

Б.М. Рувінський¹, М.А. Рувінський²

Внутрішньозонна динамічна провідність допованого графену поза лінійним відгуком

¹ Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу,
вул.Карпатська, 15, м.Івано-Франківськ, 76000, Україна,

² Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул.Шевченка, 57, м.Івано-Франківськ, 76000, Україна
bruvinsky@gmail.com

Досліджено теоретично внутрішньозонну динамічну провідність допованого графену за межами підходу лінійного відгуку електронної підсистеми на падаючу електромагнітну хвилю. Визначено залежності внутрішньозонного струму від електричного поля, частоти, температури і хімічного потенціалу, які свідчать про відхилення в достатньо сильних електричних полях і при малих частотах від лінійного наближення класичної теорії провідності Друде-Больцмана. Зокрема, отримано насичення індукованого струму і нелінійне збільшення прозорості графену з ростом інтенсивності хвилі, як і для випадку міжзонної провідності при постлінійному відгуку. На відміну від збільшення для міжзонних переходів при фіксованій інтенсивності коефіцієнт трансмісії графену за внутрішньозонним механізмом зменшується з підвищенням хімпотенціалу і температури.

Ключові слова: внутрішньозонна динамічна провідність, допований графен, постлінійний відгук, прозорість.

Стаття постуила до редакції 16.04.2012; прийнята до друку 20.06.2012.

Вступ

В ряді теоретичних робіт [1-4] було передбачено універсальну поведінку динамічної провідності і оптичної прозорості моноатомного шару графену як лінійного відгуку діраківських ферміонів на змінне електричне поле і падаючу електромагнітну хвилю. Ця поведінка визначається в основному через універсальні фізичні сталі та сталу тонкої структури, що було підтверджено експериментально в інфрачервоній [5-7] і видимій [8] області спектра. Нещодавно в роботі [9] було визначено міжзонну власну провідність і прозорість ідеально чистого графену при нульовій температурі та енергії Фермі за межами теорії лінійного відгуку. Внаслідок явного врахування електронних осциляцій типу Рабі між двома енергетичними конусами [9] мають місце нелінійні ефекти насичення амплітуди дисипативної частини міжзонного струму і прозорості графену. В [10] іншим методом, за допомогою рівняння для матриці густини, проведено розгляд міжзонної провідності і прозорості допованого графену для постлінійного відгуку при ненульових значеннях температури і хімпотенціалу. В загальних умовах [10] отримані модифіковані нелінійні ефекти насичення як дисипативної, так недисипативної

частин міжзонного струму і прозорості допованого графену.

Метою даної роботи є дослідження внутрішньозонної динамічної провідності і пов'язаної з нею прозорості допованого графену в достатньо сильних електричних полях.

I. Функція розподілу і густина внутрішньозонного струму в графені

Внутрішньозонна провідність обумовлена переходами електронів в межах однієї зони і є аналогом класичної провідності Друде-Больцмана. Відомо [1-4], що внутрішньозонна провідність є домінуючою при низьких частотах змінного електричного поля $\omega < \theta / \hbar$, де θ – абсолютна температура в енергетичних одиницях, $\hbar = h / 2\pi$, h – стала Планка. В межах переважання внутрішньозонної провідності і лінійного відгуку квантовий розгляд призводить до тих самих результатів, що і квазікласичне кінетичне рівняння.

Нехай однорідне періодичне в часі t електричне поле $\dot{E}(t) = \dot{E}_0 \exp(-i\omega t)$ напрямлене в графені вздовж осі x . Воно викликає появу змінного струму

частоти ω з густиною \mathbf{j} , пов'язаною з внутрішньозонними переходами. Внаслідок відсутності енергетичної щільності між зонами моноатомного графену, одночасно відбуваються і міжзонні переходи, які приводять в квазірезонансних умовах до встановлення нерівноважного стаціонарного стану з функцією розподілу [10] для електронів в зоні провідності

$$\rho_c^0 = f_0(\varepsilon - \mu) \cdot \left[1 + \zeta^2 \left(\frac{p_x}{p} \right)^2 \right]^{-1} \quad (1)$$

і для електронів у валентній зоні

$$\rho_v^0 = f_0(-\varepsilon + \mu) \cdot \left[1 + \zeta^2 \left(\frac{p_x}{p} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (2)$$

де

$$\zeta = \frac{|e| u E_0}{\hbar \omega \Gamma} \quad (3)$$

– характерний параметр теорії Міщенка [9], $f_0(\varepsilon - \mu) = (\exp[(\varepsilon - \mu) / \theta] + 1)^{-1}$ – рівноважна фермієвська функція розподілу електронів в зоні провідності з енергією $\varepsilon = u |\dot{\mathbf{p}}| = u p$ поблизу "діраківських" точок K і K', $u \approx 10^8$ см/с, $\Gamma \equiv \Gamma_{\hbar\omega/2u}$ – обернений час релаксації носіїв заряду, який вважається однаковим для електронів і дірок [9,10]; $p_x = p \cos \Phi_p$, $p_y = p \sin \Phi_p$, Φ_p – кут між двовимірним вектором імпульсу електрона і електричним полем, μ – хімічний потенціал графену в рівноважному стані. Зауважимо, що функції розподілу ρ_α^0 ($\alpha = c, v$) залежать згідно (1)-(3), від амплітуди електричного поля E_0 і становлять вже вихід за межі теорії лінійного

відгуку, обумовлений внутрішньозонним зсувом енергії електрона при міжзонних переходах [10]. Крім того, незалежні від часу функції ρ_α^0 є парними функціями складових імпульсу електрона. Тому для визначення внутрішньозонного струму шукаємо нерівноважну функцію розподілу електронів у вигляді

$$f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \rho_\alpha^0 + f_{\alpha 1}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad (4)$$

де $f_{\alpha 1}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ – нерівноважне відхилення f_α від стаціонарного нерівноважного розподілу ρ_α^0 . Функцію розподілу $f_{\alpha 1} \propto \exp(-i\omega t)$ визначаємо з кінетичного рівняння Больцмана [11] у наближенні часу релаксації $\tau \equiv 1/\Gamma$ при $|f_{\alpha 1}| \ll \rho_\alpha^0$. Для функції розподілу f_{c1} електронів в зоні провідності ($\alpha = c$) маємо кінетичне рівняння:

$$-i\omega f_{c1} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_{c1} + e \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \rho_c^0 = -\frac{f_{c1}}{\tau}, \quad (5)$$

\mathbf{r} – радіус-вектор електрона, $\mathbf{v} = (\partial \varepsilon / \partial \mathbf{p}) = u \dot{\mathbf{p}} / p$ – швидкість, e – заряд електрона.

Тоді

$$f_{c1} = -\frac{e \mathbf{E}}{(\Gamma - i\omega)} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \rho_c^0. \quad (6)$$

Густина внутрішньозонного струму дорівнює

$$\mathbf{j} = g_s g_v \frac{e}{(2\pi \hbar)^2} \int \mathbf{v} (f_{c1} - f_{v1}) d^2 \mathbf{p}, \quad (7)$$

g_s і g_v – спінове і долинне виродження ($g_s = g_v = 2$). Враховуючи напрям електричного поля вздовж осі x і формулу (6), маємо:

$$j_x(t) = -g_s g_v \frac{e^2 E_0 e^{-i\omega t}}{(2\pi \hbar)^2 (\Gamma - i\omega)} \cdot \int v_x \frac{\partial}{\partial p_x} (\rho_c^0 - \rho_v^0) d^2 \mathbf{p}, \quad (8)$$

де $v_x = u p_x / p$, а ρ_c^0 і ρ_v^0 визначаються формулами (1)-(3). Після підстановки в (8) (1)-(3) і

інтегрування в полярних координатах одержимо:

$$j_x(t) = \frac{4ie^2 \theta}{\pi \hbar^2 (\omega + i\Gamma)} E_0 e^{-i\omega t} \cdot \frac{(\sqrt{1 + \zeta^2} - 1)}{\zeta^2} \ln \left[2 \operatorname{ch} \left(\frac{\mu}{2\theta} \right) \right]. \quad (9)$$

Умовами застосування (9), як і в роботах [9,10], є дві нерівності:

$$\Gamma \ll \omega \quad \text{і} \quad \zeta \ll \omega / \Gamma, \quad (10)$$

які пов'язані з виведенням [10] формул (1)-(3). При $\zeta^2 \ll 1$, що відповідає достатньо слабким електричним полям або великим значенням ω і Γ (див. (3)),

$$j_x(t) = \sigma(\omega) E_0 e^{-i\omega t}, \quad (11)$$

де

$$\sigma(\omega) = \frac{2ie^2 \theta}{\pi \hbar^2 (\omega + i\Gamma)} \ln \left[2 \operatorname{ch} \left(\frac{\mu}{2\theta} \right) \right] \quad (12)$$

співпадає з виразом внутрішньозонної провідності, наведеним, напр., в [4].

З формули (9) легко визначити дисипативну частину внутрішньозонного струму, яка зумовлює

виділення джоулевого тепла і зменшення прозорості графену,

$$j_d(t) = \frac{16\sigma_0 E_0 \cos \omega t}{(\sqrt{1+\zeta^2} + 1)} \cdot \frac{\theta(\mathbf{h}\Gamma)}{\pi[(\mathbf{h}\omega)^2 + (\mathbf{h}\Gamma)^2]} \cdot \ln\left[2\text{ch}\left(\frac{\mu}{2\theta}\right)\right] \quad (13)$$

і недисипативну частину, непов'язану з дисипацією енергії,

$$j_{nd}(t) = \frac{16\sigma_0 E_0 \sin \omega t}{(\sqrt{1+\zeta^2} + 1)} \cdot \frac{\theta(\mathbf{h}\omega)}{\pi[(\mathbf{h}\omega)^2 + (\mathbf{h}\Gamma)^2]} \cdot \ln\left[2\text{ch}\left(\frac{\mu}{2\theta}\right)\right], \quad (14)$$

де $\sigma_0 = e^2 / 4\mathbf{h}$.

При $\zeta^2 \gg 1$, тобто для сильних електричних полів (або малих частот), з (13), (14) і (3) впливає

насичення амплітуди внутрішньозонного струму до значень

$$j_{d,\max} = \frac{4|e|\omega\Gamma}{\pi u} \cdot \frac{\theta(\mathbf{h}\Gamma)}{\pi[(\mathbf{h}\omega)^2 + (\mathbf{h}\Gamma)^2]} \cdot \ln\left[2\text{ch}\left(\frac{\mu}{2\theta}\right)\right], \quad (15)$$

$$j_{nd,\max} = \frac{4|e|\omega\Gamma}{\pi u} \cdot \frac{\theta(\mathbf{h}\omega)}{\pi[(\mathbf{h}\omega)^2 + (\mathbf{h}\Gamma)^2]} \cdot \ln\left[2\text{ch}\left(\frac{\mu}{2\theta}\right)\right], \quad (16)$$

причому

$$\frac{j_{d,\max}}{j_{nd,\max}} = \frac{\Gamma(\omega)}{\omega}. \quad (17)$$

Для амплітуди насичення дисипативної частини міжзонного струму в допованому графені [10]

$$j_{d,\max}^{\text{inter}} = \frac{|e|\omega\Gamma}{2u} \cdot G(\omega, \theta, \mu), \quad (18)$$

де

$$G(\omega, \theta, \mu) = \text{sh}\left(\frac{\mathbf{h}\omega}{2\theta}\right) \cdot \left[\text{ch}\left(\frac{\mu}{\theta}\right) + \text{ch}\left(\frac{\mathbf{h}\omega}{2\theta}\right)\right]^{-1}. \quad (19)$$

Відношення амплітуд насичення при $\Gamma \ll \omega$ для внутрішньозонного струму (15) до випадку (18), (19) міжзонного струму дорівнює

$$\frac{j_{d,\max}}{j_{d,\max}^{\text{inter}}} = \frac{8}{\pi} \cdot \frac{\theta(\mathbf{h}\Gamma)}{(\mathbf{h}\omega)^2} \cdot \frac{\ln\left[2\text{ch}\left(\frac{\mu}{2\theta}\right)\right]}{G(\omega, \theta, \mu)}, \quad (20)$$

тобто суттєво залежить від температури, частоти поля, хімічного потенціалу графену і механізму розсіяння вільних носіїв заряду, який визначає також функцію $\Gamma(\omega)$ [9,10].

II. Внутрішньозонний механізм прозорості допованого графену

Падаюча електромагнітна хвиля поширюється вздовж від'ємного напрямку осі z і перпендикулярно до площини xy графену з лінійною поляризацією вздовж осі x . Напруженість електричного поля хвилі

$$E = \begin{cases} E_0 \cos(\omega t + \frac{\omega z}{c}) + E_R \cos(\omega t - \frac{\omega z}{c}), & z > 0, \\ E_T \cos(\omega t + \frac{\omega z}{c}), & z < 0, \end{cases} \quad (21)$$

де E_0 відповідає падаючій хвилі, E_R – відбитій від площини графену, E_T – хвилі, що пройшла через графен; c – швидкість світла.

Хвильове рівняння відрізняється від випадку робіт [9,10] лише тим, що, замість міжзонного струму j_d^{inter} , розглядається внутрішньозонний струм j_d (13):

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = -\frac{64\sigma_0 \omega}{c^2} \cdot \frac{E_T}{(\sqrt{1+\zeta^2} + 1)} g(\omega, \theta, \mu) \cdot \delta(z), \quad (22)$$

$$g(\omega, \theta, \mu) = \frac{\theta(\mathbf{h}\Gamma)}{[(\mathbf{h}\omega)^2 + (\mathbf{h}\Gamma)^2]} \cdot \ln\left[2\text{ch}\left(\frac{\mu}{2\theta}\right)\right], \quad (23)$$

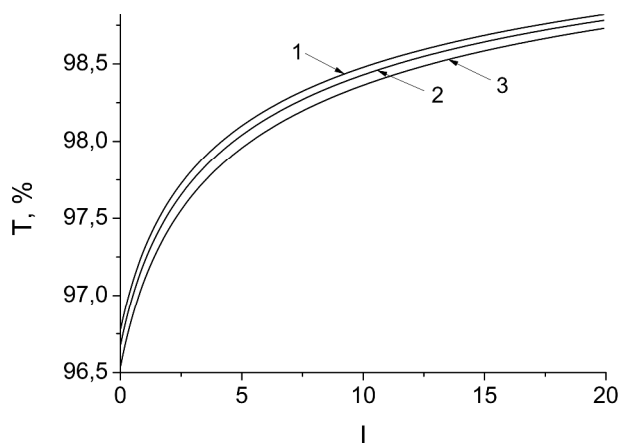


Рис. 1. Залежність внутрішньозонного коефіцієнта трансмісії T підвищеного графену від ефективної інтенсивності падаючого випромінювання $I = (euE_0 / \hbar\omega\Gamma)^2 \equiv \zeta_0^2$ при температурі 300 К, $\hbar\Gamma = 0,010$ еВ, $\hbar\omega = 0,015$ еВ і різних значеннях хімпотенціалів μ (концентрації вільних носіїв заряду n_0).

Криві: 1 – $\mu = 0,010$ еВ ($n_0 = 5,3 \cdot 10^{10}$ см⁻²);
 2 – $\mu = 0,015$ еВ ($n_0 = 8,1 \cdot 10^{10}$ см⁻²);
 3 – $\mu = 0,020$ еВ ($n_0 = 1,1 \cdot 10^{11}$ см⁻²)

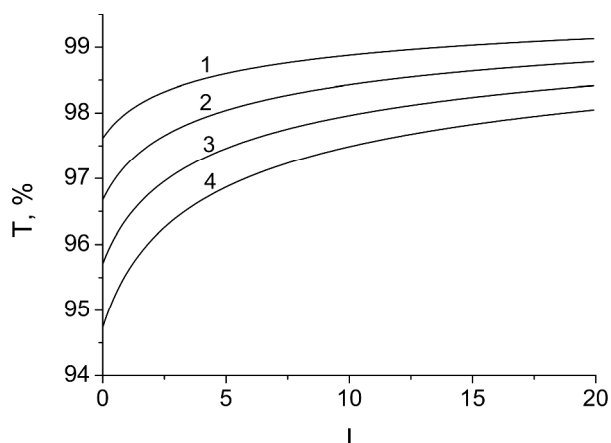


Рис. 2. Залежності $T(I)$ при хімпотенціалі графену $\mu = 0,015$ еВ, $\hbar\Gamma = 0,010$ еВ, $\hbar\omega = 0,015$ еВ і різних значеннях температури (концентрації n_0):

Криві 1 – 200 К ($n_0 = 5,5 \cdot 10^{10}$ см⁻²);
 2 – 300 К ($n_0 = 8,1 \cdot 10^{10}$ см⁻²);
 3 – 400 К ($n_0 = 1,1 \cdot 10^{11}$ см⁻²);
 4 – 500 К ($n_0 = 1,3 \cdot 10^{11}$ см⁻²).

$\delta(z)$ – дельта-функція Дірака, θ – температура в енергетичних одиницях, $\zeta_T^2 = (euE_T / \hbar\omega\Gamma)^2$ відповідає полю E_T в площині графену $z=0$. Аналогічно [9,10] знайдемо алгебраїчне рівняння для коефіцієнта трансмісії $T = E_T^2 / E_0^2$ графену

$$1 + \frac{8\alpha g(\omega, \theta, \mu)}{1 + \sqrt{1 + T \cdot I}} = \frac{1}{\sqrt{T}}, \quad (24)$$

де $\alpha = e^2 / \hbar c$ – стала тонкої структури.

$$I = \left(\frac{euE_0}{\hbar\omega\Gamma} \right)^2 \quad (25)$$

– безрозмірна ефективна інтенсивність падаючої хвилі. Рівняння (24) відрізняється від відповідного рівняння для міжзонного коефіцієнта трансмісії допованого графену [10] заміною в (24) $8g(\omega, \theta, \mu) \rightarrow \pi G(\omega, \theta, \mu)$.

На рис. 1,2 наведені графічні залежності внутрішньозонного коефіцієнта трансмісії $T(I)$ графену, згідно (24), при різних значеннях хімпотенціалу, концентрації вільних носіїв заряду n_0 і температури. Як і для випадку міжзонного поглинання [9,10], має місце нелінійне зростання T із збільшенням ефективної інтенсивності I падаючої хвилі: спочатку при малих I – лінійно, а потім – більш повільно $T \rightarrow 1$, згідно

$$T \approx 1 - \frac{16\alpha}{\sqrt{I}} g(\omega, \theta, \mu). \quad (26)$$

При сталому I внутрішньозонний коефіцієнт трансмісії зменшується з підвищенням хімпотенціалу μ і температури θ (рис. 1,2) на відміну від збільшення T для міжзонного випадку [10]. Пояснюється це відповідною поведінкою $g(\omega, \theta, \mu)$ (23) порівняно з $G(\omega, \theta, \mu)$ (19).

Висновки

Визначені залежності внутрішньозонного струму допованого графену від електричного поля, частоти, хімічного потенціалу, концентрації вільних носіїв заряду і температури свідчать про суттєві відхилення в достатньо сильних електричних полях і при низьких частотах від лінійного наближення класичної теорії провідності Друде-Больцмана. Як і для міжзонного струму [9,10], отримано насичення амплітуди індукованого внутрішньозонного струму і нелінійне збільшення відповідної прозорості підвищеного графену з ростом інтенсивності падаючого випромінювання. Внутрішньозонний коефіцієнт трансмісії графену при фіксованій інтенсивності випромінювання зменшується з ростом хімпотенціалу і температури, в той час як міжзонний коефіцієнт трансмісії при цьому зростає.

Рувінський Б.М. – к.ф.-м.н., доцент кафедри загальної та прикладної фізики.

Рувінський М.А. – д.ф.-м.н., професор кафедри фізики і хімії твердого тіла.

- [1] L.A.Falkovsky and A.A.Varlamov. Space-time dispersion of graphene conductivity // *Eur.Phys.J.*, **B.56**, pp.281-285 (2007).
- [2] V.P.Gusynin, S.G.Sharapov and J.P.Carbote. Unusual microwave response of Dirac quasiparticles in graphene // *Phys.Rev.Lett.*, **96**, pp. 256802-1–256802-4 (2006).
- [3] Л.А.Фальковский. Оптические свойства допированных графеновых слоев // *ЖЭТФ*, **133**(3), сс.663-669 (2008).
- [4] Л.А.Фальковский. Оптические свойства графена и полупроводников типа A_4B_6 // *УФН*, **178**(9), сс.923-934 (2008).
- [5] K.F.Mak, M.J.Sfeir, Y.Wu et al. Measurement of the optical conductivity of graphene // *Phys.Rev.Lett.*, **101**, pp. 196405-1 – 196405-4 (2008).
- [6] Z.Q.Li, E.A.Henriksen, Z.Jiang et.al. Dirac charge dynamics in graphene by infrared spectroscopy // *Nature Phys.*, **4**, pp.532-535 (2008).
- [7] A.V.Kuzmenko, E. van Heumen, F.Carbone, D. van der Marel. Universal optical conductivity of graphene // *Phys.Rev.Lett.*, **100**, pp. 117401-1 – 117401-4 (2008).
- [8] R.R.Nair, F.Blake, A.N.Grigorenko et al. Fine structure constant defines visual transparency of graphene // *Science(N.Y.)*, **320**, p. 1308 (2008).
- [9] E.G.Mishchenko. Dynamic conductivity in graphene beyond linear response // *Phys.Rev.Lett.*, **103**, pp. 246802-1 – 246802-4 (2009).
- [10] Б.М.Рувінський, М.А.Рувінський. Міжзонна провідність допованого графену у постлінійному відгуку // *Фізика і хімія твердого тіла*, **13**(2), сс.325-331 (2012).
- [11] А.А.Абрикосов. *Основы теории металлов*. Наука, М., 520с., (1987).

В.М. Ruvinskii¹, М.А. Ruvinskii²

Intraband Dynamic Conductivity of Doped Graphene beyond Linear Response

¹ *Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas,*

15, Carpatska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine,

² *Vasyl Stefanyk' Precarpathian National University,*

57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine

bruvinsky@gmail.com

The intraband dynamic conductivity of doped graphene was investigated theoretically beyond the approach of linear response of electron subsystem to the incident electromagnetic wave. The dependences of intraband current on the electric field, frequency, temperature and chemical potential were determined with the deviations from the linear approximation of Drude-Boltzmann classical theory of conductivity for the rather strong electric fields and low frequencies. Particularly the saturation of induced current and the non-linear increase of graphene transparency with growth of the wave intensity were obtained also as before in the case of interband conductivity at post-linear response. As contrasted to increase for the interband transitions at fixed intensity the transmission coefficient by the intraband mechanism decreases with rise of the chemical potential and temperature.