

01

Исследование косвенного взаимодействия в квантовых точках бислоя графена в рамках $s-d$ -модели

© М.Б. Белоненко, Н.Г. Лебедев, А.В. Пак

Entropique Inc., London, N6J 3S2, ON, Canada
Волгоградский институт бизнеса
Волгоградский государственный университет
E-mail: pak.anastasia@gmail.com

Поступило в Редакцию 22 февраля 2011 г.

В рамках $s-d$ -модели рассчитаны особенности РККИ-взаимодействия в графеновых квантовых точках в виде треугольников. Теоретические модельные расчеты показали, что ввиду ограниченности электронного спектра дираковским приближением зависимость энергии обменного взаимодействия от расстояния между спинами перестает носить периодический характер.

Недавний успех экспериментов в производстве „чешуек“ одно-слойного графена на различных поверхностях сделал графен новой платформой для работ теоретической и вычислительной физики. Большая часть недавних исследований была сосредоточена на эффектах, вызванных спецификой зонной структуры графена вблизи уровня Ферми (E_F): электроны и дырки ведут себя подобно безмассовым частицам (дираковские фермионы) из-за линейного закона дисперсии в окрестности определенных (дираковских) точек зоны Бриллюэна. В свою очередь дальнейшее развитие таких исследований вызвало интерес к изучению пространственно-ограниченных кластеров графена — аналогов квантовых точек [1]. Треугольная форма двумерных кластеров графена особенно интересна, потому что в случае свободных электронов она формирует, возможно, самую устойчивую и регулярную структуру сверхрешетки всей системы [2]. Кроме того, треугольная форма предпочтительна в двумерных металлических системах [3] и в кластерах плазмы [4]. Отметим, что для четырехвалентных элементов, треугольные квантовые точки наблюдались в кремнии [5]. Логично предположить, что такие формы могут наблюдаться и для углерода, это

подтверждено тем фактом, что в графене равносторонние треугольники могут быть вырезаны с двумя устойчивыми краевыми структурами, зигзагообразными и кресельными краями.

Особенно интересным представляется исследование электрических и магнитных свойств графена, измененных в результате присоединения к графеновым листам различных атомов и молекул [6].

В этой работе мы исследовали РККИ (Рудермана, Киттеля, Касуя, Иосиды) взаимодействие [7–10] в квантовых точках графена посредством косвенного взаимодействия с электронами в зоне проводимости графенового образца. Форму квантовой точки рассматривали в виде треугольника.

В работе рассмотрен однослойный и двухслойный графен, как чистый, так и примесный, состоящий из двух подрешеток a и b в приближении Хюккеля [11], принимая во внимание динамику только π -электронов. В этой модели учитываются кинетическая энергия электронов и энергия электронов примеси и пренебрегается энергией электронов внутренних оболочек атомов и электронов, участвующих в образовании химических связей σ -типа, а также энергией колебаний атомов кристаллической решетки.

Гамильтониан системы имеет вид, стандартный для s – d -обменных моделей [12]:

$$H = H_0 + H_{int}, \quad (1)$$

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} \tilde{\varepsilon}_k b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} + \omega_0 \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{S}_{\mathbf{R}}^z,$$

$$H_{int} = \sum_{pp'} J(\mathbf{q}) \sum_{\sigma\sigma'} S_q \sigma_{\sigma\sigma'} a_{p\sigma}^+ a_{p'\sigma'} + \sum_{pp'} J(\mathbf{q}) \sum_{\sigma\sigma'} S_q \sigma_{\sigma\sigma'} b_{p\sigma}^+ b_{p'\sigma'},$$

где $S_q = \sum_{\mathbf{R}} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}) \mathbf{S}_{\mathbf{R}}$; $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$; $J(\mathbf{q})$ — фурье-образ потенциала взаимодействия d -примеси с электронами в зоне проводимости; $\sigma_{\sigma\sigma'}$ — матричные элементы матрицы Паули; ω_0 определяет энергию спинового момента и пропорциональна приложенному вдоль оси z внешнему постоянному магнитному полю; $\mathbf{S}_{\mathbf{R}}$ — вектор спина примеси, находящейся в точке \mathbf{R} ; $a_{k\sigma}^+$, $a_{k\sigma}$, $b_{k\sigma}^+$, $b_{k\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов в зоне проводимости со спинами σ и с волновыми векторами \mathbf{k} , которые имеют законы дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_k$ и $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) = \tilde{\varepsilon}_k$ соответственно. Для биграфена $\varepsilon_k = -\tilde{\varepsilon}_k$.

Закон дисперсии электронов двойного слоя графена можно представить в таком виде [13]:

$$E_k^{\pm\pm}(V) = \pm \sqrt{\varepsilon_{k,adsorb}^2 + \frac{t_{\perp}^2}{2} + \frac{V^2}{4} \pm \sqrt{\frac{t_{\perp}^4}{4} + (t_{\perp}^2 + V^2)\varepsilon_{k,adsorb}^2}}, \quad (2)$$

где $\varepsilon_{k,adsorb}$ — зонная структура кристаллической решетки графена, измененная в результате присоединения различных атомов, t_{\perp} — интеграл перескока электронов между слоями (~ 0.3 eV), V — электростатический потенциал взаимодействия между слоями графена.

Закон дисперсии электронов для однослойного графена с присоединенными одиночными атомами имеет следующий вид [14]:

$$\varepsilon_{k,adsorb} = \frac{1}{2} \left[\varepsilon_a + \varepsilon_k \pm \sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_k)^2 + 4 \frac{N_{imp}}{N} |V_{ka}|^2} \right]. \quad (3)$$

Здесь ε_a — энергия уровня присоединенного атома, ε_k — зонная структура однослойного графена [11], V_{ka} — потенциал гибридизации электронов кристаллита и электронов примеси, N — число элементарных ячеек, N_{imp} — число атомов примесей.

Обозначим $\frac{N_{imp}}{N} |V_{ka}|^2 = \alpha$ и используем при построении необходимых зависимостей константы обменного взаимодействия от расстояния между квантовыми точками.

В качестве дисперсионного соотношения для ограниченных областей графена использовалось соотношение [1,15]:

$$\varepsilon_{m,n} = \varepsilon_0(n^2 + m^2 - nm), \quad (4)$$

где $\varepsilon_0 = \frac{4\pi^2 t}{9N}$, N — число атомов в квантовой точке, t — прыжковый интеграл между ближайшими соседями, который в данной работе полагался равным 2.6 eV, квантовые числа n и m должны удовлетворять следующему условию: $m \geq 1$, $n \geq 2m$ [1].

Метод Фрелиха расчета косвенных взаимодействий [16] строится на предположении, что для матричных элементов операторов энергии выполняется неравенство $|H_{int}| \ll |H_0|$, и состоит из двух этапов. Первый — это переход от представления (1) к новому представлению с помощью унитарного преобразования $U = \exp(-L)$, где L — антиэрмитов оператор, удовлетворяющий условию:

$$H_{int} + [H_0, L] = 0. \quad (5)$$

В новом представлении гамильтониан H приобретает форму:

$$H \rightarrow \tilde{H} = H_0 + \frac{1}{2}[H_{int}, L] + O(H_{int}^3). \quad (6)$$

Решением операторного уравнения (3) будет следующее выражение [1]:

$$L = \frac{1}{i\hbar} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t} H_{int}(t) dt, \quad H_{int}(t) = \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) H_{int} \exp\left(-\frac{iH_0 t}{\hbar}\right).$$

Второй этап заключается в усреднении выражения (6) для преобразованного гамильтониана \tilde{H} по состояниям поля-переносчика взаимодействия: в усреднении с равновесной матрицей плотности для электронной подсистемы. Так что член второго порядка теории возмущений $H_{ss} = \frac{1}{2}\langle [H_{int}, L] \rangle$, где угловые скобки обозначают среднее с равновесной матрицей плотности для электронной подсистемы, в разложении (6) перестает зависеть от операторов рождения и уничтожения электронов, но сохраняет зависимость от спиновых операторов различных атомов примеси и поэтому имеет смысл оператора косвенного взаимодействия.

После элементарных преобразований оператор L имеет вид:

$$\begin{aligned} L = \sum_{pp'} J(\mathbf{q}) \sum_{\sigma} \left\{ \frac{(S_q^x - iS_q^y) a_{p,\sigma}^+ a_{p',-\sigma}}{\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p + \hbar\omega_0} + \frac{(S_q^x - iS_q^y) b_{p,\sigma}^+ b_{p',-\sigma}}{\tilde{\varepsilon}_{p'} - \tilde{\varepsilon}_p + \hbar\omega_0} \right. \\ + \frac{(S_q^x + iS_q^y) a_{p,-\sigma}^+ a_{p',\sigma}}{\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p - \hbar\omega_0} \\ + \frac{(S_q^x + iS_q^y) b_{p,-\sigma}^+ b_{p',\sigma}}{\tilde{\varepsilon}_{p'} - \tilde{\varepsilon}_p - \hbar\omega_0} + \frac{S_q^z a_{p,\sigma}^+ a_{p',\sigma}}{\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p} + \frac{S_q^z b_{p,\sigma}^+ b_{p',\sigma}}{\tilde{\varepsilon}_{p'} - \tilde{\varepsilon}_p} \\ \left. + \frac{S_q^z a_{p,-\sigma}^+ a_{p',-\sigma}}{\varepsilon_{p'} - \varepsilon_p} + \frac{S_q^z b_{p,-\sigma}^+ b_{p',-\sigma}}{\tilde{\varepsilon}_{p'} - \tilde{\varepsilon}_p} \right\}. \quad (7) \end{aligned}$$

Подстановка (7) в (6) и термодинамическое усреднение дают:

$$\begin{aligned}
 H_{s,s} = & \sum_{p_1 p_2 R_1 R_2} M_1 \exp(i(p_1 - p_2)(R_1 - R_2)) S_{R_1}^- S_{R_2}^- \\
 & + \exp(i(p_2 - p_1)(R_1 - R_2)) S_{R_1}^- S_{R_2}^+ \\
 & + \sum_{p_1 p_2 R_1 R_2} M_3 \exp(i(p_1 - p_2)(R_1 - R_2)) S_{R_1}^+ S_{R_2}^+ \\
 & + \exp(i(p_2 - p_1)(R_1 - R_2)) S_{R_1}^+ S_{R_2}^- + \sum_{p_1 p_2 R} M_2 S_z^R, \quad (8)
 \end{aligned}$$

где введены следующие обозначения констант косвенного обменного взаимодействия:

$$\begin{aligned}
 M_1 = & \frac{1}{2} J_{p_1 - p_2} J_{p_2 - p_1} \left\{ \frac{\exp(-\beta \varepsilon_{p_1}) - \exp(-\beta \varepsilon_{p_2})}{\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2} + \hbar \omega_0} \right. \\
 & \left. + \frac{\exp(-\beta \tilde{\varepsilon}_{p_1}) - \exp(-\beta \tilde{\varepsilon}_{p_2})}{\tilde{\varepsilon}_{p_1} - \tilde{\varepsilon}_{p_2} + \hbar \omega_0} \right\}, \\
 M_2 = & \hbar J_{p_1 - p_2} J_{p_2 - p_1} \left\{ \frac{2\hbar \omega_0 \exp(-\beta \tilde{\varepsilon}_{p_1})(1 - \exp(-\beta \tilde{\varepsilon}_{p_2}))}{(\hbar \omega_0)^2 - (\tilde{\varepsilon}_{p_2} - \tilde{\varepsilon}_{p_1})^2} \right. \\
 & \left. + \frac{2\hbar \omega_0 \exp(-\beta \tilde{\varepsilon}_{p_1})(1 - \exp(-\beta \tilde{\varepsilon}_{p_2}))}{(\hbar \omega_0)^2 - (\tilde{\varepsilon}_{p_2} - \tilde{\varepsilon}_{p_1})^2} \right\}, \\
 M_3 = & \frac{1}{2} J_{p_1 - p_2} J_{p_2 - p_1} \left\{ \frac{\exp(-\beta \varepsilon_{p_1}) - \exp(-\beta \varepsilon_{p_2})}{\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2} - \hbar \omega_0} \right. \\
 & \left. + \frac{\exp(-\beta \tilde{\varepsilon}_{p_1}) - \exp(-\beta \tilde{\varepsilon}_{p_2})}{\tilde{\varepsilon}_{p_1} - \tilde{\varepsilon}_{p_2} - \hbar \omega_0} \right\}.
 \end{aligned}$$

Последнее слагаемое в (6) описывает хорошо известный в теории магнитного резонанса сдвиг Найта [15], а другие слагаемые отвечают за косвенное взаимодействие.

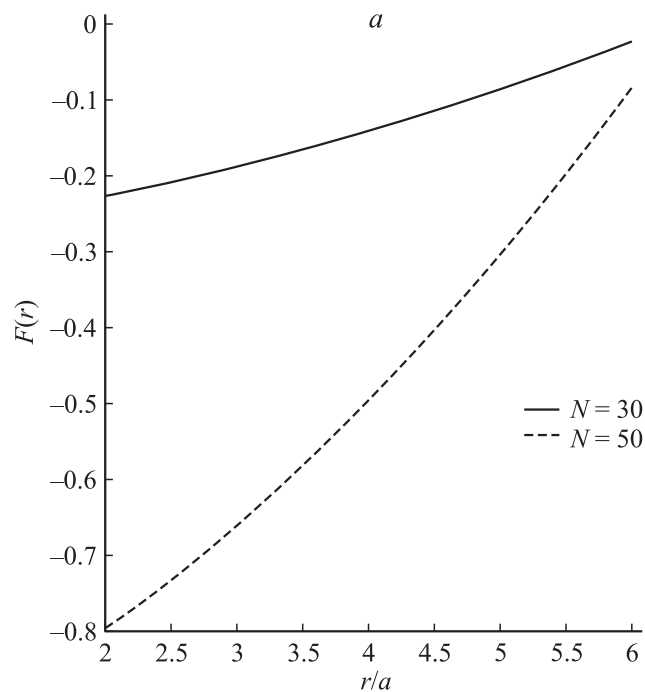
Обменное взаимодействие локализованных спинов примесей будем рассматривать в прямом пространстве, для этого применим обратное преобразование Фурье (В обратном пространстве интегрирование велось по зоне Бриллюэна):

$$J_{eff} = \int_0^{\frac{\pi}{3\alpha}} dk_{x1} \int_0^{\frac{\sqrt{3}}{3}k_{x1}} dk_{y1} \int_0^{\frac{\pi}{3\alpha}} dk_{x2} \times \int_0^{\frac{\sqrt{3}}{3}k_{x2}} M_{1,3}(k_{x1}, k_{y1}, k_{x2}, k_{y2}) \exp\{i(k_{x1} - k_{x2})x\} \exp\{i(k_{y1} - k_{y2})y\} dk_{y2}. \quad (9)$$

Отметим, что в данной зависимости уже неявно содержится осциллирующая часть и, оценивая интегралы методом перевала, можно показать наличие экспоненциального спада, т.е. сильного уменьшения величины косвенного взаимодействия при увеличении расстояний между примесями. Заметим, что подобное поведение всегда характерно для механизмов косвенного обмена через электроны проводимости и обусловлено локальным характером взаимодействия электронов с атомами примесей.

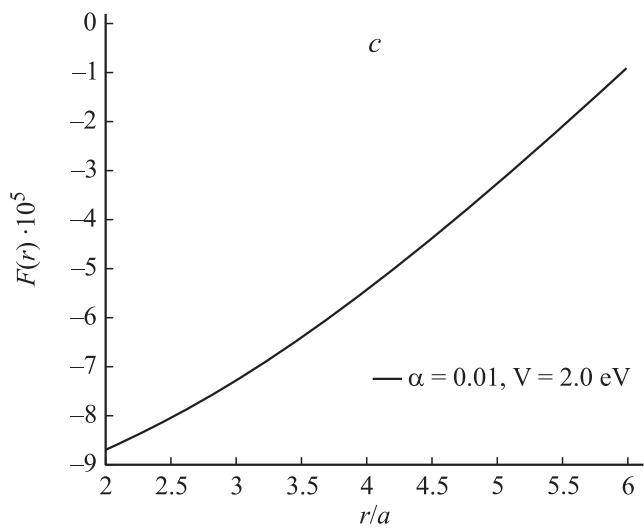
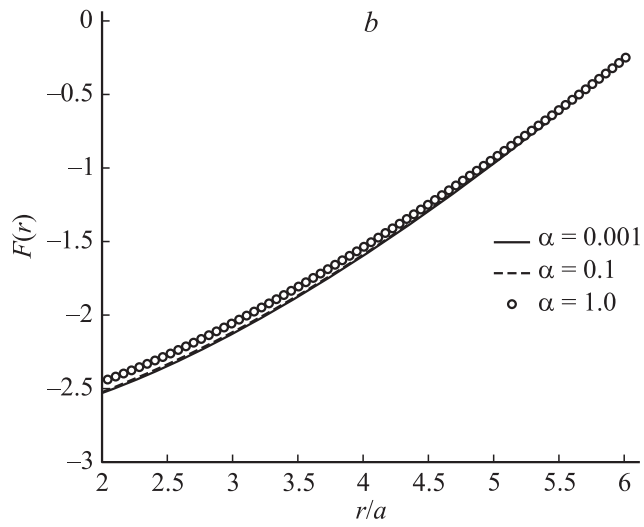
Зависимость константы обменного взаимодействия от расстояния между квантовыми точками графена представлена на рисунке. Из приведенной зависимости видно, что, в отличие от случая пространственного неограниченного образца РККИ, взаимодействие не носит осциллирующего характера, что связано как с характером электронного спектра системы, так и с ограничением области интегрирования в (9). По-видимому, это является хорошим примером того, как квантование спектра (4), связанное с ограниченностью в пространстве образца, изменяет характер косвенного взаимодействия.

Зависимость распределения обменного взаимодействия от расстояния для различных значений параметра α , по сути отображающего величину энергии гибридизации, т.е. тип атома примеси, представлена на рисунке. Как видно, характер кривой качественно не изменился. С практической точки зрения это может быть полезным при создании устройства памяти на основе примесного биграфена.



Распределение косвенного взаимодействия квантовых точек в зависимости от расстояния между ними, выраженного в единицах постоянной решетки: a — для различного количества квантовых точек N , b — для различных значений параметра α ; c — посредством примесного бислоя графена. Расстояние между локализованными спинами выражается в единицах постоянной решетки, $a = 2.49 \text{ \AA}$.

Зависимость величины константы обменного взаимодействия от расстояния между квантовыми точками для бислоя графена представлена на рисунке, b . Заметим, что вид кривой аналогичен зависимости для однослойного примесного графена (см. рисунок, c). На наш взгляд, это связано с квантованием спектра электронов проводимости и с ограничением области интегрирования в (9). Данный факт может оказаться полезным в приложениях и позволяет управлять величиной энергии косвенного взаимодействия спинов внешним постоянным



Продолжение рисунка.

электрическим полем. Необходимо отметить, что здесь рассмотрена ситуация, когда примесные спины находились внутри квантовых точек, но на расстояниях, больших, чем постоянная решетки a , т.е. $a < r < l$, где l — размер квантовой точки.

Следует подчеркнуть, что данная работа проведена впервые. Особенность РККИ-взаимодействия примесных квантовых точек на поверхности двухслойного графена, исследуемого в данной работе, заключается в том, что в связи с ограничением электронного спектра только длинноволновым приближением характер косвенного взаимодействия спинов примесных атомов перестает носить осциллирующий характер. Не нарушая общности, в качестве примеси можно использовать атомы щелочных металлов.

Работа выполнена в рамках ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 годы (проекты № НК-16 (3) и П-1145).

Список литературы

- [1] Akola J., Heiskanen H.P., Manninen M. // ArXiv: 0804.0918v1. 2008.
- [2] Brack M., Blaschke J., Greagh S.C., Magner A.G., Meier P., Reimann S.M. // Z. Phys. D. 1997. V. 40. P. 276.
- [3] Jenssens E., Tanaka H., Neukermans S., Silverans R.E., Lievens P. // New J. Phys. 2003. V. 5. P. 46.
- [4] Reimann S.M., Koskinen M., Helgesson J., Lindelof P.E., Manninen M. // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 8111.
- [5] Lai M.Y., Wang Y.L. // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 164.
- [6] Power S.R., de Menezes V.M., Fagan S.B., Ferreira M.S. // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 235424.
- [7] Abanin D.A., Shytov A.V., Levitov L.S. // ArXiv: 1004.3678v2. 2010.
- [8] Cheainov V.V., Syljuasen O., Altshuler B.L., Fal'ko V.I. // ArXiv: 1002.2330v1. 2010.
- [9] Uchoa B., Rappoport T.G., Castro Neto A.H. // ArXiv: 1006.2512v1. 2010.
- [10] Black-Schaffer Annica M. // Phys. Rev. B. 2010. V. 82. P. 073409.
- [11] Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001.
- [12] Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И., Скрябин Ю.Н. Магнетизм коллективизированных электронов. М.: Физматлит, 1994.

- [13] *Stauber T., Peres N.M.R., Castro Neto A.H.* // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. P. 115425.
- [14] *Belonenko M.B., Popov A.V., Lebedev N.G., Pak A.V., Zhukov A.V.* // Phys. Lett. A. 2011. V. 375. P. 946.
- [15] *Borghis F.E., Papas C.H.* Encyclopedia of Physics / Ed. by S. Flücke. Berlin: Springer, 1957.
- [16] *Уайт Р.* Квантовая теория магнетизма. М.: Мир, 1985.