

## Моделирование методом Монте-Карло фотоэлектрического эффекта в черном фосфоре

© Д.В. Завьялов<sup>1</sup>, В.И. Конченков<sup>1,2</sup>, Е.С. Сивашова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия

<sup>2</sup> Волгоградский государственный социально-педагогический университет, Волгоград, Россия

E-mail: kontchenkov@yandex.ru

Поступила в Редакцию 18 мая 2023 г.

В окончательной редакции 2 сентября 2023 г.

Принята к публикации 30 октября 2023 г.

При помощи моделирования методом Монте-Карло численно исследован фотоэлектрический эффект в черном фосфоре в приближении постоянного времени релаксации. Показано влияние анизотропии энергетического спектра на проявление эффекта. Согласно данным расчета, решающую роль в возникновении тока увлечения играет неупругое рассеяние электронов.

**Ключевые слова:** фосфорен, фотоэлектрический эффект, метод Монте-Карло.

DOI: 10.61011/FTT.2023.12.56757.5045k

Черный фосфорен, экспериментально полученный в 2014 г., имеет анизотропный энергетический спектр [1]:

$$\varepsilon = \sqrt{v_F^2 p_x^2 + (\Delta + up_y^2)^2}. \quad (1)$$

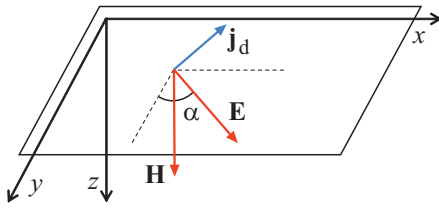
Здесь  $\Delta$  — полуширина запрещенной зоны, в зависимости от способа изготовления образца фосфорена этот параметр принимает значения  $\Delta = 0.15\text{--}1.0\text{ eV}$  [2]. Параметры  $v_F$  и  $u$  связаны с компонентами тензора эффективной массы:  $v_F = \sqrt{\Delta/m_x}$ ,  $u = 1/(2m_y)$ . Согласно расчетам [2], для черного фосфорена тензор эффективной массы

$$m = \begin{pmatrix} 1.2854 & 0 \\ 0 & 0.1255 \end{pmatrix} m_c,$$

$m_e$  — масса свободного электрона. Черный фосфорен представляет собой полупроводник с прямой зоной и относится к так называемым диракоподобным материалам: вдоль одного направления (ось  $OX$ ) движение носителей заряда подобно движению в графене, зависимость энергии от соответствующей компоненты импульса линейна, а зависимость энергии от перпендикулярной компоненты квазиимпульса (в направлении оси  $OY$ ) квадратична. Представляет интерес исследование проявлений анизотропии энергетического спектра рассматриваемого материала в кинетических эффектах, одним из которых является эффект увлечения носителей тока фотонами [3,4]. Данный эффект, обусловленный передачей импульса фотона электронной подсистеме, в рамках квазиклассического подхода объясняется как результат действия силы Лоренца, возникающей при движении электрона в переменных электрическом и магнитном полях волны. В работе [5] экспериментально исследуются инфракрасные и терагерцевые спектры фототоков в топологических изоляторах, показано, что

причиной возникновения фототоков является линейный фотогальванический эффект. Работа [6] посвящена экспериментальному исследованию циркулярного и линейного фотогальванического эффекта в так называемом вертикально выращенном графене на основе анализа данных терагерцевой эмиссионной спектроскопии. Работа [7] посвящена исследованию влияния механических напряжений на амплитуду фотогальванического эффекта в двумерном фотодетекторе никель–фосфорен–никель, сообщается о сильной зависимости величины фототока от асимметрии образца. В работе [8] сообщается о создании поляриметра, построенного на основе сложенных стопкой нескольких образцов двумерных материалов, одним из которых является черный фосфорен. Поляриметр демонстрирует уверенное детектирование света с линейной и эллиптической поляризацией в связи с проявлением в слое фосфорена линейного и циркулярного фотогальванического эффекта. В настоящей работе предпринята попытка исследования линейного фотогальванического эффекта в квазиклассическом приближении на основе прямого моделирования методом Монте-Карло. По сравнению с квантовомеханическим рассмотрением, используемым например, в [7], квазиклассический подход позволит в принципе рассмотреть большие амплитуды падающего на образец излучения, а также исследовать влияние различных механизмов рассеяния носителей заряда на неоднородностях кристаллической решетки.

Рассмотрим ситуацию, когда вдоль поверхности черного фосфорена распространяется электромагнитная волна, так что вектор напряженности магнитного поля  $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 \cos \omega t$  перпендикулярен плоскости образца, а вектор напряженности электрического поля  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos \omega t$  направлен произвольным образом в плоскости образца (рис. 1).



**Рис. 1.** Конфигурация приложенных к образцу электромагнитных полей.

Классические уравнения движения электрона принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{dp_x}{dt} &= eE_0 \sin \alpha \cos t + \frac{e}{c} v_y H_0 \cos \omega t, \\ \frac{dp_y}{dt} &= eE_0 \cos \alpha \cos t - \frac{e}{c} v_x H_0 \cos \omega t. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $\alpha$  — угол между положительным направлением оси  $OY$  и вектором  $\mathbf{E}$ ,

$$v_x = v_F^2 p_x / \left( \sqrt{v_F^2 p_x^2 + (\Delta + up_y^2)^2} \right),$$

$$v_y = 2up_y (\Delta + up_y^2) / \sqrt{v_F^2 p_x^2 + (\Delta + up_y^2)^2}$$

— компоненты вектора скорости электрона.

Квазиклассическое кинетическое уравнение Больцмана в общем случае имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = I(f), \quad (3)$$

где  $f(\mathbf{p})$  — функция распределения,  $\mathbf{F}$  — результирующая сила,  $\mathbf{v}$  — скорость,  $I(f)$  — интеграл столкновений. В случае невырожденного электронного газа интеграл столкновений принимает вид

$$I(f) = - \int [W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}, t) - W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}', t)] d\mathbf{p}', \quad (4)$$

где  $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$  — вероятность рассеяния в единицу времени электрона из состояния с импульсом  $\mathbf{p}$  в состояние с импульсом  $\mathbf{p}'$ ,  $f(\mathbf{p})$  — функция распределения.

Численное решение интегро-дифференциального уравнения Больцмана (3) связано с большими математическими трудностями и трудно поддается распараллеливанию. Одним из часто применяемых приближений является использование простейших модельных интегралов столкновений, например, в форме Батнагара–Гросса–Крука [9]:

$$I(f) = -(f(\mathbf{p}, t) - f_0(\mathbf{p}))/\tau, \quad (5)$$

где  $f_0(\mathbf{p})$  — равновесная функция распределения,  $\tau$  — время релаксации. Однако и в этом случае приходится численно решать уравнение в частных производных при помощи различных сеточных методов.

Ввиду нелинейности уравнений движения (2) для решения кинетического уравнения удобно использовать метод Монте-Карло (см., например, [10–12]). Идея метода Монте-Карло состоит в предположении, что в промежутках между столкновениями электрон движется согласно уравнениям движения (3), а момент столкновения определяется на основе вероятностей рассеяния носителей заряда на акустических и оптических фонах, заряженных и незаряженных примесях [11]. Метод Монте-Карло в указанной формулировке успешно используется для вычисления кинетических коэффициентов и при рассмотрении интегрального члена столкновений в кинетическом уравнении, но зачастую для качественного рассмотрения явлений переноса достаточно использовать приближение постоянного времени релаксации. При этом нужно определить такой вид функции  $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ , чтобы выражение (4) превращалось в интеграл столкновений Батнагара–Гросса–Крука (5). Прямым вычислением нетрудно убедиться, что требуемый вид дается выражением

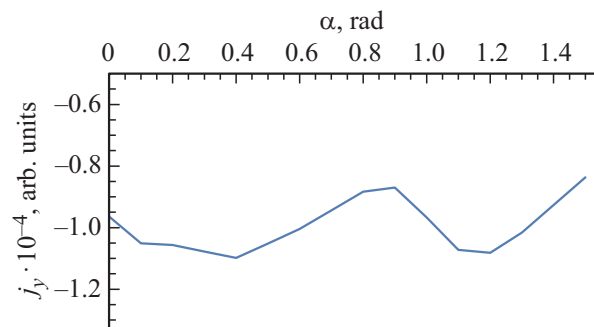
$$W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_0(\mathbf{p}')/\tau. \quad (6)$$

Действительно, после подстановки (6) в (4), с учетом нормировки

$$\int f(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} = 1, \quad \int f_0(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = 1 \quad (7)$$

интеграл столкновений (4) принимает вид (5).

Моделирование показало, что необходимым условием возникновения тока увлечения является неупругость рассеяния электронов на неоднородностях кристаллической решетки. Вообще говоря, приближение постоянного времени релаксации выводится для упругого рассеяния, однако, с некоторыми оговорками среднее время релаксации можно ввести и для процессов неупругого рассеяния электронов на оптических фонах (см., например, [13]). В работе [11], посвященной исследованию возникновения постоянного тока в графене перпендикулярно тянущему полю в условиях нормального падения на образец эллиптически поляризованной волны, также отмечалась необходимость учета неупругости рассеяния носителей тока для проявления эффекта. На рис. 2



**Рис. 2.** Зависимость плотности тока вдоль оси  $OY$  от угла  $\alpha$  между плоскостью поляризации волны и осью  $OY$ .

показана зависимость плотности тока увлечения вдоль оси  $OY$  от угла  $\alpha$  (рис. 1) в относительных единицах. В случае материала с параболическим энергетическим спектром эта зависимость должна быть синусоидальной, а в исследуемом случае видно, что ток увлечения слабо зависит от угла между плоскостью поляризации волны и осью  $OY$ , что связано с большим различием компонент тензора эффективных масс и неаддитивностью энергетического спектра (1).

### Финансирование работы

Работа поддержана грантом РНФ 23-22-00461 „Исследование тепловых свойств упорядоченных и неупорядоченных низкоразмерных материалов методом молекулярного моделирования с потенциалами, полученными при помощи глубокого машинного обучения“ (конкурс 2022 года „Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований малыми отдельными научными группами“).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] M. Ezawa. *J. Phys.: Conf. Ser.* **603**, 012006 (2015). DOI: 10.1088/1742-6596/603/1/012006
- [2] V. Chaudhary, P. Neugebauer, O. Mounkachi, S. Lahbabi, A. El. Fatimy. *2D-Mater.* **9**, 032001 (2022). DOI: 10.1088/2053-1583/ac6dc2
- [3] Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, Е.И. Кухарь. *ФТП* **41**, 6, 726 (2007).
- [4] L. Shi, D. Zhang, K. Chang, J.C.W. Song. *Phys. Rev. Lett.* **126**, 197402 (2021). DOI: doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.197402.
- [5] H. Plank, J. Pernul, S. Gebert, S.N. Danilov, J. König-Otto, S. Winnerl, M. Lanius, J. Kampmeier, G. Mussler, I. Aguilera, D. Grützmacher, S.D. Ganichev. *Phys. Rev. Mater.* **2**, 024202 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.2.024202.
- [6] L. Zhu, Z. Yao, Y. Huang, Ch. He, B. Quan, J. Li, Ch. Gu, X. Xu, Zh. Ren. *Phys. Rev. Appl.*, **12**, 044063 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevApplied.12.044063.
- [7] J. Zhao, Y. Hu, Y. Xie, L. Zhang, Y. Wang. *Phys. Rev. Appl.* **14**, 064003 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevApplied.14.064003.
- [8] Y. Xiong, Y. Wang, R. Zhu, H. Xu, Ch. Wu, J. Chen, Y. Ma, Y. Liu, Y. Chen, K. Watanabe, T. Taniguchi, M. Shi, X. Chen, Y. Lu, P. Zhan, Y. Hao, F. Xu. *Sci. Adv.* **8**, eabo0375 (2022). DOI: 10.1126/sciadv.abo0375.
- [9] Р. Либов. Введение в теорию кинетических уравнений. Мир, М. (1974). С. 233–237.
- [10] В.М. Борздов, А.В. Борздов, Ю.Г. Василевский. *ФТП* **57**, 1, 14 (2023). DOI: 10.21883/FTP.2023.01.54925.4425.
- [11] Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, Т.А. Тюлькина. *ФТП* **44**, 7, 910 (2010).
- [12] G. Gaddemane, M.L. Van de Put, W.G. Vandenberghe, E. Chen, M.V. Fischetti. *J. Comp. El.* **20**, 60 (2021). DOI: 10.1007/s10825-020-01610-6.
- [13] B.K. Ridley. *Quantum Processes in Semiconductors*. Oxford University Press, Oxford (2013). P. 89–100.

Редактор Т.Н. Василевская