 426 (2006).
- [7] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, J.P. Carbotte. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 157 402 (2007).
- [8] M.A.H. Vozmediano, M.I. Katsnelson, F. Guinea. *Phys. Rep.* **496**, 109 (2010).
- [9] N.M.R. Peres, E.V. Castro. *J. Phys.: Cond. Matter* **19**, 406 231 (2007).
- [10] G.D. Mahan. *Many particle physics*. Plnum, N.Y. (1990). 1043 p.
- [11] B. Zhou, L. Ren, Sh. Shen. *Phys. Rev. B* **73**, 165 303 (2006).
- [12] Y. Zhang, J.W. Tan, H.L. Stormer, P. Kim. *Nature* **438**, 201 (2005).