01

Динамическое рождение щели в монослойном графене

© С.А. Ктиторов, Сяосинь Чэн

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
Государственный электротехнический университет, Санкт-Петербург

В окончательной редакции 13 января 2010 г.

Изучена возможность нестабильности бесщелевого состояния монослойного графена вследствие динамического нарушения симметрии, вызванного электрон-фононным взаимодействием.

Бесщелевой характер электронного спектра в однослойном графене считается надежно установленным [1]. Однако в ряде работ утверждается, что в некоторых случаях удается обнаружить небольшую щель [2]. Появление щели обычно объясняют взаимным смещением подрешеток. Возникает вопрос: какова природа этого смещения? Одна из возможностей — это влияние структурных дефектов. Наша цель здесь состоит в том, чтобы изучить альтернативную возможность: динамическое нарушение симметрии, сопровождающееся возникновением щели (массы) благодаря достаточно сильному электрон-фононному взаимодействию. Аналогичное явление хорошо изучено в теории сверхпроводимости [3], квантовой теории поля [4], теории бесщелевых полупроводников [5] и теории органических квазиодномерных проводников [6]. Заметим, что размерность системы играет решающую роль в этой проблеме. Мы здесь покажем, каким образом сильное электрон-фононное взаимодействие может модифицировать спектр 2-мерной (две пространственные координаты плюс время) электронной системы графена. Графен представляет собой моноатомный слой атомов углерода, образующих двумерный гексагональный кристалл типа „пчелиные соты“, состоящий из двух подрешеток. Зона Бриллуэна ограничена правильным шестиугольником; в углах шестиугольника расположены чередующиеся критические точки K и K'. Точки K и K' не могут быть совмещены преобразованиями симметрии. В окрестностях этих точек зонный спектр $\epsilon(k)$ имеет вид двухполостного конуса, т.е. является бесщелевым, что вытекает из симметрии решетки. Следовательно, для возникновения щели необходимо нарушение симметрии. Явление, которые мы здесь изучаем, относится к категории динамического нарушения симметрии. Это частный случай спонтанного нарушения симметрии, который не проявляет себя на уровне теории самосогласованного поля Ландау, а требует учета, как минимум, однопетлевых поправок теории возмущений. Хорошо известным примером является теория сверхпроводимости БКШ. Лагранжиан дираковских электронов, взаимодействующих с фононами, имеет вид:

$$L=\sum_{\mu=1}^{2}\sum_{a=1}^{2}\left(i\hbar v_F\overline{\psi}_a\gamma_\mu\partial_\mu\psi_a-i\hbar\overline{\psi}_a\gamma_0\partial_0\psi_a-g\varphi\overline{\psi}_a\psi_a\right)+\rho\omega_0^2\varphi^2/2, \qquad (1)$$

где $\gamma_x=i\sigma_y$, $\gamma_y=-i\sigma_x$, $\gamma_0=\sigma_z$ — матрицы Паули, ψ — 2-спинор (аналогичен 2-вектору, но в спинорном пространстве), $\overline{\psi}_a=\gamma_0\psi^\dagger$ — сопряженный по Дираку спинор, т.е. эрмитово-сопряженный и умноженный на гамма-матрицу, ρ— двумерная массовая плотность решетки, φ — скалярное поле, представляющее оптический фонон со спектром $\omega(k_x,k_y)=\omega_0$, g — константа электрон-фононного взаимодействия, v_F — скорость электронов вблизи вершины конуса, $\partial_\mu=\partial/\partial x_\mu$, $\partial_0=\partial/\partial t$.

Стандартная процедура метода самосогласованного поля [7] ведет к эффективному действию для классического поля φ:

$$S=-\frac{\rho\omega_0^2}{2}\int d^2x\varphi^2+tr\int\limits_0^\beta d\tau\int d^2x\left[\ln\left(\sum_{\mu=1}^{2}v_F\gamma^\mu\hat{p}_\mu+i\hbar\gamma_0\partial_0+g\varphi\right)\right]. \qquad (2)$$

Условие стационарности действия

$$\frac{\delta\tilde{S}}{\delta\phi}=0 \qquad (3)$$

дает уравнение самосогласования:

$$\phi=\frac{1}{(2\pi)^2}\,\tilde{T}\sum_{s=-\infty}^{\infty}\int^{\tilde{\Lambda}}d^2k\,\frac{\tilde{g}\phi}{-\omega_s^2+k^2+\tilde{g}^2\phi^2}. \qquad (4)$$

Мы ввели безразмерные переменные и параметры:

$$\overline{\Psi} = \overline{\psi} a, \quad \Psi = \psi a, \quad k_\mu = k_\mu a, \quad \phi = \frac{\varphi}{a}, \quad \Omega^2 = \frac{M\omega_0^2 a}{v_F \hbar},$$

$$\tilde{g} = \frac{g}{v_F \hbar \Omega}, \quad \tilde{T} = Ta/\hbar v_F.$$

Суммируя по мацубаровским частотам

$$\omega_s = i(2s+1)\pi\tilde{T}, \tag{5}$$

мы получаем

$$1 = \frac{\hat{g}}{(2\pi)^2} \int^{\tilde{\Lambda}} dk \, \frac{k}{2\sqrt{k^2 + \tilde{g}^2\phi^2}} \tanh \frac{\sqrt{k^2 + \tilde{g}^2\phi^2}}{2\tilde{T}}, \tag{6}$$

где $\tilde{\Lambda} = \Lambda a$ — безразмерный параметр, соответствующий границе области применимости линеаризованного зонного спектра; по порядку величины это значение волнового вектора вблизи границы $\tilde{\Lambda} = \pi$. Выполнив интегрирование, мы получаем следующее уравнение самосогласования:

$$\frac{(2\pi)^2}{\hat{g}} = \tilde{T} \ln \left[\cosh \left(\frac{\sqrt{\Lambda^2 + \hat{g}^2\phi^2}}{2\tilde{T}} \right) \right] - \tilde{T} \ln \left[\cosh \left(\frac{\hat{g}\phi}{2\tilde{T}} \right) \right]. \tag{7}$$

Графическое решение этого уравнения проиллюстрировано на рис. 1. В случае одномерной системы эта формула дает хорошо известный результат для динамического рождения массы $m \propto \varphi_c = \Delta \exp(-1/N_g)$, где параметр Δ пропорционален ширине электронной разрешенной полосы. Этот результат может быть применен к случаю углеродных нанотрубок. Углеродные трубки являются квазиодномерными объектами, поскольку движение в поперечном по отношению к оси направлении ограничено; соответствующие уровни размерного квантования отделены щелью от энергии основного состояния и, следовательно, не проявляют себя в низкоэнергетических процессах. В этом случае динамическое рождение массы (щели) приосходит при сколь угодно слабом электрон-фононном взаимодействии. Совершенно другая ситуация имеет место в случае графена. В этом случае имеется пороговое

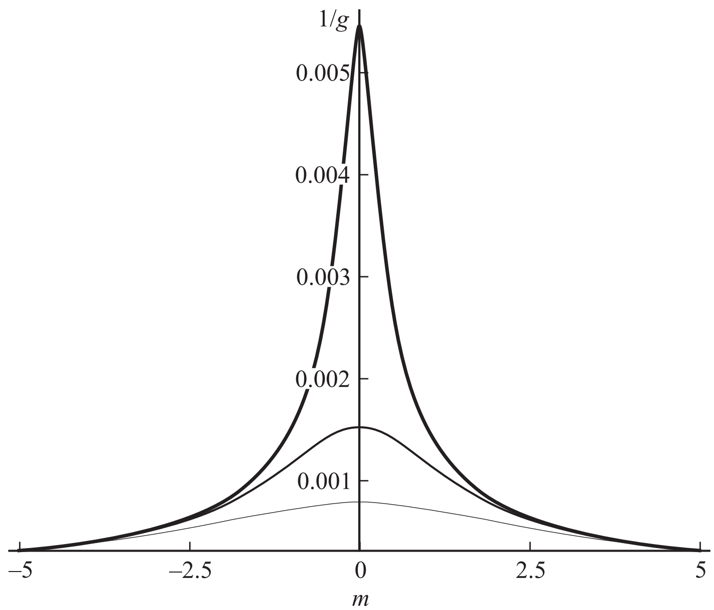

Рис. 1. Графическое решение уравнения самосогласования. По оси абсцисс отложена безразмерная масса (щель) m, по оси ординат — обратная безразмерная константа связи g^{-1}.

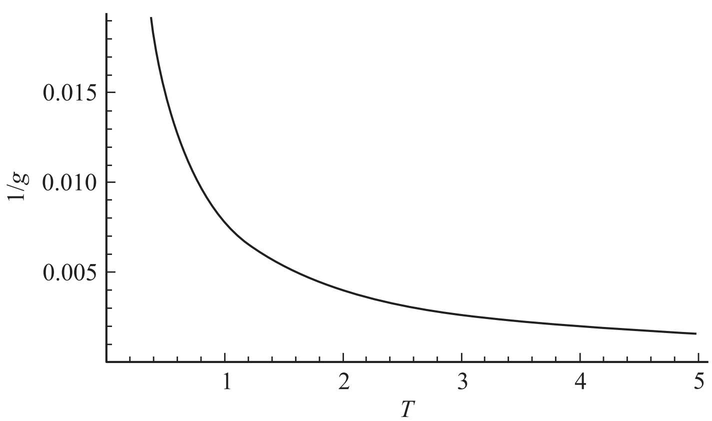

Рис. 2. Граница раздела щелевого и бесщелевого состояний в плоскости обратная константа связи — температура.

значение безразмерной константы взаимодействия. Щель возникает при $\hat{g} > \hat{g}_{cr} = (2\pi)^2/\tilde{\Lambda}$:

$$m \propto \Delta(g - g_c). \tag{8}$$

Приравняв в уравнении (7) величину щели нулю, мы получаем зависимость порогового значения безразмерной константы взаимодействия от температуры (рис. 2). Таким образом, мы показали, что при определенных условиях достаточно сильное электро-фононное взаимодействие может привести к динамическому рождению щели в электронном спектре моноатомного графена. Присутствие щели является необходимым условием для работы большинства электронных приборов, поэтому понимание природы щели важно для возможных приложений.

Список литературы

[1] *Castro Neto A.H., Guinea F., Perez N.M.R., Novoselov K.S., Geim A.K.* // Rev. Mod. Phys. 2009. V. 81. P. 109.
[2] *Lherbier A., Blase X., Niquet Y.M., Triozon F., Roche S.* // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. P. 036808-1.
[3] *Шриффер Дж.* Теория сверхпроводимости. М. Наука, 1970.
[4] *Gross D., Neveu A.* // Phys. Rev. D. 1974. V. 10. P. 3235.
[5] *Ктиторов С.А., Петров Ю.В., Шалаев Б.Н.* // ФТТ. 1987. Т. 29. С. 3357.
[6] *Su W.P., Schrieffer J.R., Heeger A.J.* // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 42. P. 1698.
[7] *Zinn-Justen J.* Quantum Field Theory and Critical Phenomena. Oxford: Clarendon Press, 1996.