

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

З. З. Алисултанов, Р. П. Мейланов, Квантовые кинетические уравнения системы “графен + размерно-квантовая пленка”, *ТМФ*, 2012, том 172, номер 3, 454–467

DOI: 10.4213/tmf6948

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.17.128.129

19 апреля 2024 г., 05:09:11



© 2012 г.

З. З. Алисултанов*, Р. П. Мейланов†

КВАНТОВЫЕ КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ СИСТЕМЫ

“ГРАФЕН + РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННАЯ ПЛЕНКА”

Рассматривается задача об эпитаксиальном графене, сформированном на размерно-квантованной пленке. Дается микроскопический вывод квантовых кинетических уравнений для системы “графен + размерно-квантованная пленка”. На основе полученных уравнений исследованы особенности электронных состояний рассматриваемой системы. Получены аналитические выражения для перехода заряда в данной системе.

Ключевые слова: эпитаксиальный графен, размерно-квантованная пленка, квантовые кинетические уравнения, плотность состояний.

1. ВВЕДЕНИЕ

Благодаря своим уникальным свойствам графен привлекает внимание многих исследователей в различных областях науки и техники. Интерес к изучению графена усилился, когда он был получен Новоселовым, Геймом и Морозовым [1], [2] с помощью микромеханического метода расщепления графита. Этими же авторами были получены одно-, двух- и многослойные образцы графена и исследованы их транспортные свойства [3]. Повышенный интерес к изучению графена вызван двумя обстоятельствами. Во-первых, уникальные свойства графена делают его перспективным материалом для наноэлектроники [4]–[6]. С другой стороны, графен представляет собой идеальную систему для развития и проверки теоретических моделей. Это, прежде всего, связано с тем, что данный материал дает возможность работать с безмассовыми фермионами, не имеющими аналогов среди элементарных частиц. Последнее обстоятельство позволяет наблюдать в графене квантово-электродинамические эффекты, в частности клейновское туннелирование [7], [8], что обычно было сопряжено с созданием больших полей.

*Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия.
E-mail: zaur0102@gmail.com

†Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра РАН, Махачкала, Россия.
E-mail: lanten50@mail.ru

В последнее время все больше внимания уделяется исследованию электронных состояний графена, сформированного на поверхности металлов и полупроводников (см., например, работы [9]–[15]). Интерес к изучению свойств эпитаксиального графена, находящегося на поверхности металла, обусловлен тем, что при создании приборных структур на основе графена, а также экспериментальном изучении свойств самого графена необходимо иметь металлические и полупроводниковые контакты. Кроме того, каталитический рост графена на поверхности переходных металлов является одним из методов получения графена. Большинство теоретических расчетов в этом направлении делаются численными методами в рамках формализма функционала плотности. Наряду с этим для исследования системы “графен – другая электронная система”, где в качестве другой электронной системы могут выступать адатом, металлическая или полупроводниковая подложка, можно применить подход, основанный на модельных гамильтонианах типа Андерсона–Ньюнса [16], [17] или Халдейна–Андерсона [18]. Такой подход позволяет получать аналитические выражения, что полезно в приложениях. В работах [13]–[15] в рамках этих моделей были рассмотрены электронные состояния эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металла и полупроводника, а также исследован зарядовый обмен между графеном и подложкой. Было показано, что в рамках указанных моделей удастся получить вполне адекватные результаты.

Особый интерес представляет исследование электронных состояний графена, сформированного на поверхности низкоразмерных систем. Это связано с возможностью варьирования свойств низкоразмерных структур и создания на их основе твердотельных структур с управляемыми параметрами [19]–[22], что, в свою очередь, интересно с точки зрения возможности создания управляемого воздействия на электронные состояния графена. Следует отметить, однако, что исследование системы “графен–низкоразмерная структура”, в отличие от системы “графен–макроскопическая структура”, имеет иные аспекты. Дело в том, что графен и низкоразмерная подложка находятся как бы в равных условиях (низкоразмерная структура на низкоразмерной структуре). Следовательно, существенно не только влияние подложки на электронные состояния графена, но также и влияние графена на электронные состояния подложки. Влияние графена на электронные состояния пленки обсуждается в работе [23].

В настоящей работе на основе метода квантовых функций Грина в формализме Каданова–Бейма [24], обобщенного на случай пространственно неоднородной системы [25], дается микроскопический вывод квантовых кинетических уравнений для системы “графен + размерно-квантованная пленка”. На основе полученных уравнений дается обобщение модели Андерсона–Ньюнса на случай системы “графен + металлическая пленка”.

2. КВАНТОВЫЕ КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}$, где $\hat{T}$ – одночастичный гамильтониан системы “графен–подложка”, $\hat{U}$ – оператор взаимодействия с переменным внешним скалярным полем, $\hat{V}$ – потенциал межчастичного взаимодействия. Одночастичный гамильтониан $\hat{T}$ можно представить в виде (ось Z

считаем направленной перпендикулярно поверхности графена)

$$\hat{T}(z, r) = \Theta(-z)\hat{T}_g(r) + \Theta(z)\hat{T}_p(z, r).$$

Здесь $z = 0$ – граница между графеном и подложкой, $\Theta(z)$ – единичная функция Хевисайда. Область $z < 0$ соответствует графену, а область $z > 0$ – пленке; r – двумерный радиус-вектор вдоль поверхности системы. В соответствии с работой [25] введем следующие неравновесные функции Грина:

$$g(1; 2) = \begin{pmatrix} g(\overset{\leftarrow}{1}; \overset{\rightarrow}{2}), & g(\overset{\leftarrow}{1}; \overset{\leftarrow}{2}) \\ g(\overset{\rightarrow}{1}; \overset{\leftarrow}{2}), & g(\overset{\leftarrow}{1}; \overset{\leftarrow}{2}) \end{pmatrix}.$$

Здесь $1 = (z_1, r_1, t_1)$ – совокупность пространственных и временных координат и введены обозначения $\overset{\leftarrow}{1} = (r_1, t_1)$; $\overset{\rightarrow}{1} = (\vec{z}_1, r_1, t_1)$ ($\overset{\leftarrow}{1}$ не содержит перпендикулярной составляющей, т.к. зона Бриллюэна плоская). Таким образом, $g(\overset{\leftarrow}{1}; \overset{\leftarrow}{2}), g(\overset{\rightarrow}{1}; \overset{\rightarrow}{2})$ – функции Грина электронов графена и подложки соответственно, остальные функции Грина описывают процессы обмена электронной плотностью между графеном и подложкой. Функции Грина определены следующим образом [24], [25]:

$$g(\overset{\leftarrow}{1}; \overset{\leftarrow}{2}) = -i \frac{\langle T[\hat{S}(\psi^+(\overset{\leftarrow}{1})\psi(\overset{\leftarrow}{2}))] \rangle}{\langle T[\hat{S}] \rangle},$$

$$\hat{S} = \exp \left[-i \int_{t_0}^{t_0 - i\beta} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dr_1 \psi^+(\overset{\leftarrow}{1}) u(\overset{\leftarrow}{1}) \psi(\overset{\leftarrow}{1}) \right],$$

где $\langle \cdot \rangle$ – термодинамическое усреднение, T – оператор упорядочения вдоль оси мнимых времен, $\beta^{-1} = kT$. Аналогично определяются и другие функции Грина. Уравнение движения для функций Грина электрона графена $g(\overset{\leftarrow}{1}; \overset{\leftarrow}{2}), g(\overset{\rightarrow}{1}; \overset{\rightarrow}{2})$ принимает вид

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{h}_g(\overset{\leftarrow}{1}) - u(\overset{\leftarrow}{1}) \right] g(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{2}) - \int_{-\infty}^{\infty} d\overset{\leftarrow}{3} \sigma(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{3}) g(\overset{\leftarrow}{3}, \overset{\leftarrow}{2}) - \int_0^L \int d\overset{\rightarrow}{3} \sigma(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\rightarrow}{3}) g(\overset{\rightarrow}{3}, \overset{\leftarrow}{2}) = \delta(\overset{\leftarrow}{1} - \overset{\leftarrow}{2}), \quad (1)$$

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{h}_p(\overset{\rightarrow}{1}) - u(\overset{\rightarrow}{1}) \right] g(\overset{\rightarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{2}) - \int_0^L \int d\overset{\rightarrow}{3} \sigma(\overset{\rightarrow}{1}, \overset{\rightarrow}{3}) g(\overset{\rightarrow}{3}, \overset{\leftarrow}{2}) - \int_{-\infty}^{\infty} d\overset{\leftarrow}{3} \sigma(\overset{\rightarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{3}) g(\overset{\leftarrow}{3}, \overset{\leftarrow}{2}) = 0. \quad (2)$$

Здесь $\sigma(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{2})$ и $\sigma(\overset{\rightarrow}{1}, \overset{\rightarrow}{2})$ – массовые операторы электрона графена и подложки соответственно при отсутствии взаимодействия между ними, $\sigma(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\rightarrow}{2})$ и $\sigma(\overset{\rightarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{2})$ описывают взаимодействие между электронами графена и подложки, L – толщина пленки.

В выражениях (1) и (2) интегрирование по переменной r для электронов пленки проводится по всей плоскости безграничной пленки. Таким образом, в настоящей работе всеми краевыми эффектами как в подложке, так и в графене пренебрегается. Решая систему уравнений (1), (2), получим следующее уравнение для функции Грина электрона графена $g(\overset{\leftarrow}{1}; \overset{\leftarrow}{2})$:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{h}_g(\overset{\leftarrow}{1}) - u(\overset{\leftarrow}{1}) \right] g(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{2}) - \int_{-\infty}^{\infty} d\overset{\leftarrow}{3} [\sigma(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{3}) + \sigma_P(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{3})] g(\overset{\leftarrow}{3}, \overset{\leftarrow}{2}) = \delta(\overset{\leftarrow}{1} - \overset{\leftarrow}{2}), \quad (3)$$

где $\sigma_P(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{2})$ – вклад в массовый оператор электрона графена за счет взаимодействия с подложкой:

$$\sigma_P(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{2}) = \int_0^L \int d\overset{\rightarrow}{3} \int_0^L \int d\overset{\rightarrow}{4} \sigma(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\rightarrow}{3}) g_0(\overset{\rightarrow}{3}, \overset{\rightarrow}{4}) \sigma(\overset{\rightarrow}{4}, \overset{\leftarrow}{2}), \quad (4)$$

где $g_0(\overset{\rightarrow}{1}, \overset{\rightarrow}{2})$ – функция Грина электрона подложки при отсутствии взаимодействия с графеном. В дальнейшем удобно ввести обозначения $g(\overset{\leftarrow}{1}; \overset{\leftarrow}{2}) = G(1; 2)$, $\sigma(\overset{\leftarrow}{1}, \overset{\leftarrow}{2}) \equiv \Sigma(1; 2)$ для функций графена и $g(\overset{\rightarrow}{1}; \overset{\rightarrow}{2}) = g(1; 2)$, $\sigma(\overset{\rightarrow}{1}, \overset{\rightarrow}{2}) \equiv \sigma(1, 2)$ для функций подложки. При этом подразумевается, конечно, что координаты электрона графена не содержат перпендикулярной составляющей, т. е. z .

Для вывода кинетических уравнений типа Каданова–Бейма необходимо перейти от функций Грина, зависящих от мнимых временных аргументов, к функциям, зависящим от действительных временных аргументов. При этом можно использовать правила, предложенные в работе [26]. Для произведения функций, зависящих от мнимых временных аргументов, $D = BC$ после перехода к действительным временным аргументам имеем

$$D^{R,A} = B^{R,A} \cdot C^{R,A}, \quad \overset{\gtrless}{D} = B^R \cdot \overset{\gtrless}{C} + \overset{\gtrless}{B} \cdot C^A, \quad (5)$$

где D^R, D^A – запаздывающая и опережающая функции Грина соответственно, $\overset{\gtrless}{D}$ – корреляционные функции, зависящие от действительных временных аргументов. Эти соотношения имеют место и для смешанного представления, которое получается при переходе от переменных t_1, t_2 к переменным $t = t_1 - t_2, T = (t_1 + t_2)/2$ с последующим преобразованием Фурье по переменной t ($t, T \rightarrow \omega, T$):

$$D^{R,A}(\omega, T) = \{B^{R,A}(\omega, T), C^{R,A}(\omega, T)\}, \quad (6)$$

где

$$\{B(\omega, T), C(\omega, T)\} = \exp \left[\frac{i}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \omega} \frac{\partial}{\partial T} - \frac{\partial}{\partial \omega_1} \frac{\partial}{\partial T_1} \right) \right] B(\omega, T) C(\omega_1, T_1) \Big|_{\omega=\omega_1, T=T_1}.$$

Используя в уравнении (3) соотношения (5), (6), а также совершая преобразование Фурье и по переменной T ($T \rightarrow \Omega$), окончательно получим следующее уравнение

для корреляционной функции графена:

$$\begin{aligned}
 & \left[\omega_{\Omega}^{+} - \hat{h}_g(\hat{1}) - u(\hat{z}_1, r_1, \omega_{\Omega}^{+}) \right] \hat{G}(\hat{z}_1 r_1; \hat{z}_2, r_2; \omega, \Omega) - \\
 & - \int dr_3 \int \frac{d\Omega'}{2\pi} (\Sigma^R + \Sigma_P^R)(r_1; r_3; \omega_{\Omega-\Omega'}^{+}, \Omega') \times \\
 & \times \hat{G}(r_3; r_2; \omega_{\Omega'}^{-}, \Omega - \Omega') = \int dr_3 \int \frac{d\Omega'}{2\pi} (\hat{\Sigma} + \hat{\Sigma}_P) \times \\
 & \times (r_1; r_3; \omega_{\Omega-\Omega'}^{+}, \Omega') \hat{G}^A(r_3; r_2; \omega_{\Omega'}^{-}, \Omega - \Omega'), \tag{7}
 \end{aligned}$$

где $\omega_{\Omega}^{\pm} = \omega \pm \Omega/2$. Здесь

$$\begin{aligned}
 \hat{\Sigma}_P^{R,A}(r, r'; \omega) &= \int_0^L d\hat{z}_1 \int dr_1 \int_0^L d\hat{z}_2 \int dr_2 \sigma(r; \hat{z}_1, r_1; \omega) \times \\
 &\times \hat{g}_0^{R,A}(\hat{z}_1 r_1; \hat{z}_2, r_2; \omega) \sigma(\hat{z}_2 r_2; r'; \omega)
 \end{aligned}$$

представляет собой поправку к собственно энергетической части электрона графена за счет взаимодействия с размерно-квантованной пленкой. Аналогичный вид имеет уравнение для корреляционной функции электрона подложки. Чтобы определить эффективные волновые уравнения для электронов графена и подложки, представим массовый оператор $\Sigma_P[g_0]$ в виде двух слагаемых с помощью преобразования $g_0 \rightarrow g + (g_0 - g)$: $\Sigma_P[g_0] = \Sigma_P[g] + \tilde{\Sigma}_P[g_0 - g]$. Слагаемое $\tilde{\Sigma}_P$ учтем при определении эффективного волнового уравнения электрона графена. Это позволяет ввести в дальнейшем параметр для перенормировки энергии электрона графена. Другую часть Σ_P оставляем в уравнении для корреляционной функции. В дальнейшем она приводит к появлению потенциала гибридизации затравочных энергетических состояний системы “графен + подложка”. Таким образом, эффективное волновое уравнение для электрона графена принимает вид

$$\hat{h}_g(r) \varphi_q(r, \omega) - \int dr_1 \operatorname{Re}[\Sigma^R + \tilde{\Sigma}_P](r; r_1; \omega) \varphi_q(r_1, \omega) = E(q, \omega) \varphi_q(r, \omega), \tag{8}$$

где q – двумерный волновой вектор электрона графена, описывающий движение электрона в графене. При удалении графена от поверхности подложки имеем $g \rightarrow g_0$ и $\tilde{\Sigma}_P[g_0 - g] \rightarrow 0$. Уравнение (8) при этом переходит в эффективное волновое уравнение для графена без взаимодействия с подложкой. Эффективное волновое уравнение для электрона размерно-квантованной пленки имеет вид

$$\begin{aligned}
 & \hat{h}_P(\hat{z}, r) \psi_{n,p}(\hat{z}, r; \omega) - \int_0^L d\hat{z}_1 \int dr_1 \operatorname{Re}[\sigma^R + \tilde{\sigma}_g](\hat{z} r; \hat{z}_1, r_1; \omega) \times \\
 & \times \psi_{n,p}(\hat{z}_1, r_1; \omega) = \varepsilon_n(p, \omega) \psi_{n,p}(\hat{z}, r; \omega), \tag{9}
 \end{aligned}$$

где n – дискретное квантовое число, описывающее движение электрона поперек пленки, p – двумерный волновой вектор, описывающий движение электрона в плоскости размерно-квантованной пленки. Запишем граничные условия к уравнению

ям (8), (9)

$$\begin{aligned}\varphi_q(z = -0, r; \omega) &= \psi_{n,p}(z = +0, r; \omega), \\ \frac{d\varphi_q(z = -0, r; \omega)}{dz} &= \frac{d\psi_{n,p}(z = +0, r; \omega)}{dz}.\end{aligned}$$

Перейдя в уравнении (7) и сопряженном к нему уравнении к представлению, осуществляемому уравнениями (8), (9), окончательно получим следующее квантовое кинетическое уравнение для электронной подсистемы графена:

$$\begin{aligned}& [\Omega - E(q_k^+, \omega_\Omega^+) + E(q_k^-, \omega_\Omega^-)] \hat{G}(q, k; \omega, \Omega) - \\& - [u(q_k^+, \omega_\Omega^+) - u(q_k^-, \omega_\Omega^-)] \hat{G}(q, k; \omega, \Omega) - \\& - \int \frac{dk' d\Omega'}{(2\pi)^3} (\Sigma^R + \Sigma_P^R)(q_{k-k'}, \omega_{\Omega-\Omega'}^+; k', \Omega') \hat{G}(q_k^-, \omega_\Omega^-; q - k', \Omega - \Omega') + \\& + \int \frac{dk' d\Omega'}{2\pi} \hat{G}(q_{k-k'}, \omega_{\Omega-\Omega'}^+; k', \Omega') (\Sigma^A + \Sigma_P^A)(q_k^-, \omega_\Omega^-; q - k', \Omega - \Omega') = \\& = \int \frac{dk' d\Omega'}{(2\pi)^3} (\hat{\Sigma} + \hat{\Sigma}_P)(q_{k-k'}, \omega_{\Omega-\Omega'}^+; k', \Omega') G^A(q_k^-, \omega_\Omega^-; q - k', \Omega - \Omega') - \\& - \int \frac{dk' d\Omega'}{(2\pi)^3} G^R(q_{k-k'}, \omega_{\Omega-\Omega'}^+; k', \Omega') (\hat{\Sigma} + \hat{\Sigma}_P)(q_k^-, \omega_\Omega^-; q - k', \Omega - \Omega'), \quad (10)\end{aligned}$$

где $q_k^\pm = q \pm k/2$. Здесь

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_P^{R,A}(q, \omega; k, \Omega) &= \sum_{n,n'} \int \frac{dp d\Omega'}{(2\pi)^3} V_{n,p-k/2, \omega_\Omega'}(q_k^-, \omega_\Omega^-) \hat{g}_{n,n'}^{R,A}(p\omega; k, \Omega') \times \\& \times V_{p+k/2, \omega_\Omega^+}(q_k^+, \omega_\Omega^+),\end{aligned}$$

где g – соответствующие функции Грина электрона размерно-квантованной пленки. Выражение для потенциала гибридизации имеет вид

$$V_{n,p,\omega}(q, \omega) = \int dr \int_0^L dz dr_1 \frac{dq}{(2\pi)^2} \phi_q(r_1, \omega) \sigma(r; \vec{z}, r_1; \omega) \psi_p(\vec{z}, r_1; \omega).$$

Уравнения движения для функций $G_{nn'}^{R(A)}$ принимают вид

$$\begin{aligned}& [\omega_\Omega^+ - E(q_k^+, \omega_\Omega^+) - u(q_k^+, \omega_\Omega^+)] G_{nn'}^{R(A)}(q, \omega; k, \Omega) - \\& - \int \frac{d\Omega}{2\pi} (\Sigma_{nn''}^{R(A)} + \Sigma_{P,nn''}^{R(A)})(q_{k-k'}, \omega_{\Omega-\Omega'}^+; k', \Omega') \times \\& \times G_{n''n'}^{R(A)}(q_k^-, \omega_\Omega^-; k - k', \Omega - \Omega') = 1.\end{aligned} \quad (11)$$

Квантовое кинетическое уравнение для корреляционной функции $\hat{g}_{nn'}(\omega, \Omega)$ электрона размерно-квантованной пленки имеет вид, аналогичный уравнению (10), которое совместно с аналогичным уравнением для электрона размерно-квантованной пленки позволяет исследовать как равновесные, так и неравновесные свойства системы “графен + размерно-квантованная пленка”. К неравновесным явлениям можно отнести такие, как колебания электронной плотности эпитаксиального графена под влиянием внешнего электромагнитного поля (плазменные колебания), нуле-

вой звук и т.д. Кинетические явления играют решающую роль при формировании оптических свойств эпитаксиального графена. Следовательно, они представляют значительный теоретический и экспериментальный интерес. Для конкретных расчетов необходимо применить к полученным точным уравнениям аппроксимации. Подобные расчеты выходят за рамки настоящей работы и являются темой отдельной статьи.

3. РАВНОВЕСНЫЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ “ГРАФЕН + РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННАЯ ПЛЕНКА”

Остановимся на исследовании равновесных свойств системы “графен + размерно-квантованная пленка”. Определим перенормировку энергии электрона за счет взаимодействия с размерно-квантованной пленкой. Для равновесной корреляционной функции электрона графена из уравнений (7) и (11) получим следующее выражение:

$$\check{G}(q, \omega) = G^R(q, \omega)(\Sigma^< + \Sigma_P^<)(q, \omega)G^A(q, \omega),$$

или

$$\begin{aligned} \check{G}(q, \omega) = \\ = \frac{\check{\Sigma}(q, \omega) + \check{\Sigma}_P(q, \omega)}{[\omega - E(q, \omega) - \text{Re}(\Sigma(q, \omega) + \Sigma_P(q, \omega))]^2 + (1/4) \text{Im}(\Sigma(q, \omega) + \Sigma_P(q, \omega))^2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Для корреляционной функции электрона размерно-квантованной пленки $\check{g}_{nn'}(\omega)$ из соответствующего уравнения аналогично получим

$$\begin{aligned} \check{g}(p, \omega) = \\ = \frac{\check{\sigma}(p, \omega) + \check{\sigma}_g(\omega)}{[\omega - \varepsilon_P(p, \omega) - \text{Re}(\sigma(p, \omega) + \sigma_g(p, \omega))]^2 + (1/4) \text{Im}(\sigma(p, \omega) + \sigma_g(p, \omega))^2}, \end{aligned} \quad (13)$$

где поправки к массовому оператору электрона графена (размерно-квантованной пленки) за счет взаимодействия с размерно-квантованной пленкой (графеном) имеют вид

$$\check{\Sigma}_P(q, \omega) = \sum_n \int \frac{dp}{(2\pi)^2} V_{n,p}(q, \omega) \check{g}(p, \omega) V_{q,n}(p, \omega), \quad (14)$$

$$\check{\sigma}_g(p, \omega) = \int \frac{dq}{(2\pi)^2} V_{q,n}(p, \omega) \check{G}(q, \omega) V_{n,p}(q, \omega). \quad (15)$$

Используя для $\check{\Sigma}(q, \omega)$, $\check{\sigma}(p, \omega)$ анзац Каданова–Бейма [24] $\check{\Sigma}(q, \omega) = f(\omega)\Gamma_g(q, \omega)$, $\check{\sigma}(p, \omega) = f(\omega)\Gamma_P(p, \omega)$, где $f(\omega)$ – функция распределения Ферми–Дирака, $\Gamma_g(q, \omega)$, $\Gamma_P(p, \omega)$ – затухание одночастичных состояний электрона графена и пленки соответственно, получим $\check{G}(q, \omega) = f(\omega)A(q, \omega)$, $\check{g}(p, \omega) = f(\omega)a(p, \omega)$, где $A(q, \omega)$, $a(p, \omega)$ –

спектральные функции электрона графена и размерно-квантованной пленки соответственно:

$$\begin{aligned}
 A(q, \omega) &= \\
 &= \frac{\Gamma_g(q, \omega) + \Gamma_P(q, \omega)}{[\omega - E(q, \omega) - \text{Re}(\Sigma(q, \omega) + \Sigma_P(q, \omega))]^2 + (1/4) \text{Im}(\Sigma(q, \omega) + \Sigma_P(q, \omega))^2}, \\
 a(p, \omega) &= \\
 &= \frac{\Gamma_P(p, \omega) + \Gamma_g(\omega)}{[\omega - \varepsilon(p, \omega) - \text{Re}(\sigma(p, \omega) + \sigma_g(p, \omega))]^2 + (1/4) \text{Im}(\sigma(p, \omega) + \sigma_g(p, \omega))^2}.
 \end{aligned}$$

Далее определим самосогласованные значения энергии электрона графена и размерно-квантованной пленки:

$$\begin{aligned}
 E(q) &= [E(q, \omega) + \text{Re}(\Sigma(q, \omega) + \Sigma_P(q, \omega))]_{\omega=E(q)}, \\
 \varepsilon(p) &= [\varepsilon(p, \omega) + \text{Re}(\sigma(p, \omega) + \sigma_g(p, \omega))]_{\omega=\varepsilon(p)}.
 \end{aligned}$$

В результате для спектральных функций получим следующие выражения:

$$\begin{aligned}
 A(q, \omega) &= \\
 &= Z_g \frac{\tilde{\Gamma}(q, \omega) + \sum_n Z_P Z_g \int [dp/(2\pi)^2] |V_{n,q}(p, \omega)|^2 a(p, \omega)}{[\omega - E(q)]^2 + (1/4) \left(\left(\tilde{\Gamma}(q, \omega) + \sum_n Z_P Z_g \left(\int [dp/(2\pi)^2] |V_{n,q}(p, \omega)|^2 a(p, \omega) \right) \right)^2 \right)}, \\
 &\quad (16)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 a(p, \omega) &= \\
 &= Z_P \frac{\tilde{\Gamma}_P(\omega) + Z_P Z_g \int [dq/(2\pi)^2] |V_{q,n}(p, \omega)|^2 A(q, \omega)}{[\omega - \varepsilon(p)]^2 + (1/4) \left(\tilde{\Gamma}_P(\omega) + Z_P Z_g \int [dq/(2\pi)^2] |V_{q,n}(p, \omega)|^2 A(q, \omega) \right)^2}, \\
 &\quad (17)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 Z_g^{-1} &= 1 - \frac{d}{d\omega} (E(q, \omega) + \text{Re}(\Sigma(q, \omega) + \Sigma_P(q, \omega)))|_{\omega=E(q)}, \\
 Z_P^{-1} &= 1 - \frac{d}{d\omega} (\varepsilon(p, \omega) + \text{Re}(\sigma(p, \omega) + \sigma_g(p, \omega)))|_{\omega=\varepsilon(p)}
 \end{aligned} \quad (18)$$

– перенормировочные ферми-жидкостные константы, $\tilde{\Gamma}_{g(P)} = Z_{g(P)} \Gamma_{g(P)}$. Отметим, что учет ферми-жидкостных эффектов для электронов графена существен ввиду того, что последние приводят к искажению линейного характера закона дисперсии электронов в графене. Кроме того, в графене возможны отклонения от теории Ландау–Силина [24]–[26].

4. ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ “ГРАФЕН + РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННАЯ ПЛЕНКА”

Рассмотрим вопрос о плотности состояний эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металлической пленки. В работах [1], [14] было показано, что изолированный графен обладает законом дисперсии

$$\varepsilon_{\pm}(k_x, k_y) = \varepsilon_c \pm tf(k_x, k_y),$$

где знак плюс относится к верхней зоне $\pi^*(\Omega = \omega - \varepsilon > 0)$, а минус – к нижней зоне $\pi(\Omega = \omega - \varepsilon < 0)$ [9], t – матричный элемент перехода между соседними узлами решетки адатомов, k_x, k_y – квазиволновые векторы, описывающие движение электрона в плоскости графена, ε_c – положение центра квазиуровня изолированного адатома углерода. Функция $f(k_x, k_y)$ имеет вид

$$f^2(k_x, k_y) = 3 + 2 \cos(\sqrt{3} k_x b) + 4 \cos\left(\sqrt{\frac{3}{2}} k_x b\right) \cos\left(3 k_y \frac{b}{2}\right),$$

где b – расстояние между соседними атомами решетки. Нас, однако, будет интересовать случай малых волновых чисел, когда закон дисперсии можно представить в виде

$$\varepsilon = \varepsilon_c \pm \frac{3}{2}tb|q|, \quad (19)$$

где $q = K - k$, K – волновой вектор точки Дирака.

Лист графена, находящегося на поверхности пленки, можно представить как хемосорбированные атомы углерода на этой поверхности, выстроенные в структуре графена [13]–[15]. Поэтому, следуя Андерсону [16], введем внутриатомное кулоновское отталкивание, появляющееся при зарядовом обмене между графеном и подложкой. С учетом этого закон дисперсии для графена, находящегося на поверхности пленки, перепишем в виде

$$\varepsilon = \varepsilon_c \pm \frac{3}{2}tb|q| + U\langle n \rangle,$$

где U – внутриатомное кулоновское отталкивание, $\langle n \rangle$ – возмущение электронной плотности графена при взаимодействии с подложкой. Следует отметить, однако, что зарядовый обмен между графеном и подложкой не только сдвигает положение центра квазиуровня изолированного адатома углерода ε_c , что видно из последнего выражения, но также влияет и на матрицу перехода между соседними атомами графена. В связи с этим более общее выражение для графена, взаимодействующего с подложкой, следовало бы записать в виде

$$\varepsilon = \varepsilon_c \pm \frac{3}{2}(t + \tilde{t}(n))b|q| + U\langle n \rangle.$$

Кроме того, изменение концентрации носителей в графене существенно искажает линейный характер закона дисперсии. Это связано с возможным усилением кулоновского взаимодействия при изменении концентрации носителей, что, вообще говоря, приведет к сильным коллективным явлениям (см., например, работу [5]). Исследование электронных состояний графена с учетом указанных эффектов представляет самостоятельный интерес и выходит за рамки настоящей статьи.

Энергия электронов в пленке записывается как (ось OZ направлена перпендикулярно поверхности подложки)

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \varepsilon_i.$$

Для спектральной функции подложки при этом имеем

$$A(\omega) = \frac{\Gamma}{(\omega - (p_x^2 + p_y^2)/2m - \varepsilon_i)^2 + \Gamma^2},$$

плотность состояний подложки

$$\rho(\omega) = \frac{m}{\pi L \hbar^2} \sum_{i=1}^{n_F} \left\{ \arctg \left(\frac{\omega - \varepsilon_i}{\Gamma} \right) + \frac{\pi}{2} \right\},$$

где L – толщина пленки, n_F – число состояний под уровнем Ферми. Для получения аналитических выражений воспользуемся приближением, в котором $\Gamma \rightarrow 0$. Тогда для плотности состояний пленки получим

$$\rho(\omega) = \frac{m}{\pi L \hbar^2} \sum_i \Theta(\omega - \varepsilon_i).$$

Для плотности состояний графена с помощью соотношений (8) и (9) получим

$$\begin{aligned} \rho_{gr}(\omega) = \frac{2\Gamma_c}{3tbp_B} \ln \frac{(\Omega_c/\Gamma_c \mp 3tbp_B/(2\Gamma_c))^2 + 1}{\Omega_c^2/\Gamma_c^2 + 1} + \\ + \frac{4\Omega_c}{3tbp_B} \left[\arctg \frac{\Omega_c}{\Gamma_c} - \arctg \left(\frac{\Omega_c}{\Gamma_c} \mp \frac{3tbp_B}{2\Gamma_c} \right) \right], \end{aligned} \quad (20)$$

где

$$\Gamma_c(\omega) = \pi |V|^2 \rho(\omega) = \pi |V|^2 \frac{m}{\pi L \hbar^2} \sum_i \Theta(\omega - \varepsilon_i) = \Gamma_0 \sum_i \Theta(\omega - \varepsilon_i),$$

$\Omega_c = \omega_c - U\langle n \rangle$, $\omega_c = \omega - \varepsilon_c$, q_B – импульс обрезания [8].

В безразмерных переменных

$$\rho_{gr}(\alpha) = \frac{K(\alpha)}{\mu} \ln \frac{((\alpha \mp \mu)/K(\alpha))^2 + 1}{(\alpha/K(\alpha))^2 + 1} + \frac{2\alpha}{\mu} \left[\arctg \frac{\alpha}{K(\alpha)} - \arctg \left(\frac{\alpha \mp \mu}{K(\alpha)} \right) \right],$$

где $\alpha = \Omega_c/\Gamma_0$, $\mu = \xi/\Gamma_0$, $\xi = 3tbq_B/2$, $K(\alpha) = \sum_i \Theta(\Gamma_0 \alpha + \varepsilon_c + U\langle n \rangle - \varepsilon_i)$.

Для построения кривых плотности состояний воспользуемся следующей аппроксимацией. Если рассматривать пленку в направлении оси OZ как прямоугольную потенциальную яму, то энергию уровней в пленке с достаточной степенью точности можно выразить через толщину пленки с помощью соотношения $\varepsilon_i = \hbar^2 i^2 / (mL^2) = \varepsilon_0 i^2$. Если взять пленку толщиной $L \approx 10^{-8} \text{ м} \approx 100 \text{ \AA}$, то для энергии основного

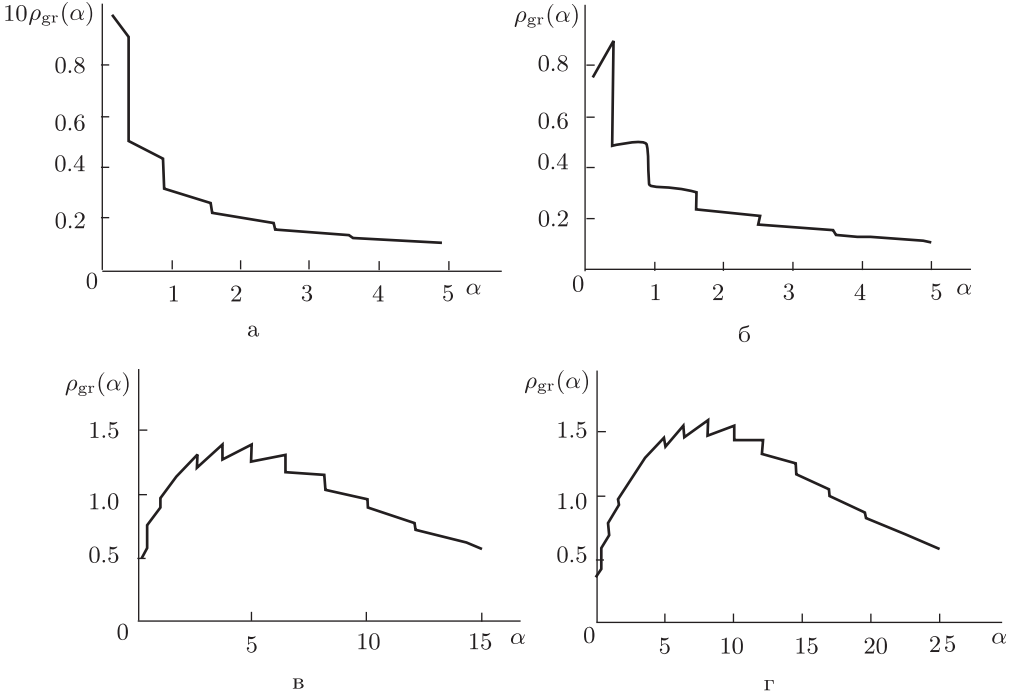


Рис. 1. Приведенная плотность состояний для эпитаксиального графена при различных значениях μ : $\mu = 0.1$ (а), $\mu = 1$ (б), $\mu = 10$ (в), $\mu = 16$ (г).

При построении кривых условно принято, что $n_F = 20$.

уровня ε_0 получим значение порядка 0.01 эВ. Далее, положим $\varepsilon_c = -1$ эВ. Внутриатомный потенциал положим равным 10 эВ. Для получения качественных зависимостей предположим, что возмущение электронной плотности графена порядка 0.1. На рис. 1 изображены зависимости плотности состояний от энергетической переменной при различных значениях величины μ .

Изображенные на рис. 1 кривые похожи на кривые плотности состояний, приведенные в работе [13]. Отличие заключается в том, что на каждый дискретный уровень пленки графен реагирует отдельно. Кроме того, в работе [13] не учитывалось внутриатомное кулоновское отталкивание.

Интегрируя выражение (20) по энергетической переменной от 0 до ε_F , получим величину переходящего заряда:

$$\langle n \rangle_{\pm} = |V|^2 \int_0^{\varepsilon_F} d\omega \rho_{gr}(\omega) \int_0^{q_B} \frac{q dq}{\left[\omega - \varepsilon_c - U\langle n \rangle_{\pm} \mp (3/2)tbq \right]^2 + |V|^4(\rho(\omega))^2},$$

где знак “плюс” соответствует переходу заряда из подложки в графен, а “минус” – переходу заряда из графена в подложку. Проводя сначала интегрирование по энер-

гетической переменной, получим

$$\langle n \rangle_{\pm} = \sum_{i=1}^{n_F-1} \int_0^{q_B} \left[\operatorname{arctg} \left(\frac{\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_c - U \langle n \rangle_{\pm} \mp (3/2)tbq}{i\rho_{\Pi}} \right) - \right. \\ \left. - \operatorname{arctg} \left(\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_c - U \langle n \rangle_{\pm} \mp (3/2)tbq}{i\rho_{\Pi}} \right) \right] q dq,$$

где $\rho_{\Pi} = m|V|^2/(\pi L\hbar^2)$. Интегрирование по импульсу дает следующее выражение для переходящего заряда:

$$\langle n \rangle_{\pm} = \sum_{i=1}^{n_F-1} \{ A_{\varepsilon(i+1)} - A_{\varepsilon(i)} + B_{\varepsilon(i+1)} - B_{\varepsilon(i)} \mp (C_{\varepsilon(i+1)} - C_{\varepsilon(i)}) \}, \quad (21)$$

где

$$A_{\varepsilon(i)} = \frac{1}{2}q_B^2 \operatorname{arctg} \left(\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_c - U \langle n \rangle_{\pm} \mp \mu}{i\rho_{\Pi}} \right), \\ B_{\varepsilon(i)} = \frac{i^2\Gamma_0^2}{2} \left[1 \pm \left(\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_c - U \langle n \rangle_{\pm}}{i\rho_{\Pi}} \right)^2 \right] \times \\ \times \left(\operatorname{arctg} \left(\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_c - U \langle n \rangle_{\pm} \mp \mu}{i\rho_{\Pi}} \right) - \operatorname{arctg} \left(\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_c - U \langle n \rangle_{\pm}}{i\rho_{\Pi}} \right) \right), \\ C_{\varepsilon(i)} = \frac{i^2\Gamma_0^2(\varepsilon_i - \varepsilon_c - U \langle n \rangle_{\pm})}{2i\rho_{\Pi}} \ln \left[\frac{((\varepsilon_i - \varepsilon_c - U \langle n \rangle_{\pm})/(i\rho_{\Pi}) \mp \mu)^2 + 1}{((\varepsilon_i - \varepsilon_c - U \langle n \rangle_{\pm})/(i\rho_{\Pi}))^2 + 1} \right],$$

$\mu = \xi/(i\rho_{\Pi})$. При аппроксимации пленочного потенциала прямоугольной ямой для энергии Ферми и толщины пленки, при которой заполняется $i + 1$ энергетический уровень, имеют место следующие выражения [27]:

$$\varepsilon_F = \frac{\pi\hbar^2 NL}{mn_F} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{L} \right)^2 (n_F + 1)(2n_F + 1), \quad (22) \\ L_i^2 = \frac{\pi}{12N} i(i+1)(4i+5),$$

где N – концентрация электронов в пленке.

Как показывают расчеты, начиная примерно с толщины $800 \text{ \AA}$ величина переходящего заряда имеет порядок 0.055. Для больших толщин размерные эффекты перестают действовать. Как следствие этого, величина переходящего заряда перестает зависеть от толщины пленки. Значение 0.055 хорошо согласуется с экспериментальными данными работы [28], в которой исследовалась адсорбция графена на Ru(0001), а переходящий с субстрата на графен заряд составлял 0.06.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные квантовые кинетические уравнения позволяют исследовать равновесные и неравновесные свойства системы “графен + размерно-квантованная пленка”. Учет ферми-жидкостных эффектов в графене, который можно провести в рамках полученных уравнений, чрезвычайно важен ввиду того, что ферми-жидкостные

эффекты, вообще говоря, приводят к искажению дираковского конуса в графене [29]–[32]. Исследование электронных состояний системы “графен + размерно-квантованная пленка” показывает, что они существенно зависят от толщины пленки. Самосогласованное исследование электронных состояний такой системы с учетом ферми-жидкостных эффектов представляет большой интерес и требует отдельного рассмотрения.

Благодарности. Авторы выражают благодарность С.Ю. Давыдову за интерес к работе и ценные замечания. Авторы благодарны А.М. Игнатову, А.А. Рухадзе, С.В. Гарнову за полезные обсуждения результатов работы.

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**:5696 (2004), 666–669, arXiv:cond-mat/0410550.
- [2] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, A. K. Geim, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **102**:30 (2005), 10451–10453, arXiv:cond-mat/0503533.
- [3] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov, *Nature*, **438**:7065 (2005), 197–200.
- [4] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *Rev. Modern Phys.*, **81**:1 (2009), 109–162, arXiv:0709.1163.
- [5] Ю.Е. Лозовик, С.П. Меркулова, А.А. Соколик, *УФН*, **178**:7 (2008), 757–776.
- [6] M. Hongki, R. Bistritzer, J.-J. Su, A. H. MacDonald, *Phys. Rev. B*, **78**:12 (2008), 121401(R), 4 pp., arXiv:0802.3462.
- [7] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *Nature Phys.*, **2**:9 (2006), 620–625, arXiv:cond-mat/0604323.
- [8] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.*, **80**:4 (2008), 1337–1354, arXiv:0710.3848.
- [9] G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, V. M. Karpan, J. van den Brink, P. J. Kelly, *Phys. Rev. Lett.*, **101**:2 (2008), 026803, 4 pp., arXiv:0802.2267.
- [10] P. A. Khomyakov, G. Giovannetti, P. C. Rusu, J. van den Brink, P. J. Kelly, *Phys. Rev. B.*, **79**:19 (2009), 195425, 12 pp., arXiv:0902.1203.
- [11] P. A. Khomyakov, A. A. Starikov, G. Brocks, P. J. Kelly, *Phys. Rev. B*, **82** (2010), 115437, 6 pp., arXiv:0911.2027.
- [12] M. Vanin, J. J. Mortensen, A. K. Kelkkanen, J. M. Garcia-Lastra, K. S. Thygesen, K. W. Jacobsen, *Graphene on metals: a Van der Waals density functional study*, arXiv:0912.3078.
- [13] С.Ю. Давыдов, *Письма в ЖТФ*, **37**:10 (2011), 64–67.
- [14] С.Ю. Давыдов, *ФТП*, **45**:5 (2011), 629–633.
- [15] С.Ю. Давыдов, *ФТП*, **45** (2011), 1102–1108.
- [16] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **124**:1 (1961), 41–53.
- [17] D. M. Newns, *Phys. Rev.*, **178**:3 (1969), 1123–1135.
- [18] F. D. M. Haldane, P. W. Anderson, *Phys. Rev. B.*, **13**:6 (1976), 2553–2559.
- [19] Р.П. Мейланов, Б.А. Абрамова, М.М. Гаджиалиев, В.В. Джабраилов, *ФТТ*, **44**:11 (2002), 2097–2100.
- [20] Р.П. Мейланов, Б.А. Абрамова, Г.М. Мусаев, М.М. Гаджиалиев, *ФТТ*, **46**:6 (2004), 1076–1077; Р.П. Мейланов, Б.А. Абрамова, *ФТТ*, **50**:1 (2008), 130–134.
- [21] Ю.Е. Лозовик, С.Ю. Волков, *ФТТ*, **45**:2 (2003), 345–348.
- [22] Р.З. Витлина, А.В. Чаплик, *Письма в ЖЭТФ*, **78**:10 (2003), 1147–1150.
- [23] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов, *ФТТ*, **54**:7 (2012), 1398–1404.

- [24] Л. Каданов, Г. Бейм, *Квантовая статистическая механика. Методы функций Грина в теории равновесных и неравновесных процессов.*, Мир, М., 1964.
- [25] Р. П. Мейланов, *Поверхность. Физика. Химия. Механика*, **3** (1999), 52.
- [26] D. C. Langreth, P. Nordlander, *Phys. Rev. B*, **43**:4 (1991), 2541–2557.
- [27] А. С. Кондратьев, А. Е. Кучма, *Электронная ферми-жидкость нормальных металлов*, Изд-во ЛГУ, Л., 1980.
- [28] L. Kong, C. Bjelkevig, S. Gaddam et al., *J. Phys. Chem. C*, **114**:49 (2010), 21618–21624.
- [29] J. González, F. Guinea, M. A. H. Vozmediano, *Nucl. Phys. B*, **424**:3 (1994), 595–618.
- [30] J. González, F. Guinea, M. A. H. Vozmediano, *Phys. Rev. B*, **59**:4 (1999), R2474–R2477, arXiv: cond-mat/9807130.
- [31] D. C. Elias, R. V. Gorbachev, A. S. Mayorov, S. V. Morozov, A. A. Zhukov, P. Blake, L. A. Ponomarenko, I. V. Grigorieva, K. S. Novoselov, F. Guinea, A. K. Geim, *Nature Physics*, **7**:9 (2011), 701–704, arXiv: 1104.1396.
- [32] N. Garcia, P. Esquinazi, A. A. Pasa, *Comment on “Dirac cones reshaped by interaction effects in suspended graphene” by Elias et al.*, *Nature Physics* **7**, 701 (2011), 2011, arXiv: 1110.2601.

Поступила в редакцию 20.11.2011,
после доработки 13.02.2012