

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования*

ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
СОЦИАЛЬНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

НОСАЕВА Татьяна Александровна

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО И МАГНИТНОГО
ПОЛЕЙ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА

01.04.07 – физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических

наук, профессор КРЮЧКОВ С.В.

Волгоград – 2014

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
1 Графен – перспективный материал современной науки и техники	8
1.1 Электронные свойства графена.....	15
1.2 Двухслойный графен	18
1.3 Перспективы применения графена.....	27
1.4 Квазиклассический метод исследования полупроводников и графена....	32
1.5 Эффекты выпрямления переменных токов в полупроводниковых сверх- решетках и графене.....	36
1.6 Выводы первого раздела.....	40
2. Эффект выпрямления поперечного тока в графене.....	41
2.1 Моделирование эффекта выпрямления тока в графене, вызванного действием электромагнитной волны	42
2.2 Выводы второго раздела.....	54
3 Квазиклассический подход к исследованию электрических свойств графена с примесями.....	55
3.1 Вероятность ионизации примесей в графене, под действием постоянного и переменного электрических полей	56
3.2 Проводимость графена с учетом ионизации примесей.....	71
3.3 Выводы третьего раздела.....	80
4 Эффект выпрямления переменных токов в графене.....	81
4.1 Влияние магнитного поля на взаимное выпрямление переменных токов в графене	83
4.2 Выводы четвертого раздела.....	93
Заключение	94
Список литературы	96

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы. Физические свойства графена, плоского моно-слоя атомов углерода, в стабильном состоянии плотно упакованных в двумерную гексагональную решетку, привлекает внимание, как специалистов физики конденсированного состояния, так и разработчиков переключательных электронных и оптоэлектронных устройств на основе этого материала. Уникальные свойства графена возникают, благодаря природе его носителей заряда – они ведут себя подобно релятивистским частицам без массы, для которых закон дисперсии в низкоэнергетическом приближении принимает вид $E(p) = v_f p$, где энергия отсчитывается от так называемой точки Дирака, в которой валентная зона и зона проводимости соприкасаются. Носители заряда в графене имеют бесщелевой энергетический спектр, но дополнительное влияние подложки, примесей, перпендикулярного к поверхности графена постоянного электрического поля может приводить к появлению запрещенной зоны, и тогда в нем проявляются новые электронные свойства.

Результаты исследования природы физических процессов в графене и последние достижения микроэлектроники стимулируют теоретическое исследование влияния внешних электрических полей и электромагнитных волн на электронные свойства его и наноструктур на его основе. Энергетический спектр графена не аддитивен, поэтому воздействие электрического или магнитного поля на систему в одном направлении приводит к возникновению тока в перпендикулярном полю направлению. Одним из методов определения особенностей электронных свойств графена является квазиклассическое приближение, с использованием которого можно рассматривать эффекты, проявляющиеся в области квазиклассических сильных полей. Подобные эффекты ранее были изучены в полупроводниковых сверхрешетках. Возникновение при определенных условиях запрещенной зоны в электронной структуре графена позволяет обнаружить такие эффекты, но в других диапазонах полей и частот.

На основании вышесказанного тема диссертации, посвященной теоретическому исследованию электронных свойств графена под влиянием электрического и магнитного полей с использованием квазиклассического метода, является актуальной.

Цель: выявление особенностей электронных свойств щелевой модификации графена при воздействии электрического и магнитного полей.

Для достижения цели были поставлены следующие **задачи:**

1) вычислить методом Монте-Карло постоянную составляющую плотности тока, индуцированного в графене эллиптически поляризованной электромагнитной волной и постоянным электрическим полем при учете неупругого механизма рассеяния, рассматривая в монослойном графене два канала рассеяния электронов на фононах: оптических и акустических;

2) вычислить постоянную составляющую плотности тока в монослойном графене с щелевым энергетическим спектром с учетом ионизации короткодействующих примесей в постоянном электрическом поле и определить зависимость вероятности ионизации примесных центров от параметров процесса: глубины залегания примеси и напряженности электрического поля;

3) вычислить постоянную составляющую плотности тока в двухслойном графене под влиянием двух электромагнитных волн разных частот с параллельными плоскостями поляризации в присутствии постоянного магнитного поля.

Методы: квазиклассический метод, основанный на физическом приближении для определенных диапазонов напряженностей и частот электрических и магнитных полей; метод численного моделирования Монте-Карло, решение кинетического уравнения Больцмана, где столкновительный член выбирается в модели с постоянной частотой столкновений, а также метод итерации и другие методы аналитического расчета.

Научная новизна. В данной работе впервые:

1) методом Монте-Карло изучены механизмы рассеяния электронов в монослойном графене и определена постоянная составляющая плотности тока, индуцированного в графене эллиптически поляризованной электромагнитной волной и постоянным электрическим полем, причем обнаружено, что неупругое рассеяние носителей тока на оптических фононах вносит наибольший вклад в эффект выпрямления тока;

2) вычислена в квазиклассическом приближении вероятность ионизации примесей в монослойном графене с щелевым энергетическим спектром при воздействии электрического поля, а также вычислена постоянная составляющая плотности тока в графене с учетом ионизации примесных центров в постоянном электрическом поле;

3) в квазиклассическом приближении в двухслойном графене вычислена постоянная составляющая плотности тока в направлении, перпендикулярном плоскостям поляризации падающих электромагнитных волн, при воздействии постоянного магнитного поля. Полученная при этом постоянная составляющая плотности тока возникает только при отношении частот падающих волн, равном 2.

Практическая ценность основных полученных результатов и выводов заключается в том, что установленные зависимости плотности тока от вероятности ионизации примесных центров, от глубины их залегания в графене позволяют дополнить информацию о характерных электронных свойствах графена и развить методы их исследования. Эффект выпрямления переменных токов, индуцированных в графене двумя падающими на его поверхность электромагнитными волнами, проявляющийся только при отношении их частот, равном 2, может быть использован при проектировании детектора второй гармоники излучения. Эффект выпрямления поперечного тока в графене может быть использован для создания прибора, измеряющего сдвиг фаз между плоско поляризованными волнами, являющимися компо-

нентами эллиптически поляризованной волны. Теоретически обнаруженные эффекты перспективны для нанотехнологии, например, для установления характеристик исследуемых образцов графена и воздействующих на него внешних полей.

Достоверность полученных результатов и выводов обеспечивается использованием современных, хорошо апробированных методов теоретической физики и компьютерного моделирования: метода мнимого времени и кинетического уравнения Больцмана; квазиклассического моделирования методом Монте-Карло и строгим соблюдением критериев применимости используемых подходов, моделей и приближений. Полученные данные качественно согласуются с известными экспериментальными данными, где такое сравнение возможно и правомерно.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. Неупругое рассеяние носителей тока на оптических фонах под действием эллиптически поляризованной электромагнитной волны и постоянного электрического поля приводит к возникновению постоянной составляющей плотности тока в графене, которая зависит от сдвига фаз компонент и частоты эллиптически поляризованной электромагнитной волны.

2. Ионизация примесных центров под влиянием электрического поля приводит к росту постоянной составляющей плотности тока в щелевой модификации графена, а зависимость вероятности ионизации примесных центров в графене качественно соответствует зависимости вероятности ионизации примесей в полупроводниках.

3. Одновременное воздействие на двухслойный графен постоянного магнитного поля и двух нормально падающих электромагнитных волн с параллельными плоскостями поляризации, отношение частот которых равно 2, приводит к возникновению постоянной составляющей плотности тока в перпендикулярном направлении.

Апробация результатов. Результаты исследований представлялись на научных конференциях: XIV и XV Региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области / Направление «Физика и математика» / Волгоград, 2009, 2010; XIX Международное совещание «Радиационная физика твердого тела» / Севастополь, 2009; 17 Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-17, Екатеринбург) / Направление: «Физика конденсированного состояния» / Екатеринбург, 2011; 18 Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-18, Красноярск) / Направление: «Физика конденсированного состояния» / Красноярск, 2012; 10 региональная научная конференция «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование» / Владивосток, 2011; Основные результаты проделанной работы регулярно докладывались и обсуждались на семинарах научно-исследовательской лаборатории «Физика низкоразмерных систем» на кафедре общей физики Волгоградского государственного социально-педагогического университета.

Публикации. Основные научные положения, результаты и выводы диссертации опубликованы в 10 работах: 3 статьи в рецензируемых российских журналах из Перечня ВАК Минобрнауки РФ и 7 тезисов в сборниках тезисов международных, всероссийских и региональных конференций.

Личный вклад автора. Основные положения диссертации сформулированы совместно с научным руководителем, профессором Крючковым С.В. и соавтором совместно опубликованных работ, профессором Завьяловым Д.В. Автор лично с использованием численного моделирования методом Монте-Карло выявила эффект возникновения постоянной составляющей плотности тока в графене и рассчитала ее в однослойном и двухслойном графене при воздействии электрического и магнитного полей, а так же непосредственное участвовала во всех сопровождающих вычислениях, анализе и обсуждении результатов и выводов работы и в подготовке публикаций.

1 ГРАФЕН – ПЕРСПЕКТИВНЫЙ МАТЕРИАЛ СОВРЕМЕННОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

Графен – новый перспективный материал нанoeлектроники. Он впервые был получен в 2004 году и описан Новоселовым К.С. с соавторами в работе [1]. Его открытие и получение вызвало большой интерес к физическим свойствам, которые изучаются экспериментально и теоретически до сих пор. Графен состоит из атомов углерода, которые соединяются sp^2 связями в гексагональную решетку, толщина которой составляет один атом (рис. 1), и представляет собой двумерный кристалл. Обратная решётка также является гексагональной. Графен можно представить как одну плоскость, отделенную от объемного кристалла графита.

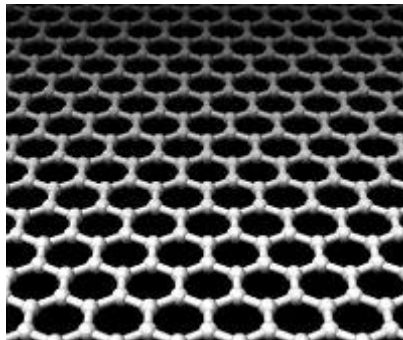


Рисунок 1 - Кристаллическая решетка графена

Теоретическое исследование графена началось задолго до получения его реальных образцов, поскольку из него можно собрать трёхмерный кристалл графита. Графен является базой для построения теории этого кристалла. Графит является полуметаллом, и, как показал еще в 1947 году Wallace P. [2], в зонной структуре графена также отсутствует запрещённая зона, причём в точках соприкосновения валентной зоны и зоны проводимости энергетический спектр электронов и дырок линейен, как функция волнового вектора.

Впервые о двумерных кристаллах и их физических свойствах заговорили в научной литературе уже в первой трети двадцатого столетия. Тем не менее, Ландау Л.Д и Лифшиц Е.М. в своей знаменитой книге [3] сделали вывод, что свободную идеальную двумерную пленку получить невозможно из-за ее неизбежного быстрого сворачивания или скручивания, тем более что тепловые флуктуации атомов в ней наверняка приведут к ее плавлению практически при любой температуре. И поэтому более полувека исследование, например, отдельно взятого графитового монослоя не представляло ни научного, ни практического интереса, что отмечалось, например, Гайдидеем Ю.Б. и Локтевым В.М. в их достаточно новой тогда работе [4].

Однако после открытия и получения углеродных нанотрубок, отдельный графитовый монослой, названный графеном, весьма заинтересовал научный мир, поскольку вначале вся теория графена строилась на простой модели нанотрубки [2]. Достаточно хорошо разработанную к тому времени несколькими научными коллективами, в частности, Hamada N., Sawada S., и Oshiyama A. (*Physical Review Letters*, 1992) [5]; Dresselhaus M.S., Dresselhaus G. и P.C. Eklund (*San Diego: Academic Press*, 1996) [6]; Ando T. (*Journal of the Physical Society of Japan*, 2005) [7], а также Harris P.J.F. (*Cambridge: Cambridge University Press*, 1999) [8], теорию нанотрубок можно было использовать для рассмотрения графена, учитывая, что нанотрубка – это тот же графен, только скрученный в цилиндр.

Энергетический спектр графена, представляющего собой плоскую гексагональную решетку, теоретически был рассчитан задолго до экспериментального получения графена в работе [2], посвященной исследованию свойств графита. После этого свойства графена широко исследовались и прежде всего потому, что он является строительным материалом для углеродных структур всех других размерностей и его свойства являются основой для расчетов свойств графита, фуллеренов и нанотрубок, в том числе, упомя-

нутыми выше учеными в работах [6 - 8], а также и Shon N.H., Ando T. (*Journal of the Physical Society of Japan*, 1998) в работе [9].

При последовательном отслаивании графита в 2004 году [1] экспериментально получили графен, который был назван *exfoliated grapheme* в работах Blake P., Hill E.W., Castro Neto A.H. с соавторами (*Applied Physics Letters*, 2007) [10] и Abergel D.S.L., Russell A., Fal'ko V.I. (*Applied Physics Letters*, 2007) [11] явилось поворотным точкой, после чего графен сделался «модным» материалом, интересным и до сих пор. В работе Новоселова К.С. и Geim A.K. с соавторами (*Science*, 2004) [1] сообщалось о получении по аналогии с тонкими эпитаксиальными плёнками стабильной двумерной плёнки (графена) на подложке окисленного кремния. Главным здесь было то, что графен стал видимым в оптическом микроскопе, если он был на поверхности кремниевой подложки с тщательно выбранной толщиной ее слоя, при этом полученный таким образом графен мог давать свою слабую интерференционную картину.

Особенностью графена является то, что зависимость энергии его носителей заряда от модуля квазиимпульса линейна в низкоэнергетическом приближении, что выявилось в работах, кроме упомянутой работы [2] и других научных коллективов, например, Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R. с соавторами (*Reviews of Modern Physics*, 2009) [12], Das Sarma S., Adam S., Hwang E.H. с соавторами (*Reviews of Modern Physics*, 2011) [13], Sitenko Y.A., Vlasii N.D. (*Nuclear Physics B*, 2007) [14]. Как показали Allain P.E., Fuchs J.N. (*European Physical Journal B*, 2011) [15], Drut J.E., Lähde T.A. (*Physical Review B*, 2009) [16], Katsnelson M.I. (*European Physical Journal B*, 2006) [17] и Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V. с соавторами (*Nature*, 2005) [18], эта особенность определяет сходство поведения носителей заряда в графене с поведением ультрарелятивистских частиц, движущихся со скоростью Ферми $v_f \approx 10^6$ м/с и, следовательно, их энергия может быть описана формулой:

$$\varepsilon = v_F |\mathbf{p}|. \quad (1.1)$$

Далее была разработана методика получения стабильных к изгибной деформации и достаточно совершенных образцов графена, которая представлена в работах Novoselov K.S., Jiang D., Schedin F. с соавторами (*Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2005) [19], Niyogi S., Bekyarova E., Itkis M.E. с соавторами (*J. Am. Chem. Soc.*, 2006) [20], позволившая начать экспериментальное изучение кинетических и гальваномагнитных явлений в материале. Существует несколько вариантов выращивания графена, которые представлены в работах Bunch J.S. (*NanoLett*, 2005) [21], Stankovich S. (*Nature*, 2006) [22], Stankovich S., Mater J. (*Chem*, 2006) [23], Rollings E., Gweon G.-H., Zhou S. Y. с соавторами (*arXiv: cond-mat*, 2006) [24], Berger C. (*Science*, 2006) [25].

Носители зарядов в графене, которые называются дираковскими фермионами, обладают рядом особенностей. В графене обнаружен аномальный квантовый эффект Холла, описанный в работах [18], Zhang Y., Tan Y.-W., Stormer H.L. с соавторами (*Nature*, 2005) [26], Novoselov K.S., McCann E., Morozov S.V. с соавторами (*Nature Physics*, 2006) [27], Abanin D.A., Novoselov K.S., Zeitler U. с соавторами (*Physical Review Letters*, 2007) [28], графен обладает так называемой минимальной проводимостью, представленной в ранее описанных работах [12, 13, 18], а также в работе Ando T., Nakanishi T., Saito R. (*Journal of the Physical Society of Japan*, 1998) [30], для этого материала предсказаны эффекты, связанные с особым типом рассеяния носителей заряда на потенциальных барьерах – парадокс Клейна, описанные в работах Katsnelson M.I., Novoselov K.S., Geim A.K. (*Nature Physics*, 2006) [29], Calogeracos A., Dombey N. (*Contemporary Physics*, 1999) [31], Ициксон К., Зюбер Ж.-Б. (М.: «Мир», 1984) [32]. Благодаря своим кристаллическим и электронным свойствам графен привлек внимание разработчиков микроэлектронных устройств.

Кристаллическая решётка графена представляет собой плоскость, состоящую из шестиугольных ячеек, то есть является двумерной гексагональной кристаллической решёткой [12 – 14]. В элементарной ячейке кристалла

находятся два атома, обозначенные А и В. Каждый из этих атомов при сдвиге на вектора трансляций (любой вектор вида $r_a = me_1 + ne_2$, где m и n – любые целые числа) образует подрешётку из эквивалентных ему атомов, расположенных в эквивалентных узлах кристалла (рис. 2).

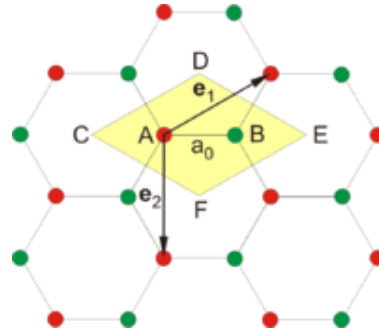


Рисунок 2 - Кристаллическая структура графена из двух подрешеток из атомов, покрашенных зеленым и красным цветом

Расстояние между ближайшими атомами углерода в шестиугольниках, обозначенное a_0 , составляет 0,142 нм. Постоянную решётки a можно получить из простых геометрических соображений. Она равна $a = \sqrt{3}a_0$, то есть 0,246 нм, которая представлена в работах [1, 12, 13] и Rozhkov A.V., Giavaras G., Vliokh Y.P. с соавторами (*Physics Reports*, 2011) [33]. Если определить за начало координат точку, соответствующую узлу кристаллической решётки (подрешётка А), из которой начинаются векторы трансляций: e_1 , e_2 с длиной векторов, равной a , и ввести двумерную декартову систему координат в плоскости графена с осью ординат, направленной вверх, и осью абсцисс, направленной по отрезку, соединяющему соседние узлы А и В, то тогда координаты концов векторов трансляций, начинающихся из начала координат, записываются в виде:

$$e_1 = \left[\sqrt{3}a/2, -a/2 \right], e_2 = [0, a], \quad (1.2)$$

а соответствующие им вектора обратной решётки:

$$g = \left[2/\left(\sqrt{3}a\right), a\right], g_2 = \left[1/\left(\sqrt{3}a\right), 1/a\right], \quad (1.3)$$

В декартовых координатах положение ближайших к узлу подрешётки А, то есть все атомы которой показаны красным в начале оси координат (см. рис. 2), атомов из подрешётки В, которые показаны, соответственно, зелёным цветом, задаётся в виде:

$$\left[a/\sqrt{3}, 0\right], \left[-a/(2\sqrt{3}), a/2\right], \left[-a/(2\sqrt{3}), -a/2\right]. \quad (1.4)$$

Кристаллическая структура материала находит отражение во всех его физических свойствах. В особенности сильно от порядка, в котором расположены атомы в кристаллической решётке, зависит зонная структура кристалла. Зонная структура графена рассчитана в статье [2] в приближении сильно связанных электронов. На внешней оболочке атома углерода находится 4 электрона, три из которых образуют связи с соседними атомами в решётке при перекрывании sp^2 -гибридизированных орбиталей, а оставшийся электрон находится в $2pz$ -состоянии (именно, это состояние отвечает в графите за образование межплоскостных связей, а в графене – за образование энергетических зон).

Энергетический спектр графена, с учетом точек импульсного пространства, представляется в форме:

$$\varepsilon = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) \left(\cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) + \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)\right)}. \quad (1.5)$$

Расчет показывает, что валентная зона (знак « \leftarrow ») и зона проводимости (знак « \rightarrow ») касаются в точках импульсного пространства. Где координаты этих точек равны:

$$\begin{aligned} & \left(0; \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \left(0; -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \left(\frac{2\pi}{3a}; \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \left(\frac{2\pi}{3a}; -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \\ & \left(-\frac{2\pi}{3a}; \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \left(-\frac{2\pi}{3a}; -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Таким образом, графен по своим свойствам является полуметаллом [12, 13], Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. (М.: «Наука», 1977) [34]. Так как закон дисперсии для носителей зарядов в графене идентичен закону дисперсии для безмассовых частиц, графен может выступать в качестве своеобразной «экспериментальной лаборатории» для квантовой электродинамики.

1.1 Электронные свойства графена

Аллотропные модификации углерода все чаще привлекают исследователей в области наноматериалов и наноэлектроники. Первоначально физики интенсивно изучали фуллерены, затем ученых заинтересовали углеродные нанотрубки, а в настоящее время, как представлено в работе Volotin K. I., Ghahari F., Shulman M. D. с соавторами (*Nature*, 2009) [35], пристальное внимание физиков и специалистов в области нанотехнологий направлено и к графену. С точки зрения электронных свойств, графен является двумерным полупроводником с нулевой запрещенной зоной. Вследствие линейности спектра графена, можно ожидать, что поведение квазичастиц в нем будет в корне отличаться от поведения квазичастиц в обычных металлах и полупроводниках, имеющих параболический закон дисперсии и подобных свободным электронам [1].

Графен представляет собой не только самый тонкий материал в мире, он еще и на порядок прочнее стали, а при комнатной температуре проводит электрический ток лучше любого из известных материалов. Эти уникальные свойства графена привлекают к нему интерес физиков и специалистов по нанотехнологии, которые планируют использовать графен для получения механических и электронных устройств нового типа, как показано в работе Chen J.H., Jang C., Adam S. с соавторами (*Nat. Phys.*, 2008) [36].

Подвижность носителей заряда в современных образцах графена при комнатной температуре, обусловленная рассеянием на примесях или нановолнистостью кристалла, имеет огромный потенциал для роста и ограничена разве что величиной $200000 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, которая, как показано в работе [25], обусловлена фононным рассеянием. Другой особенностью графена является то, что проводимость σ его остается конечной даже при стремлении к нулю концентрации носителей n и, более того, близка по величине к кванту проводимости, как описано в работе Pi K., McCreary K. M., Bao W. с соавторами (*Physical Review B*, 2009) [37].

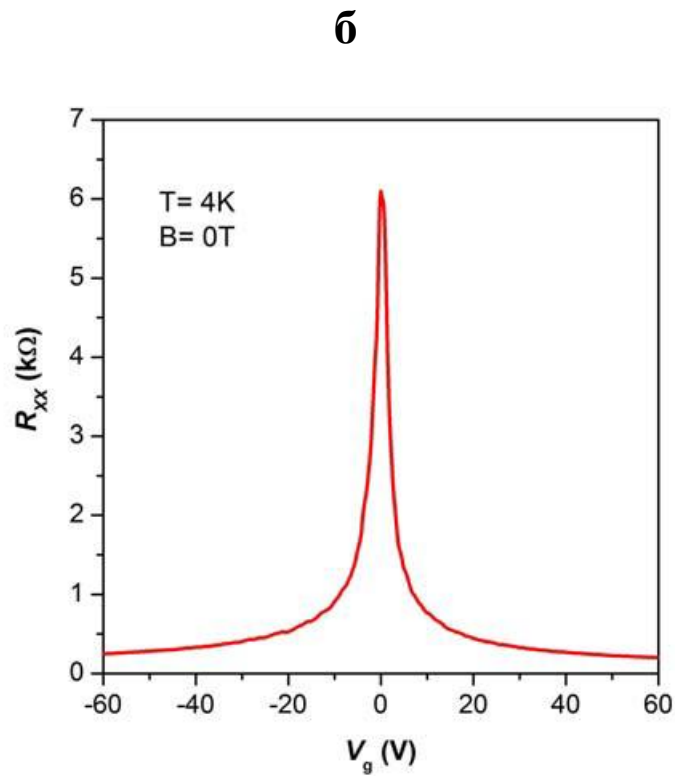
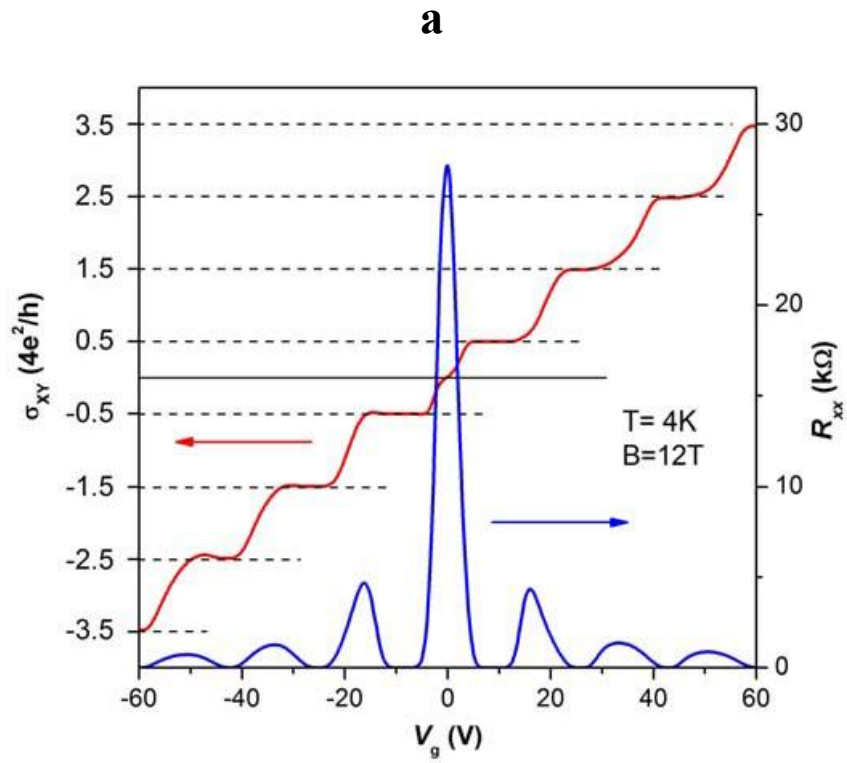


Рисунок 3 - Продольное магнитосопротивление и Холловская проводимость в графене как функция напряжения на затворе (а) и амбиполярный эффект электрического поля в графене (б)

Полуцелое квантование подтверждает, что квазичастицы в графене являются безмассовыми дираковскими фермионами (рис. 3, а). Положительное (отрицательное) напряжение на затворе индуцирует электроны (дырки) с концентрацией, равной $n = \alpha VG$, где $\alpha \approx 7,2 \cdot 10^{10} \text{ см}^2/\text{В}$ при толщине подзатворного SiO_2 диэлектрика равной 300 нм. Под влиянием электрического поля тип носителей заряда (рис. 3, б) может быть изменен с электронного на дырочный. В электрических полях, ограниченных пробоем диэлектрика, можно достигать концентраций носителей n до 10^{13} см^{-2} . При этом во всем интервале концентраций сохраняется высокая подвижность носителей, слабо зависящая от температуры [1]. Как следствие, баллистический транспорт субмикронного масштаба реализуется даже при комнатной температуре. Как отмечено в работе Bostwick A., Ohta T., Seyller T. с соавторами (*Nat. Phys.*, 2007) [38], удивительные свойства графена возникают, благодаря уникальной природе его носителей заряда – они ведут себя подобно релятивистским частицам. Хотя ничего особо релятивистского при движении непосредственно электронов в окрестностях атомов углерода нет, их взаимодействие с сотовидной решеткой приводит к образованию квазичастиц, которые при низких значениях энергии E точно описываются уравнением Дирака.

Классическая частица не может преодолеть область, в которой ее потенциальная энергия выше, чем ее полная энергия. Однако из соотношения неопределенностей Гейзенберга в квантовой механике следует, что чем меньше рассматриваемый отрезок времени, тем больше неопределенность в энергии, и проникновение через классически запрещенную область для квантовой частицы становится возможным. Это явление широко используется в современной электронике, например, в гигантском магниторезистивном эффекте и спиновых клапанах.

Графен стал первым и пока самым ярким представителем нового класса материалов – двумерных кристаллов. Фактически, с открытием графена по-

явилась новая научная парадигма – «релятивистская» физика твердого тела, в которой квантовые релятивистские явления (часть которых не реализуема даже в физике высоких энергий) могут быть теперь исследованы в обычных лабораторных условиях. Уникальность электронных свойств графена обусловлена тем, что носители заряда в нем подобны безмассовым релятивистским фермионам и описываются релятивистским уравнением Дирака, а не уравнением Шредингера.

1.2 Двухслойный графен

Двухслойный графен, в котором можно провести изменение ширины запрещенной зоны при изменении напряженности электрического поля, которое падает перпендикулярно поверхности образца, также представляет интерес. Однако, при рассмотрении энергетического спектра двухслойного графена необходимо учесть взаимодействие между слоями и взаимодействие атомов, которые находятся в каждом слое материала (рис. 4), как показано в работе Nilsson J., Castro Neto A.H. (*Physical Review Letters*, 2007) [39].

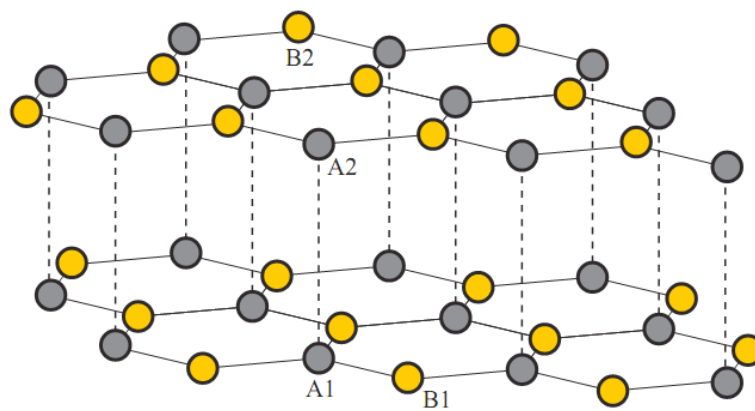


Рисунок 4 - Структура двухслойного графена, взятая из работы [39], где желтые и серым обозначены атомы элементарной ячейки

Тем не менее, для расчета энергетической структуры можно брать во внимание только относительное расположение проекции атомов одной графеновой плоскости на другую плоскость, несмотря на то, что двухслойный графен является двумерным материалом (рис. 5), как показано в работе Nilsson J., Castro Neto A.H., Guinea F. с соавторами (*Physical Review B*, 2008) [40]. Аналогично как и для однослойного графена, выделим в каждой плоскости подрешетки A и B (для верхнего листа обозначим их A_1 и B_1 , для нижнего листа – A_2 и B_2). Необходимо волновую функцию представить в виде столбца состоящего из четырех компонент, которые отвечают состояниям электрона на двух листах углеродных атомов, каждый из которых, в свою очередь, состоит из двух подрешеток:

$$\psi = (\psi_1^A, \psi_1^B, \psi_2^A, \psi_2^B)^T \quad (1.7)$$

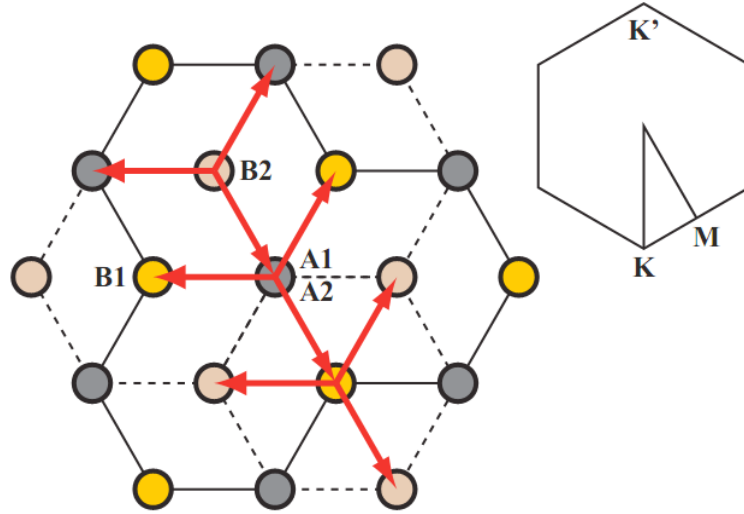


Рисунок 5 - Проекция верхней плоскости кристалла двухслойного графена на нижнюю плоскость

Гамильтониан первого листа графена запишем в следующем виде:

$$H^1 = \begin{pmatrix} 0 & \varsigma \\ \varsigma^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

где $\varsigma = -t \sum_{j=1}^3 \exp(i \mathbf{k} \mathbf{u}_j) \approx v_F (k_x - i k_y)$. При такой записи компонента $H_{12} = \varsigma$ соответствует переходу электрона с подрешетки B_1 на подрешетку A_1 (соответственно, компонента H_{21} соответствует обратному переходу $A_1 \rightarrow B_1$). Из-за изменения роли подрешеток во втором листе графена (см. рис. 5), меняется гамильтониан подрешетки и принимает следующий вид

$$H^2 = \begin{pmatrix} 0 & \varsigma^* \\ \varsigma & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.9)$$

если независимые компоненты волновой функции, которые отвечают разным листам, и отсутствует взаимодействия между слоями, то гамильтониан запишется следующим образом:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \zeta & 0 & 0 \\ \zeta^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \zeta^* \\ 0 & 0 & \zeta & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

Выражение (1.10) в длинноволновом приближении совпадает со следующим:

$$\tilde{H} = v_F \begin{pmatrix} 0 & \kappa_x - i\kappa_y & 0 & 0 \\ \kappa_x + i\kappa_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \kappa_x + i\kappa_y \\ 0 & 0 & \kappa_x - i\kappa_y & 0 \end{pmatrix} = v_F \kappa_x \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \end{pmatrix} + v_F \kappa_y \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & -\sigma_2 \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

но изменяются компоненты волновой функции: четыре компоненты волновой функции, которая соответствует некоторому гамильтониану:

$$\tilde{H} = v_F \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha}(ik_x + k_y) \\ e^{-i\alpha}(-ik_x + k_y) & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.12)$$

будут соответствовать состояниям электрона на двух подрешетках для двух разных долин, а компоненты волновой функции гамильтониана в выражении (1.10) будут отвечать состояниям электрона на двух подрешетках двух различных листов.

В проекции на плоскость перекрытие $B_1 \rightarrow B_2$ противоположно перекрытию $B_1 \rightarrow A_1$ (рис. 5), поэтому компонента, соответствующая такому переходу, должна быть пропорциональна ζ^* . Из-за изменения расстояния между атомами изменится интеграл перекрытия. Поэтому, компонента гамильтониана, соответствующая переходу электрона $B_1 \rightarrow B_2$, равна

$$v_3 \zeta = \frac{\gamma_3}{\gamma_0} \zeta^*, \quad \text{где интегралы перекрытия } \gamma_0 = t \approx 2,7 \text{ эВ}, \gamma_3 \approx 0,3 \text{ эВ [13].}$$

Аналогично, проекция перекрытия $B_1 \rightarrow A_2$ совпадает с направлением перекрытия

$B_1 \rightarrow A_1$, и компонента гамильтониана, соответствующая данному переходу, будет выражена по формуле из работы [11]:

$$-v_4\zeta = \frac{\gamma_4}{\gamma_0} \zeta, \quad \text{где } \gamma_4 = -0,04 \text{ эВ}. \quad (1.13)$$

Атомы из подрешетки A_1 , в решетке двухслойного графена, располагаются непосредственно над атомами подрешетки A_2 . Интеграл перекрытия между слоями графена $\gamma_1 = t_\perp \approx 0,4 \text{ эВ}$. Окончательно, гамильтониан двухслойного графена приобретает вид:

$$H = \begin{pmatrix} \Delta & \zeta & t_\perp & -v_4\zeta^* \\ \zeta^* & \Delta & -v_4\zeta^* & v_3\zeta \\ t_\perp & -v_4\zeta & -\Delta & \zeta^* \\ -v_4\zeta & v_3\zeta^* & \zeta & -\Delta \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

Здесь параметр Δ является разностью энергий электрона, расположенных на разных слоях, которые возникают, если графен поместить в перпендикулярное его поверхности постоянное электрическое поле.

В случае, когда $\Delta=0$, закон дисперсии принимает параболический вид и в энергетическом спектре двухслойного графена отсутствует щель. Образец, в гамильтониане которого $\Delta \neq 0$ (так называемый *biasbilayer graphene* [39, 41]), имеет в своем энергетическом спектре запрещенную зону. В низкоэнергетическом приближении щелевую модификацию графена рассчитал McCann E. (*Physical Review B*, 2006) в работе [42], когда он пренебрег в гамильтониане (1.14) элементами, пропорциональными γ_3 , γ_4 , и тогда можно было записать следующую матрицу:

$$H = \begin{pmatrix} \Delta & v_F k e^{-\theta} & t_\perp & 0 \\ v_F k e^{\theta} & \Delta & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & -\Delta & v_F k e^{\theta} \\ 0 & 0 & v_F k e^{-\theta} & -\Delta \end{pmatrix}, \quad (1.15)$$

где введены обозначения $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, $\theta = \text{arctg} \frac{k_y}{k_x}$.

Решая уравнение $\det(H - I\varepsilon) = 0$, где I - единичная матрица, авторы в работах [12, 42, 43] приходят к выражению спектра двухслойного графена в низкоэнергетическом приближении:

$$\varepsilon_\alpha = \pm \sqrt{\Delta^2 + v_F^2 k^2 + \frac{t_\perp^2}{2} + (-1)^\alpha \sqrt{v_F^2 k^2 (4\Delta^2 + t_\perp^2) + \frac{t_\perp^4}{4}}}, \quad (1.16)$$

где $\alpha = 1, 2$. Знак «+» в формуле (1.16) соответствует дисперсионным кривым в зоне проводимости, знак «-» отвечает кривым, описывающим валентную зону. Индекс α нумерует дисперсионные кривые, относящиеся к одной зоне. Используя выражение (1.16), построен спектр двухслойного графена (рис. 6).

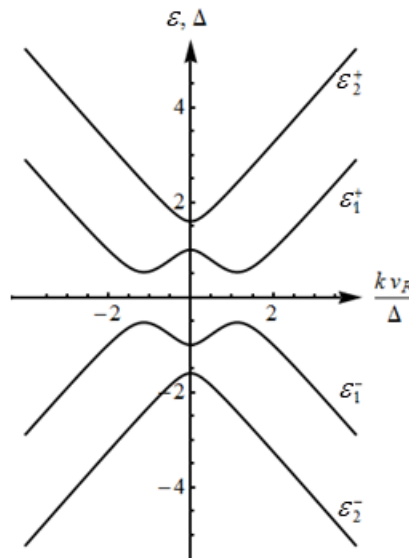


Рисунок 6 - Спектр двухслойного графена

Далее используя низкоэнергетическое приближение, рассмотрим случай когда $\alpha = 1$. Энергия электрона в зоне проводимости запишется в виде:

$$\varepsilon = \sqrt{\Delta^2 + v_F^2 k^2 + \frac{t_\perp^2}{2}} - \sqrt{v_F^2 k^2 (4\Delta^2 + t_\perp^2) + \frac{t_\perp^4}{4}}. \quad (1.17)$$

Если выполняется условие

$$\frac{v_F k}{t_{\perp}} \ll 1 \text{ и } \frac{\Delta}{t_{\perp}} \ll 1, \quad (1.18)$$

то выражение (1.17) можно разложить по параметру $\frac{v_F k}{t_{\perp}}$ [2]:

$$\varepsilon \approx \Delta \left(1 - 2 \left(\frac{v_F k}{t_{\perp}} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{t_{\perp}}{\Delta} \right)^2 \left(\frac{v_F k}{t_{\perp}} \right)^4 \right) \quad (1.19)$$

и получить энергетические спектры двухслойного графена (рис. 17).

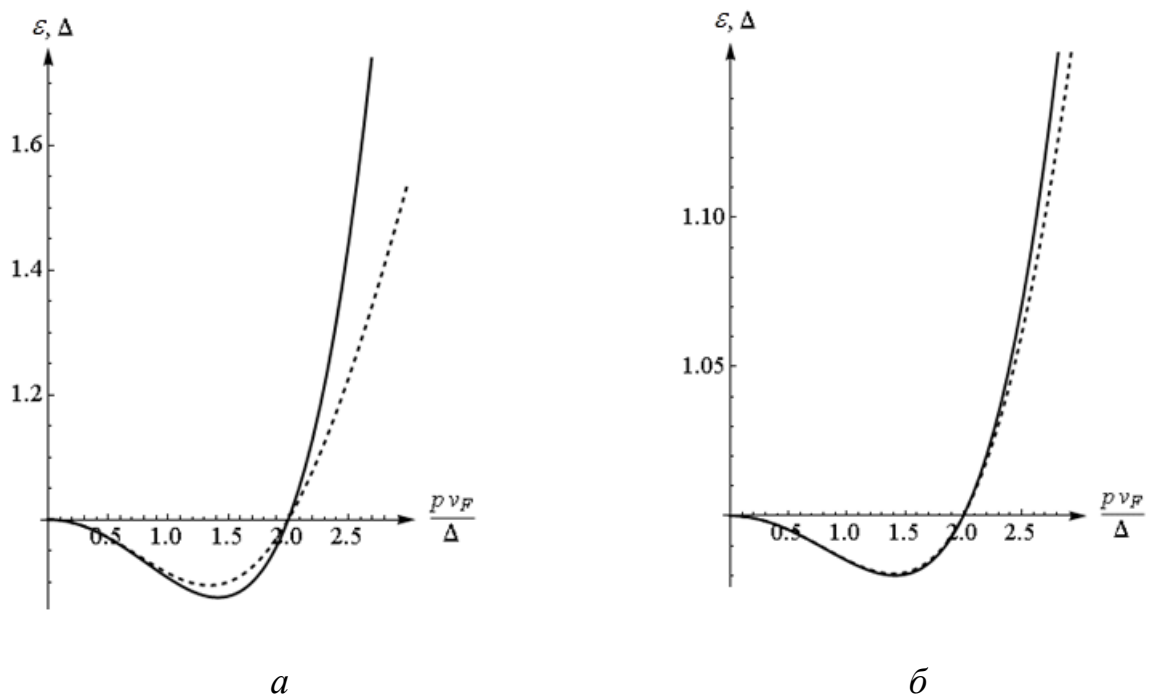


Рисунок 7 - Энергетические спектры двухслойного графена по выражению (1.17) (пунктирные линиями) и (1.19) (жирные линии) при $\Delta/t=0,1$ (а) и при $\Delta/t=0,25$ (б)

Анализируя рисунок 7 видим, что для случая меньшего Δ совпадение графиков хуже. Выражение (1.17) принимает минимум при значениях

$$\frac{k_{\min} v_F}{\Delta} = \sqrt{\frac{4V^2 + 2}{4V^2 + 1}}, \quad V = \frac{\Delta}{t_{\perp}}. \quad (1.20)$$

Полуширина запрещенной зоны двухслойного графена равна

$$\Delta' = \frac{\Delta}{\sqrt{4V^2 + 1}}, \quad V = \frac{\Delta}{t_{\perp}}. \quad (1.21)$$

Энергетический спектр двухслойного графена можно выразить в форме (1.19) в ограниченных областях величин напряженностей прикладываемых полей, значений температуры и справедлив только в области малых импульсов. Условие (1.18) приводит к следующим соотношениям:

$$\frac{eE\tau v_F}{t_{\perp}} \ll 1, \quad k_B T \sim \Delta. \quad (1.22)$$

Здесь τ - среднее время между столкновениями, для которых в графене характерны значения $\tau \sim 10^{-10} \dots 10^{-11} \text{ с}^{-1}$, соответственно, $eE\tau$ - импульс, набираемый электроном, находящимся в электрическом поле напряженностью E , за промежуток времени между двумя последовательными столкновениями. При сравнении графиков выражений (1.19) и (1.17) было получено условие $k_B T \sim \Delta$ (k_B - постоянная Больцмана). Поэтому, энергетический спектр двухслойного графена записанный в форме (1.22) может использоваться если значения напряженности электрического поля определены:

$$E \leq 0,1 \text{ ед. СГСЭ} = 30 \text{ В/см}. \quad (1.23)$$

Однозонное приближение накладывает более строгое условие на температуру:

$$k_B T \ll \Delta'. \quad (1.24)$$

Полагая $\Delta = 0,1 t_{\perp} \approx 0,035 \text{ эВ}$, находим

$$T \ll 400 \text{ К} \quad (1.25)$$

Выражение (1.19) можно применять и при значениях температур до нескольких десятков градусов.

В спектре двухслойного графена записанного по форме (1.19) отражается особенность поведения носителей заряда как в графене с запрещенной зоной, и в нем появляется слагаемое, которое пропорционально четвертой степени модуля квазиимпульса. Этот факт означает, что этот спектр суще-

ственно не аддитивен, поэтому выражение энергии не может находиться в виде суммы слагаемых, которые зависят только от одной из компонент квазиимпульса. Поэтому будут взаимно зависимыми в перпендикулярных направлениях движения носителей заряда. Таким образом, лучше использовать выражение (1.19) для энергии двухслойного графена если учитывать неаддитивность спектра и изучать эффекты, которые с ней связаны.

Неаддитивность энергетического спектра присуща не только двухслойному графену, но также и образцам с зависимостью энергии от квазиимпульса

са вида $\varepsilon = v_F |\mathbf{k}|$ и $\varepsilon = \pm \sqrt{\Delta^2 + v_F^2 (k_x^2 + k_y^2)}$.

1.3 Перспективы применения графена

Графен может быть использован как перспективный материал для применения в микро- и нанoeлектронике. По способу получения, электронным и физическим свойствам различают несколько видов графена. Основные его разновидности:

- *exfoliated graphene* – образец, который помещен на поверхность диоксида кремния и имеет линейный закон дисперсии,
- эпитаксиальный графен (*epitaxial graphene*) на подложке карбида кремния,
- графен на подложке нитрида бора (в энергетическом спектре данных модификаций присутствует запрещенная зона) и
- графен, полученный в свободном состоянии (*suspended graphene*).

Широко исследуются искусственные структуры на основе графена – графеновые наноленты (*graphene nanoribbons*), графеновые квантовые точки, графеновые сверхрешетки, которые представлены в работе [26], а также Zhou S.Y., Gweon G.-H., Fedorov A.V. с соавторами (*Nature Materials*, 2007) [44], Davydov S. Yu. (*Semiconductors*, 2011) [45], Giovannetti G., Khomyakov P.A., Brocks G. с соавторами (*Physical Review B*, 2007) [46].

Носители заряда в графене обладают высокой подвижностью, как показано в работах [1, 13], а баллистический транспорт может применяться в устройствах вплоть до микрометровых размеров, что выявилось в работе [12]. Вероятно, наилучшими вариантами для полевых транзисторов, базированных на графене, окажутся устройства на квантовых ямах и те, которые будут использовать *p-n* переход в двухслойном графене.

При конструировании полевых транзисторов необходимо повышать степень легирования, что избежать уменьшения подвижности при повышении концентрации носителей. Увеличение вероятности столкновения носителей с ионами доноров связано с повышением концентрации доноров и может привести к снижению подвижности носителей. Использование гетероперехо-

дов позволило разрешить это противоречие: двумерный электронный газ обеспечивает возможность получения слоя с повышенной концентрацией носителей без увеличения концентрации доноров.

Так как углеродные нанотрубки проводят электричество практически без сопротивления, их пытались применять для создания транзисторов. Уже были созданы единичные транзисторы и полностью функционирующий логический контур. Тем не менее, серьезным преимуществом графена перед углеродными нанотрубками является еще более высокая подвижность носителей зарядов. Были проведены эксперименты, в которых при комнатной температуре электроны в графеновой наноткани совсем не рассеивались в полете, а свободно перемещались по баллистическим траекториям. Таким образом, реальны попытки создать прототипы так называемых «баллистических транзисторов», где электроны могут перемещаться с огромными скоростями и с минимальными потерями энергии. Но проблема заключается в высоких значениях токов утечки, что связано с проявлением парадокса Клейна.

С уменьшением потенциального барьера, по сравнению с энергетической щелью, которая разделяет валентную зону и зону проводимости, по экспоненциальному закону при увеличении высоты и ширины барьера уменьшается вероятность проникновения носителей (рис. 8, а). Если энергия распространяющегося электрона будет совпадать с одним из уровней энергий дырки внутри барьера, то возможно резонансное туннелирование. Вероятность преодоления барьера для графена, если электроны перпендикулярно падающие, всегда равна 1, независимо от его высоты и ширины (рис. 8, б), как показано в работе Станкевича И.В., Никерова М.В., Бочвара Д.Ф. (*Успехи химии*, 1984) [47]. Поэтому, не могут быть закрыты никаким внешним напряжением «углеродные транзисторы» на основе однослойного графена.

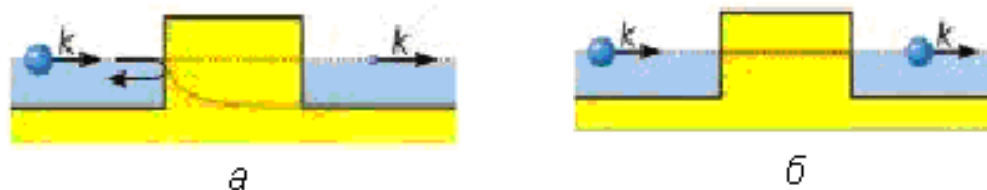


Рисунок 8 – Туннелирование электрона через потенциальный барьер: в обычном полупроводнике - (а) и графене - (б)

Парадокс Клейна может привести к следующему: в графене частицы трудно локализовать и возникает высокая подвижность носителей зарядов в графене. Были предложены несколько моделей, которые представлены в работах Попова В.С. (*ЖЭТФ*, 1971) [48] и Schneider W., Seeger K. (*Applied Physics Letters*, 1966) [49], когда электроны в графене можно локализовать и туннелирование киральных частиц в случае двухслойного графена может приводить к более сильному подавлению проникновения нормально падающего электрона через барьер, по сравнению с традиционными полупроводниками. Если создать потенциальный барьер при помощи внешнего вентиля, то можно манипулировать вероятностью перехода для баллистических электронов, которые слабо взаимодействуют с атомами решетки в двухслойном графене.

В работе Banis T. Ya., Pozhela Yu. K., Repshas K.K. (*Litovskiy fizicheskii sbornik*, 1966) [50] было предложено использовать однослойные графеновые наноленты в качестве основы транзистора. Предполагалось создать тонкие полоски графена, с такой шириной запрещенной зоны, чтобы при комнатной температуре ее ширина была достаточной для перехода в диэлектрическое состояние. Быстроту действия данного транзистора можно было увеличить благодаря высокой подвижности частиц. Такое устройство способно работать как транзистор, хотя затвор к нему ещё не создан.

Еще одно возможное применение графена показано в работе Wonneberger W., Breymayer H.-J. (*Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 1981) [51]. Если облучать графен электромагнитными волнами, то он будет испус-

катель излучение более высокой частоты, а значит сможет работать как умножитель частоты, которое можно использовать для получения излучения в диапазоне частот, для которых не еще не найдены подходящие источники излучения. В качестве такого диапазона является терагерцовый диапазон (от 100 ГГц до 1–10 ТГц). Если частота менее 100 ГГц то используются мощные источники излучения. Если использовать графен в качестве умножителя и выше описанные источники, то можно получить в терагерцовом диапазоне излучение.

Другое обещающее направление исследований – спиновые клапаны. Вследствие пренебрежимо малого спин-орбитального взаимодействия поляризация спинов в графене сохраняется на субмикронных расстояниях. Однако, несмотря на царящий оптимизм по отношению к базированной на графене электронике, маловероятно, что «графеновые» микропроцессоры появятся в ближайшее время.

Если вышеупомянутые приложения – предмет будущих исследований, то графен может быть использован уже сегодня. Одна из них – газовые датчики. Было показано, что графен абсорбирует молекулы газа из окружающей атмосферы, которые образуют примеси в слое графена, при этом свойства электронов и дырок зависят от природы газа. Следя за изменениями сопротивления, можно в считанные минуты определить концентрации определенных газов в окружающей среде.

Другая перспективная возможность – использование графенового порошка в электрических батареях, являющихся основным потребителем для графита. Графен также рассматривается как важная составляющая в некоторых композитных материалах, в частности электропроводящих пластиках.

Уже разработаны на основе графена прототипы различных электронных и оптоэлектронных устройств: газовые сенсоры с экстремальной чувствительностью, которые представлены в работе [38], графеновый одноэлектронный транзистор, описанный в ранее представленной работе [52], жидко-

кристаллические дисплеи и солнечные батареи (в качестве прозрачного проводящего электрода), действие которых представлено в работе [53], в работе [54] представлен спиновый транзистор, работы [55 – 58] написаны о графеновых полевых транзисторах, графеновые выпрямители описаны в работе [59], а авторами работы [60 - 61] представлены умножители частоты и высокочувствительные фотодетекторы. Имеются предпосылки для создания детекторов терагерцевого излучения [62]. Так или иначе, но уникальные свойства графена обеспечат к нему внимание ученых и разработчиков не один десяток лет.

1.4 Квазиклассический метод исследования полупроводников и графена

Для практической реализации многих электронных устройств необходима как высокая подвижность носителей заряда [1, 12], так и наличие щели в энергетическом спектре образца. Причинами возникновения щели могут быть: влияние подложки, влияние постоянного электрического поля, перпендикулярного поверхности образца двухслойного графена и нарушающего эквивалентность графеновых слоев, спин-орбитальное взаимодействие, сильное электрон-фононное взаимодействие, наличие примесных центров и их ионизация. В графене под действие выше перечисленных причин может появляться запрещенная зона, что, в свою очередь, относит его к полупроводникам.

Для описания процесса ионизации примесных центров в кристаллах полупроводников существует ряд математических методов, описывающих различные механизмы ионизации. Так, в случае перехода электрона с примесного уровня в минизону проводимости под действием не слишком интенсивного электромагнитного излучения, используется Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. (М.: «Наука», 1989) в работе [63] квантово-механическая теория возмущений. При этом вероятность ионизации примесных центров единицы объема за время t определяется соотношением

$$W(\vec{p}, t) = \frac{N}{\hbar} \left| \int_0^t M(\vec{p}, t') dt' \right|^2 \quad (1.35)$$

где N – концентрация примесей, $M(\vec{p}, t)$ – матричный элемент перехода примесь – минизона.

Эффективную концентрацию носителей в зоне проводимости можно найти по формуле:

$$n = n_0 + \frac{(N - n + n_0)W}{v_r \tau_0}, \quad (1.30)$$

где W – вероятность туннелирования, τ_0 – мнимая часть момента начала туннелирования, N – концентрация электронов способных совершить межзонный переход.

Для случая туннелирования электрона с примесного уровня в минизону проводимости можно, как считают авторы Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. (М: «Наука», 1971) работы [64] применить так называемый квазиклассический метод. При этом вероятность перехода записывается с экспоненциальной точностью следующим образом:

$$W = \exp(-2\text{Im}(S)) \quad (1.36)$$

где S – классическое действие, набираемое частицей при подбарьерном движении, определяемое формулой

$$S = \int_0^{t_0} (\varepsilon(p(t)) - V) dt \quad (1.37)$$

где $p(t)$ – импульс электрона, определяемый из классического уравнения движения.

Для нахождения τ_0 в работе [64] пользуются условием:

$$x(t_0) = 0, \quad (1.32)$$

где $x(t)$ – уравнение движения электрона, t_0 – момент начала туннелирования.

Уравнение движения можно найти из определения скорости

$$v(t) = \frac{dx}{dt}. \quad (1.33)$$

С другой стороны, для скорости можно записать

$$v(p) = \frac{\partial \varepsilon(p)}{\partial p}; \quad (1.34)$$

где $\varepsilon(p)$ – энергетический спектр электронов. При этом момент начала туннелирования находится из условия минимума мнимой части действия следующим образом:

$$\left. \frac{\partial m(S(t))}{\partial t} \right|_t = 0 \quad (1.38)$$

Критерием применимости квазиклассического метода является условие

$$Im(S) \gg 1 \quad (1.39)$$

Так же активно изучается эффект Франца – Келдыша, межзонное поглощение в присутствии постоянного электрического поля, и межзонные переходы. Теоретическое описание данного явления было дано авторами Келдыш Л.В. (*ЖЭТФ*, 1958) и Frantz W. (*Z. Natur forschung*, 1958) в работах [66, 67]. В присутствии переменного и постоянного электрических полей в работе Бычков Ю.А., Дыхне А.М. (*ЖЭТФ*, 1970) [67] построена последовательная теория поведения полупроводников без сверхструктуры. Так же рассмотрены случаи поведения электрона в постоянном, переменном поле и суперпозиции данных полей.

Для описания межзонных переходов в полупроводнике используется прием, описанный С.В. Крючковым, Г.А. Сыродоевым (*Изв. ВУЗов СССР. Радиофизика*, 1990) в работе [68]. При рассмотрении межзонных переходов для энергетического спектра носителей тока необходимо использовать, как минимум, двузонное приближение. При этом в общем случае нельзя использовать двузонную модель Кейна, предложенную в работе Kane E.O. (*J. Phys. Chem. Solids*, 1957) [69], из-за того, что разрешенные зоны, по сравнению с запрещенной зоной, предполагаются бесконечно широкими. Данное предположение можно использовать лишь к туннельным процессам для специального класса узкозонных кристаллов полупроводников на основе *InSb*. Энер-

гии электрона в валентной зоне и зоне проводимости представляют собой две ветви единой аналитической функции комплексного квазиимпульса, которые связаны точкой ветвления, как полагает Перельман Н.Ф. (*ЖЭТФ*, 1977) в работе [70].

В модели Кейна положение точки ветвления определяется шириной запрещенной зоны и не зависит от ширины проводящей и валентной зон. Если ширина запрещенной зоны совпадает с шириной разрешенных зон, то учет разрешенных становится принципиальным. Для сравнения по величине запрещенной и разрешенной зон и основой для построения теории туннельных явлений служит двузонная модель Слэттера и Костера, которая учитывает как аналитическую связь законов дисперсии в валентной зоне и зоне проводимости, так и конечность ширины разрешенной зоны.

Наряду с примесным, активно исследуется и внутриминизонное поглощение. В работах Павловича В.В., Эпштейна Э.М. (*Физика твердого тела*, 1976) [71,72] изучается с использованием классического уравнения Больцмана с постоянным временем релаксации в квазиклассической ситуации $\Delta_s \gg \hbar\omega$, \hbar/τ , eEd (Δ_s – ширина s -й минизоны, ω – частота монохроматической электромагнитной волны, τ – время релаксации электрона в минизоне проводимости, E – амплитуда электрического поля волны) внутриминизонного поглощения электромагнитной волны. При написании уравнения Больцмана учитывалось расстояние, на котором изменялись поля волны, бралось значительно больше длины свободного пробега электронов.

1.5 Эффекты выпрямления переменных токов в полупроводниковых сверхрешетках и графене

Передача информации с помощью электромагнитных волн и миниатюризация современных средств ее обработки стали возможными в связи с использованием твердотельных структур. Нелинейные механизмы, присутствующие в них, в случае передачи сигнала высокой мощности, могут существенно влиять на форму сигнала, что нежелательно. Нелинейные явления в твердом теле используются для обработки информации (модуляция и гетеродирование) для умножения частоты и для спектроскопических измерений. Объемные полупроводники только в очень сильных полях проявляют нелинейные свойства, что описано Эпштейном Э. М. (*Физика твердого тела*, 1969) в работе [73], поэтому необходимо использовать искусственные структуры для изготовления устройств обработки информации.

В настоящее время получили распространение многослойные структуры, в частности, полупроводниковые сверхрешетки (СР) [74]. Полупроводниковая СР является существенно нелинейной средой. Возникновение постоянного тока при воздействии на материал только переменных полей, так называемые эффекты выпрямления, является одним из интересных эффектов, которые представлены в работах Shon N.H., Anh V.H. (*Physica status solidi (b)*, 1986) [75], Mensa S., Shmelev G.M., Epstein E. M. (*Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Fizika*, 1985) [76], Alekseev K.N., Erementchouk M.V., Kuzmartsev F.V. (*Europhysics Letters*, 1999) [77], Seeger K. (*Applied Physics Letters*, 2000) [78], Stepanov S., Hernández E., Plata M. (*Journal of the Optical Society of America B*, 2005) [79], Shorokhov A.V., Khvastunov N.N., Hyart T. с соавторами (*Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2010) [80], Abukari S.S., Mensah S.Y., Mensah N.G. с соавторами (*arXiv: 1007.1772v1*, 2010) [81], Zav'yalov D.V., Kryuchkov S.V., Kukhar E.I. (*Optics and Spectroscopy*, 2006) [82], где показано, что в таких эффектах физической причиной выпрямления тока является

некоторое, возникающее в результате действия одной из волн, обычно сильной, выделенное направление в материале. Эффекты взаимного усиления электромагнитных волн в нелинейных средах, а также так называемые эффекты когерентного смешивания волн по природе весьма близки.

Эффект возникновения постоянного тока в полупроводниковой СР в условиях воздействия вдоль оси СР двух поляризованных электромагнитных волн, частоты которых относятся как одна вторая, изучен в работе [76]. А линейность по напряженности поля волны с большей частотой в случае слабых полей и пропорциональность тока квадрату амплитуды напряженности поля волны с меньшей частотой является характерной чертой эффектов выпрямления. Подобная зависимость ранее была получена в случае объемных полупроводников в упомянутых уже работах [75, 78]. Данный эффект получил название фотостимулированный фотогальванический эффект. Кроме того, изучено возникновение постоянного тока в объемном полупроводнике, когда основным механизмом нелинейности являлся разогрев электронов, то есть так называемое приближение «теплых электронов» и изучено возникновение постоянной э.д.с. в $n - Ge$, помещенном в сильное переменное поле волновода, в котором, наряду с основной волной, присутствовали её четные гармоники.

Постоянная составляющая продольной плотности тока, вызванного в СР совместным действием высокочастотных электрических полей двух электромагнитных волн, одна из которых синусоидальна, а другая представляет собой кноидальную волну, имеет вид чередующихся резонансов в зависимости от амплитуды кноидальной волны, что показано в работе [82]. Резонанс тока возникает, когда частоты волн относятся как целые числа.

В наиболее общем случае произвольного соотношения частот смешиваемых полей синусоидальных волн рассмотрена в работе [80] генерация постоянного тока в полупроводниковой СР под действием переменного бихроматического поля. Показано, что этот эффект имеет параметрическую природу.

ду, связанную с осцилляцией электронной эффективной массы в минизоне. В работе [81], посвященной изучению эффекта взаимного выпрямления переменных токов с частотами, относящимися как один к двум, в углеродных нанотрубках с границами типа *zigzag*.

Достаточно подробно эффект взаимного выпрямления в сверхрешетках изучен теоретически. Прежде всего, в связи с возможностью исследовать свойства падающего на образец излучения, данный эффект интересен с точки зрения экспериментатора. Можно сконструировать детектор второй гармоники лазерного излучения, используя зависимость плотности тока от напряженности полей падающих волн. Такой прибор, фактически, будет эффективно осуществлять детектирование высокочастотного (терагерцового или СВЧ) сигнала, что может быть полезным для создания устройств, работающих в этих диапазонах. Экспериментально эффект взаимного выпрямления волн в сверхрешетке еще не наблюдался до сих пор.

Одной из особенностей эффекта выпрямления в объемных полупроводниках и в сверхрешетке является то, что этот эффект является продольным, то есть постоянная плотность тока возникает в направлении поляризации падающих волн. Невозможно определить в детекторе на основе сверхрешетки, являются ли плоскости падающих волн строго параллельными, или есть составляющая переменных электрических полей, перпендикулярная оси сверхрешетки. В изначально изотропном материале для того чтобы ток вдоль одного из направлений зависел от напряженности поля в перпендикулярном ему направлении необходимо существование взаимной зависимости направлений движений носителей зарядов в перпендикулярных друг другу направлениях. Данная зависимость отражается, прежде всего, в энергетическом спектре материала: он должен быть неаддитивным.

Оставаясь в низкоэнергетическом приближении изотропным, энергетический спектр графена является неаддитивным. Поэтому в графене, наряду с продольными эффектами выпрямления, могут проявиться также и попереч-

ные. Представление о сдвиге фаз между компонентами падающих на поверхность образца волн, о спектральном составе и относительном расположении их плоскостей поляризации можно получить, лишь зная вид отклика на воздействие полей различных конфигураций и измеряя токи в перпендикулярных друг другу направлениях.

В статье Завьялова Д. В., Крючкова С. В., Марчука Э. В. (*Письма в Журнал технической физики*, 2008) [83] изучен один из эффектов, связанных с неаддитивностью энергетического спектра графена и показано, что если в образце создано тянущее постоянное электрическое поле, а на его поверхность падает эллиптически поляризованная волна, возникает постоянный ток, перпендикулярный напряженности постоянного поля. Там на основе решения кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянной частоты столкновений выполнен расчет: рассмотренный эффект в определенном смысле сходен с эффектом Холла с тем отличием, что отклоняющее действие в поперечном направлении оказывает эллиптически поляризованная волна, действующая на электроны с неаддитивным спектром. Оказывается, что плотность тока пропорциональна косинусу угла сдвига фаз между компонентами эллиптически поляризованной волны, что может быть использовано для построения прибора, измеряющего сдвиг фаз между линейно поляризованными волнами, плоскости поляризации которых перпендикулярны друг другу. Возникновение постоянного тока в графене в условиях воздействия эллиптически поляризованной волны наблюдалось на эксперименте в работах Karch J., Olbrich P., Schmalzbauer M. с соавторами (*arXiv:1002.1047v1*, *arXiv:1008.2116v1*, 2010) [84, 85].

1.6 Выводы к первому разделу

1) Исследование физических свойств графена и наноструктур на его основе представляет интерес как с точки зрения развития теории физики конденсированного состояния, так и с точки зрения перспектив применения их в микроэлектронике.

2) Причиной эффектов возникновения постоянного тока при совместном влиянии переменных электрических полей (так называемых эффектов взаимного выпрямления волн) являются, в первую очередь, неаддитивность и неквадратичность энергетического спектра материала.

3) Для технических приложений наибольшее значение имеют полупроводниковые модификации графена, проводимость которых существенно зависит от наличия примесей. Влияние глубоких примесей на проводимость материала простейшим образом можно исследовать квазиклассическим методом.

2 ЭФФЕКТ ВЫПРЯМЛЕНИЯ ПОПЕРЕЧНОГО ТОКА В ГРАФЕНЕ

Графен является полуметаллом, так как запрещённая зона отсутствует в его зонной структуре, но при этом энергетический спектр электронов и дырок линеен по квазиимпульсу и неаддитивен [2] в точках соприкосновения валентной зоны и зоны проводимости, что открывает возможность обнаружения новых транспортных свойств данного материала. Экспериментальное исследование проводимости и целочисленного квантового эффекта Холла в графене проведено в выше упомянутых работах [2, 17, 19], где показано, что проводимость графена имеет минимум порядка $\frac{e^2}{h}$ и линейно зависит от приложенного напряжения. Влияние электрических и магнитных полей на электронные свойства графена, которое должно привести к проявлению их новых особенностей графена и позволить найти новые его применения, изучены недостаточно полно.

С использованием квазиклассического подхода в работах Falkovsky L.A. (*Phys. Rev. B*, 2007) [86], Peres N., Lopes dos Santos J., Stauber T. (*Phys. Rev. B*, 2007) [87], Shaffique A., Hwang E.H., Galitski V.M. с соавторами (*Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2007) [88] проведено исследование полевой зависимости тока в графене. Однако они изучали, в основном, проводимость графена в постоянном и переменном полях в линейном приближении по приложенным полям, но при этом упускали из виду возможные эффекты, которые выходят за рамки линеаризованного уравнения Больцмана и связаны с неаддитивностью энергетического спектра графена.

2.1 Моделирование эффекта выпрямления тока в графене, вызванного действием электромагнитной волны

В цитируемых ранее работах [41 – 43], а также в работах Mikhailov S. A. (*Europhysics Letters*, 2007) [89], Jiang Z., Henricsen E.A., Tung L.C. с соавторами (*Physical Review Letters*, 2007) [90], Bliokh K.Y. (*Physical Letters*, 2005) [91], С.-Н. Park, L. Yang, Y.-W. Son с соавторами (*Nature Phys.*, 2008) [92], Barbier M., Peeters F.M., Vasilopoulos P. с соавторами (*Phys. Rev. B*, 2008) [93] и Guinea F., Katsnelson M. I., Vozmediano M.A.H. (*Phys. Rev. B*, 2008) [94] описаны результаты исследования оптико-электронных свойств графена. Оказалось, что даже в квазиклассической ситуации в графене можно ожидать проявления новых эффектов. Кроме того, в работе Марчука Э.В., Завьялова Д.В. и Крючкова С.В. (*Письма в Журнал технической физики*, 2008) [83] в рамках того же приближения предсказано возникновение поперечной к приложенному постоянному электрическому полю постоянной составляющей тока, когда эллиптически поляризованная электромагнитная волна распространяется перпендикулярно к поверхности графена (рис. 9). В той же работе показано, что величина постоянного тока зависит от разности фаз компонент эллиптической волны.

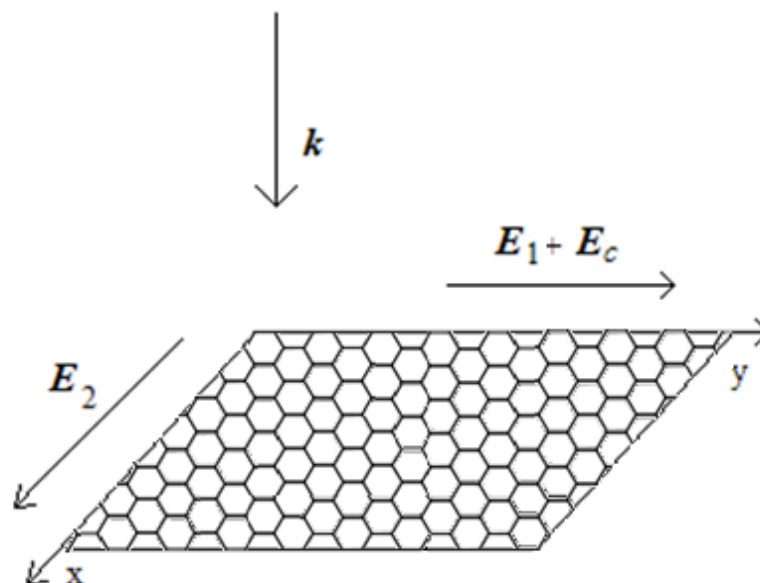


Рисунок 9 - Пространственная ориентация. Здесь $E_1 = E_{10} \cos(\omega t)$, $E_2 = E_{20} \cos(\omega t + \varphi)$ – компоненты эллиптически поляризованной электромагнитной волны, E_c – напряженность постоянного электрического поля, k – волновой вектор электромагнитной волны, перпендикулярный плоскости графена

В исследовании [83] интеграл столкновений в уравнении Больцмана был выбран в модели с постоянной частотой столкновений. При таком подходе явление может быть обусловлено именно выбором вида члена столкновений. В нашей совместной работе [A2] сделана попытка проанализировать явление без использования такого модельного интеграла столкновений, на основании прямого компьютерного моделирования методом Монте-Карло, предложенного в работах Хокни Р., Иствуда Дж. (М.: «Мир», 1987) [95] и Соболя И.М. (М.: «Наука», 1973) [96]. Рассеивателями носителей тока при этом предполагались акустические и оптические фононы.

Рассчитаем вероятности рассеяния электрона на акустических и оптических фононах [A2], для того, чтобы установить какие механизмы рассеяния электронов в монослойном графене вносят большой вклад в эффект

выпрямления тока. В работе Vasko F.T., Ryzhii V. (*Physical Review Letters*, 2008) [97] определена вероятность рассеяния электрона на акустической фононой моде в единицу времени из начального состояния \mathbf{p} в конечное состояние:

$$W_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1 + \cos(\phi)}{2} \left| C_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} \right|^2 \left\{ \left(N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} + 1 \right) \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) + N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') + \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \right\} \quad (2.1)$$

Здесь ϕ – угол между векторами \mathbf{p} и \mathbf{p}' . Для акустических фононов значение квадрата модуля матричного элемента взаимодействия электронов с фононами равно $\left| C_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} \right|^2 = \hbar q D_a^2 / (2\rho s^2 L^2)$, где D_a – постоянная деформационного потенциала, q – абсолютная величина волнового вектора фонона, ρ – плотность вещества в расчете на единицу площади, s – скорость звука для графена, L – характерный размер образца, $N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar}$ – планковская функция распределения фононов. Далее будем рассматривать динамику носителей тока при комнатной температуре. В этом случае $\hbar\omega_{\mathbf{q}} / (kT) \ll 1$ и функцию распределения акустических фононов можно взять в виде $N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} = kT / (\hbar\omega_{\mathbf{q}})$. Воспользуемся тем, что скорость звука $s \ll V_f$, в таком случае рассеяние на акустических фононах будет носить упругий характер и в аргументе дельта функции можно пренебречь энергией фонона в (2.1). Окончательно получаем выражение для вероятности перехода

$$W_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} = \frac{2\pi D_a^2 kT}{\rho s^2 \hbar L^2} \frac{1 + \cos(\phi)}{2} \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}')). \quad (2.2)$$

Проинтегрируем выражение (2.2) по импульсу в конечном состоянии \mathbf{p}' . В результате получаем вероятность рассеяния электрона на акустических фононах в единицу времени

$$W_{\rho} = v_a \sqrt{\rho^2 + \left(\frac{\Delta}{kT}\right)^2} \quad (2.3)$$

где введено обозначение $v_a = (kTD_a)^2 / (2\rho s^2 \hbar^3 v_f^2)$ и осуществлен переход к безразмерному импульсу $v_f \rho / (kT) \rightarrow \rho$. При значениях параметров $D_a \approx 18 \text{ эВ}$, $T = 300 \text{ К}$, получаем $v_a \approx 2,34 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$.

Следующим шагом является расчет вероятности рассеяния электронов на фононах оптической моды. Исходим из общей формулы (2.1). Частоту фононов будем считать не зависящей от его волнового вектора ($\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 = \text{const.}$), а их энергию примем равной $\hbar\omega_0 = 160 \text{ мэВ}$, как представлено в работе Fratini S., Guinea F. (*Physical Review Letters*, 2008) [98]. При температуре $T = 300 \text{ К}$ отношение $\hbar\omega_0 / (kT) \approx 6$ и, тогда $N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} \ll 1$, а значит множитель $N_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar} + 1$ в первом слагаемом можно заменить единицей, а второе слагаемое в (2.1) пренебрежимо мало. Квадрат модуля матричного элемента взаимодействия электронов с фононами оптической моды равен $|C_{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|/\hbar}|^2 = \hbar D_o^2 / (2\rho\omega_0 L^2)$, где D_o – постоянная взаимодействия с фононами оптической моды. Вероятность рассеяния электронов для случая фононов оптической ветви будет определяться выражением:

$$W_{\rho,\rho'} = \frac{\pi D_o^2}{\rho\omega_0 L^2} \frac{1 + \cos(\phi)}{2} \delta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}') - \hbar\omega_0) \quad (2.4)$$

Найдем теперь вероятность рассеяния электрона на оптических фононах в единицу времени. Для этого перейдем к безразмерному импульсу по правилу, аналогичному случаю акустических фононов, и, интегрируя выражение (2.4) по конечному значению импульса, получим

$$W_p = \begin{cases} v_o \left(\sqrt{p^2 + \left(\frac{\Delta}{kT}\right)^2} - \beta \right), & \text{при } \sqrt{p^2 + \left(\frac{\Delta}{kT}\right)^2} - \beta \geq \frac{\Delta}{kT} \\ 0, & \text{при } \sqrt{p^2 + \left(\frac{\Delta}{kT}\right)^2} - \beta < \frac{\Delta}{kT} \end{cases} \quad (2.5)$$

Здесь $\beta = \hbar\omega_0 / (kT)$, $v_o = kTD_0^2 / (4v_f^2 \rho \omega_0 \hbar^2)$. При типичных значениях параметров $D_o \approx 1,4 \cdot 10^9 \text{ эВ} / \text{см}$, $T = 300 \text{ К}$ получаем $v_o \approx 2,67 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$.

Будем полагать, что между последовательными моментами рассеяния движение электрона описывается уравнением:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E}(t). \quad (2.6)$$

Промежутки времени от последнего до следующего столкновения найдем, решая неявное уравнение

$$r = \int_0^t W(\mathbf{p}(t')) \cdot \exp\left(\int_0^{t'} W(\mathbf{p}(t'')) dt''\right) dt', \quad (2.7)$$

где r – равномерно распределенное на интервале $[0,1]$ случайное число, $W(\mathbf{p})$ – полная вероятность рассеяния электрона с импульсом \mathbf{p} . Чтобы не решать громоздкое уравнение (2.7) для определения времени пробега будем использовать прием, предложенный Ризом, описанный в работе Соболя И.М. (М.: «Наука», 1973)[96], вводя в расчет процесс саморассеяния, вероятность которого из состояния \mathbf{p} в состояние \mathbf{p}' определяется следующим выражением:

$$W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = W_0(\mathbf{p}) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (2.8)$$

при этом состояние электрона не меняется, саморассеяние электрона не имеет физического смысла, и величина $W_0(\mathbf{p})$ может быть выбрана произвольно.

Включив вероятность в виде (2.8) в уравнение (2.7), получим

$$r = \int_0^t (W(\mathbf{p}(t')) + W_0(\mathbf{p}(t'))) \cdot \exp\left(\int_0^{t'} (W(\mathbf{p}(t'')) + W_0(\mathbf{p}(t''))) dt''\right) dt' \quad (2.9)$$

Для $W_0(\mathbf{p})$ выберем следующее представление $W_0(\mathbf{p}) = \Gamma - W(\mathbf{p}(t'))$, с некоторой постоянной Γ . В результате для нахождения времени свободного пробега электрона получим уравнение:

$$r = 1 - \exp(-\Gamma t). \quad (2.10)$$

Значение Γ должно быть велико, чтобы в нужной нам области импульсного пространства вероятность $W_0(\mathbf{p})$ была больше нуля. Определим по методу Монте-Карло с помощью генератора случайных чисел время свободного пробега, вычислим следующую величину перемещения вдоль координатных осей. Далее нужно разыграть характер рассеяния, для этого используем равномерно распределенную на отрезке $[0, \Gamma]$ случайную величину s , в зависимости от условий

$$\begin{cases} W_{opt}(\mathbf{p}) > s, \text{ оптические фононы;} \\ W_{ac}(\mathbf{p}) + W_{opt}(\mathbf{p}) > s > W_{opt}(\mathbf{p}), \text{ акустические фононы;} \\ W_{ac}(\mathbf{p}) + W_{opt}(\mathbf{p}) < s, \text{ саморассеяние.} \end{cases} \quad (2.11)$$

Здесь $W_{opt}(\mathbf{p})$ и $W_{ac}(\mathbf{p})$ – вероятности рассеяния на фононах оптической и акустической мод соответственно. Для того, чтобы саморассеяние встречалось, как можно, реже следует, что величина Γ должна быть не очень велика. Следующим шагом является расчет импульсов после столкновения. Для этого используем выражения для вероятности рассеяния из состояния \mathbf{p} в состояние \mathbf{p}' . После этого переходим к новому шагу и процесс повторяется.

Обратим также внимание на следующий прием. Преобразуем уравнение (2.7) к следующему виду

$$r = 1 - \exp\left(-\int_0^t W(\mathbf{p}(t')) dt'\right). \quad (2.12)$$

Для решения данного уравнения необходимо рассчитать вероятность столкновения электронов, которая описана в работе Киреева П.С. (М.: «Мир»,

1975) [99]. Первоначально находим вероятность рассеяния на промежутке $(t, t+dt)$. Обозначим вероятность рассеяния на промежутке $(0, t)$ через функцию распределения $F(t)$, а вероятность рассеяния на промежутке $(0, t+dt)$ через $F(t+dt)$. Тогда вероятность рассеяния на интересующем нас промежутке будем находить следующим образом $F(t+dt) - F(t)$. Найдем вероятность столкновения электронов по формуле:

$$dF = [1 - F(t)] \cdot [\Sigma(t) dt + \delta(t)] \quad (2.13)$$

Из выражения (2.13) видно, что для дальнейших расчётов используем:

$$\frac{dF}{dt} = [1 - F(t)] \Sigma(t). \quad (2.14)$$

После интегрирования и преобразования выражения (2.14) и получаем (2.12).

Перейдем в (2.12) от интеграла к интегральной сумме с использованием алгоритма трапеций численного интегрирования, с шагом сетки длительностью Δt . После этого, на каждом шаге Δt рассчитывалось приращение импульса электрона, его перемещение и значение интегральной суммы в цикле до тех пор, пока не было выполнено условие

$$-\ln(r) \leq \frac{\Delta t}{2} \sum_i (W(\mathbf{p}_i) + W(\mathbf{p}_{i-1})) \quad (2.15)$$

За момент столкновения принималось то значение, при котором первый раз выполнялось условие (2.15). После этого разыгрывался характер рассеяния с помощью случайной величины s , равномерно распределенной на отрезке $[0, 1]$, по правилу

$$\begin{cases} \frac{W_{opt}(\mathbf{p})}{W_{ac}(\mathbf{p}) + W_{opt}(\mathbf{p})} \geq s, \text{оптические фононы;} \\ \frac{W_{opt}(\mathbf{p})}{W_{ac}(\mathbf{p}) + W_{opt}(\mathbf{p})} < s, \text{акустические фононы.} \end{cases} \quad (2.16)$$

Следующим шагом является расчет импульсов после столкновения на основании зависимостей вероятностей рассеяния из ρ в ρ' , после чего процесс повторяется заново.

Было произведено сравнение моделирования по обоим методам, которое показало в пределах погрешностей хорошее совпадение значений, вычисленных на основании каждого из алгоритмов. Погрешность вычисления определялась по значению стандартного отклонения тока. Число столкновений в опыте и число испытаний устанавливалось так, чтобы тройное стандартное отклонение величины тока было не менее чем на порядок меньше его средних значений, найденных в процессе численного эксперимента. Эффективность второго метода оказалась в 2...3 раза выше.

Оказалось, что предсказанное явление возникает только при включении неупругого канала за счет столкновений электрона с нерегулярностями кристаллической решетки. При выключении оптических фононов из рассмотрения, и проведении моделирования только с рассеянием на акустических фононах, с упругим характером взаимодействия, то усредненный по времени поперечный тянущему постоянному электрическому полю ток вообще не возникал. Этот факт показывает [A4], что модельный интеграл столкновений с постоянной частотой столкновений в какой-то мере учитывает неупругие механизмы рассеяния. Неупругие каналы рассеяния необходимые для появления постоянной составляющей тока в перпендикулярном направлении. Отметим также, что при расчете потерь на джоулево тепло с использованием модельного интеграла столкновений с постоянным временем релаксации, их величина получается пропорциональной частоте столкновений.

В результате проведенного моделирования стало возможным дать качественную оценку рассмотренным эффектам, которые связаны с переносом заряда в графене и обязаны своим существованием особенностям энергетического спектра носителей заряда в графене, а именно его неаддитивностью.

Результаты численного исследования [A2, A4] не в полной мере совпали с результатами расчета, проведенного аналитически в упомянутой ранее работе [83].

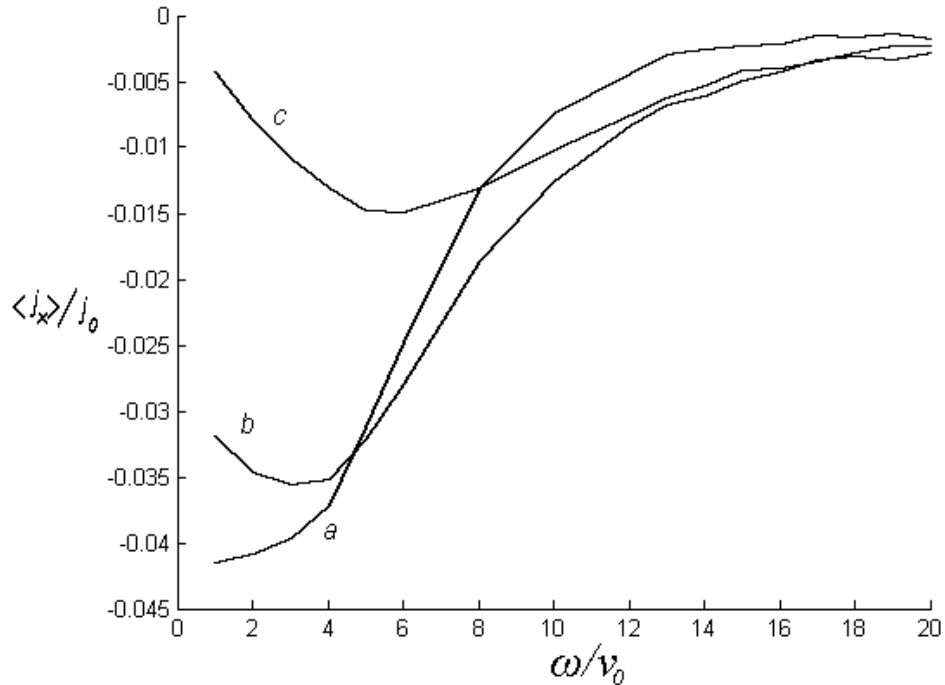


Рисунок 10 - Зависимость среднего значения плотности тока $\langle j_x \rangle$, поперечного к тянущему постоянному электрическому полю, от безразмерной частоты электромагнитной волны при следующих значениях φ :

$$\varphi = 0 \text{ (a); } \varphi = \pi/4 \text{ (b); } \varphi = \pi/2 \text{ (c)}$$

С увеличением частоты поведение $\langle j_x \rangle$ резко зависит от φ (рис. 10), что находится в противоречии с результатами аналитических расчетов в [83], где получалось монотонное падение $\langle j_x \rangle$ при увеличении частоты. Отметим появление у нас следующего эффекта. Из работы [83] видно, что зависимость $\langle j_x \rangle$ от сдвига фаз φ компонент падающей электромагнитной волны принимает вид

$$\langle j_x \rangle = j_0 \cos(\varphi), \quad (2.17)$$

где J_0 – некоторая постоянная, зависящая от других параметров модели. Наш же численный эксперимент показал, что зависимость (2.17) имеет вид, отличающийся сдвигом аргумента косинуса

$$\langle j_x \rangle = j_0 \cos(\varphi + \alpha), \quad (2.18)$$

причем величина α оказалась не зависящей от напряженностей электрических полей, а зависимость была от частоты электромагнитной волны, вызывающей появление эффекта. Можно сделать вывод, что модель интеграла столкновений с постоянным временем релаксации не полностью учитывает особенности процесса рассеяния как в графене, так и в системах, где основную роль играют именно неупругие каналы рассеяния.

Сравнение результатов моделирования по методу Монте-Карло с результатами расчета с использованием простейшей модели интегралов столкновений, в которых делается попытка разделения процессов столкновения на упругие и неупругие, а именно с интегралом столкновений, представленным в выше цитированной работе [74] в виде:

$$I_{ст} = \frac{f(\mathbf{p}) - F(\mathbf{p})}{\tau_1} + \frac{f(\mathbf{p}) - f(-\mathbf{p})}{2\tau_2}, \quad (2.19)$$

где $F(\mathbf{p})$ – функция распределения, а τ_1, τ_2 – константы, показало, что обобщаемое соотношение имеет вид (2.17), а не (2.18). Таким образом, простейшие интегралы столкновений не совсем корректно описывают процессы рассеяния носителей тока в графене, поскольку преобладающий вклад в рассмотренный эффект вносит именно неупругий канал рассеяния.

Данное макроскопическое объяснение эффекта следует подправить, беря во внимание результаты нашего моделирования. Более корректно: вектор \mathbf{j}_x может быть построен из векторов $\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2, \mathbf{E}_c$ и их производных по времени следующим образом

$$\mathbf{j}_x = \left\langle \lambda_1 [\mathbf{E}_1 [\mathbf{E}_2 \mathbf{E}_c]] + \lambda_2 \left[\frac{d\mathbf{E}_1}{dt} [\mathbf{E}_2 \mathbf{E}_c] \right] + \lambda_3 \left[\mathbf{E}_1 \left[\frac{d\mathbf{E}_2}{dt} \mathbf{E}_c \right] \right] \right\rangle, \quad (2.20)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ – некоторые константы, зависящие от параметров среды и частоты электромагнитной волны, а угловые скобки означают усреднение по периоду электромагнитной волны. Если подставить в выражение (2.20), полученное в низшем исчезающем порядке по напряженностям полей, напряженности полей и усреднить, то получим следующую зависимость

$$\langle j_x \rangle = j_0 \cos \left(\varphi - \arctg \left(\frac{\omega(\lambda_2 - \lambda_3)}{\lambda_1} \right) \right) \quad (2.21)$$

Сравнивая выражения (2.18) и (2.21), видим, что $\alpha = -\arctg(\omega(\lambda_2 - \lambda_3)\lambda_1^{-1})$.

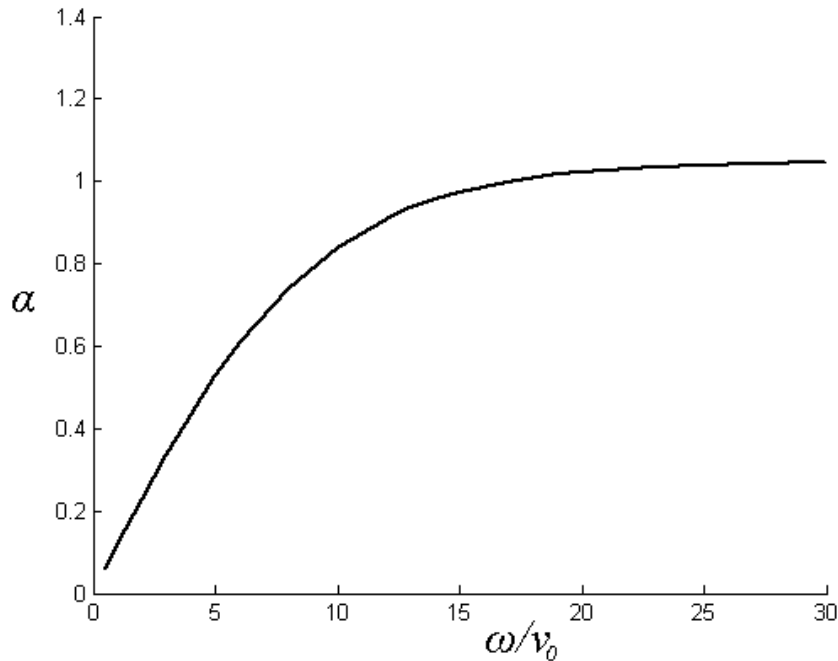


Рисунок 11 - Зависимость начального сдвига фазы возникновения тока от частоты электромагнитного поля $\alpha(\omega)$

Величина α монотонно растет с ростом частоты электромагнитного поля ω (рис. 11) и при частотах $\omega \approx 30$ (ω измеряется в единицах v_0) переходит к насыщению. Численные оценки показали, что при типичных значениях параметров графена ($n \approx 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $v_f = 10^8 \text{ cm/s}$), частоте волны $\omega \approx 10^{13} \text{ s}^{-1}$ и напряженностях электрических полей $E_{10}, E_{20}, E_c \approx 1 \text{ CGS}$ и при

комнатных температурах поверхностная плотность тока $j_x \approx 10^{-6} \text{ A/sm}$, что представляется вполне измеримой величиной.

Наше моделирование транспортных свойств графена методом Монте-Карло, весьма популярным методом и с успехом используемым, например, в работах Jacoboni C., Reggiani L. (*Reviews of Modern Physics*, 1983) [100], Kosina H., Nedjalkov M. (*Mathematics and Computers in Simulations*, 2001) [101], Ceperley D.M., Pollock E. (*Phys. Rev. B*, 1989) [102], Ceperley D.M. (*Rev. Mod. Phys.*, 1995) [103], Binder K. (*Condensed Matter Physics*, 1986) [104], позволяет найти достаточные по точности значения за сравнительно малое компьютерное время, напротив стандартные методы, которые базируются на решении кинетических уравнений, потребляют на порядки большие ресурсы вычислительной машины. Компьютерные программы для моделирования методом Монте-Карло, могут быть легко распараллелены. Напротив, классические методы решения дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений имеют пределы по использованию на параллельных вычислительных системах, связанные с необходимостью постоянной синхронизации вычислительных потоков. Все это делает методы Монте-Карло очень мощным и привлекательным инструментом исследования.

2.2 Выводы второго раздела

1) Выявленный численным моделированием эффект выпрямления поперечного тока в графене позволяет найти значение сдвига фаз между составляющими электромагнитной волны с эллиптической поляризацией.

2) Прямым численным моделированием было обнаружено, что преобладающим каналом рассеяния для возникновения тока, перпендикулярного к постоянному электрическому полю, является канал рассеяния на оптических фононах.

3) Модельные интегралы столкновений типа интеграла с постоянной частотой релаксации позволяют качественно выявлять, возникающие в материалах с неаддитивным спектром эффекты, когда они обуславливаются неупругим рассеянием.

4) Поперечный ток зависит от сдвига фаз φ составляющих эллиптически поляризованной электромагнитной волны и некоторой постоянной $-\alpha$, являющейся функцией частоты волны, как $\cos(\varphi+\alpha)$, а не $\cos(\varphi)$, как показывают расчеты с использованием модельных столкновительных членов кинетических уравнений.

3 КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГРАФЕНА С ПРИМЕСЯМИ

Как было отмечено в первом разделе присутствие примесей и дефектов может сильно повлиять на энергетический спектр графена. Особенно важным является влияние примесей на спектр вблизи Дираковской точки. Примесные состояния и соответствующие изменения плотности электронов уже обсуждались в ряде работ [26, 52].

Исследование электрических свойств графена под влиянием электрических и магнитных полей, как показано в работе [35], остается актуальным. В данной работе экспериментально в графене проводились исследования проводимости и квантового эффекта Холла. Теоретическое обоснование ненулевого минимума проводимости проведено во многих работах, например, Gusynin V.P., Sharapov S.G. (*Phys. Rev. Lett.*, 2005) [105], Tworzydło J., Trauzettel B., Titov M. с соавторами (*Phys. Rev. Lett.*, 2006) [106], Ziegler K. (*Phys. Rev. Lett.*, 2006) [107].

С использованием квазиклассического подхода в работах [137 – 139] проведено исследование полевой зависимости тока в графене. Однако основной упор исследований, который представлен в работах [86 – 88], направлен на изучение в линейном приближении воздействия постоянного и переменного полей на проводимости графена.

До сих пор последствия влияния примесей на электронную структуру графен были в основном изучены с помощью методов таких, как транспорт измерений, спектроскопия комбинационного рассеяния и угловым разрешением фотоэмиссии. Графен отличается от ранее изученных этих систем в том, что это полуметаллическая поверхность с плотностью заряда, которая может быть настроена с помощью применения электростатического напряжения. В работах Келдыша Л.В. (*ЖЭТФ*, 1978) [108], Кревчика В.Д., Грунина А.Б. (*ФТТ*, 2003) [109], Кревчика В.Д., Зайцева Р.В., Евстифеева В.В. (*ФТП*,

2000) [110], Перельмана Н.Ф., Логвинова И.Н. (*ФТТ*, 1978) [111] рассмотрена ионизация связанного состояния (отрицательного иона, примесного центра).

3.1 Вероятность ионизации примесей в графене, под действием постоянного и переменного электрических полей

Для нахождения вероятности ионизации примесей в графене, под действием постоянного и переменного электрических полей в квазиклассически сильных полях в работе [48] был разработан метод «мнимого времени», который затем был обобщен в работе Котова Л.П., Переломова А.М., Попова В.С (*ЖЭТФ*, 1968) [112] на явлении квантово-механического туннелирования через произвольный потенциальный барьер. Данный метода, описанный Левинсоном И.Б., Ясевичюте Я. (*ЖЭТФ*, 1972) в работе [113], сводится к тому, что невозможное в рамках классической механики подбарьерное движение частицы, может рассматриваться при мнимых значениях времени t . Значения t в комплексной плоскости позволяет найти связывающую две разделенные барьером области траекторию, движение частиц в каждой из которых определяется классически разрешенным. Физический смысл траектории состоит заключается в том, что в квантовой механике вероятность туннелирования будет определяться по формуле:

$$W = \exp(-2ImS), \quad (3.1)$$

где ImS – мнимая часть классического действия, набираемого частицей при подбарьерном движении. Подбарьерная траектория будет удовлетворять классическому уравнению движения.

В зоне проводимости можно определить эффективную концентрацию носителей тока следующим образом

$$n = n_0 + \frac{1}{v_r} \sum_p G(p). \quad (3.2)$$

Используя метод мнимого времени можно рассчитать квазиклассически под влияние постоянного поля напряженностью E вероятность туннельного перехода электронов с примеси в зону проводимости. Тогда член генерации $G(p)$ запишется следующим образом

$$G(p) = (N_i + n_0 - n) \frac{\exp(-2\text{Im}(S))}{\text{Im}(\tau)} \delta(p), \quad (3.3)$$

где τ – момент времени начала туннелирования, N_i – концентрация примесей, $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака.

Рассмотрим процесс влияния короткодействующих примесей в графене на вероятность ионизации под действием постоянного электрического поля [А6]. Электронный спектр щелевой модификации графена можно записать как в работе Zhou S.Y., Gweon G.-H., Fedorov A.V. с соавторами (*Nature Materials*, 2007) [44]:

$$\varepsilon = \sqrt{v_f^2 \mathbf{p}^2 + \Delta^2} \quad (3.4)$$

Здесь $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ – вектор квазиимпульса, $v_f \approx 10^8 \text{ см/с}$ – скорость на поверхности Ферми, Δ – полуширина запрещённой зоны. Предполагаем, что примеси находятся в графене на определенной глубине $|v|$ (рис. 12), где $E(np.)$ – минимальная энергия электрона в зоне проводимости, $E(\text{вал.})$ – максимальная энергия электрона в валентной зоне, V – энергия примеси. Начало отсчёта энергии выбираем посередине запрещённой зоны. Электрическое поле \vec{E} направлено вдоль оси x .

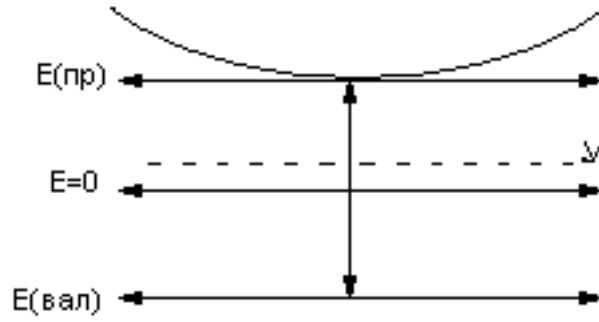


Рисунок 12 - Энергетическая диаграмма примеси.

Уровень энергии примеси обозначен штриховой линией

Применим квазиклассический метод для случая туннелирования электрона с примесного уровня в минизону проводимости, который описан в работе [48]. Записываем классическое уравнение движения:

$$\frac{dP_x}{dt} = |e|E; P_x = |e|Et + C_1; \frac{dP_y}{dt} = 0; P_y = 0. \quad (3.5)$$

Учитывая, что в момент выхода частицы из под барьера $t=0$ импульс частицы равен нулю, имеем начальное условие $P(0) = 0, C_1 = 0$, поэтому $P_x = |e|Et$. Примесь моделируем короткодействующим потенциалом. Считаем также [48], что после прохождения барьера кинетическая энергия равна нулю, то есть $\varepsilon(0) = -|v| + \Delta$. В момент начала туннелирования (время чисто мнимая величина) частица находится в точке $x = 0$ ($t = t_0$). Подставив решение уравнения движения (3.5) в (3.4), находим закон изменения энергии со временем при подбарьерном движении

$$\varepsilon(t) = \sqrt{v_f^2 E^2 |e|^2 t^2 + \Delta^2}. \quad (3.6)$$

Учитывая, что в момент времени t_0 частица, находясь в связанном состоянии на примесном центре, имеет энергию, равную $-|v| + \Delta$, из (3.6) находим время туннелирования t_0

$$\varepsilon(t_0) = \varepsilon(t) = \sqrt{v_f^2 E^2 |e|^2 t_0^2 + \Delta^2} = -|v| + \Delta. \quad (3.7)$$

После возведения в квадрат (3.7) получаем $v_f^2 E^2 |e|^2 t_0^2 = (\Delta - |v|)^2 - \Delta^2$; причём $(\Delta - |v|)^2 - \Delta^2$ величина, которая отрицательна при любых значениях величин. Таким образом, время начала туннелирования при подбарьерном движении:

$$t_0^2 = \left(\frac{1}{v_f E |e|} \right)^2 \left((\Delta - |v|)^2 - \Delta^2 \right); t_0 = \frac{i}{v_f E |e|} \sqrt{\Delta^2 - (\Delta - |v|)^2}. \quad (3.8)$$

Далее проведем при подбарьерном движении расчет классического действия, набираемое частицей с момента времени начала туннелирования t_0 до момента выхода частицы из под барьера при $t=0$.

Действие определяется по формуле $S = \int_0^{t_0} (\varepsilon(t) - V) dt$, [80] а в нашем

случае $V = -|v| + \Delta$, поэтому получаем

$$S = \int_0^{t_0} (\varepsilon(t) + (|v| - \Delta)) dt \quad (3.9)$$

Учитывая зависимость энергии от времени (3.6), после преобразования подынтегрального выражения в (3.9), получаем

$$\begin{aligned} S &= \int_0^{t_0} \left(\sqrt{v_f^2 E^2 |e|^2 t^2 + \Delta^2} + (|v| - \Delta) \right) dt = \int_0^{t_0} \sqrt{v_f^2 E^2 |e|^2 t^2 + \Delta^2} dt + \int_0^{t_0} (|v| - \Delta) dt = \\ &= v_f E |e| \int_0^{t_0} \sqrt{t^2 + \left(\frac{\Delta}{v_f E |e|} \right)^2} dt + (|v| - \Delta) \cdot t_0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Второй интеграл будет зависеть только от t_0 . Сделаем замену $t_0 = t_0 i$ и введем

обозначение $d = \frac{\Delta}{v_f E |e|}$, с учетом которого выражение для действия (3.10),

после преобразования, примет вид

$$\begin{aligned} S &= v_f E |e| \int_0^{t_0} \sqrt{t^2 + d^2} dt + (|v| - \Delta) t_0 = v_f E |e| \left(\frac{1}{2} t \sqrt{d^2 + t^2} + \frac{1}{2} d^2 \ln \left(2 \left(t + \sqrt{d^2 + t^2} \right) \right) \right) \Big|_0^{t_0} \\ &+ (|v| - \Delta) t_0 = v_f E |e| \left(\frac{1}{2} t_0 \sqrt{d^2 + t_0^2} + \frac{1}{2} d^2 \ln \left(2 t_0 + 2 \sqrt{d^2 + t_0^2} \right) \right) + (|v| - \Delta) t_0 = \\ &= v_f E |e| \left(\frac{1}{2} t_0 \sqrt{d^2 + t_0^2} + \frac{1}{2} d^2 \ln \left(\frac{t_0}{d} + \frac{\sqrt{d^2 + t_0^2}}{d} \right) \right) + (|v| - \Delta) t_0 \end{aligned} \quad (3.11)$$

Введем обозначение для модуля мнимого времени $t_0 = t_0' i$ и воспользуемся формулой, представленной в книге Абрамовица М., Стигана И. (М.: «Наука», 1979) [114]:

$$\ln(x + iy) = \frac{1}{2} \ln(x^2 + y^2) + i \operatorname{arctg} \frac{y}{x}.$$

Получаем выражение для нахождения классического действия

$$\begin{aligned} S &= v_f E |e| \left(\frac{1}{2} it_0' \sqrt{d^2 + (it_0')^2} + \frac{1}{2} d^2 \ln \left(\frac{it_0'}{d} + \frac{\sqrt{d^2 + (it_0')^2}}{d} \right) \right) + (|v| - \Delta) it_0' = \\ &= v_f E |e| \left(\frac{1}{2} it_0' \sqrt{d^2 - t_0'^2} + \frac{1}{2} d^2 \left(\frac{1}{2} \ln \left(\frac{t_0'^2 + d^2 - t_0'^2}{d^2} \right) + i \operatorname{arctg} \frac{t_0'}{\sqrt{d^2 - t_0'^2}} \right) \right) + (|v| - \Delta) it_0' = \\ &= v_f E |e| \left(\frac{1}{2} it_0' \sqrt{d^2 - t_0'^2} + \frac{1}{2} d^2 \left(i \operatorname{arctg} \frac{t_0'}{\sqrt{d^2 - t_0'^2}} \right) \right) + (|v| - \Delta) it_0' = \\ &= v_f E |e| \left(\frac{1}{2} it_0' \sqrt{d^2 - t_0'^2} + \frac{1}{2} d^2 \left(i \operatorname{arctg} \frac{t_0'}{\sqrt{d^2 - t_0'^2}} \right) \right) + (|v| - \Delta) it_0'. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Таким образом, после преобразований, получаем окончательный вид действия, набираемого частицей при подбарьерном движении

$$S = v_f E |e| \left(\frac{1}{2} it_0' \sqrt{d^2 - t_0'^2} + \frac{id^2}{2} \operatorname{arctg} \frac{t_0'}{\sqrt{d^2 - t_0'^2}} \right) + (|v| - \Delta) it_0'. \quad (3.13)$$

Возвращаясь к исходным обозначениям, получаем зависимость действия от параметров задачи

$$\begin{aligned} S &= \frac{\sqrt{\Delta^2 - (\Delta - |v|)^2}}{v_f E |e|} \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta - |v|)^2} i + \frac{\Delta^2 i}{2 v_f E |e|} \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{\Delta^2 - (\Delta - |v|)^2}}{\sqrt{(\Delta - |v|)^2}} + \\ &+ \frac{(|v| - \Delta) \sqrt{\Delta^2 - (\Delta - |v|)^2}}{v_f E |e|} i. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Из выражения (3.14) получаем мнимую часть квазиклассического действия.

$$\operatorname{Im} S = \frac{\Delta^2}{v_f E |e|} \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{\Delta^2 - (\Delta - |v|)^2}}{(\Delta - |v|)} - \frac{(\Delta - |v|) \sqrt{\Delta^2 - (\Delta - |v|)^2}}{v_f E |e|} \quad (3.15)$$

При этом вероятность перехода определяется из выражения (3.1).

После подстановки (3.15) в (3.1) находим вероятность туннелирования носителя с примесного центра в зону проводимости с точностью до предэкспоненты

$$W = \exp \left(- \frac{\Delta^2}{v_f E |e|} \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{\Delta^2 - (\Delta - |v|)^2}}{(\Delta - |v|)} + \frac{(\Delta - |v|) \sqrt{\Delta^2 - (\Delta - |v|)^2}}{v_f E |e|} \right) \quad (3.16)$$

Проанализируем полученные зависимости при типичных значениях параметров задачи с помощью методов компьютерного моделирования. Численный анализ зависимостей представлен на рисунках.

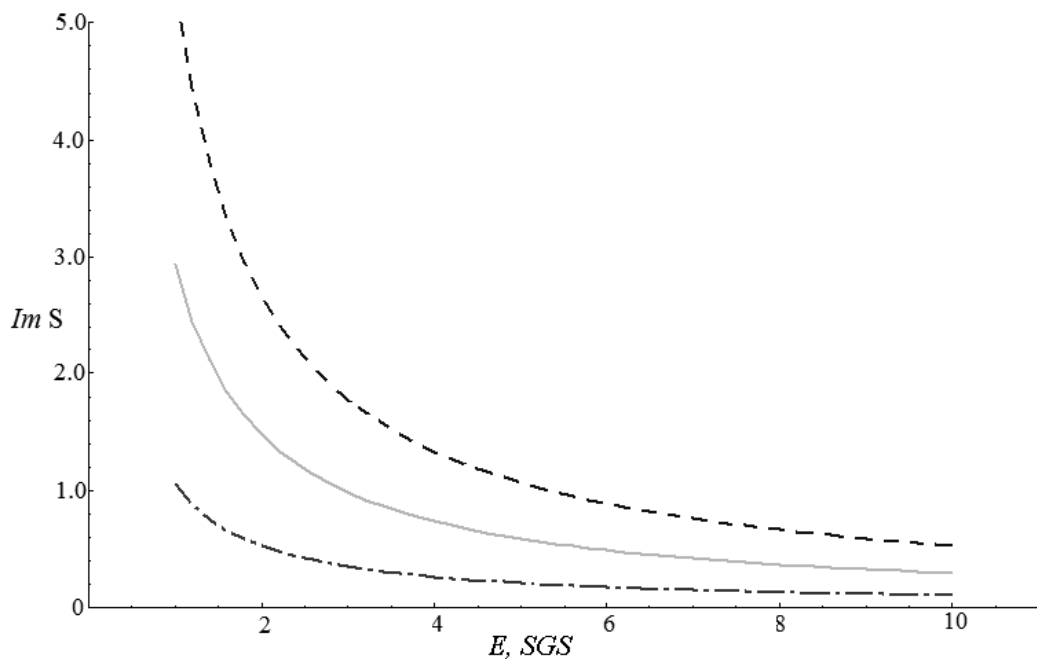


Рисунок 13 - Зависимость мнимой части действия от напряженности постоянного поля для случаев, когда отношение $|V|/\Delta$ равно 0,1 (штриховая кривая); 0,2 (сплошная кривая) и 0,3 (пунктирная кривая)

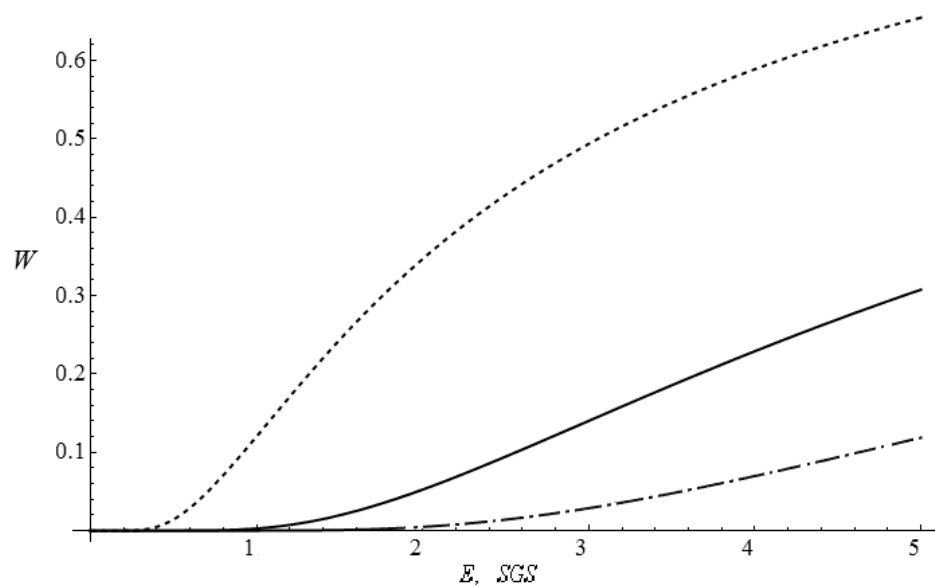


Рисунок 14 - Зависимость вероятности ионизации от напряженности постоянного поля для случаев, когда отношение $|V|/\Delta$ равно 0,1 (пунктирная кривая); 0,2 (сплошная кривая) и 0,3 (штриховая кривая)

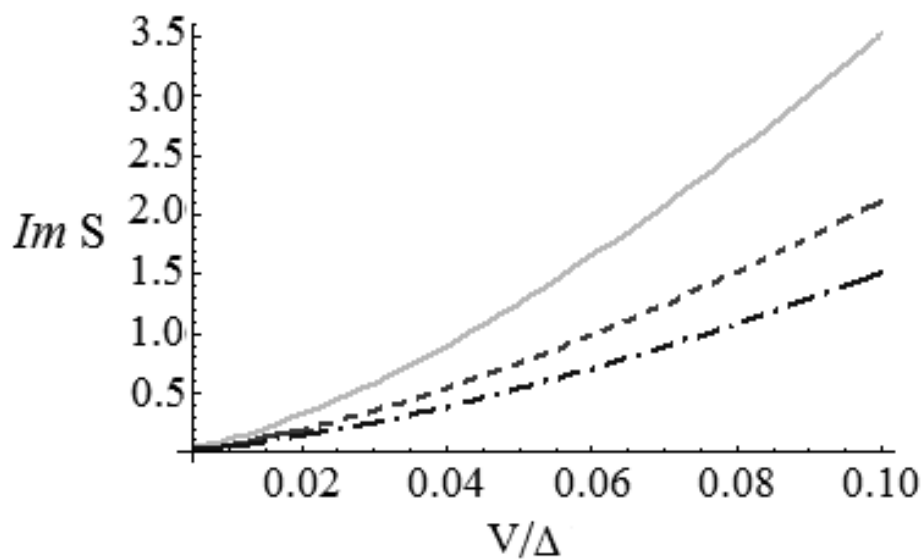


Рисунок 15 - Зависимость мнимой части действия от глубины залегания примесей при значениях напряженности постоянного поля 5 SGS (пунктирная кривая); 3 SGS (сплошная кривая) и 7 SGS (штриховая кривая).

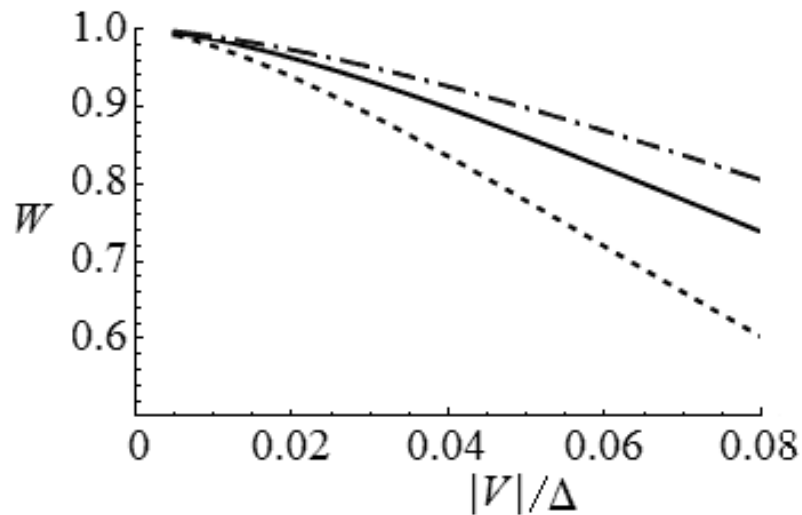


Рисунок 16 - Зависимость вероятности ионизации от глубины залегания примесей под влиянием постоянного поля при значениях напряженности постоянного поля 3 SGS (пунктирная кривая), 5 SGS (сплошная кривая) и 7 SGS (штриховая кривая).

Рассмотрим процесс влияния короткодействующих примесей в графене на вероятность ионизации под действием переменного электрического поля в графене [А6]. Для расчётов используется спектр, представленный в выражении (3.4). Положение примесного уровня энергии показано на рис.12. Считаем, что переменное электрическое поле направлено вдоль оси x. Записываем классическое уравнение движения

$$\frac{dP_x}{dt} = |e|E \cos \omega t \quad (3.17)$$

его решение определяется выражением $P_x = \frac{|e|E}{\omega} \sin \omega t + p_0$. Примем, что в момент времени $t=0$ значения проекций квазиимпульса на координатные оси $P_x(0)=0$, $P_y(0)=0$, $p_0=0$ тогда частное решение примет вид $P_x = \frac{|e|E}{\omega} \sin \omega t$.

После прохождения барьера кинетическая энергия носителя заряда равна нулю [48]. В момент начала туннелирования $t = t_0$, частица находится в связан-

ном состоянии, на примесном центре, в точке с координатой $x = 0$ и имеет энергию $\varepsilon(t_0) = -|v|$. Подставив решение уравнения движения (3.17) в (3.4), получаем зависимость энергии от времени

$$\varepsilon(t) = \sqrt{\frac{v_f^2 E^2 |e|^2}{\omega^2} \sin^2 \omega t + \Delta^2} \quad (3.18)$$

Из (3.18) находим момент времени начала туннелирования t_0 :

$$\varepsilon(t_0) = \varepsilon(t) = \sqrt{\frac{v_f^2 E^2 |e|^2}{\omega^2} \sin^2 \omega t_0 + \Delta^2} = -|v|,$$

Выразим явно произведение частоты излучения на t_0 :

$$\omega t_0 = \arcsin \frac{\omega}{Eev_f} \sqrt{(|v|^2 - \Delta^2)}$$

С учетом неравенства $\Delta > v$, приходим к следующему выражению:

$$\omega t_0 = \arcsin \frac{i\omega}{Eev_f} \sqrt{\Delta^2 - |v|^2} ; \omega t_0 = \arcsin \frac{i\omega\Delta}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta}\right)^2} ; \quad (3.19)$$

Окончательно находим время начала туннелирования:

$$t_0 = \frac{i}{\omega} \operatorname{arcsinh} \frac{\omega\Delta}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta}\right)^2} \quad (3.20)$$

Классическое действия, набираемое частицей при подбарьерном движении определяется интегралом:

$$S = \int_0^{t_0} (\varepsilon(t) - V) dt \quad (3.21)$$

После подстановки в (3.21) энергии (3.18), с учетом зависимости (3.19) получаем

$$S = \int_0^{t_0} \left(\sqrt{\frac{v_f^2 E^2 |e|^2}{\omega^2} \sin^2 \omega t + \Delta^2} + |v| \right) dt = \int_0^{t_0} \frac{Eev_f}{\omega} \sqrt{\sin^2 \omega t + \left(\frac{\Delta\omega}{Eev_f}\right)^2} dt + |v|t_0 \quad (3.22)$$

Перейдем к новой переменной:

$$\omega t = t'; \quad dt' = \alpha dt; \quad (3.23)$$

и введем обозначение $d = \frac{\Delta\omega}{Eev_f}$.

Подставляя выражение (3.23) в (3.22) получаем

$$S = \frac{Eev_f}{\omega} \int_0^{t_0\omega} \sqrt{\sin^2 t' + d^2} dt + |v|t_0 = \frac{Eev_f}{\omega^2} \cdot \frac{d^2 \sqrt{2 + \frac{1}{d^2} - \frac{\cos 2t'}{d^2}} E\left(t'; -\frac{1}{d^2}\right) \Big|_0^{t_0\omega}}{\sqrt{1 + 2d^2 - \cos 2t'}} + |v|t_0 = \frac{Eev_f}{\omega^2} \cdot dE\left(t'; -\frac{1}{d^2}\right) \Big|_0^{t_0\omega} + |v|t_0.$$

Возвращаемся к исходным обозначениям:

$$S = \frac{Eev_f}{\omega^2} \cdot \frac{\Delta\omega}{Eev_f} \cdot E\left(t_0\omega; -\left(\frac{Eev_f}{\Delta\omega}\right)^2\right) + |v|t_0 = \frac{\Delta}{\omega} E\left(t_0\omega; -\left(\frac{Eev_f}{\Delta\omega}\right)^2\right) + |v|t_0 \quad (3.24)$$

Для удобства введем следующие обозначения:

$$n = -\left(\frac{Eev_f}{\Delta\omega}\right)^2; \quad \omega t_0 = i\omega t'_0; \quad \text{где } \omega t'_0 = \operatorname{arcsch} \frac{\omega\Delta}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta}\right)^2} = \varphi; \quad (3.25)$$

Подставим (3.25) в (3.24), получим

$$S = \frac{\Delta}{\omega} E(i\omega t'_0; n) + |v|t_0 = \frac{\Delta}{\omega} E(i\omega t'_0 | n) + |v|t_0 = \frac{\Delta}{\omega} E(i\varphi | n) + |v|t_0 \quad (3.26)$$

Учтем формулу для эллиптического интеграла в случае мнимой амплитуды [114]:

$$E(i\varphi | \alpha) = i \left[-E\left(\Theta \setminus \frac{\pi}{2} - \alpha\right) + F\left(\Theta \setminus \frac{\pi}{2} - \alpha\right) + \operatorname{tg}\Theta (1 - \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha)^{\frac{1}{2}} \right]. \quad (3.27)$$

Здесь $\operatorname{tg}\Theta = \operatorname{sh}\varphi$; $\Theta = \operatorname{arctg}(\operatorname{sh}\varphi)$. Каноническая форма эллиптического интеграла второго рода:

$$E(\varphi | m) = \int_0^{\varphi} (1 - m \sin^2 \Theta)^{\frac{1}{2}} d\Theta, \quad \text{где } -\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{\pi}{2} \cdot \text{и } m = \sin^2 \alpha$$

$$E(\varphi \setminus \alpha) = E(\varphi|m) = \int_0^{\varphi} (1 - m \sin^2 \Theta)^{\frac{1}{2}} d\Theta$$

После преобразований получаем

$$\begin{aligned} E\left(\Theta \setminus \frac{\pi}{2} - \alpha\right) &= \int_0^{\varphi} \left(1 - \sin^2\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \sin^2 \Theta\right)^{\frac{1}{2}} d\Theta = \int_0^{\varphi} (1 - \cos^2 \alpha \sin^2 \Theta)^{\frac{1}{2}} d\Theta = \\ &= \int_0^{\varphi} (1 - (1-m) \sin^2 \Theta)^{\frac{1}{2}} d\Theta. \end{aligned}$$

$$E\left(\Theta \setminus \frac{\pi}{2} - \alpha\right) = E(\Theta|1-m) \quad (3.28)$$

Каноническая форма эллиптического интеграла первого рода:

$$F(\varphi|m) = \int_0^{\varphi} (1 - m \sin^2 \Theta)^{-\frac{1}{2}} d\Theta; \text{ где } -\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{\pi}{2} \text{ и } m = \sin^2 \alpha;$$

$$F(\varphi \setminus \alpha) = F(\varphi|m) = \int_0^{\varphi} (1 - m \sin^2 \Theta)^{-\frac{1}{2}} d\Theta.$$

Преобразуя выражение (3.28), получим

$$\begin{aligned} F\left(\Theta \setminus \frac{\pi}{2} - \alpha\right) &= \int_0^{\varphi} \left(1 - \sin^2\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \sin^2 \Theta\right)^{-\frac{1}{2}} d\Theta = \int_0^{\varphi} (1 - \cos^2 \alpha \sin^2 \Theta)^{-\frac{1}{2}} d\Theta = \\ &= \int_0^{\varphi} (1 - (1-m) \sin^2 \Theta)^{-\frac{1}{2}} d\Theta; \end{aligned}$$

$$F\left(\Theta \setminus \frac{\pi}{2} - \alpha\right) = F(\Theta|1-m). \quad (3.29)$$

Подставим выражения (3.29) и (3.28) в (3.27):

$$E(i\varphi \setminus \alpha) = E(i\varphi|m) = i \left(-E(\Theta|1-m) + F(\Theta|1-m) + \operatorname{tg} \Theta (m \sin^2 \Theta)^{\frac{1}{2}} \right). \quad (3.30)$$

$$\text{В данном выражении} \quad \operatorname{tg} \Theta = \operatorname{sh} \varphi; \Theta = \operatorname{arctg}(\operatorname{sh} \varphi) \quad (3.31)$$

$$\sin^2 \Theta = 1 - \cos^2 \Theta = 1 - \frac{1}{1 + \operatorname{tg}^2 \Theta} = 1 - \frac{1}{1 + \operatorname{sh}^2 \varphi} \quad (3.32)$$

Подставим выражения (3.31) и (3.32) в (3.30):

$$E(i\phi|m) = i \left[-E(\operatorname{arctg}(sh\phi)|1-m) + F(\operatorname{arctg}(sh\phi)|1-m) + sh\phi \left(1 - (1-m) \left(1 - \frac{1}{1+sh^2\phi} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \right]. \quad (3.33)$$

Проведем подстановку (3.33) в выражение для действия (3.26):

$$S = \frac{i\Delta}{\omega} \left[-E(\operatorname{arctg}(sh\phi)|1-n) + F(\operatorname{arctg}(sh\phi)|1-n) + sh\phi \left(1 - (1-n) \left(1 - \frac{1}{1+sh^2\phi} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \right] + |v|t_0 \quad (3.34)$$

Подставим зависимости t_0 ; n и ϕ в (3.34):

$$S = \frac{i\Delta}{\omega} \left[-E \left(\operatorname{arctg} \left(\frac{\Delta\omega}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \right) \middle| 1 + \left(\frac{Eev_f}{\Delta\omega} \right)^2 \right) + F \left(\operatorname{arctg} \left(\frac{\Delta\omega}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \right) \middle| 1 + \left(\frac{Eev_f}{\Delta\omega} \right)^2 \right) + \right. \\ \left. + \frac{\Delta\omega}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \left(1 - \left(1 + \left(\frac{Eev_f}{\Delta\omega} \right)^2 \right) \left(1 - \frac{1}{1 + \left(\frac{\Delta\omega}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \right)^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \right] + \frac{i|v|}{\omega} \operatorname{arcsinh} \frac{\Delta\omega}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2}$$

После преобразований получаем выражение для мнимой часть квазиклассического действия, набираемого частицей при подбарьерном туннелировании:

$$\operatorname{Im} S = \frac{\Delta}{\omega} \left[-E \left(\operatorname{arctg} \left(\frac{\Delta\omega}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \right) \middle| 1 + \left(\frac{Eev_f}{\Delta\omega} \right)^2 \right) + F \left(\operatorname{arctg} \left(\frac{\Delta\omega}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \right) \middle| 1 + \left(\frac{Eev_f}{\Delta\omega} \right)^2 \right) + \right. \\ \left. + \frac{\Delta\omega}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \left(1 - \left(1 + \left(\frac{Eev_f}{\Delta\omega} \right)^2 \right) \left(1 - \frac{1}{1 + \left(\frac{\Delta\omega}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \right)^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \right] + \frac{|v|}{\omega} \operatorname{arcsinh} \frac{\Delta\omega}{Eev_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2}. \quad (3.35)$$

Вероятность ионизации рассчитывается аналогично по формуле (3.1).

Подставляя мнимую часть действия (3.35) в выражение (3.1), получаем

$$\begin{aligned}
 W = \exp & \left(-2 \frac{\Delta}{\omega} \left(-E \left[\operatorname{arctg} \left(\frac{\Delta \omega}{E e v_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \right) \right] 1 + \left(\frac{E e v_f}{\Delta \omega} \right)^2 \right) + F \left[\operatorname{arctg} \left(\frac{\Delta \omega}{E e v_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \right) \right] 1 + \left(\frac{E e v_f}{\Delta \omega} \right)^2 \right) + \\
 & + \frac{\Delta \omega}{E e v_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \left[\left(1 - \left(1 + \left(\frac{E e v_f}{\Delta \omega} \right)^2 \right) \left(1 - \frac{1}{1 + \left(\frac{\Delta \omega}{E e v_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2} \right)^2} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \right] + \frac{|v|}{\omega} \operatorname{arcsinh} \frac{\Delta \omega}{E e v_f} \sqrt{1 - \left(\frac{|v|}{\Delta} \right)^2}
 \end{aligned}
 \tag{3.36}$$

Проведем компьютерное моделирование зависимостей мнимой части действия и вероятности ионизации от параметров системы.

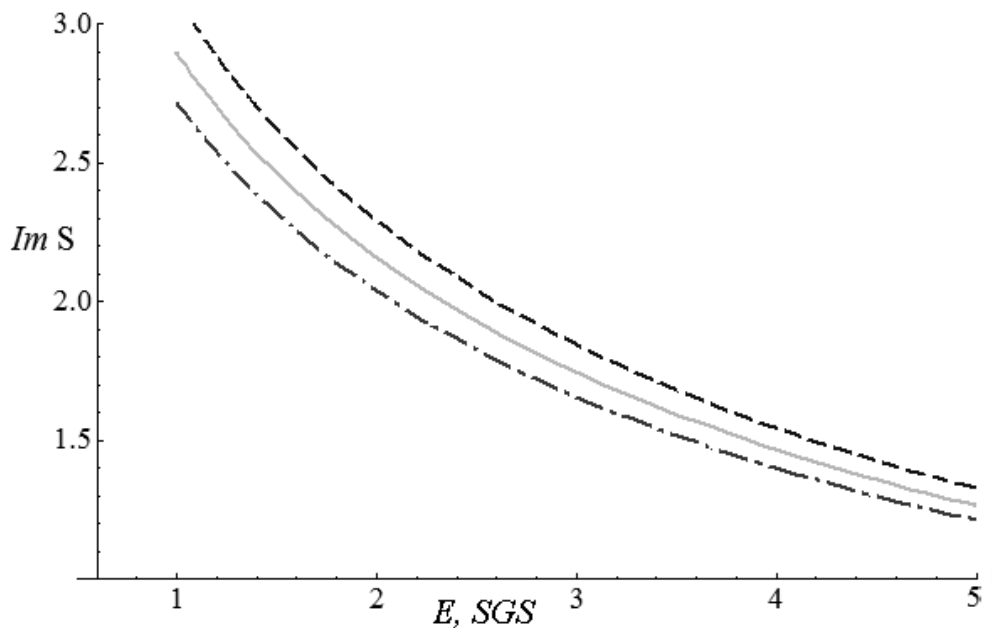


Рисунок 17 - Зависимость мнимой части действия от напряженности переменного поля для случаев, когда отношение $|V|/\Delta$ равно 0,1 (штриховая кривая); 0,2 (сплошная кривая) и 0,3 (пунктирная кривая)

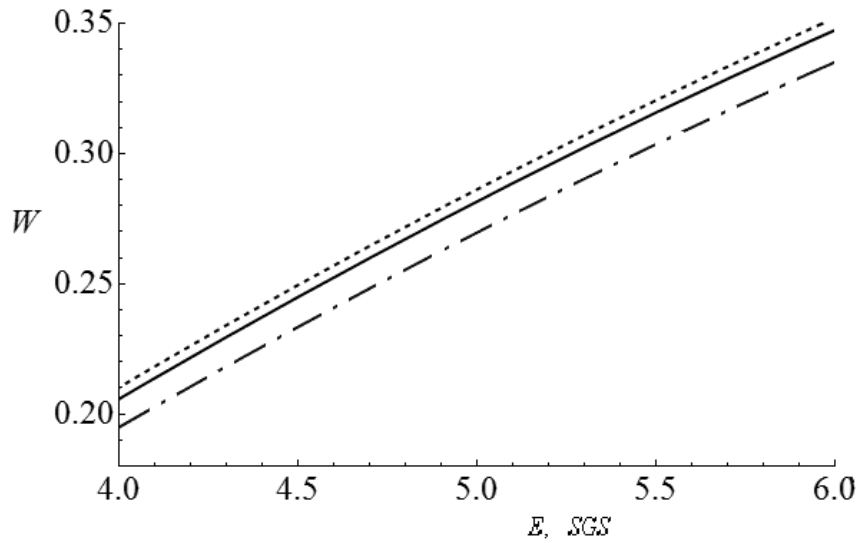


Рисунок 18 - Зависимость вероятности ионизации от напряженности переменного поля для случаев, когда отношение $|V|/\Delta$ равно 0,1 (пунктирная кривая); 0,2 (сплошная кривая) и 0,3 (штриховая кривая)

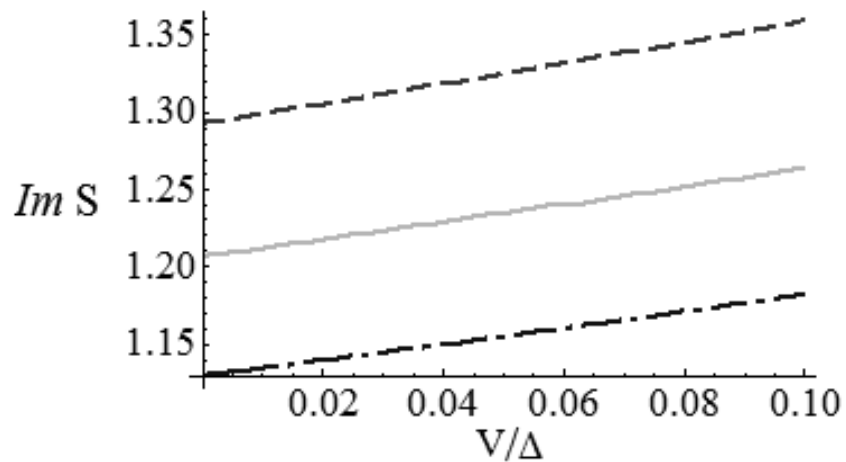


Рисунок 19 - Зависимость мнимой части действия от глубины залегания примесей при значениях напряженности переменного поля 4,5 SGS (пунктирная кривая); 5 SGS (сплошная кривая) и 5,5 SGS (штриховая кривая).

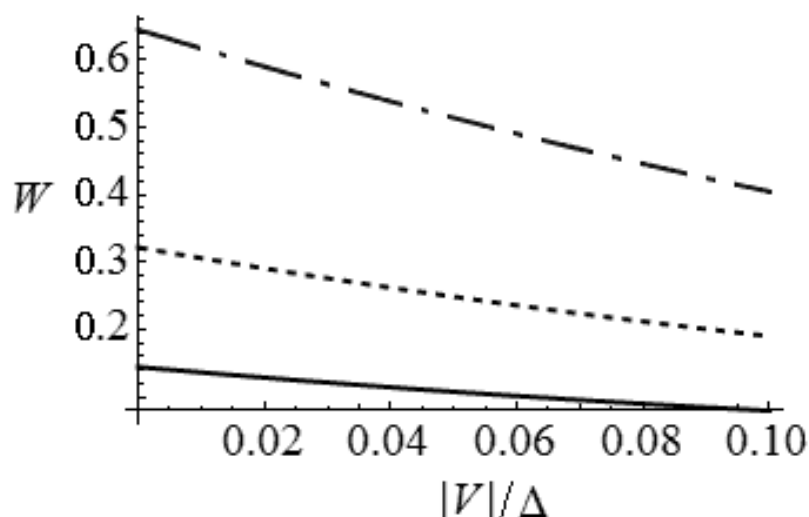


Рисунок 20 - Зависимость вероятности ионизации от глубины залегания примесей при значениях напряженности переменного поля 4,5 SGS (пунктирная кривая), 4 SGS (сплошная кривая) и 5 SGS (штриховая кривая).

По графикам зависимости (рис. 13 - 20) видно, что с уменьшением глубины залегания примесных центров вероятность их ионизации возрастает. Это связано с тем, что при увеличении напряженности приложенного поля барьер уменьшается, поэтому уменьшается квазиклассическое действие, набираемое частицей при подбарьерном движении, и, следовательно, растет вероятность ионизации примесных центров [Аб]. Эффект связан с релятивистским характером неаддитивного спектра графена.

Полученные зависимости графена качественно соответствуют подобным зависимостям для полупроводников. Этот факт еще раз подтверждает, что щелевая модификация графена может быть использована в устройствах нанoeлектроники как своеобразный полупроводник.

3.2 Проводимость графена с учетом ионизации примесей

Как было сказано выше, графен представляет собой одиночный слой атомов углерода. По электронным свойствам графен относится к полуметаллам [1, 2], однако за счёт взаимодействия с подложкой графен может приобретать свойства полупроводника. В частности, запрещённой зоной с шириной $\Delta = 0,26 \text{ eV}$, обладает спектр образца на подложке карбида кремния SiC [3].

Известно, что наличие примесей может кардинально модифицировать транспортные свойства любого материала. В графене рассеяние назад от барьера запрещено, и это меняет влияние примесей в системе кардинальным образом, делая невозможной слабую локализацию электронов. Сотрудники University of Maryland и University of Central Florida (США) выполнили систематические исследования транспортных характеристик графена, как функции концентрации заряженных примесей n_{imp} , которую они изменяли путем осаждения на графен атомов калия в сверхвысоком вакууме [35]. В связи с этим представляет интерес задача о нахождении проводимости графена в постоянном электрическом поле с учетом ионизации примесей, которая рассматривается в данном параграфе [A7]. Спектр графена на подложке SiC описывается выражением (3.4).

Энергетическая диаграмма расположения примеси между энергетическими уровнями уже была изображена на рис. 12, где $E^{(np.)}$ - минимальная энергия электрона в зоне проводимости, $E^{(вал.)}$ - максимальная энергия электрона в валентной зоне, V - энергия примеси. Начало отсчёта энергии выбираем посередине запрещённой зоны. Электрическое поле \vec{E} направлено вдоль оси x .

Для нахождения постоянной составляющей плотности тока используем метод кинетического уравнения Больцмана с модельным интегралом столкновений Батнагара–Гросса–Крука (БГК), описанного в работе Александрова А.Ф.,

Богданкевича Л.С., Рухадзе А.А. (М.: «Высшая школа», 1988) [115]. В данном виде интеграл столкновений остается простым по форме и корректно учитывает в зоне проводимости сохранение числа носителей тока.

$$\frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} + e\vec{E} \frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial \vec{p}} = \left(\frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} \right)_{cm} - R(\vec{p}) + G(\vec{p}). \quad (3.37)$$

Первое слагаемое в правой части (3.37) в соответствии с моделью БГК имеет вид

$$\left(\frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} \right)_{cm} = -\nu \left(f(\vec{p}, t) - \frac{n}{n_0} f_0(\vec{p}) \right), \quad (3.38)$$

где n – концентрация электронов в зоне проводимости, n_0 – равновесная (в отсутствие каких либо внешних воздействий) концентрация электронов в зоне проводимости, ν – частота столкновений электронов с нерегулярностями решетки, $f_0(\vec{p})$ – равновесная функция распределения. Интеграл столкновений в виде (3.38) для равновесной функции распределения обращается в ноль и сохраняет числа частиц:

$$\sum_{\vec{p}} \left(\frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} \right)_{cm} = 0. \quad (3.39)$$

Второе слагаемое в правой части выражения (3.37) определяет уменьшение числа электронов в зоне проводимости учитывая их рекомбинации.

Согласно Ландау Л.Д. (М.: «Наука», 1969) [116] член $R(\vec{p})$ имеет вид

$$R(\vec{p}) = \nu_r (f(\vec{p}, t) - f_0(\vec{p})), \quad (3.40)$$

где ν_r – частота рекомбинации электронов. Первое слагаемое учитывает электроны, убывающие из зоны за счет рекомбинации ($\nu_r f(\vec{p}, t)$), второе слагаемое учитывает электроны, рождающиеся под действием теплового движения ($-\nu_r f_0(\vec{p})$). Одинаковость константы пропорциональности ν_r является следствием равенства числа электронов, захваченных и рожденных под влиянием теплового движения в состоянии термодинамического равновесия (при $\vec{E} = 0$).

Функция $G(\vec{p})$ – член генерации носителей тока – количество носителей, которые образуются в результате ионизации в единице объема вещества в единицу времени. При глубоком залегании примеси процесс ионизации примеси может рассматриваться как процесс туннелирования электрона через потенциальный барьер и может рассчитываться квазиклассически, как описано в работах [48, 112] и Переломова А.М., Попова В.С., Терентьева М.В. (*ЖЭТФ*, 1966) [117]. В таком случае член генерации находится по формуле:

$$G(\vec{p}) = (N - (n - n_0)) \frac{\exp(-2 \operatorname{Im} S / \hbar)}{\operatorname{Im} t_0} \delta(p), \quad (3.41)$$

где N - концентрация примесей в графене. Количество носителей заряда, рождающихся в единицу времени, пропорционально количеству неионизированных примесей $N - (n - n_0)$, $\frac{\exp(-2 \operatorname{Im} S / \hbar)}{\operatorname{Im} t_0}$ - квазиклассическая

вероятность ионизации примеси в единицу времени, $S = \int_{t_0}^0 L(t') dt'$ -

классическое действие, набираемое частицей при подбарьерном движении, t_0 - время туннелирования, $L(t')$ - функция Лагранжа. Множитель $\delta(p)$ обусловлен тем, что предполагается переход электрона с примесного уровня в состояние с импульсом $\vec{p} = 0$. Член генерации удовлетворяет условию

$$\sum_{\vec{p}} G(\vec{p}) = (N - (n - n_0)) \frac{\exp(-2 \operatorname{Im} S / \hbar)}{\operatorname{Im} t_0}. \quad (3.42)$$

Полагаем, что туннелирование начинается в момент времени t_0 , когда частица находится в точке $x = x_0$, а заканчивается в момент $t = 0$ в точке $x = 0$ [80]. Из начального условия для энергии

$$\varepsilon(t_0) = \sqrt{(eEt_0 v_f)^2 + \Delta^2} \quad (3.43)$$

находим время туннелирования электрона:

$$t_0 = i \frac{\Delta}{eE v_f} \sqrt{1 - \left(\frac{V}{\Delta}\right)^2}. \quad (3.44)$$

Функция Лагранжа имеет следующий вид:

$$L = -\frac{\Delta}{v_f} \sqrt{v_f^2 - \dot{x}^2} + eEx. \quad (3.45)$$

Квазиклассическое уравнение движения электрона:

$$\dot{x} \equiv \frac{dx}{dt} = v_f \left(\frac{eE v_f t}{\Delta} \right) / \sqrt{1 + \left(\frac{eE v_f t}{\Delta} \right)^2}. \quad (3.46)$$

Решая уравнение (3.46) и подставляя его решение в (3.45), а затем, интегрируя, находим мнимую часть классического действия:

$$\text{Im} S = -\frac{\Delta}{Fv} \left((1+V_1) \sqrt{1-(1-V_1^2)} + \text{arctg} \left(\sqrt{1-(1-V_1^2)} \right) \right), \quad (3.47)$$

где $V_1 = 1 - V/\Delta$ — безразмерная глубина залегания примеси, $F = \frac{eE v_f}{\Delta v}$ — безразмерная напряженность электрического поля. Концентрация n связана с равновесной концентрацией n_0 следующим образом, согласно [116]:

$$n = n_0 + \frac{1}{v_r} \sum_p G(p). \quad (3.48)$$

Используя выражение (3.42), можно получить следующее уравнение для вычисления n :

$$n = n_0 + (N - (n - n_0)) \frac{\exp(-2\text{Im}S / \hbar)}{v_r \text{Im}t_0}. \quad (3.49)$$

Решая уравнение (3.49), окончательно получаем:

$$n = n_0 + N \frac{\exp\left(\frac{\Delta}{\hbar v} \cdot \frac{1}{F} \left[(1+V_1) \sqrt{1-(1-V_1^2)} - \text{arctg} \left(\sqrt{1-(1-V_1^2)} \right) \right] \right)}{\frac{1}{F\gamma} \sqrt{1-V_1^2} + \exp\left(\frac{\Delta}{\hbar v} \cdot \frac{1}{F} \left[(1+V_1) \sqrt{1-(1-V_1^2)} - \text{arctg} \left(\sqrt{1-(1-V_1^2)} \right) \right] \right)}, \quad (3.50)$$

где $\gamma = \frac{v}{v_r}$.

Найдем функцию распределения решив уравнение (3.37) методом характеристик. Воспользуемся равенствами

$$\frac{df(\vec{p}, t)}{dt} = \frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} + e\vec{E} \frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial \vec{p}}, \quad (3.51)$$

перепишем (3.37) в виде

$$\frac{df(\vec{p}, t)}{dt} = -(\nu + \nu_r) f(\vec{p}, t) + \left(\nu \frac{n}{n_0} - \nu_r \right) f_0(\vec{p}) + G(\vec{p}). \quad (3.52)$$

Решением уравнения (3.52) является функция

$$\begin{aligned} f(\vec{p}, t) = & f_0 \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right) \exp(-(\nu + \nu_r)t) + \\ & + \int_{-\infty}^t \exp((\nu + \nu_r)(t' - t)) \left[\left(\nu \frac{n}{n_0} - \nu_r \right) f_0 \left(\vec{p} + \frac{e}{c} (\vec{A}(t) - \vec{A}(t')) \right) + \right. \\ & \left. + G \left(\vec{p} + \frac{e}{c} (\vec{A}(t) - \vec{A}(t')) \right) \right] dt', \end{aligned} \quad (3.53)$$

где за $\vec{A}(t)$ обозначен векторный потенциал электрического поля, $\vec{A} = \{A_x, 0\}$, $A_x = -cE(t' - t)$. Первое слагаемое в выражении (3.53) определено на временах, не превышающих время релаксации $\tau = 1/\nu$. Далее, когда процесс установился ($t \gg \tau$) данным слагаемым можно пренебречь. В реальных материалах $\nu \gg \nu_r$ [78], поэтому в (3.53) сумму $\nu + \nu_r$ можно заменить на ν . Типичной для графена является частота столкновений $\nu = 10^{11} \text{ c}^{-1}$. Частоту рекомбинации ориентировочно будем полагать равной $\nu_r = 10^8 \text{ c}^{-1}$, что является близким к значениям частоты рекомбинации в объемных полупроводниковых материалах, которая представлена в работе Паздзерского В.А. (ФТП, 1972) [118].

Следующим шагом является вычисление плотности тока:

$$j_x = e \sum_{\vec{p}} v_x(\vec{p}) f(\vec{p}), \quad (3.54)$$

где $v_x(p)$ – компонента скорости носителей заряда, $f(\vec{p})$ – неравновесная функция распределения. В силу своей симметричности $G(\vec{p})$ вклада в ток не

вносит, поэтому вместо функции распределения, задаваемой формулой (3.53), в (3.54) можно подставить выражение

$$f(\bar{p}, t) = \nu \int_{-\infty}^t \exp(\nu(t' - t)) \frac{n}{n_0} f_0 \left(\bar{p} + \frac{e}{c} (\bar{A}(t) - \bar{A}(t')) \right) dt'. \quad (3.55)$$

В этом случае плотность тока, текущего вдоль оси, запишем в виде:

$$j(t) = j_0 \frac{n}{n_0} \int_{-\infty}^0 dt \cdot \exp(t) \int_0^{\infty} q \cdot dq \cdot \exp\left(-\frac{\Delta}{T} \sqrt{1+q^2}\right) \times \\ \times \left[\frac{(1+q^2 - F^2 t^2) K\left(\frac{4Ftq}{1+(q+ Ft)^2}\right) - (1+(q+ Ft)^2) E\left(\frac{4Ftq}{1+(q+ Ft)^2}\right)}{Ft \sqrt{1+(q+ Ft)^2}} \right] \quad (3.56)$$

Здесь $j_0 = \frac{2ev_f}{\pi d}$, $I = \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\Delta}{T} \sqrt{1+x}\right) dx$, $E(x)$ и $K(x)$ - полные эллиптические интегралы соответственно первого и второго рода.

Проанализируем зависимости плотности тока от напряженности электрического поля, концентрации, глубины залегания примесей и температуры, которые представлены на рисунках 21, 22, 23.

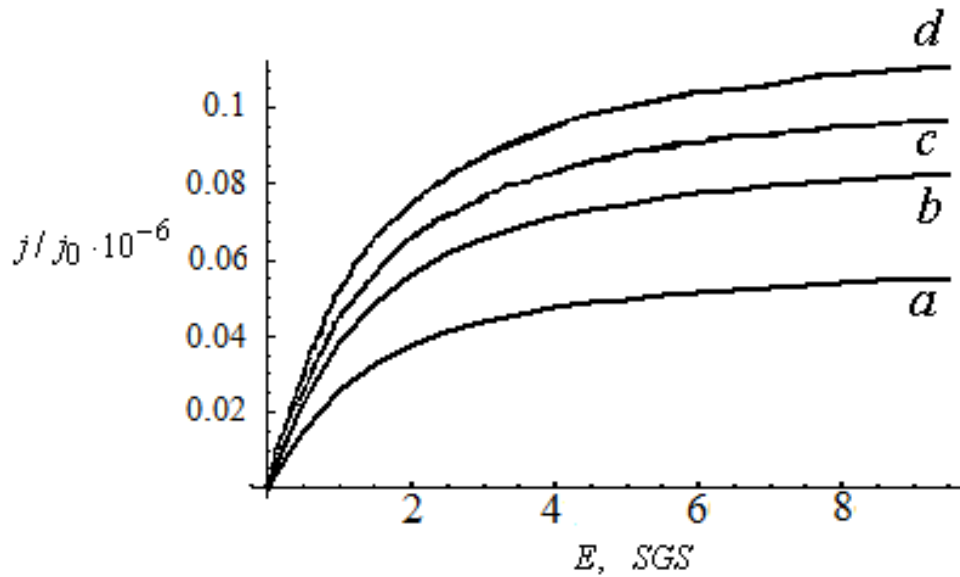


Рисунок 21 – Зависимость плотности тока от напряженности электрического поля, где плотность тока в отсутствие примесей – (a); с учетом ионизации примесей: при условии равенства концентрации примесей N и равновесной концентрации носителей заряда n_0 - (d), если концентрация примесей меньше равновесной концентрации носителей заряда в два раза - (b), отношение концентрации примесей к равновесной концентрации носителей заряда равно 0,75 - (c)

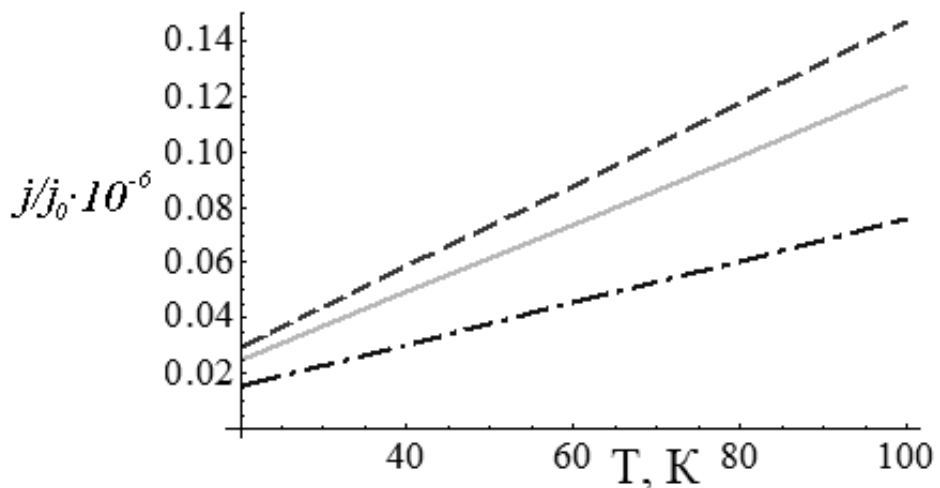


Рисунок 22 - График зависимости плотности тока от температуры при значениях постоянного электрического поля 5 SGS (пунктирная линия), 4 SGS (сплошная линия), 3 SGS (штриховая линия)

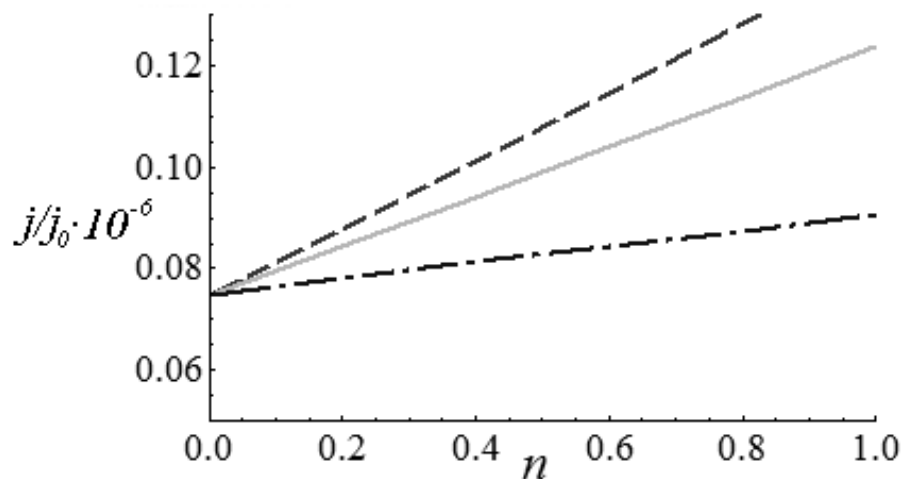


Рисунок 23 - Зависимость плотности тока от концентрации примесей при значениях постоянного электрического поля 4,5 SGS (пунктирная линия), 4 SGS (сплошная линия), 3,5 SGS (штриховая линия)

Зависимость плотности тока от напряженности электрического поля (рис. 21), которая демонстрирует эффект насыщения, объясняется спецификой спектра носителей тока с релятивистским спектром энергии. В случае слабых полей, когда ионизация не очень сильная, происходит рост тока по стандартному линейному закону Ома (см. рис. 21). С ростом поля увеличивается количество ионизированных примесей, что, в свою очередь, приводит к росту тока насыщения. Три из представленных графиков (см. рис. 21, кривые *b*, *c*, *d*) являются зависимостями величинами постоянной составляющей плотности тока от напряженности электрического поля при различных значениях концентрации примесей и демонстрируют пропорциональность плотности тока насыщения сумме равновесной концентрации носителей тока и концентрации примесей [A10]. Из рисунка 22 видно, что абсолютная

величина постоянного тока увеличивается с повышением температуры. Также постоянный ток увеличивается с увеличением концентрации примесей, как можно видеть на рисунке 23.

Отметим, что ионизация глубоких примесей начинается при довольно сильных полях, при которых необходимо использовать выражение для энергетического спектра в более точной форме, чем (3.4), однако качественно рассмотренный эффект должен сохраняться [A9 - A10]. При температуре порядка $T = 70K$ и концентрации $n_0 = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ плотность тока составляет порядка $j = 10^{-5} \text{ A/cm}$.

3.3 Выводы третьего раздела

1) Вероятность ионизации примесного центра в щелевой модификации графена как для случая воздействия постоянного, так и для случая переменного электрического поля, в области квазиклассически сильных значений, носит резкий экспоненциальный характер и больше для примесей с меньшей глубиной залегания.

2) Присутствие переменного поля приводит к росту вероятности ионизации, при этом ионизация примесей начинается при довольно сильных полях, что позволяет осуществлять управление величиной вероятности.

3) Плотность тока насыщения, рассчитанная с учетом процессов ионизации примесных центров, увеличивается пропорционально сумме равновесной концентрации носителей заряда и концентрации примесей. Подобный эффект может быть использован для экспериментального определения количества примесей в образце.

4 ЭФФЕКТ ВЫПРЯМЛЕНИЯ ПЕРЕМЕННЫХ ТОКОВ В ГРАФЕНЕ

Эффекты взаимного выпрямления волн, описанные как в работах [49-51, 75-82], так и в работах Zav'yalova D.V., Kryuchkova S.V., Marchuka É. V. (*Technical Physics Letters*, 2008) [119], Zav'yalova D.V., Konchenkova V.I., Kryuchkova S.V. (*Physics of the Solid State*, 2009) [120], Завьялова Д.В., Конченкова В.И., Крючкова С.В. (*Физика твердого тела*, 2010) [121], Zav'yalova D.V., Konchenkova V.I., Kryuchkova S.V. (*Physics of Wave Phenomena*, 2010) [122], Kryuchkova S.V., Kuhar E.I., Yakovenko V.A. (*Bulletin of Russian Academy of Sciences: Physics*, 2010) [123], Zavialova D.V., Konchenkova V.I., Kruchkova S.V. (*Semiconductors*, 2012) [124] или эффект когерентного волнового взаимодействия [48, 51, 77, 79, 80] класса нелинейных явлений, которые могут возникать в материалах с неквадратичным энергетическим спектром электрона (масса полупроводников, полупроводниковые сверхрешетки (SL), углеродные материалы), эти эффекты заключались в появлении постоянного тока [75 – 78, 75 - 82, 119 - 124] (или постоянной электродвижущей силы на контактах разомкнутого образца [50]) в присутствии влияния альтернативных электрических полей (или в присутствии постоянного электрического поля направленного перпендикулярно к направлению тока [73, 119, 124]). Проблемы устранения волн в нелинейных средах красивы и интересны с точки зрения развития методов кинетической теории взаимодействия электромагнитного излучения с твердым телом.

Причиной образования постоянного тока могут быть сильные электромагнитные волны, которые изменяют электронную структуру материала. Волна распространяется в среде с некоторым преимущественным направлением [49, 50, 75] (этот механизм проявляется в объемных полупроводниках с квадратичным спектром энергии). Для SL [76 – 78, 80, 82] является типичным другой механизм. В этом материале из-за узости зоны проводимости и неаддитивного характера энергетического спектра эффект взаимного выпрямле-

ния электромагнитных волн проявлялся в существенно малых величинах электрического поля. Эффекты взаимного устранения волн в полупроводниковых SL являются наиболее теоретическими, в частности, было показано, что появление постоянного тока является своего рода параметрическим эффектом [48], и он был изучен в случае нелинейного выпрямления [80].

Последние годы связаны с экспериментальным производством графена [84], этот материал оказался в центре внимания исследований в области физики конденсированных сред [44]. Одной из важных особенностей графена является неаддитивность энергетического спектра [50], которая приводит к взаимной зависимости движения носителей заряда вдоль перпендикулярных друг другу направлений.

Работа над исследованием электронного газа в графене с помощью электрического поля ориентирована в одном направлении. В объемных полупроводниковых волноводах и полупроводниковых SL чаще всего был изучен случай волны с совпадающими поляризациями и процесс появления тока в направлении пересечения плоскости поляризации волны и поверхностью образца (в SL это направление обычно выбирают вдоль оси сверхрешетки). Из-за взаимосвязи носителей заряда движения в перпендикулярном направлении в графене можно предположить, что устранение электромагнитных волн должно происходить в поперечной геометрии поляризации падающей волны. В работах [119 – 123] различные эффекты, связанные с неаддитивностью спектра графена и SL на базе графена, теоретические.

В работах [119, 120, 124] рассматривается приближение постоянного времени релаксации и квазиклассический метод Монте-Карло, исследуется постоянный ток в поперечном направлении постоянного электрического поля под влиянием эллиптически поляризованной падающей электромагнитной волны по нормали к поверхности графена [119, 120] и графена SL [124]. В работе [44] постоянный ток был экспериментально обнаружен в графене, облученным косо падающим на его поверхность эллиптически поляризованно-

го лазерного излучения, которое является косвенным доказательством эффекта [73, 119, 124]. В работах [120, 122, 123], появление постоянного тока изучали в ситуации, когда две взаимно перпендикулярно поляризованные электромагнитные волны с разными частотами падают нормально на образец графена [120 – 122] и SL на основе графена [123].

4.1 Влияние магнитного поля на взаимное выпрямление переменных токов в графене

Эффекты взаимного выпрямления электромагнитных волн в материалах с неаддитивным спектром изучены достаточно подробно. Однако чтобы дать полную картину, стоит разобраться в ситуации, где постоянный электрический ток в графене появляется в условиях воздействия волн с совпадающей поляризацией. Интересно рассмотреть появление постоянного тока в направлении, перпендикулярном плоскости поляризации волн с разными частотами под влиянием постоянного магнитного поля.

В работе [121] рассмотрен эффект возникновения постоянного тока под влиянием двух переменных электрических полей со взаимно перпендикулярными векторами напряженности в присутствии магнитного поля. Показано, что постоянный ток возникает когда отношение частот падающих волн равно двум и одной второй.

В данной главе нами рассмотрен случай (рис. 24), когда векторы напряженности электрических полей сонаправлены, падающие на образец волны поляризованы в одной плоскости, а постоянное магнитное поле перпендикулярно поверхности образца [A1, A5]. Покажем, что возможно возникновение постоянной составляющей тока в графене при определенном соотношении между частотами данных волн.

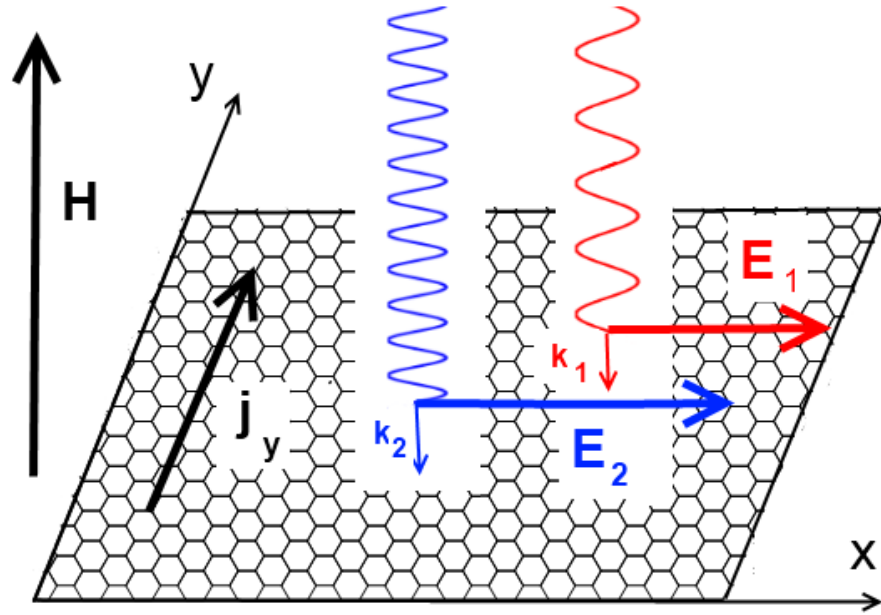


Рисунок 24 - Геометрия задачи, здесь $E_1 = E_{10} \cos(\omega_1 t)$,

$E_2 = E_{20} \cos(\omega_2 t + \varphi)$ - напряжённости электрических полей падающих волн.

Для проявления эффектов выпрямления, неаддитивность и неквадратичность энергетического спектра материалов являются ключевыми. Для упрощения расчетов примем во внимание изменения графена, которые имеют щель в энергетическом спектре, что позволяет использовать один диапазон приближения в нашем исследовании. Сейчас существует несколько форм графена с шириной запрещенной зоны: эпитаксиальный графен на основе подложки из карбида кремния с половинной ширины запрещенной зоны $\Delta \approx 0,13 \text{ эВ}$ [44, 45], графен на подложке гексагонального нитрида бора ($\Delta \approx 0,053 \text{ эВ}$) [46], который является тенденцией двухслойного графена, который описан в работе Ohta T., Bostwick A., Seyller T. с соавторами (*Science*, 2006) [125].

Рассмотрим двухслойный графен, энергетический спектр носителей которого определяется выражением [12, 39].

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{t_{\perp}^2}{2} + \Delta^2 + v_f^2 \mathbf{p}^2} - \sqrt{\frac{t_{\perp}^4}{4} + v_f^2 \mathbf{p}^2 (t_{\perp}^2 + 4\Delta^2)}. \quad (4.1)$$

Здесь $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ - вектор квазиимпульса, $v_f \approx 10^8 \text{ см/с}$ - скорость на поверхности Ферми, Δ - полуширина запрещённой зоны, $t_{\perp} \approx 0.35 \text{ эВ}$ - интеграл перекрытия между слоями графена.

Для проведения аналитических выкладок сложно использовать энергетический спектр в виде (4.1). Однако, если малы актуальные значения квазиимпульса P , то можно ограничиться следующим выражением [12], которое получено разложением выражения (4.1) в ряд Тейлора:

$$\varepsilon(\mathbf{q}) \approx \Delta \left(1 - 2V^2 |\mathbf{q}|^2 + \frac{1}{2} V^2 |\mathbf{q}|^4 \right). \quad (4.2)$$

В выражении (4.2) введены обозначения $V = \Delta/t_{\perp}$, $\mathbf{q} = \mathbf{p} v_f / \Delta$, $v_f \approx 10^8 \text{ см/с}$ - скорость на поверхности Ферми, Δ - полуширина запрещённой зоны, $t_{\perp} \approx 0.35 \text{ эВ}$ - интеграл перекрытия между слоями графена, p - квазиимпульс электрона. Малость значений импульса означает выполнение условий $|\mathbf{q}| \ll 1/V$ и $V \ll 1$.

Спектр (4.2) является простейшей моделью неаддитивного энергетического спектра, который позволяет нам выполнять многие расчеты аналитически. Эффект выпрямления двух волн с совпадающими поляризациями и частотами (без магнитного поля) в материале со спектром в виде (4.2), рассмотрена в [77], показано, что постоянный ток возникает только в случае, когда отношение частот падающих волн равно двум и одной второй. Можно показать, что в материале со спектром (4.2) постоянная составляющая электрического тока может появиться только при соотношении частот $\omega_2 / \omega_1 = 2$ (или $\omega_2 / \omega_1 = 1/2$).

Таким образом, в данном случае постоянный ток возникает вдоль оси, происходит выпрямление электрического тока, вызванного электромагнитными волнами. Наличие постоянного магнитного поля, перпендикулярного к направлению тока, должно привести к появлению постоянного тока вдоль оси в результате влияния силы Ампера.

Таким образом, рассматриваемая проблема по ее физическому содержанию похожа на эффект Холла. Совместное действие электрического и магнитного полей в графене экспериментально изучены в работе [85]. В работе [120] (в другой геометрии) было показано, что влияние магнитного поля приводит к появлению дополнительного отклонения силы, действующей на носители заряда, которая становится причиной протекания тока без магнитного поля.

Плотность тока вдоль оси Y определяется стандартным образом:

$$j_y = e \sum_{\mathbf{q}} v_y(\mathbf{q}) f(\mathbf{q}, t), \quad (4.3)$$

$$\text{где } v_y = \frac{\partial \varepsilon}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial p_y} = 2v_f V^2 u_y, \quad \mathbf{u} = \left\{ q_x \left(|\mathbf{q}|^2 - 2 \right); q_y \left(|\mathbf{q}|^2 - 2 \right) \right\}, \quad (4.4)$$

Неравновесная функция распределения $f(\mathbf{q}, t)$ является решением кинетического уравнения Больцмана, столкновительный член которого выберем в приближении постоянной частоты столкновений ν . Уравнение Больцмана имеет вид:

$$\frac{\partial f(\mathbf{q}, \theta)}{\partial \theta} + (\mathbf{F} + [\mathbf{u}, \mathbf{R}]) \frac{\partial f(\mathbf{q}, \theta)}{\partial \mathbf{q}} = -\gamma [f(\mathbf{q}, \theta) - f_0(\mathbf{q})], \quad (4.5)$$

где $f_0(\mathbf{q})$ - равновесная функция распределения,

$$\mathbf{F} = \left\{ F_1 \cos(b\theta), \frac{F_2}{b} \cos(\theta + \varphi), 0 \right\}. \quad F_1 = eE_{01}v_f / \omega_1\Delta, \quad F_2 = eE_{02}v_f / \omega_2\Delta,$$

$$R = 2eHv_f^2 \Delta / \omega_2 c t_{\perp}^2, \quad \theta = \omega_1 t, \quad b = \omega_1 / \omega_2, \quad \gamma = \nu / \omega_1.$$

Решение уравнения (4.4) находится методом характеристик и имеет вид:

$$f(\mathbf{q}, \theta) = \gamma \int_{-\infty}^{\theta} d\theta_1 \exp(-\gamma(\theta - \theta_1)) f_0(q_1(\theta_1; \mathbf{q}, \theta)), \quad (4.6)$$

где компоненты $q_1(\theta_1; \mathbf{q}, \theta)$ представляют собой решения классических уравнений движения:

$$\frac{dq_{1x}}{d\theta_1} = F_1 \cos(\theta_1) + \frac{F_2}{b} \cos\left(\frac{\theta_1}{b} + \varphi\right) + Rq_{1y} \left(-2 + |q|^2 \right); \quad (4.7)$$

$$\frac{dq_{1y}}{d\theta_1} = -Rq_{1x}(-2 + |q|^2), \quad (4.8)$$

с начальным условием

$$\theta_1 = \theta, q_1 = q. \quad (4.9)$$

Полагая $F_1, F_2 \gg R$, решаем уравнения движения итерациями по R .

В нулевом приближении по R уравнения движения принимают вид

$$\frac{dq_{1x}}{d\theta_1} = F_1 \cos(\theta_1) + \frac{F_2}{b} \cos\left(\frac{\theta_1}{b} + \varphi\right); \quad (4.10)$$

$$\frac{dq_{1y}}{d\theta_1} = 0. \quad (4.11)$$

Решением уравнений (4.10), (4.11) являются

$$q_{1x} = q_x + F_1 g_1(\theta_1, \theta) + \frac{F_2}{b} g_2(\theta_1, \theta), \quad g_1(\theta_1, \theta) = \sin(\theta_1) - \sin(\theta),$$

$$g_2(\theta_1, \theta) = \sin\left(\frac{\theta_1}{b} + \varphi\right) - \sin\left(\frac{\theta}{b} + \varphi\right); \quad (4.12)$$

$$q_{1y} = q_y. \quad (4.13)$$

Подставляем выражения (4.12), (4.13) в правые части (4.7), (4.8) и находим q_{1x} , q_{1y} в первом приближении по R . Начальные условия накладываем в форме (4.9). Получаем:

$$\begin{aligned} q_{1x} = & q_x + F_1 g_1 + \frac{F_2}{b} g_2 + Rq_y(-2 + (q_x + q_y)^2) + R \left(F_1^2 q_y \int_{\theta}^{\theta_1} g_1^2 d\theta_1 + \right. \\ & + \left(\frac{F_2}{b} \right)^2 q_y \int_{\theta}^{\theta_1} g_2^2 d\theta_1 + 2F_1 (q_y^2 + q_x q_y) \int_{\theta}^{\theta_1} g_1 d\theta_1 + 2 \frac{F_2}{b} q_y^2 \int_{\theta}^{\theta_1} g_2 d\theta_1 + \\ & \left. 2F_1 \frac{F_2}{b} q_x q_y \int_{\theta}^{\theta_1} g_1 g_2 d\theta_1 \right) \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned}
q_{1y} = & q_y - R \left(q_x + F_1 g_1 + \frac{F_2}{b} g_2 \right) \left(-2 + (q_x + q_y)^2 \right) - R \left(F_1^2 (3q_x + 2q_y) \int_{\theta}^{\theta_1} g_1^2 d\theta_1 + \right. \\
& \left(\frac{F_2}{b} \right)^2 (q_x + 2q_y) \int_{\theta}^{\theta_1} g_2^2 d\theta_1 + 2F_1 (q_y q_x + q_x^2) \int_{\theta}^{\theta_1} g_1 d\theta_1 + 2 \frac{F_2}{b} q_y q_x \int_{\theta}^{\theta_1} g_2 d\theta_1 + \\
& 2F_1 \frac{F_2}{b} (q_x^2 + 2q_y + q_x) \int_{\theta}^{\theta_1} g_1 g_2 d\theta_1 + F_1^3 \int_{\theta}^{\theta_1} g_1^3 d\theta_1 + F_1 \left(\frac{F_2}{b} \right)^2 (1 + 2q_x) \int_{\theta}^{\theta_1} g_2^2 g_1 d\theta_1 \\
& \left. + F_1^2 \frac{F_2}{b} (2q_x + 1) \int_{\theta}^{\theta_1} g_1^2 g_2 d\theta_1 + \left(\frac{F_2}{b} \right)^3 \int_{\theta}^{\theta_1} g_2^3 d\theta_1 \right) \quad (4.15)
\end{aligned}$$

Выбирая $f_0(\mathbf{p})$ в виде функции распределения Больцмана, в первом исчезающем приближении по напряжённости электрических полей F_1 , F_2 и магнитного поля R . Подставляем найденные выражения для компонент импульса в выражение для плотности тока (4.2). Получаем следующее выражение для поперечной поверхностной плотности тока:

$$j_y = j_0 (G_{11} \cos \varphi + G_{12} \sin \varphi) F_1^2 F_2 R \delta_{b,2} + j_0 (G_{21} \cos 2\varphi + G_{22} \sin 2\varphi) F_1 F_2^2 R \delta_{b,1/2} \quad . \quad (4.16)$$

В (4.16) введены обозначения

$$\begin{aligned}
j_0 = & ev_f n \left(\left(2\sqrt{2} V^{7/2} \gamma e^{-2V^3/T'} \right) / T'^{1/2} \left(1 + \operatorname{erf} \left(\sqrt{2V^3/T'} \right) \right) \right), T' = T/t_{\perp}, \\
G_{11} = & \int_0^q - \frac{1}{8v(4+v^2)^2 T} \exp \left[\frac{V}{T} \left(2q^2 V^2 - \frac{q^4 V^2}{2} \right) \right] q^2 (-2 + q^2) V^3 \cdot \\
& \left(\left(2 - \frac{8q^4 V^3}{T} + \frac{2q^6 V^3}{T} + q^2 \left(-3 + \frac{8V^3}{T} \right) \right) (192 + 96v^2 + 12v^4) + \right. \\
& \left(-4 + \frac{48V^3}{T} - \frac{24V^6 q^8}{T^2} + \frac{3V^6 q^{10}}{T^2} + \frac{8V^3 q^4}{T} \left(11 - \frac{12V^3}{T} \right) + \frac{V^3 q^6}{T} \left(-19 + \frac{72V^3}{T} \right) + \right. \\
& \left. \left. 2q^2 \left(3 - \frac{62V^3}{T} + \frac{24V^6}{T^2} \right) \right) (-4v + v^3) \right) dq; \quad (4.17)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{12} = & \int_0^q \frac{1}{2v(4+v^2)^2 T} \exp\left[\frac{V}{T}\left(2q^2V^2 - \frac{q^4V^2}{2}\right)\right] vq^3(-2+q^2)V^3 \cdot \\
& \left(-4 + \frac{48V^3}{T} - \frac{24V^6q^8}{T^2} + \frac{3V^6q^{10}}{T^2} + \frac{8V^3q^4}{T}\left(11 - \frac{12V^3}{T}\right) + \frac{V^3q^6}{T}\left(-19 + \frac{72V^3}{T}\right) + \right. \\
& \left. 2q^2\left(3 - \frac{62V^3}{T} + \frac{24V^6}{T^2}\right)\right) dq; \tag{4.18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{21} = & \int_0^q -\frac{1}{4v(4+v^2)^2 T} \exp\left[\frac{V}{T}\left(2q^2V^2 - \frac{q^4V^2}{2}\right)\right] q^3(-2+q^2)V^3 \cdot \\
& \left(\left(2 - \frac{8q^4V^3}{T} + \frac{2q^6V^3}{T} + q^2\left(-3 + \frac{8V^3}{T}\right)\right)(12 + 24v^2 + 12v^4) + \right. \\
& \left(-4 - \frac{48V^3}{T} + \frac{24V^6q^8}{T^2} - \frac{3V^6q^{10}}{T^2} + \frac{8V^3q^4}{T}\left(-7 + \frac{12V^3}{T}\right) + \frac{V^3q^6}{T}\left(11 - \frac{72V^3}{T}\right) + \right. \\
& \left. q^2\left(6 + \frac{92V^3}{T} - \frac{48V^6}{T^2}\right)\right)(v+v^3) dq; \tag{4.19}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{22} = & \int_0^q -\frac{1}{2(1+v^2)^2 T} \exp\left[\frac{V}{T}\left(2q^2V^2 - \frac{q^4V^2}{2}\right)\right] vq^3(-2+q^2)V^3 \cdot \\
& \left(4 + \frac{48V^3}{T} - \frac{24V^6q^8}{T^2} + \frac{3V^6q^{10}}{T^2} + \frac{8V^3q^4}{T}\left(7 - \frac{12V^3}{T}\right) + \frac{V^3q^6}{T}\left(-11 + \frac{72V^3}{T}\right) + \right. \\
& \left. q^2\left(-6 - \frac{92V^3}{T} + \frac{48V^6}{T^2}\right)\right) dq. \tag{4.20}
\end{aligned}$$

Проанализируем зависимости G_{ij} от безразмерной частоты столкновений \mathcal{V} .

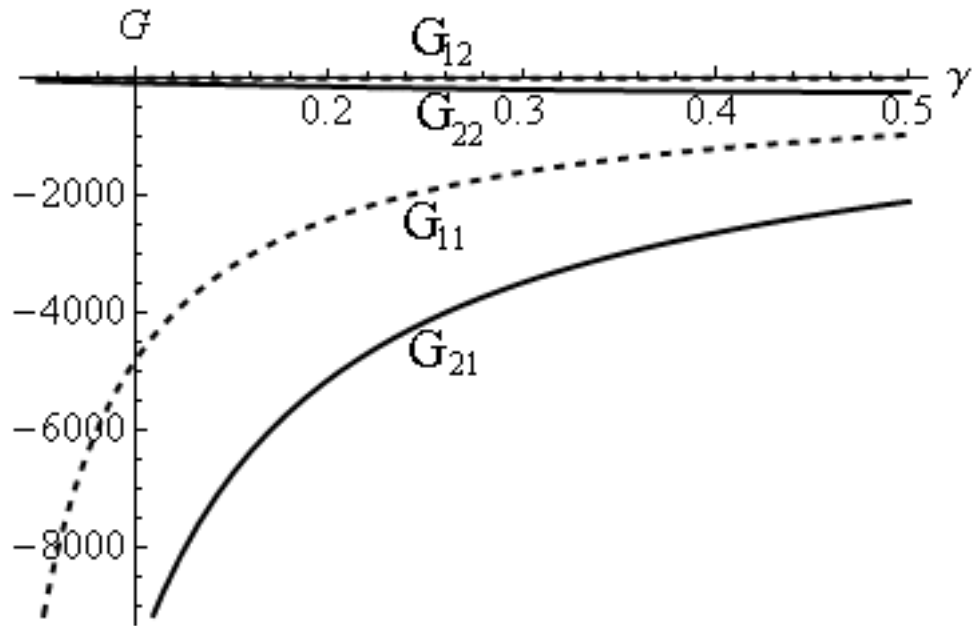


Рисунок 25 - Зависимость G_{ij} от безразмерной частоты столкновений γ при $V = 0.25$

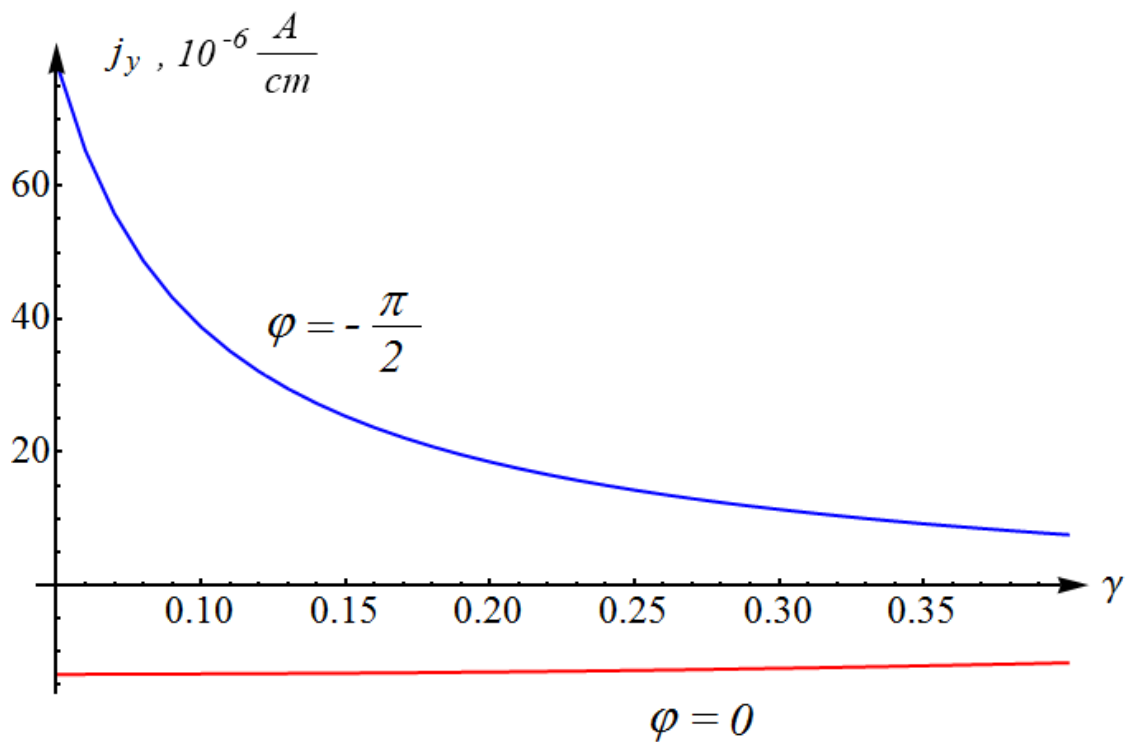


Рисунок 26 - Зависимость j_y от безразмерной частоты столкновений γ в $\omega_1 / \omega_2 = 1/2$ и температуры $T = 70 K$

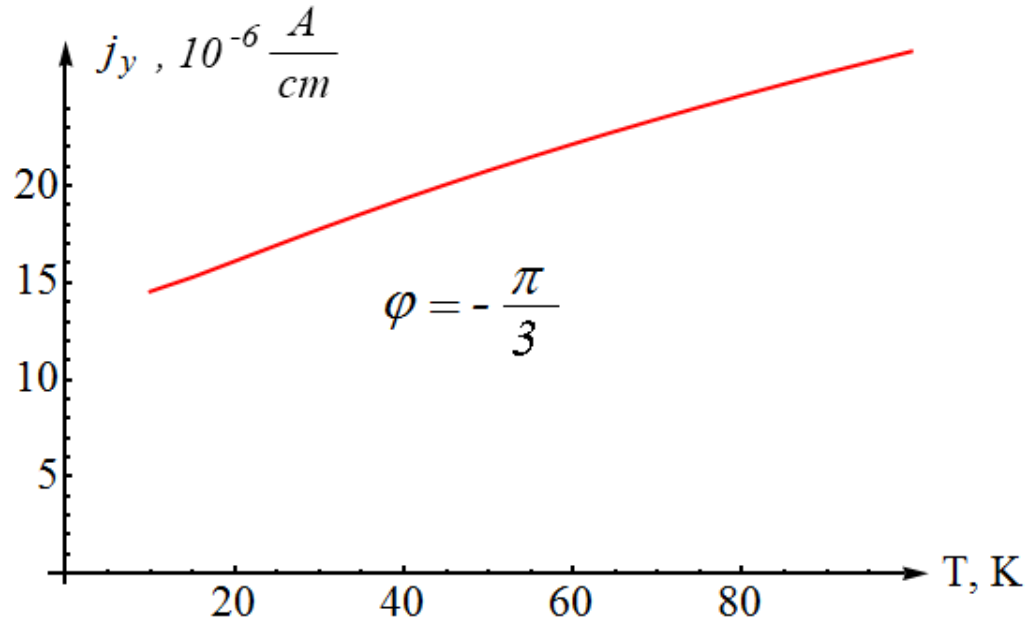


Рисунок 27 - Зависимость j_y от температуры в $\omega_1 / \omega_2 = 1/2$ ($\gamma = 0,1$)

Из рисунка 25 видно, что коэффициенты G_{11} , G_{21} растут с увеличением частоты столкновений, а коэффициенты G_{12} , G_{22} уменьшаются на этом интервале частот.

Из рисунка 26 видно, что абсолютная величина постоянного тока плотность монотонно убывает с частотой столкновений в области существенных значений γ (с помощью решения уравнения Больцмана в виде (4.6), будем считать $v \ll \omega_1, \omega_2$, это условие выполняется для графена, где $v \sim 10^8 s^{-1}$, в терагерцовом диапазоне с $\omega \sim 10^{12} s^{-1}$). Постоянный ток увеличивается с повышением температуры, как можно видеть на рисунке 27.

Постоянная составляющая электрического тока в направлении, перпендикулярном плоскостям поляризации падающих волн, возникает в графене только в присутствии магнитного поля при отношении частот равном двум [A3, A8]. При $E_1, E_2 \sim 0.1 \text{ ед.СГС}$, $H \sim 10^2 \text{ Э}$, $\omega_1, \omega_2 \sim 10^{12} \text{ с}^{-1}$, $v \sim 10^{11} \text{ с}^{-1}$, $T=50K$, $V=0.25$ плотность тока $j_y \sim 10^{-7} \text{ A/cm}$, что соответствует про-

странственной плотности тока $j_{ys} \approx 10^3 \text{ A}/\text{m}^2$. Такие плотности тока достижимы в двухслойном графене при температурах порядка 30 К [104].

Возникновение постоянной составляющей тока при воздействии на материал только переменных электрических полей изучалось во многих работах. Одна из первых работ [76] посвящена эффекту взаимного выпрямления двух электромагнитных волн в сверхрешетке, когда плоскости поляризации совпадают с направлением оси сверхрешетки. При этом ток возникал вдоль оси сверхрешетки за счет непараболичности энергетического спектра этой структуры. Ранее эффект продольного выпрямления токов изучался в объемных полупроводниках (см., например, ссылки в [76]). В данном разделе изучен эффект возникновения тока в поперечном направлении под влиянием магнитного поля. Благодаря присутствию в выражении энергетического спектра слагаемого, пропорционального четвертой степени квазиимпульса, постоянный ток возникает и вдоль направления поляризации падающих волн. В присутствии магнитного поля возникает ток и в поперечном направлении. Причиной возникновения этого тока является эффект Холла. Похожая ситуация рассмотрена в [85], где изучен эффект Холла в режиме эллиптически поляризованной волны в графене.

Есть специальные экспериментальные методики управления волны в микроволновом диапазоне [49, 78]. Эффект, изученный в данном разделе, может быть использован для измерения.

4.2 Выводы четвертого раздела

1) В графене, помещенном в постоянное магнитное поле, на поверхность которого падают две плоские электромагнитные волны с совпадающими плоскостями поляризации, возникает постоянная составляющая тока в направлении, перпендикулярном плоскости поляризации волн, при отношении частот, равном двум. Причиной эффекта является неаддитивность спектра графена, приводящая к генерации постоянного тока вдоль пересечения плоскости образца плоскостью поляризации падающих волн (так называемый эффект продольного выпрямления).

2) Появление продольного тока в условиях воздействия магнитного поля обуславливает возникновение холловского тока в направлении, перпендикулярном плоскостям поляризации падающих волн.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе квазиклассического подхода проведено теоретическое исследование влияния электрического и магнитного полей на электронные свойства графена. Проведены исследования взаимного выпрямления переменных токов, индуцированных электромагнитными волнами в рассматриваемом объекте, влияние магнитного поля на данный эффект, а также исследована проводимость графена с учетом ионизации примесей. В результате получены основные результаты и выводы:

1. Выявленный численным моделированием эффект выпрямления поперечного тока в графене позволяет найти значение сдвига фаз между составляющими электромагнитной волны с эллиптической поляризацией.

2. Прямым численным моделированием было обнаружено, что преобладающим каналом рассеяния для возникновения тока, перпендикулярного к постоянному электрическому полю, является канал рассеяния на оптических фононах.

3. Поперечный ток зависит от сдвига фаз φ составляющих эллиптически поляризованной электромагнитной волны и некоторой постоянной $-\alpha$, являющейся функцией частоты волны, как $\cos(\varphi+\alpha)$, а не $\cos(\varphi)$, как показывают расчеты с использованием модельных столкновительных членов кинетических уравнений.

4. Вероятность ионизации примесного центра в щелевой модификации графена как для случая воздействия постоянного, так и для случая переменного электрического поля, в области квазиклассически сильных значений, носит резкий экспоненциальный характер и больше для примесей с меньшей глубиной залегания.

5. Плотность тока насыщения, рассчитанная с учетом процессов ионизации примесных центров, увеличивается пропорционально сумме равновесной концентрации носителей заряда и концентрации примесей.

6. В графене на поверхность которого нормально падают две электромагнитные волны с параллельными плоскостями поляризации и частотами, отношение которых равно двум, под влиянием постоянного магнитного поля, возникает постоянная составляющая тока в направлении перпендикулярном плоскости поляризации волны.

7. Появление продольного тока в условиях воздействия магнитного поля обуславливает возникновение холловского тока в направлении, перпендикулярном плоскостям поляризации падающих волн.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Novoselov, K.S. Electric field effect in atomically thin carbon films / K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, et al. // Science. - 2004. - Vol. 306. - P. 666 - 669.
2. Wallace, P.R. The band theory of graphite / P.R. Wallace // Physical Review. - 1947. - Vol. 71. - P. 622 - 634.
3. Ландау, Л.Д. Курс теоретической физики. Статистическая физика: в 5 т. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. - М.: Наука, 1986. - Т. 5. - 616 с.
4. Гайдидей, Ю.Б. О возможности наблюдения в графене обычного квантового эффекта Холла / Ю.Б. Гайдидей, В.М. Локтев // Физика низких температур. - 2006. - Т. 32, №7. - С. 923 - 926.
5. Hamada, N. New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules / N. Hamada, S. Sawada, A. Oshiyama // Physical Review Letters. - 1992. - Vol. 68. - P. 1579 - 1581.
6. Dresselhaus, M.S. Science of fullerenes and carbon nanotubes / M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund.-San Diego: Academic Press, 1996. - 966 p.
7. Harris, P.J.F. Carbon nanotubes and related structures: new materials for the twenty-first century / P.J.F. Harris. - Cambridge: Cambridge University Press, 1999. - 279 p.
8. Ando, T. Theory of electronic states and transport in carbon nanotubes / T. Ando // Journal of the Physical Society of Japan. - 2005. - Vol. 74.-P. 777-817.
9. Shon, N.H. Quantum transport in two-dimensional graphite system / N.H. Shon, T. Ando // Journal of the Physical Society of Japan. - 1998. - Vol. 67. - №. 7. - P. 2421 - 2429.

10. Blake, P. Making graphene visible / P. Blake, E.W. Hill, A.H. Castro Neto, et al. // Applied Physics Letters. - 2007. - Vol. 91. - Is. 6. - P.063124.
11. Abergel, D.S.L. Visibility of graphene flakes on a dielectric substrate / D.S.L. Abergel, A. Russell, V.I. Fal'ko // Applied Physics Letters. - 2007. - Vol. 91. - Is. 6. - P. 063125.
12. Castro Neto, A.H. The electronic properties of graphene / A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, et al. // Reviews of Modern Physics. - 2009. -Vol. 81. - P. 109 - 162.
13. Das Sarma, S. Electronic transport in two-dimensional graphene / S. Das Sarma, S. Adam, E.H. Hwang, et al. // Reviews of Modern Physics. - 2011. - Vol. 83. - Is 2. - P. 407 - 470.
14. Sitenko, Y.A. Electronic properties of graphene with a topological defect / Y.A. Sitenko, N.D. Vlasii // Nuclear Physics B. - 2007. - Vol. 787. - Is. 3. - P. 241 - 259.
15. Allain, P.E. Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons / P.E. Allain, J.N. Fuchs // European Physical Journal B. - 2011. - Vol. 83. -№. 3. - P. 301 -317.
16. Drut, J.E. Lattice field theory simulations of graphene / J.E. Drut, T.A. Lähde // Physical Review B. - 2009. - Vol. 79. - P. 165425.
17. Katsnelson, M.I. Zitterbewegung, chirality and minimal conductivity in graphene / M.I. Katsnelson // European Physical Journal B. - 2006. - Vol. 51. - №. 2.-P. 157-160.
18. Novoselov, K.S. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, et al. // Nature. - 2005. - Vol. 438. - P. 197 - 200.
19. Novoselov, K.S. Two-dimensional atomic crystals / K.S. Novoselov, D. Jiang, F.Schedin, et al. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA.-2005. - Vol. 102. - P. 10451-10453.

20. Niyogi, S. Solution Properties of Graphite and Graphene / S. Niyogi, E. Bekyarova, M.E. Itkis, et al. // J. Am. Chem. Soc.-2006. - Vol. 128. - P. 7720-7721.
21. Bunch, J.S. Coulomb Oscillations and Hall Effect in Quasi-2D Graphite Quantum Dots / J.S. Bunch // NanoLett. - 2005. - Vol. 5. - P. 287.
22. Stankovich, S. Graphene-based composite materials / S. Stankovich // Nature. - 2006. - Vol. 282. - P. 442.
23. Stankovich, S. Stable aqueous dispersions of graphitic nanoplatelets via the reduction of exfoliated graphite oxide in the presence of poly (sodium 4-styrenesulfonate) / S. Stankovich, J. Mater // Chem. - 2006. - Vol. 16. - P. 155.
24. Rollings, E. Synthesis and characterization of atomically-thin graphite films on a silicon carbide substrate / E. Rollings, G.-H. Gweon, S. Y. Zhou, et al. // arXiv: cond-mat / 0512226. - 2006.
25. Berger, C. Electronic Confinement and Coherence in Patterned Epitaxial Graphene / C. Berger // Science.-2006. - Vol. 12. - P. 1191.
26. Zhang, Y. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene / Y. Zhang, Y.-W. Tan, H.L. Stormer, et al. // Nature. - 2005. - Vol. 438. - P. 201 - 204.
27. Novoselov, K.S. Unconventional quantum Hall effect and Berry's phase of 2π in bilayer graphene / K.S. Novoselov, E. McCann, S.V. Morozov, et al. // Nature Physics. - 2006. - Vol. 2. - P. 177 - 180.
28. Abanin, D.A. Dissipative quantum Hall effect in graphene near the Dirac point / D.A. Abanin, K.S. Novoselov, U. Zeitler, et al. // Physical Review Letters. - 2007. - Vol. 98. - Is. 19. - P. 196806.
29. Katsnelson, M.I. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene / M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, A.K. Geim // Nature Physics. - 2006. - Vol. 2. - P. 620 - 625.

30. Ando, T. Berry's phase and absence of back scattering in carbon nanotubes / T. Ando, T. Nakanishi, R. Saito // *Journal of the Physical Society of Japan*. - 1998. - Vol. 67. - P. 2857.
31. Calogeracos, A. History and physics of the Klein paradox / A. Calogeracos, N. Dombey // *Contemporary Physics*. - 1999. - Vol. 40. - Is. 5 - P. 313 - 321.
32. Ициксон, К. Квантовая теория поля: в 2 т. / К. Ициксон, Ж.-Б. Зюбер. - М.: Мир, 1984. - Т. 1. - 448 с.
33. Rozhkov, A.V. Electronic properties of mesoscopic graphene structures: Charge confinement and control of spin and charge transport / A.V. Rozhkov, G. Giavaras, Y.P. Bliokh, et al. // *Physics Reports*. - 2011. - Vol. 503. - Is. 2 - 3. - P. 77 - 114.
34. Бонч-Бруевич, В.Л. Физика полупроводников / В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. - М.: Наука, 1977. - 672 с.
35. Bolotin, K.I. Observation of the fractional quantum Hall effect in graphene / K. I. Bolotin, F. Ghahari, M. D. Shulman, et al. // *Nature*. - 2009. - Vol. 462. - P. 196.
36. Chen, J. H. Charged-impurity scattering in graphene / J.H. Chen, C. Jang, S. Adam, et al. // *Nat Phys*. - 2008. - Vol. 4. - №.5. - P. 377.
37. Pi, K. Electronic doping and scattering by transition metals on grapheme / K. Pi, K. M. McCreary, W. Bao, et al. // *Physical Review B*. - 2009. - Vol.80. - №.7. - P. 075406.
38. Bostwick, A. Quasiparticle dynamics in grapheme / A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller, et al. // *Nat Phys*. - 2007. - Vol.3. - №.1. - P. 36.
39. Nilsson, J. Impurities in a biased graphene bilayer / J. Nilsson, A.H. Castro Neto // *Physical Review Letters*. - 2007. - Vol. 98. - P. 126801.
40. Nilsson, J. Electronic properties of bilayer and multilayer graphene / J. Nilsson, A.H. Castro Neto, F. Guinea, et al. // *Physical Review B*. - 2008. - Vol. 78. - Is. 4. - P. 045405.

41. Nilsson, J. Transmission through a biased graphene bilayer barrier / J. Nilsson, A.H. Castro Neto, F. Guinea, et al. // *Physical Review B*. - 2007. - Vol. 76. - P. 165416.
42. McCann, E. Asymmetry gap in the electronic band structure of bilayer graphene / E. McCann // *Physical Review B*. - 2006. - Vol. 74. - P. 161403.
43. McCann, E. Landau-level degeneracy and quantum Hall effect in a graphite bilayer / E. McCann, V.I. Fal'ko // *Physical Review Letters*. - 2006. - Vol. 96. - P. 086805.
44. Zhou, S. Y. Substrate-induced band gap opening in epitaxial graphene / S.Y. Zhou, G.-H. Gweon, A.V. Fedorov, et al. // *Nature Materials*. - 2007. - Vol. 6. - №. 10. - P. 770-775.
45. Davydov, S. Yu. Electronic states in epitaxial graphene fabricated on silicon carbide / S. Yu. Davydov // *Semiconductors*. - 2011. - Vol. 45. - №. 8. - P. 1070-1076.
46. Giovannetti, G. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations / G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, et al. // *Physical Review B*. - 2007. - Vol. 76. - P. 073103.
47. Станкевич, И.В. Структурная химия кристаллического углерода: геометрия, стабильность, электронный спектр / И.В. Станкевич, М.В. Никеров, Д.Ф. Бочвар // *Успехи химии*. - 1984. - Т. 57. - №. 7. - С. 1101-1124.
48. Попов, В.С. Рождение пар в переменном внешнем поле (квазиклассическое приближение) / В.С. Попов // *ЖЭТФ*. - 1971. - Т. 61. - №. 4. - С. 1334-1351.
49. Schneider, W. Harmonic mixing of microwaves by warm electron singer manium / W. Schneider, K. Seeger // *Applied Physics Letters*. - 1966. - Vol. 8. - №. 6. - P. 133-135.

50. Banis, T. Ya. The study of constant electromotive force generated in the semiconductor in a strong alternating electric field / T. Ya. Banis, Yu. K. Pozhela, K.K. Repshas // *Litovskii fizicheskii sbornik*. - 1966. - Vol. 6. - №. 3. - P. 415-425.
51. Wonneberger, W. Asymptotics of harmonic microwave mixing in a sinusoidal potential / W. Wonneberger, H.-J. Breymayer // *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*. - 1981. - Vol. 43. - №. 4. - P. 329-334.
52. Schedin, F. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene / F. Schedin, A. K. Geim, S. V. Morozov, et al. // *Nature Materials*. - 2007. - Vol.6. - P. 652.
53. McChesney, J. L. Interlayer Interaction and Electronic Screening in Multilayer Graphene Investigated with Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy / J.L. McChesney, A. Bostwick, T. Ohta, et al. // *Physical Review Letters*. - 2007. - Vol. 98. - Is. 20. - P. 206802.
54. Zhou, S. Y. Metal to Insulator Transition in Epitaxial Graphene Induced by Molecular Doping / S.Y. Zhou, D. A. Siegel, A. V. Fedorov, et al. // *Physical Review Letters*. -2008. - Vol.101. - №. 8.-P. 086402.
55. Liao, L. Graphene - dielectric integration for graphene transistors / L. Liao, X. Duan // *Materials Science and Engineering: R: Reports*. - 2010. - Vol. 70. - Is. 3 - 6. - P. 354 -370.
56. Vogel, E.M. Transport properties of graphene transistors / E.M. Vogel, A. Venugopal, L. Colombo // *ECS Transactions*. - 2011. - Vol. 35 (3). - P. 229 - 237.
57. Bhat, A.K. Dual top gated graphene transistor in the quantum Hall regime [Эл. печат] / A.K. Bhat, V. Singh, S. Patil, et al. // *arXiv:1108.3243v1*. - 2011. - URL: <http://arxiv.org/pdf/1108.3243v1.pdf>.

58. Lin, Y.-M. 100-GHz Transistors from wafer-scale epitaxial graphene / Y.-M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K.A. Jenkins, et al. // Science. - 2010. - Vol. 327. - №. 5966.-P. 662.
59. Cho, S. Gate-tunable graphene spin valve / S. Cho, Y.-F. Chen, M.S. Fuhrer // Applied Physics Letters. - 2007. - Vol. 91. - P. 123105.
60. Wang, H. Graphene-based ambipolar RF mixers / H. Wang, A. Hsu, J. Wu, et al. // Electron Device Letters. - 2010. - Vol. 31. - №. 9. - P. 906-908.
61. Mueller, T. Graphene photodetectors for high-speed optical communications / T. Mueller, F. Xia, P. Avouris // Nature Photonics. - 2010. - Vol. 4. - P. 297 - 301.
62. Rana, F. Graphene terahertz plasmon oscillators / F. Rana // Transactions on Nanotechnology. - 2008. - Vol. 7. - Is. 1. - P. 91 - 99.
63. Ландау, Л.Д. Квантовая механика / Лифшиц Е.М. // М.: Наука, 1989. -768с.
64. Базь, А.И. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике / А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. - М: Наука, 1971. - 544 с.
65. Келдыш, Л.В. О влиянии сильного электрического поля на оптические характеристики непроводящих кристаллов // ЖЭТФ. - 1958. - Т.34. - №. 5. - С.1138 - 1141.
66. Frantz, W. Einflusseines elektrischen Field en au feine optische Absorptionskante // Z. Natur forschung. -1958.-Vol.13.-№. 6.-P.484-489.
67. Бычков, Ю.А. Пробой полупроводников в переменном электрическом поле / Ю.А. Бычков, А.М. Дыхне // ЖЭТФ. - 1970. - Т.58. - №. 5. - С.1734 - 1743.
68. Крючков, С.В. Эффект Франца-Келдыша в узкозонных полупроводниках в сильном переменном поле / С.В. Крючков, Г.А. Сыродо-

- ев // Изв. ВУЗов СССР. Радиофизика. - 1990. - Т. 33. - №.6. - С. 762 - 764.
69. Kane, E.O. Band Structure of indium antimonide / E.O. Kane // J. Phys. Chem. Solids. - 1957. -Vol. 1. - P. 249 - 261.
 70. Перельман, Н.Ф. Теория туннелирования в кристаллах при произвольных соотношениях между ширинами запрещенной и разрешенной зон / Н.Ф. Перельман // ЖЭТФ. - 1977. - Т. 73. - Вып. 4. - С. 1526 - 1536.
 71. Павлович, В.В. Нелинейная высокочастотная проводимость сверхрешетки / В.В. Павлович, Э.М. Эпштейн // Физика твердого тела. - 1976. - Т. 18. - №. 5. - С. 1483 - 1485.
 72. Павлович, В.В. Проводимость полупроводника со сверхрешеткой в сильных электрических полях / В.В. Павлович, Эпштейн Э.М. // ФТП -1976. - Т.10. - №. 10. - С.2001.
 73. Эпштейн, Э.М. Рассеяние электронов фононами в сильном поле излучения / Э. М. Эпштейн // Физика твердого тела. – 1969. – Т. 11. – Вып. 10. – С. 2732-2738.
 74. Басс, Ф.Г. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками / Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, А.П. Тетервов. - М.: Наука, 1989. - 288с.
 75. Shon, N.H. Photovoltaic effect in semiconductors stimulated by an additional electromagnetic wave / N.H. Shon, V.H. Anh // physica status solidi (b). - 1986. - Vol. 134. - Is. 1. - P. 363-366.
 76. Mensa, S. Mutual rectification of two electromagnetic waves in superlattice / S. Mensa,G.M. Shmelev, E. M. Epstein // Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved.,Fizica. - 1985. -Vol. 28. - №. 2. - P. 112-114.
 77. Alekseev, K.N. Direct-current generation due to wave mixing in semiconductors / K.N. Alekseev, M.V. Erementchouk, F.V. Kuzmartsev // Europhysics Letters. - 1999. - Vol. 47. – №. 5.-P. 595.

78. Seeger, K. High-frequency-induced phase-dependent dc current by Bloch oscillator non-ohmicity / K. Seeger // *Applied Physics Letters*. - 2000. - Vol. 76. - Is. 1. - P. 82-84.
79. Stepanov, S. Two-wave mixing of orthogonally polarized waves via anisotropic dynamic gratings in erbium-doped optical fiber / S. Stepanov, E. Hernández, M. Plata // *Journal of the Optical Society of America B*. - 2005. - Vol. 22. - P. 1161-1166.
80. Shorokhov, A.V. Generation of direct current in a semiconductor superlattice under the action of a bichromatic field as a parametric effect / A.V. Shorokhov, N.N. Khvastunov, T. Hyart, et al. // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. - 2010. - Vol. 111. - №. 5. - P. 822-829.
81. Abukari, S.S. Direct current generation due to wave mixing in zigzag carbon nanotubes [Эл. ресурс] / S.S. Abukari, S.Y. Mensah, N.G. Mensah, et al. // arXiv: 1007.1772v1. - 2010. - URL: <http://arxiv.org/pdf/1007.1772v1.pdf>.
82. Zav'yalov, D. V. Mutual rectification of cnoidal and sinusoidal electromagnetic waves in a superlattice / D.V. Zav'yalov, S.V. Kryuchkov, E.I. Kukhar // *Optics and Spectroscopy*. – 2006. - Vol. 100. - №. 6. - P. 916-919.
83. Завьялов, Д. В. О возможности эффекта выпрямления поперечного тока в графене / Д. В. Завьялов, С. В. Крючков, Э. В. Марчук. // *Письма в Журнал технической физики*. - 2008. - Т. 34. - Вып. 21. - С. 21- 26.
84. Karch, J. Photon helicity driven electric currents in grapheme / J. Karch, P. Olbrich, M. Schmalzbauer, et al. // arXiv:1002.1047v1, - 2010.
85. Karch, J. Circular AC Hall effect / J. Karch, P. Olbrich, M. Schmalzbauer, et al. // arXiv:1008.2116v1, - 2010.

86. Falkovsky, L.A. Unusual field and temperature dependence of the Hall effect in graphene / L.A. Falkovsky // *Phys. Rev. B.*-2007.-Vol. 75. - P. 033409.
87. Peres, N. Phenomenological study of the electronic transport coefficients of graphene / N. Peres, J. Lopes dos Santos, T. Stauber // *Phys. Rev. B.*-2007.-Vol. 76. - P. 073412.
88. Shaffique, A. A self-consistent theory for graphene transport / A. Shaffique, E.H. Hwang, V.M. Galitski, et al. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* - 2007.-Vol. 104. - P. 18392
89. Mikhailov, S. A. Non-linear electromagnetic response of graphene. / S. A. Mikhailov // *Europhysics Letters.* - 2007. - Vol. 79. - 27002.
90. Jiang, Z. Infrared Spectroscopy of Landau Levels of Graphene / Z. Jiang, E. A. Henriksen, L. C. Tung, et al. // *Physical Review Letters.* - 2007. - Vol. 98. - P. 197403.
91. Bliokh, K.Y. Weak antilocalization of ultrarelativistic fermions/ K.Y. Bliokh // *Physical Letters.* - 2005. - Vol.344. - P. 127.
92. Park, C.-H. Anisotropic behaviours of massless Dirac fermions in graphene under periodic potentials / C.-H. Park, L. Yang, Y.-W. Son, et al. // *Nature Phys.* - 2008. - Vol. 4. - P. 213.
93. Barbier, M. Dirac and Klein-Gordon particles in one-dimensional periodic potentials / M. Barbier, F.M. Peeters, P. Vasilopoulos, et al. // *Phys. Rev. B.* - 2008. - Vol. 77. - P. 115446.
94. Guinea, F. Midgap states and charge in homogeneities in corrugated graphene / F. Guinea, M. I. Katsnelson, M. A. H. Vozmediano // *Phys. Rev. B.* - 2008. - Vol. 77. - P. 075422.
95. Хокни, Р. Численное моделирование методом частиц / Р. Хокни, Дж. Иствуд. - М.: Мир, 1987. - 639с.
96. Соболев, И.М. Численные методы Монте-Карло / И.М. Соболев. - М.: Наука, 1973. - 313с.

97. Vasko, F.T. Photoconductivity of an intrinsic grapheme / F.T. Vasko, V. Ryzhii // *Physical Review Letters*. - 2008. - Vol.1. - P. 3476.
98. Fratini, S. Substrate limited electron dynamics in grapheme / S. Fratini, F. Guinea// *Physical Review Letters*. - 2008. - Vol. 77. - P. 195415.
99. Киреев, П.С. Физика полупроводников. 2-еизд. / П.С. Киреев // М.: Мир, 1975. - С. 586.
100. Jacoboni, C. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials / C. Jacoboni, L. Reggiani // *Reviews of Modern Physics*. - 1983. - Vol. 55. - №. 3.-P. 645-705.
101. Kosina, H. The Monte Carlo method for semi-classical charge transport in semiconductor devices / H. Kosina, M. Nedjalkov // *Mathematics and Computers in Simulations*. - 2001. - Vol. 55. - P. 93-102.
102. Ceperley, D. M. Path-integral simulation of the superfluid transition in two-dimensional ^4He / D.M. Ceperley, E. Pollock // *Phys. Rev. B*. - 1989. - Vol. 39. - P. 2084.
103. Ceperley, D. M. Path integrals in the theory of condensed helium / D.M. Ceperley // *Rev. Mod. Phys.* - 1995. - Vol. 67. - P. 279-355.
104. Binder, K. Monte Carlo methods in statistical physics / K. Binder // *Condensed Matter Physics*, Springer-Verlag, Berlin, 1986.
105. Gusynin, V.P. Unconventional Integer Quantum Hall Effect in Graphene/ V.P. Gusynin, S.G. Sharapov // *Phys. Rev. Lett.*-2005. - Vol. 95. -P. 146801.
106. Tworzydło, J. Sub-Poissonian Shot Noise in Graphene / J. Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, et al. // *Phys. Rev. Lett.*-2006. -Vol. 96. - P. 246802.
107. Ziegler, K. Robust Transport Properties in Graphene / K. Ziegler // *Phys. Rev. Lett.*-2006. -Vol. 97. -P. 266802.

108. Келдыш, Л.В. Ионизация в поле сильной электромагнитной волны / Л.В. Келдыш // ЖЭТФ.-1978. -Т. 20. - №. 9. - С. 1945-1957.
109. Кревчик, В.Д. Эффект увлечения одномерных электронов при фотоионизации $D^{(-)}$ -центров в продольном магнитном поле / В.Д. Кревчик, А.Б. Грунин // ФТТ.-2003. - Т. 45. - Вып. 7. - С. 1272-1279.
110. Кревчик, В.Д. К теории фотоионизации глубоких примесных центров в параболической квантовой яме / В.Д. Кревчик, Р.В. Зайцев, В.В. Евстифеев // ФТП.-2000. - Т. 34. - Вып. 10. - С. 1244-1249.
111. Перельман, Н.Ф. Теория туннелирования в кристаллах при произвольных соотношениях между ширинами запрещенной и разрешенной зон / Н.Ф. Перельман, И.Н. Логвинов // ФТТ. – 1978. – Т. 20. – С. 1045 – 1051.
112. Котова, Л.П. Квазиклассическое приближение в задачах ионизации / Л.П. Котова, А.М. Переломов, В.С. Попов // ЖЭТФ. - 1968. - Т. 54. - №. 4. - С. 1151-1161.
113. Левинсон, И.Б. Влияние конечной ширины зоны проводимости на разогрев электронов в электрическом поле / И.Б. Левинсон, Я. Ясевичюте // ЖЭТФ. - 1972. - Т. 62. - №. 5. - С. 1902-1912.
114. Справочник по специальным функциям / под ред. М. Абрамовица, И. Стигана. - М.: Наука, 1979. - 832с.
115. Александров, А.Ф. Основы электродинамики плазмы / Л.С. Богданкевич, А.А. Рухадзе. - М.: Высшая школа, 1988. - 424 с.
116. Ландау, Л.Д. Собрание трудов: в 2 т. / Л.Д. Ландау. - М.: Наука, 1969. – Т. 1. - 512 с.
117. Переломов, А.М. Ионизация атомов в переменном электрическом поле / А.М. Переломов, В.С. Попов, М.В. Терентьев // ЖЭТФ. - 1966. - Т. 51. - №. 7. - С. 309-326.
118. Паздзерский, В. А. Многофотонное поглощение света носителями тока / В.А. Паздзерский // ФТП. - 1972. - Т. 6. - №. 4. - С. 758-760.

119. Zav'yalov, D. V. On the possibility of transverse current rectification in grapheme / D.V. Zav'yalov, S.V. Kryuchkov, É. V. Marchuk // Technical Physics Letters. - 2008. - Vol. 34. - №. 11. - P. 915-917.
120. Zav'yalov, D. V. Mutual rectification of alternating currents induced by electromagnetic waves in graphene / D.V. Zav'yalov, V.I. Konchenkov, S.V. Kryuchkov // Physics of the Solid State. - 2009. - Vol. 51. - №. 10. - P. 2157-2160.
121. Завьялов, Д.В. Влияние магнитного поля на эффект взаимного выпрямления переменных токов, индуцированных электромагнитными волнами в графене / Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // Физика твердого тела. - 2010. - Т. 52. - Вып. 4. - С. 746-750.
122. Zav'yalov, D. V. Mutual rectification of alternating currents in grapheme / D.V. Zav'yalov, V.I. Konchenkov, S.V. Kryuchkov // Physics of Wave Phenomena. - 2010. - Vol. 18. - №. 4. - P. 284-288.
123. Kryuchkov, S. V. Effect of mutual rectification of two electromagnetic waves with perpendicular polarization planes in a superlattice based on grapheme / S.V. Kryuchkov, E.I. Kuhar, V.A. Yakovenko // Bulletin of Russian Academy of Sciences: Physics. - 2010. - Vol. 74. - №. 12. - P. 1679-1681.
124. Zavialov, D. V. Transverse current rectification in a graphene-based superlattice / D.V. Zavialov, V.I. Konchenkov, S.V. Kruchkov // Semiconductors. - 2012. - Vol. 46. - №. 1. - P. 109-116.
125. Ohta, T. Controlling the electronic structure of bilayer grapheme / T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, et al. // Science. - 2006. - Vol. 313. - P. 951-954.

Список основных публикаций автора

A1. Завьялов, Д.В. Влияние магнитного поля на взаимное выпрямление переменных токов в графене / Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, **Т.А. Носаева** // Известия ВолгГТУ. – 2012. – Т. 6. – №. 6. – С. 25-29.

A2. Zav'yalov, D. V. Effect of rectification of current induced by an electromagnetic wave in graphene: A numerical simulation / D.V. Zav'yalov, S.V. Kryuchkov, **Т.А. Tyulkina*** // Semiconductors. – 2010. – Vol. 44. – №. 7. – P. 879-883.

A3. Konchenkov, V. I. Mutual rectification of alternating currents in graphene in the field of two electromagnetic waves / V.I. Konchenkov, D. V. Zav'yalov, S. V. Kryuchkov, **Т. А. Nosaeva** // Physics of Wave Phenomena. – 2013. – Vol. 21. – №.1. – P. 56 -61.

A4. Завьялов, Д.В. Численное моделирование эффекта возбуждения поперечного тока в графене в условиях воздействия эллиптически поляризованной электромагнитной волны / Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, **Т.А. Тюлькина*** // Труды XIX Международного совещания «Радиационная физика твёрдого тела» (Севастополь, 31 августа – 5 сентября 2009 г.) – М.: НИИ ПМТ. – С. 176 - 178.

A5. **Носаева, Т.А.** Взаимное выпрямление переменных токов в графене под влиянием магнитного поля / Т.А. Носаева, С.В. Крючков // XV Региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области, 9-12 нояб. 2010 г. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2011 – Вып. 5. (Физика и математика.) – С. 15-18.

A6. **Тюлькина, Т.А.** Ионизация короткодействующих примесей в графене / Т.А. Тюлькина*, С.В. Крючков // XIV Региональная конференция молодых исследователей Волгоградской области, 11-13 нояб. 2009 г. – Волгоград: Изд-во ВолГУ, 2010. – Вып. 4. (Физика и математика.) – С. 51-55.

А7. Завьялов, Д.В. Проводимость графена с учетом ионизации примесей / Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, **Т.А. Носаева** // Информационные и математические технологии в образовании, технике, экономике и управлении: сборник научных трудов. – Волгоград: информресурс, 2011. – С. 107-114.

А8. **Носаева, Т.А.** Взаимное выпрямление переменных токов в графене под влиянием магнитного поля / Т.А. Носаева, С.В. Крючков // Сборник тезисов, материалы Семнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-17, Екатеринбург): материалы конференции, тезисы докладов. – Екатеринбург: издательство АСФ России, 2011. – С. 138-139.

А9. Завьялов, Д.В. Влияние ионизации примесей на проводимость графена / Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, **Т.А. Носаева** // Десятая региональная научная конференция «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование»: Тезисы докладов. 1-3 ноября 2011 года. Владивосток, 2011. – С. 63-64.

А10. **Носаева, Т.А.** Воздействие ионизации примесей на проводимость графена / Т.А. Носаева, С.В. Крючков // Сборник тезисов, материалы Восемнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-18, Красноярск): материалы конференции, тезисы докладов. – Красноярск: Изд-во АСФ России, 2012. – С. 154-156.

* *Фамилия «Тюлькина» или «Tjulkina» – девичья фамилия Носаевой Т.А.*