

УДК 537.311.33

ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА В ГРАФЕНЕ

П. В. Ратников¹, А. П. Силин

В двухзонном приближении рассчитана энергия основного состояния носителей тока в графене, который рассматривался как бесщелевой полупроводник. Получено условие устойчивости электронной (дырочной) системы в графене. Обсуждается возможность перехода бесщелевого полупроводника в полуметалл.

Известно, что тонкие пленки графита проявляют полуметаллические свойства [1]; однако одноатомный слой атомов углерода, образующих правильную гексагональную решетку (графен), обладает такой зонной структурой, что в шести К-точках зоны Бриллюэна энергетическая щель равна нулю. Поэтому графен можно рассматривать как двумерный бесщелевой полупроводник, или как полуметалл с нулевым перекрытием зоны проводимости и валентной зоны [2]. Первый подход дает возможность описывать носители тока в графене в рамках двухзонной модели Дирака² [7, 8]

$$i \vec{\alpha} \cdot \widehat{p} \Psi = \varepsilon_p \Psi, \quad (1)$$

¹ratnikov@lpi.ru

²Уравнение Дирака (1) эквивалентно с точностью до унитарного преобразования гамильтониана и волновой функции паре уравнений Вейля (см. книгу [3] на с. 79). Как известно, уравнение Вейля описывает в КЭД двухкомпонентное нейтрино (см., например, книгу [4] на с. 114). Использование уравнения Дирака как матричного уравнения 4×4 в двумерной системе возможно потому, что в случае двух пространственных измерений матричное представление 4×4 можно использовать равноправно с матричным представлением 2×2 (см. [5] на с. 133). Этот факт позволяет перенести формализм диаграммной техники КЭД на случай двумерной системы дираковских фермионов (графен). На применение уравнения Вейля к задаче об описании носителей тока в бесщелевом полупроводнике впервые указано в работе [6].

где $\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$ – α -матрицы Дирака; $\widehat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ – двумерный оператор импульса (в дальнейшем $\hbar = 1$); $u = \frac{3}{2}\gamma a_0 = 9.84 \cdot 10^7$ см/с – величина, аналогичная кейновскому матричному элементу скорости межзонных переходов, $\gamma \simeq 3$ эВ – зонный параметр и $a_0 = 1.44 \text{ \AA}$ – межатомное расстояние в решетке графена [9]. В окрестности К-точек зоны Бриллюэна закон дисперсии носителей тока линеен $\epsilon_p = \pm up$ (+ соответствует электронам, – соответствует дыркам). Для двумерного электронного (дырочного) газа, возникающего при электронном легировании бесщелевого полупроводника [2], энергия основного состояния, приходящаяся на одну частицу, есть сумма трех слагаемых:

$$E_{gs} = E_{kin} + E_{exch} + E_{corr}, \quad (2)$$

где $E_{kin} = \frac{2}{3}up_F$ – средняя кинетическая энергия, $p_F = \sqrt{\frac{2\pi n_{2D}}{\nu}}$ – импульс Ферми, n_{2D} – двумерная концентрация частиц, ν – кратность вырождения³. Если уровень Ферми E_F лежит выше $E = 0$, то в системе есть только электроны как носители тока в зоне проводимости с числом долин $\nu_e = 2$; если $E_F < 0$, то в системе есть только дырки как носители тока с $\nu_h = 2$. Положение уровня Ферми можно изменять приложением электрического поля [2]. Видно, что оба случая в модели Дирака равноправны. Ниже будем для определенности рассматривать случай электронов.

Обменная энергия дается обменной диаграммой первого порядка (рис. 1)

$$E_{exch} = -\frac{\nu}{2n_{2D}} \int \frac{d^2 \vec{p} d\epsilon d^2 \vec{k} d\omega}{(2\pi)^3 (2\pi)^3} Sp \left\{ \gamma^\mu G(\vec{p}, \epsilon) \gamma^\nu G(\vec{k}, \omega) \right\} D_{\mu\nu}(\vec{p} - \vec{k}, \epsilon - \omega), \quad (3)$$

где фотонный пропагатор $D_{\mu\nu}(\vec{p} - \vec{k}, \epsilon - \omega) \approx V(\vec{p} - \vec{k}) \delta_{\mu 4} \delta_{\nu 4}$ (мы пренебрегаем фотонным полюсом при $\omega = \pm c|\vec{p} - \vec{k}|$, вклад которого в интеграл по частотам ϵ и ω порядка $(u/c)^2 \sim 10^{-5}$ по сравнению с вкладом полюсов функций Грина), $V(\vec{q}) = \frac{2\pi e^2}{\kappa_{eff} |\vec{q}|}$ – закон Кулона в двухмерном случае, κ_{eff} – эффективная диэлектрическая проницаемость графена. Функция Грина свободного электрона при $\Delta = 0$ есть

³В общем случае для двух проекций спина кратность вырождения равна $\nu = 2\nu_{e,h}$. Ниже будет показано, что спин-неполяризованное состояние энергетически выгоднее, чем спин-поляризованное, для которого $\nu = \nu_{e,h}$.

[10]

$$G(\vec{p}, \varepsilon) = -\frac{u\hat{p}}{u^2\vec{p}^2 - \varepsilon^2 - i0} + 2\pi i\delta(u^2\vec{p}^2 - \varepsilon^2)N_p u\hat{p}, \quad (4)$$

где $\hat{p} = p_\beta \gamma^\beta$ ($\beta = 0, 1, 2$) – свертка с матрицами Дирака $\gamma^k = -i\gamma^0\alpha^k$ для $k = 1, 2$ и $\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$, I – единичная матрица 2×2 ; $N_p = \theta(|\vec{p}| - p_F)\theta(\varepsilon)$; $\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$

Выражение (3) преобразуется к виду (см. Приложение):

$$E_{\text{exch}} = -\frac{\alpha^* I_1}{\sqrt{2\pi}} u \left(\frac{n_{2D}}{\nu}\right)^{1/2}, \quad (5)$$

где $I_1 = \int_0^1 dx \int_0^1 dy \int_0^{2\pi} d\chi \frac{(1 + \cos \chi)xy}{\sqrt{x^2 + y^2 - 2xy \cos \chi}} = \frac{8}{3} \left(G + \frac{1}{2}\right)$, $G = 0,915965\dots$ – постоянная Каталана [11]; $\alpha^* = \frac{e^2}{\kappa_{\text{эфф}} u}$ – аналог постоянной тонкой структуры.

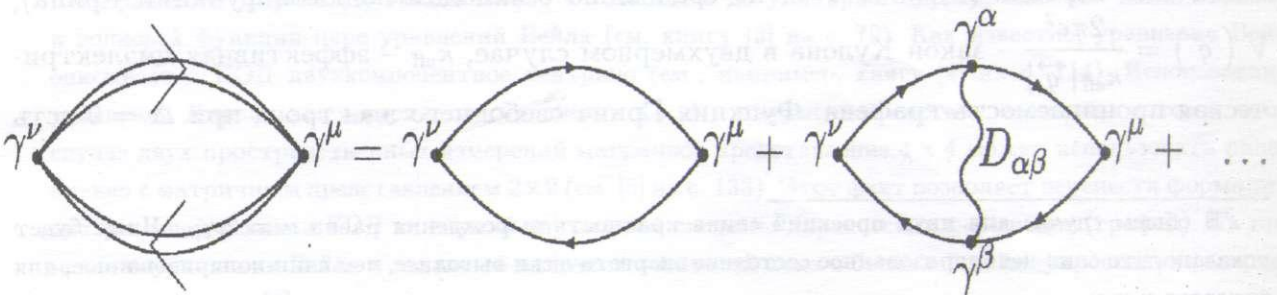
Корреляционная энергия дается формулой [12]

$$E_{\text{corr}} = \frac{1}{2n_{2D}} \int \frac{d^2 \vec{k} d\omega}{(2\pi)^3} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \left[\frac{-\lambda\nu V(\vec{k}) \Pi_{44}(\vec{k}, i\omega)}{1 - \lambda\nu V(\vec{k}) \Pi_{44}(\vec{k}, i\omega)} + \lambda\nu V(\vec{k}) \Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega) \right]. \quad (6)$$

Полный поляризационный оператор равен

$$\Pi_{44}(\vec{k}, i\omega) = \Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega) + \Pi_{44}^{(1)}(\vec{k}, i\omega) + \dots, \quad (7)$$

что соответствует сумме диаграмм:



Поляризационный оператор в низшем порядке по взаимодействию $\Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega)$ в двумерном случае равен [10]

$$\Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega) = 16 \int \frac{d^2 \vec{p}}{(2\pi)^2} \frac{\theta(|\vec{p}| - p_F)}{2\varepsilon_p} \frac{(\vec{k} \cdot \vec{p})^2 - \frac{|\vec{k}|^2 \varepsilon_p^2}{u^2}}{\left(|\vec{k}|^2 + \frac{\omega^2}{u^2}\right)^2 - 4\left(\vec{k} \cdot \vec{p} - \frac{i\varepsilon_p \omega}{u^2}\right)^2}. \quad (8)$$

Мы вычисляем корреляционную энергию, следуя методу, во многом сходному с известным методом Нозьера–Пайнса [13, 14], применяемым для расчета электронного газа и электронно-дырочной жидкости, при этом используются асимптотики безразмерного поляризационного оператора [15]

$$\tilde{\Pi}_{44}^{(0)}(r, \theta) = \begin{cases} -\frac{\sin \theta}{24\pi r^2}, & r \gg 1, \\ -\frac{1 - |\cos \theta|}{16\pi}, & r \ll 1, \end{cases} \quad (9)$$

где введены безразмерные переменные $r = \sqrt{\omega^2 + u^2 k^2} / u p_F$ и $\sin \theta = uk / \sqrt{\omega^2 + u^2 k^2}$.

Чтобы найти параметр малости разложения (7), оценим поправку первого порядка по взаимодействию $\Pi_{44}^{(1)}$ к поляризационному оператору (8):

$$\begin{aligned} \Pi_{44}^{(1)}(\vec{k}, i\omega) &= - \int \frac{d^2 \vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{d^2 \vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\Omega}{2\pi} Sp \left\{ \gamma^\mu G(\vec{p} + \vec{q}, \varepsilon + \Omega) \gamma^\alpha G(\vec{p}, \varepsilon) \cdot \right. \\ &\cdot \left. \gamma^\nu G(\vec{p} - \vec{k}, \varepsilon - \omega) \gamma^\beta G(\vec{p} + \vec{q} - \vec{k}, \varepsilon + \Omega - \omega) \right\} \times V(\vec{q}) \delta_{\alpha 4} \delta_{\beta 4} \approx \\ &\approx -\frac{1}{16\pi u p_F^2} \int \frac{d^2 \vec{p}}{(2\pi)^4} \frac{d^2 \vec{q}}{|\vec{q}|} \frac{2\pi \alpha^*}{|\vec{q}|} \theta(p_F - |\vec{p}|) \theta(p_F - |\vec{q}|) = -\frac{\alpha^* p_F}{(8\pi)^2 u}. \end{aligned} \quad (10)$$

Учитывая, что основной вклад в $\Pi_{44}^{(1)}(\vec{k}, i\omega)$ вносят малые передаваемые импульсы из-за наличия $V(\vec{q})$ [15], сравнивать (10) нужно с асимптотикой $\Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega)$ при малых $|\vec{k}|$, откуда получаем, что (10) мало по параметру $\frac{\alpha^*}{4\pi} \ll 1$, что одновременно является условием применимости приближения хаотических фаз.

Подстановка асимптотики поляризационного оператора при $r \gg 1$ в (6) дает вклад больших импульсов:

$$E_{\text{corr}}^\infty = -\frac{u p_F^3}{3(2\pi)^2 n_{2D}} [(1 + g_1) \cdot \ln(1 + g_1) - g_1], \quad (11)$$

где $g_1 = \frac{\alpha^* \nu}{12} \ll 1$ при $\nu = 4$ и $\alpha^* < 1$; разлагая (11), в этом случае получаем

$$E_{\text{corr}}^\infty = -\frac{\alpha^{*2} \nu^{1/2}}{864 \sqrt{2\pi}} u n_{2D}^{1/2}, \quad (12)$$

что совпадает с вкладом кольцевой диаграммы второго порядка (рис. 2):

$$\begin{aligned} E_{\text{corr}}^{(2)} &= -\frac{i\nu^2}{4n_{2D}} \int \frac{d^2 \vec{p} d^2 \vec{q} d^2 \vec{k} d\varepsilon d\Omega d\omega}{(2\pi)^9} Sp \left\{ \gamma^\alpha G(\vec{p}, \varepsilon) \gamma^\beta G(\vec{p} - \vec{k}, \varepsilon - \omega) \right\} \times \\ &\times Sp \left\{ \gamma^\mu G(\vec{q}, \Omega) \gamma^\nu G(\vec{q} + \vec{k}, \Omega + \omega) \right\} D_{\alpha\mu}(\vec{k}, \omega) D_{\beta\nu}(\vec{k}, \omega) \approx \\ &\approx -\frac{1}{4n_{2D}} \int \frac{d^2 \vec{k} d\omega}{(2\pi)^3} \left(\nu \Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega) V(\vec{k}) \right)^2. \end{aligned} \quad (13)$$

Таким образом, согласно методу Нозьера-Пайнса [13, 14] при вычислении корреляционной энергии при больших передаваемых импульсах по формуле (6) с точностью до членов порядка g_1^2 можно ограничиться вторым порядком теории возмущений. Помимо кольцевой диаграммы второго порядка (рис. 2) учтем также и обменную диаграмму второго порядка (рис. 3):

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{\text{corr}}^{(2)} &= -\frac{i\nu}{4n_{2D}} \int \frac{d^2 \vec{p} d^2 \vec{q} d^2 \vec{k} d\varepsilon d\Omega d\omega}{(2\pi)^9} Sp \left\{ \gamma^\alpha G(\vec{p}, \varepsilon) \gamma^\beta G(\vec{k} - \vec{p}, \omega - \varepsilon) \gamma^\mu \cdot \right. \\ &\cdot G(\vec{p} - \vec{q} - \vec{k}, \varepsilon - \Omega - \omega) \gamma^\nu G(\vec{p} - \vec{q}, \varepsilon - \Omega) \left. \right\} D_{\alpha\mu}(\vec{q}, \Omega) D_{\beta\nu}(\vec{k}, \omega). \end{aligned} \quad (14)$$

Вычисление интеграла (14) весьма трудоемко, однако оценки показывают, что, как и в нерелятивистском случае, его вклад положителен и по величине в $\frac{1}{2\nu}$ раз меньше (13) [16]. Окончательно для вклада больших передаваемых импульсов в корреляционную энергию получаем

$$E_{\text{corr}}^\infty = -\frac{\alpha^{*2} \nu^{1/2}}{864 \sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{1}{2\nu} \right) u n_{2D}^{1/2}. \quad (15)$$

Подстановка асимптотики поляризационного оператора при $r \ll 1$ из (9) в (6) дает вклад малых передаваемых импульсов:

$$E_{\text{corr}}^0 = -\frac{u p_F^3 g_2^2}{3(2\pi)^2 n_{2D}} \int_0^{\pi/2} d\theta (1 - \cos \theta)^2 \cdot \left[1 - g_2 \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \cdot \ln \left(1 + \frac{\sin \theta}{g_2 (1 - \cos \theta)} \right) \right] +$$

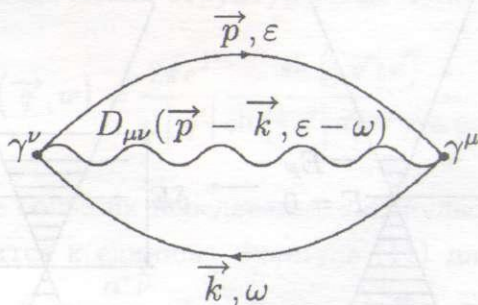


Рис. 1. Обменная диаграмма первого порядка.

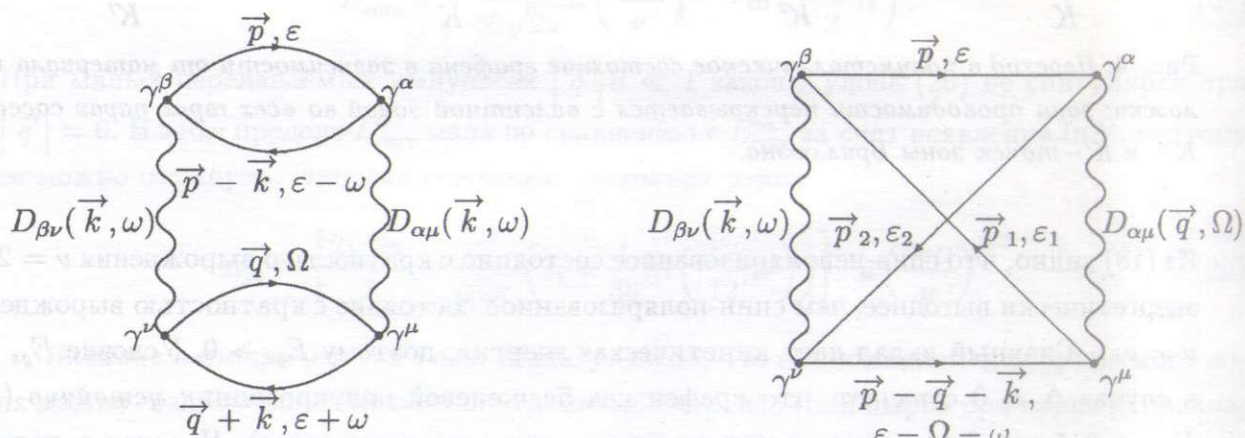


Рис. 2. Кольцевая диаграмма второго порядка.

Рис. 3. Обменная диаграмма второго порядка. Введены обозначения: $\vec{p}_1 = \vec{p} - \vec{k}$, $\epsilon_1 = \epsilon - \omega$; $\vec{p}_2 = \vec{p} - \vec{q}$, $\epsilon_2 = \epsilon - \Omega$.

$$+ \frac{\sin \theta}{g_2(1 - \cos \theta)} - \frac{\sin^2 \theta}{g_2^2(1 - \cos \theta)^2} \cdot \ln \left(1 + g_2 \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \right) \Bigg], \quad (16)$$

где $g_2 = \frac{\alpha^* \nu}{8} \ll 1$ и выражение (16) можно упростить:

$$E_{\text{сорт}}^0 = -\frac{\alpha^{*2} \nu^{1/2}}{128 \sqrt{2\pi}} \left(\frac{3\pi}{4} - 2 \right) u n_{2D}^{1/2}. \quad (17)$$

Из (15) и (17) видно, что корреляционная энергия имеет порядок малости α^{*2} , а обменная энергия (5) – порядка α^* , так что получаем энергию основного состояния электронного газа как ряд по степеням α^* , который мы обрезаем на членах порядка α^{*2} :

$$E_{gs} = \frac{2\sqrt{2\pi}}{3} u \left(\frac{n_{2D}}{\nu} \right)^{1/2} - \frac{\alpha^* I_1}{\sqrt{2\pi}} u \left(\frac{n_{2D}}{\nu} \right)^{1/2} - \frac{\alpha^{*2}}{64\sqrt{2\pi}} \left(\frac{3\pi}{8} - \frac{25}{27} - \frac{1}{27\nu} \right) u (\nu n_{2D})^{1/2}. \quad (18)$$

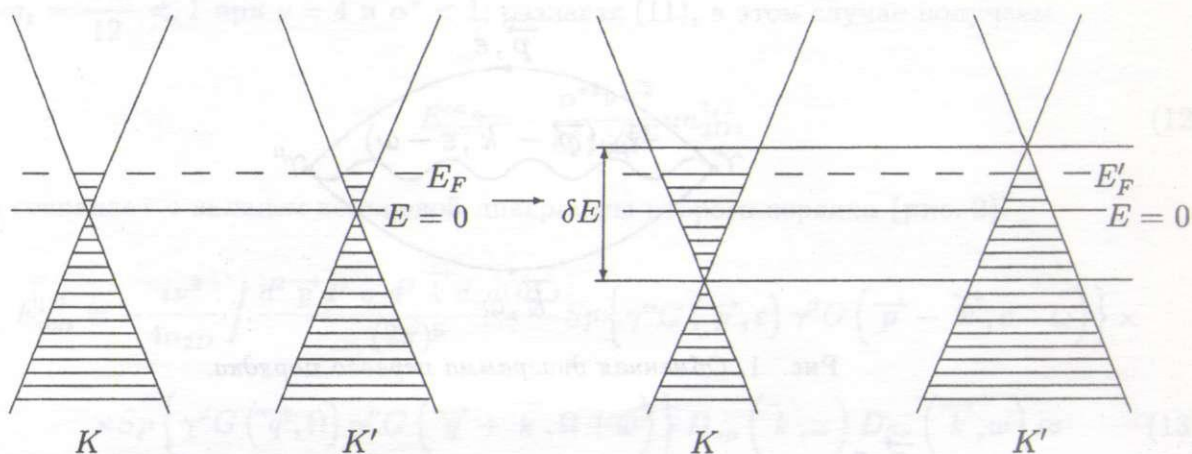


Рис. 4. Переход в полуметаллическое состояние графена в зависимости от материала подложки: зона проводимости перекрывается с валентной зоной во всех трех парах соседних K - и K' -точек зоны Бриллюэна.

Из (18) видно, что спин-неполяризованное состояние с кратностью вырождения $\nu = 2\nu_{e,h}$ энергетически выгоднее, чем спин-поляризованное состояние с кратностью вырождения $\nu = \nu_{e,h}$. Главный вклад дает кинетическая энергия, поэтому $E_{gs} > 0$. Условие $E_{gs} > 0$ в случае $\Delta = 0$ означает, что графен как бесщелевой полупроводник устойчив (при $E_{gs} < 0$ было бы выгодно рожать электронно-дырочные пары). Переход в полуметаллическое состояние – спонтанное рождение электронно-дырочных пар – происходит при некотором α_0^* таком, что при $\alpha^* > \alpha_0^*$ выполняется $E_{gs} < 0$. Уравнение $E_{gs} = 0$ при подстановке $\nu = 4$ дает:

$$\alpha_0^* = \sqrt{A^2 + B} - A = 1.1044, \quad (19)$$

где $A = \frac{64I_1}{3\pi - 202/27}, B = \frac{512\pi}{9\pi - 202/9}$.

Рассмотрим влияние некоторых параметров на зонную структуру графена подробнее.

Эффективная многодолинность. Если взять структуру (сверхрешетку), содержащую N слоев графена, то при отсутствии переходов между слоями в ней эффективно имеется всего $\tilde{\nu} = \nu \cdot N$ электронных (дырочных) долин с $\bar{N}_{e(h)} = N_{e(h)} \cdot N$ числом электронов (дырок), где $N_{e(h)}$ — число электронов (дырок) в каждом слое графена. Пусть слой графена разделены широкозонным полупроводником (диэлектриком).

В общем случае для периодических структур закон Кулона дается выражением [15]

$$\bar{V}(\vec{q}, w) = \frac{2\pi e^2}{\kappa |\vec{q}|} \frac{\text{sh}(|\vec{q}|d)}{\text{ch}(|\vec{q}|d) - \cos w}, \quad (20)$$

где $0 \leq w \leq 2\pi$, но в случае больших передаваемых импульсов, таких, что $|\vec{q}|d \gg 1$, вторая дробь в (20) стремится к единице. Формула (11) для E_{corr}^∞ остается в силе с точностью до замены $g_1 \rightarrow \tilde{g}_1 = \frac{\alpha^* \tilde{\nu}}{12} \gg 1$ и $n_{2D} \rightarrow \bar{n}_{2D} = \bar{N}_{e(h)}/S = N \cdot n_{2D}$ (S – площадь слоев)

$$E_{\text{corr}}^\infty = -\frac{\alpha^*}{36\sqrt{2\pi}} u \left(\frac{n_{2D}}{\nu}\right)^{1/2} \cdot \ln\left(\frac{\alpha^* \nu}{12} N\right). \quad (21)$$

При малых передаваемых импульсах $|\vec{q}|d \ll 1$ закон Кулона (20) не сингулярен при $|\vec{q}| = 0$. В этом пределе E_{corr}^0 мала по сравнению с E_{corr}^∞ за счет появления $\ln N$, поэтому ее можно откинуть. Энергия основного состояния равна

$$E_{gs} = \left[\frac{2\sqrt{2\pi}}{3} - \frac{\alpha^*}{\sqrt{2\pi}} \left(I_1 + \frac{1}{36} \ln\left(\frac{\alpha^* \nu}{12} N\right) \right) \right] \cdot u \left(\frac{n_{2D}}{\nu}\right)^{1/2}. \quad (22)$$

Влияние электрического поля. Выше указано, что приложением электрического поля можно создать ненулевую концентрацию электронов (или дырок при смене направления электрического поля) в графене на подложке [2]. При этом двумерная концентрация носителей тока пропорциональна управляющему напряжению V_g [2]

$$n_{2D} = \frac{\epsilon}{4\pi e l} V_g, \quad (23)$$

где ϵ – диэлектрическая проницаемость подложки.

Согласно расчету [17] в графене, содержащим несколько слоев, при достаточно сильном электрическом поле в К-точках зоны Бриллюэна открывается энергетическая щель. То есть система переходит из полуметаллического состояния, которое было исследовано в [1], в полупроводниковое. Выясним, есть ли аналогичное явление и в однослойном графене. Допустим, что приложение достаточно слабого электрического поля приводит к открытию щели $\Delta \neq 0$, малой по сравнению с энергией Ферми $E_F = u\rho_F$: $\Delta \ll E_F = \frac{u}{2} \sqrt{\frac{\epsilon}{e l}} V_g$; при этом поправка к кинетической энергии равна $\delta E_{\text{kin}} = \Delta^2/E_F$.

Поправка к обменной энергии согласно (П.1) равна

$$\delta E_{\text{exch}} = -\frac{\alpha^* I_2 \Delta^2}{2\pi E_F}, \quad (24)$$

где $I_2 = \int_0^1 dx \int_0^1 dy \int_0^{2\pi} d\chi \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 - 2xy \cos \chi}} = 16G$. Поправку к корреляционной энергии

выразим через поправку к поляризаационному оператору $\bar{\Pi}_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega) = \Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega) + \delta\Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega)$, опуская члены, дающие нулевой вклад в δE_{corr} (нечетные по ω):

$$\delta\Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega) = -\frac{3}{4\pi} \frac{u^2 |\vec{k}|^4 \Delta^2}{\omega^3 (u^2 |\vec{k}|^2 + \omega^2)} \arctg \left(\frac{2up_F\omega}{u^2 |\vec{k}|^2 + \omega^2} \right), \quad (25)$$

$$\delta E_{\text{corr}} = -\frac{\nu^2}{2n_{2D}} \int \frac{d^2 \vec{k} d\omega}{(2\pi)^3} \frac{V^2(\vec{k}) \Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega)}{1 - \nu V(\vec{k}) \Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega)} \delta\Pi_{44}^{(0)}(\vec{k}, i\omega). \quad (26)$$

Переходя к безразмерным переменным r, θ и подставляя асимптотики $\bar{\Pi}_{44}^{(0)}(r, \theta)$ при $r \gg 1$ и при $r \ll 1$, замечая, что в δE_{corr} основной вклад дают малые передаваемые импульсы из-за наличия в (26) $V^2(\vec{k})$, получаем:

$$\delta E_{\text{corr}} = \frac{9\pi\alpha^{*2}\nu}{256} \ln \left(1 + \frac{8}{\alpha^*\nu} \right) \cdot \frac{\Delta^2}{E_F}. \quad (27)$$

Поправка к энергии основного состояния обладает дополнительно малым множителем:

$$\delta E_{gs} = \delta E_{\text{kin}} + \delta E_{\text{exch}} + \delta E_{\text{corr}} = \left[1 - \frac{8G\alpha^*}{\pi} + \frac{9\pi\alpha^{*2}\nu}{256} \ln \left(1 + \frac{8}{\alpha^*\nu} \right) \right] \frac{\Delta^2}{E_F} \approx 0,1202 \frac{\Delta^2}{E_F}, \quad (28)$$

поэтому даже при наличии щели (малой по сравнению с E_F) выражение (18) верно, к тому же эта поправка положительна, что указывает на *устойчивость* фазы бесщелевого полупроводника относительно перехода в фазу полупроводника с ненулевой щелью во внешнем электрическом поле.

Переход в полуметаллическое состояние. Для графена параметр α^* может эффективно изменяться за счет сил изображения, то есть изменения эффективной диэлектрической проницаемости графена κ_{eff} в зависимости от окружения (диэлектрик или вакуум), в котором графен находится: при толщине подложки $l \gg n_{2D}^{-1/2}$ она равна $\kappa_{\text{eff}} = \frac{\epsilon' + \epsilon}{2}$, где ϵ' – диэлектрическая проницаемость среды над графеном [18]. Для SiO_2 подложки $\kappa_{\text{eff}} = 5$ и $\alpha^* \approx 0.44$, для SiC подложки $\kappa_{\text{eff}} = 3$ и $\alpha^* \approx 0.73$ [19]. Оценим величину перекрытия валентной зоны и зоны проводимости δE в полуметаллическом

состоянии (рис. 4). Пусть сначала $E_F > 0$ и $\Delta = 0$, а после перехода зона проводимости опустилась относительно уровня $E = 0$ на $\delta E/2$ и валентная зона поднялась на $\delta E/2$, тогда число электронов ΔN_e , перетекших из валентной зоны, равно $\frac{\nu}{2\pi} p_1^2 S$; новый импульс Ферми равен p_2 : $N_e' = \frac{\nu}{2\pi} p_2^2 S = N_e + \Delta N_e$, где $N_e = \frac{\nu}{2\pi} p_F^2 S$ (p_F – импульс Ферми до перехода). Можно оценить $u p_1 \simeq \delta E/2$. Средняя кинетическая энергия электронов $E_{\text{kin}}^e = \frac{2}{3} u p_2$, для дырок $E_{\text{kin}}^h = \frac{2}{3} u p_1$ (число дырок равно числу перетекших электронов $N_h = \Delta N_e$, поэтому их импульс Ферми равен p_1). Энергия основного состояния на одну электронно-дырочную пару в полуметаллической фазе равна

$$E'_{gs} = E_{\text{kin}}^e + E_{\text{kin}}^h + E_{\text{exch}} + E_{\text{corr}}, \quad (29)$$

где E_{corr} вычисляется по поляризованному оператору $\Pi_{44}^{(0)} = \Pi_{44}^{(0)e} + \Pi_{44}^{(0)h}$; если $N_h \simeq N_e$, то $E_{\text{exch}}^h \simeq E_{\text{exch}}^e \simeq \frac{1}{2} E_{\text{exch}}$ и $E_{\text{exch}}^{e,h}$ полагается равной (5). Пренебрегая E_{corr} , в предположении $E'_{gs} = 0$ получаем

$$\delta E \simeq \left(b - \frac{1}{b}\right) u p_F, \quad (30)$$

где $b = \frac{|E_{\text{exch}}|}{E_{\text{kin}}} = \frac{3\alpha^* I_1}{4\pi} = \frac{2\alpha^*}{\pi} \left(G + \frac{1}{2}\right)$; условие $b > 1$ означает, что фаза бесщелевого полупроводника *неустойчива* ($E_{gs} < 0$), при этом $\delta E > 0$, т. е. происходит переход в полуметаллическую фазу. Из (30) следует, что $\delta E \propto V_g^{1/2}$ и при отсутствии электрического поля $\delta E = 0$. Помимо перехода в полуметаллическое состояние происходит одновременно с ним переход из спин-неполяризованного состояния в спин-поляризованное.

Работа выполнена при поддержке Фонда некоммерческих программ “Династия”.

Приложение

Используя функцию Грина из [10], получаем выражение для обменной энергии при произвольной энергетической щели Δ :

$$E_{\text{exch}} = -\frac{\nu}{2n_{2D}} \int \frac{d^2 \vec{p} d^2 \vec{k}}{(2\pi)^4} \frac{\Delta^2 + u^2 \vec{p} \cdot \vec{k} + \varepsilon_p \varepsilon_k}{\varepsilon_p \varepsilon_k} \frac{2\pi e^2}{\kappa |\vec{p} - \vec{k}|} \theta(p_F - |\vec{p}|) \theta(p_F - |\vec{k}|). \quad (\text{II.1})$$

Из (II.1) в нерелятивистском пределе: $\Delta \gg u p_F$, $\varepsilon_p \varepsilon_k \approx \Delta^2 \gg u^2 |\vec{p} \cdot \vec{k}|$ находим

$$E_{\text{exch}}^{\text{nonrel}} = -\frac{\nu}{n_{2D}} \int \frac{d^2 \vec{p} d^2 \vec{k}}{(2\pi)^4} \frac{2\pi e^2}{\kappa |\vec{p} - \vec{k}|} \theta(p_F - |\vec{p}|) \theta(p_F - |\vec{k}|), \quad (\text{II.2})$$

что совпадает с известным выражением (см., например, [16] на с. 98). В ультрарелятивистском пределе: $\Delta \ll up_F$, $\varepsilon_p \varepsilon_k \approx u^2 |\vec{p}| \cdot |\vec{k}| \gg \Delta^2$ находим

$$E_{\text{exch}}^{\text{ultrarel}} = -\frac{\nu}{2n_{2D}} \int \frac{d^2 \vec{p} d^2 \vec{k}}{(2\pi)^4} \left(1 + \frac{\vec{p} \cdot \vec{k}}{|\vec{p}| \cdot |\vec{k}|} \right) \frac{2\pi e^2}{\kappa |\vec{p} - \vec{k}|} \theta(p_F - |\vec{p}|) \theta(p_F - |\vec{k}|). \quad (\text{П.3})$$

Обезразмеривая подынтегральное выражение (П.3) и интегрируя по импульсам, получаем ответ в виде (5). Выражение (П.3) эквивалентно формуле (7) работы [20].

ЛИТЕРАТУРА

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, et al., *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, et al., *Nature* **438**, 197 (2005).
- [3] А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика* (М., Наука, 1969).
- [4] С. Швебер, *Введение в релятивистскую квантовую теорию поля* (М., ИЛ, 1963).
- [5] А. М. Цвелик, *Применение квантовой теории поля в физике конденсированного состояния* (М., Физматлит, 2002).
- [6] H. Nielsen, M. Ninomiya, *Phys. Lett.* **130B**, 389 (1983).
- [7] Б. А. Волков, Б. Г. Идлис, М. Ш. Усманов, *УФН* **65**, 799 (1995).
- [8] T. J. Ando, *Phys. Soc. Jpn.* **74**, 777 (2005).
- [9] L. A. Falkovsky, A. A. Varlamov, *Cond-mat/0606800*.
- [10] Л. Е. Печеник, А. П. Силин, *Краткие сообщения по физике ФИАН*, No. 5-6, 72 (1996).
- [11] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (М., Физматлит, 1963).
- [12] L. V. Keldysh, *Contemp. Phys.* **27**(5), 395 (1986).
- [13] P. Nozieres, D. Pines, *Phys. Rev.* **111**, 442 (1958).
- [14] M. Combescot, P. J. Nozieres, *Phys. C* **5**, 2369 (1972).
- [15] Е. А. Андрияшин, Л. Е. Печеник, А. П. Силин, *Краткие сообщения по физике ФИАН*, No. 7-8, 68 (1996).
- [16] Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твердых телах* (М., Наука, 1965).
- [17] M. Aoki, H. Amawashi, *Cond-mat/0702257*.
- [18] Л. В. Келдыш, *Письма в ЖЭТФ*, **29**, 716 (1979).
- [19] A. Iyengar, J. Wang, H. A. Fertig, L. Brey, *Phys. Rev. B* **75**, 125430 (2007).
- [20] M. W. C. Dharma-wardana, *Phys. Rev. B* **75**, 075427 (2007).

Поступила в редакцию 30 октября 2007 г.