Low Temperature Physics/Физика низких температур, 2011, т. 37, № 9/10, с. 1022–1026

Квантовые осцилляции в перестраиваемом графеновом бислое

Л.А. Фальковский

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Москва 119334
E-mail: falk@itp.ac.ru

Статья поступила в редакцию 14 февраля 2011 г.

Рассмотрены осцилляции запрещенной щели, химического потенциала и концентрации носителей на графеновом бислое в квазиклассическом магнитном и поперечном электрическом поле, создаваемом напряжением на затворе.

Розглянуто осциляції забороненої щілини, хімічного потенціалу й концентрації носіїв на графеновому бішарі у квазікласичному магнітному й поперечному електричному полі, яке створюється напругою на затворі.

PACS: 73.20.At Поверхностные состояния, зонная структура, электронная плотность состояний;
73.21.Ac Мультислои;
73.43.–f Квантовые эффекты Холла;
81.05.U– Углерод/материалы на основе углерода.

Ключевые слова: графеновый бислой, варьируемая щель в электронном спектре, квантовые осцилляции, фактор Дингла.

1. Введение

Со времени работ И.М. Лифшица и его учеников об осцилляциях магнитной восприимчивости экспериментальное и теоретическое изучение этого явления стало мощным методом исследования конденсированного состояния. И совсем недавно первые работы по графену [1] были выполнены этим же методом.

По-видимому, наиболее обещающим материалом в графеновом семействе является бислой. Объясняется это двумя обстоятельствами. В самом графене запрещенная щель в электронном спектре оказывается гораздо меньше типичных металлических энергий. Поэтому потенциал любого дефекта является безотражательным, что исключает конструирование на основе графена электронного прибора. Напротив, в бислое относительно легко создать щель путем прикладывания «на затворе» статического электрического поля в перпендикулярном относительно бислоя направлении. Таким образом, оказывается возможным и перестраивать запрещенную щель.

Как и в случае трехмерных материалов, при исследовании квантовых осцилляций в магнитном поле здесь возникает естественный вопрос о величине осцилляций различных величин. Обычно осцилляции химического потенциала в квазиклассической области магнитных полей малы по сравнению с осцилляциями магнитного момента, что приводит к периодичности осцилляций по обратному полю. В случае перестраиваемого графенового бислоя ответ на этот вопрос не вполне очевиден, в частности потому, что при варьировании внешнего электростатического поля подстраивается, как уже отмечалось, запрещенная щель и, одновременно, концентрация носителей в бислое.

Поставленный вопрос является предметом данной работы, в отсутствие магнитного поля задача изучалась в [2,3]. Вначале в квазиклассическом приближении рассмотрен электронный спектр в магнитном поле. Затем сформулирован вариационный принцип для нашей двухпараметрической задачи. Наконец, приведены осцилляции запрещенной щели, химпотенциала и концентрации носителей — они имеют, как мы увидим, различный порядок величины.

2. Электронный спектр бислоя в квазиклассическом магнитном поле

В приближении сильной связи, используемом в модели Слончевского и Вейса [4], на основе локализованных атомных функций строятся четыре блоховские функции

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_j} \psi_0(\mathbf{a}_j - \mathbf{r}),$$

$$\psi_b = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_j} \psi_0(\mathbf{a}_j + \mathbf{a} - \mathbf{r}),$$

$$\psi_{a1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_j} \psi_0(\mathbf{a}_j + \mathbf{c} - \mathbf{r}), \quad (1)$$

$$\psi_{b1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_j} \psi_0(\mathbf{a}_j + \mathbf{c} + \mathbf{a} - \mathbf{r}),$$

где суммы берутся по векторам трансляций $\mathbf{a}_j$, N — число элементарных ячеек в большом образце. Векторы **a** и **c** соединяют ближайшие атомы в слое и в соседних слоях соответственно (см. рис. 1).

Если учитывать только ближайших соседей, эффективный гамильтониан в пространстве функций (1) можно записать в виде

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} U+\Delta & \gamma_0 f^* & \gamma_1 & \gamma_4 f \\ \gamma_0 f & U-\Delta & \gamma_4 f & \gamma_3 f^* \\ \gamma_1 & \gamma_4 f^* & -U+\Delta & \gamma_0 f \\ \gamma_4 f^* & \gamma_3 f & \gamma_0 f^* & -U-\Delta \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $f = e^{ik_x a} + 2e^{-ik_x a/2} \cos(k_y a\sqrt{3}/2)$. Значения интегралов перекрытия $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_3, \gamma_4$ и Δ даны в табл. 1.

Таблица 1. Параметры электронного спектра

Параметр, эВ	Эксперимент [6]	DFT расчет [5]
γ_0	$3,16 \pm 0,3$	$2,598 \pm 0,015$
γ_1	$0,381 \pm 0,003$	$0,34 \pm 0,02$
γ_3	$0,38 \pm 0,06$	$0,32 \pm 0,02$
γ_4	$0,14 \pm 0,03$	$0,177 \pm 0,025$
Δ	$0,011 \pm 0,003$	$0,024 \pm 0,01$

Наибольший из параметров γ_0 определяет дисперсию в окрестности линии KH зоны Бриллюэна (ребро шестигранной призмы), где матричный элемент $\gamma_0 f$ можно разложить в ряд по компонентам квазиимпульса:

$$\gamma_0 f = v(ik_x - k_y),$$

что и определяет скорость носителей в слое $v = 3\gamma_0 a/2 = 10^8$ см/с. Параметры γ_3 и γ_4 малы на порядок по отношению к γ_0. Наиболее существенным оказывается γ_1, а U возникает в случае, когда слои неидентичны, например при наложении перпендикулярного электрического поля, и представляет, как можно видеть, запрещенную щель в спектре. Сохраняя наиболее существенные величины, получаем эффективный гамильтониан

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} U & vk_+ & \gamma_1 & 0 \\ vk_- & U & 0 & 0 \\ \gamma_1 & 0 & -U & vk_- \\ 0 & 0 & vk_+ & -U \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $k_\pm = \mp ik_x - k_y$.

Четыре зоны, которые находятся с помощью соответствующего детерминанта

$$\varepsilon_{1,4}(q) = \pm\left(\frac{\gamma_1^2}{2} + U^2 + q^2 + W\right)^{1/2},$$

$$\varepsilon_{2,3}(q) = \pm\left(\frac{\gamma_1^2}{2} + U^2 + q^2 - W\right)^{1/2}, \quad (4)$$

где

$$W = \left(\frac{\gamma_1^4}{4} + (\gamma_1^2 + 4U^2)q^2\right)^{1/2}$$

и $q^2 = (vk)^2$, изображены на рис. 2.

В магнитном поле компоненты квазиимпульса заменяются $\mathbf{k} \to \mathbf{k} - e\mathbf{A}/c$, а волновую функцию можно искать в виде

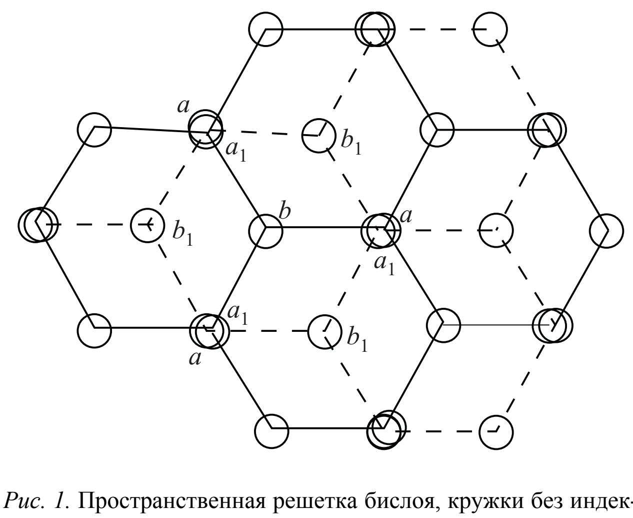

Рис. 1. Пространственная решетка бислоя, кружки без индекса изображают атомы одного слоя, с индексом 1 — другого.

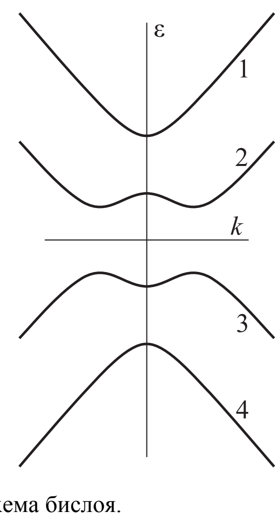

Рис. 2. Зонная схема бислоя.

$$\psi_{sn}^{\alpha}(x) = \begin{cases} C_{sn}^{1}\varphi_{n-1}(x) \\ C_{sn}^{2}\varphi_{n}(x) \\ C_{sn}^{3}\varphi_{n-1}(x) \\ C_{sn}^{4}\varphi_{n-2}(x) \end{cases}, \tag{5}$$

где n — число Ландау и $\varphi_n(x)$ — ортонормированные функции Эрмита с $n \geq 0$, индекс s нумерует решения при заданном n. При таком выборе каждая строка волнового уравнения с гамильтонианом (2) оказывается пропорциональной одной и той же функции Эрмита, на которую можно сократить, и получаем систему линейных уравнений для собственного вектора C_{sn}:

$$\begin{pmatrix} U-\varepsilon & \omega_c\sqrt{n} & \tilde{\gamma}_1 & 0 \\ \omega_c\sqrt{n} & U-\varepsilon & 0 & 0 \\ \tilde{\gamma}_1 & 0 & -U-\varepsilon & \omega_c\sqrt{n-1} \\ 0 & 0 & \omega_c\sqrt{n-1} & -U-\varepsilon \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} C_{sn}^1 \\ C_{sn}^2 \\ C_{sn}^3 \\ C_{sn}^4 \end{pmatrix} = 0, \tag{6}$$

где $\omega_c = v\sqrt{2|e|\hbar B/c}$.

В квазиклассическом приближении, о котором здесь идет речь, выполнено условие $n \gg 1$, и, пренебрегая единицей по сравнению с n, запишем дисперсионное уравнение в виде

$$\omega_c^2 n = \varepsilon^2 + U^2 \pm \sqrt{\gamma_1^2(\varepsilon^2 - U^2) + 4U^2\varepsilon^2}.$$

Введем еще одно ограничение. Будем рассматривать лишь низкоэнергетическую и наиболее интересную часть спектра, где $\gamma_1 > |\varepsilon|, |U|$. Тогда можно пренебречь последним слагаемым под корнем:

$$\omega_c^2 n = \gamma_1\sqrt{\varepsilon^2 - U^2}.$$

3. Вариационный принцип

Рассмотрим для конкретности электростатическую схему, изображенную на рис. 3. Поле в конденсаторе возникает благодаря приложенному потенциалу, на бислое появляются носители n_1 и n_2 с полной концентрацией $n_1 + n_2 = n$. Кроме того, там же могут присутствовать положительные или отрицательные ионы — допанты, их концентрации будем обозначать N_1 и N_2 соответственно. Фактически, переменными в задаче являются запрещенная щель U в спектре и химический потенциал μ. В духе теории ферми-жидкости следует условиться об основном состоянии системы. Будем считать, что таковым является состояние, в котором две нижние зоны рис. 2 заполнены, а две верхние пусты, и химпотенциал расположен между ними. Такая картина соответствует идеальному материалу. В нашем случае заполненные состояния в рассматриваемой зонной схеме так же, как и более глубокие состояния, не включенные в рамки теории Слончевского–Вейсса,

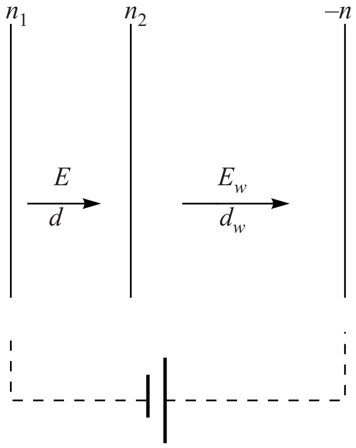

Рис. 3. Электростатическая схема: d — расстояние в бислое между графеновыми слоями, d_w — расстояние в конденсаторе, одной из обкладок которого служит графеновый слой.

не вносят вклад в поляризацию. Строго говоря, данная картина не очевидна, поскольку мы вычисляем поляризацию в зонной схеме, в которой отсутствует электронная дисперсия в нормальном по отношению к слоям направлении. Противоположный подход [2], использованный в отсутствие магнитного поля, когда принимается, что внешнее электрическое поле влияет и на заполненные глубокие состояния (например, состояния в зоне 4 на рис. 2), приводит к результату, отличающемуся от нашего буквенно, хотя количественное отличие и невелико.

Запишем изменение энергии бислоя при включении внешнего поля:

$$V^{(c)} = \frac{eH}{\pi^2\hbar^2 c}\sum_{n=1}^{\infty}\varepsilon_n f_0(\varepsilon_n), \tag{7}$$

где суммирование проводится по занятым состояниям в зоне проводимости 2, $f_0(\varepsilon)$ — фермиевская функция, и рассматриваем низкие температуры $(T \ll |\mu|)$. В случае, когда имеются дырки, следует писать $|\varepsilon_n|$ и $1 - f_0(\varepsilon_n)$.

Вычисление этой суммы проводится стандартным образом с помощью формулы суммирования Пуассона:

$$V^{(c)} = \frac{n_0 U^2}{2\gamma_1}\left[x\sqrt{x^2-1} + f(x)\right] + n_0\mu\phi(x), \tag{8}$$

где

$$f(x) = \ln(x + \sqrt{x^2-1}), \quad n_0 = \gamma_1^2/\pi\hbar^2 v^2, \quad x = \mu/U.$$

Последнее слагаемое в (8) дает осциллирующий вклад

$$\phi(x) = \frac{2eH}{\pi^2 c\hbar n_0}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{z}{\operatorname{sh} kz}\mathrm{e}^{-kD}\sin[2\pi k N(\mu)], \tag{9}$$

$$N(\mu) = \frac{\gamma_1}{\omega_c^2}\sqrt{\mu^2 - U^2}, \quad z = 2\pi^2 T\frac{dN}{d\mu},$$

где $N(\mu)$ представляет собой номер последнего уровня Ландау, совпадающего с уровнем Ферми.

При низких температурах, $z \to 0$, наиболее существенным оказывается фактор Дингла D, и осциллирующее слагаемое можно вычислить тем же способом, что и в случае графена [7]:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin kw}{k} e^{-kD} = \operatorname{arctg} \frac{\sin w}{\exp D - \cos w}.$$

К энергии носителей надо добавить энергию электрических полей

$$V^{(f)} = \frac{1}{8\pi}(dE_1^2 + \varepsilon_w d_w E^2), \qquad (10)$$

где поля в бислое и подложке определяются электростатическими условиями

$$E_1 = 4\pi e(n_1 - N_1), \quad E = 4\pi e(n - N). \qquad (11)$$

Приведем еще выражения для концентрации носителей на каждом из слоев бислоя:

$$n_{1,2} = \frac{n_0}{2}\left\{\left[\sqrt{\mu^2 - U^2} \pm U f(x)\right]\Big/\gamma_1 + (1 \pm U/\mu)\phi(x)\right\}.$$

Полную энергию следует минимизировать при заданной разности потенциалов на затворе

$$V_g = -dE_1 - d_w E.$$

Для этого воспользуемся методом неопределенных коэффициентов Лагранжа и составим соответствующую функцию

$$L = V^{(c)} + V^{(f)} - \lambda(eV_g + edE_1 + ed_w E). \qquad (12)$$

Из двух условий минимума исключим неопределенный коэффициент λ, а затем учтем, что толщина подложки обычно много больше межслоевого расстояния, $d_w \gg d$, и разложим условие минимума по этому параметру:

$$4\pi e^2 d(n_2 - N_2)\left(\frac{n_{1x}}{n_x} - \frac{n_{1U}}{n_U}\right) = \frac{V_x^{(c)}}{n_x} - \frac{V_U^{(c)}}{n_U},$$

где нижними индексами обозначены производные по U и $x = \mu/U$. Вычисляя стоящие здесь производные, получаем окончательный результат

$$2\frac{\gamma_1 N_2}{U n_0} = \sqrt{x^2 - 1} \mp f(x) + \phi(x)\frac{(x \mp 1)\gamma_1}{xU} \mp$$

$$\mp \frac{xf(x) + \phi(x)\gamma_1/U}{\Lambda[xf(x) - \sqrt{x^2-1} + \phi(x)(1 - x^{-2})\gamma_1/U]}, \qquad (13)$$

где константа экранировки

$$\Lambda = \frac{e^2 \gamma_1 d}{(\hbar v)^2}.$$

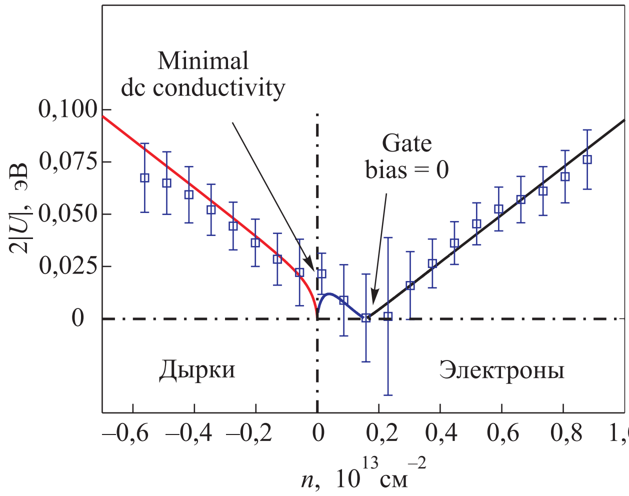

Рис. 4. Зависимость запрещенной щели в спектре графена от концентрации носителей, изменяемой напряжением на затворе в отсутствие постоянного магнитного поля при электронном допинге $N_2 = 0{,}78 \cdot 10^{12}$ см$^{-2}$ (представленная нами теория), точки с указанием погрешности — экспериментальные данные [6]; положительные (отрицательные) значения n соответствуют электронной (дырочной) проводимости. Разность значений n между отмеченными «gate bias = 0» и «minimal dc conductivity» равна $2N_2$.

4. Обсуждение результата

Если магнитное поле отсутствует, то в уравнении (13) надо положить $\phi(x) = 0$ и приходим к уже известному результату работы [3], показанному на рис. 4, где приведены также данные эксперимента [6] (похожие результаты получены в работах [8,10]). Немонотонность зависимости щели от концентрации носителей объясняется присутствием допантов.

Осцилляции различных величин на бислое в зависимости от магнитного поля изображены на рис. 5–7. При этом одна из величин, которые могут меняться, фиксировалась. Такая возможность, в принципе, име-

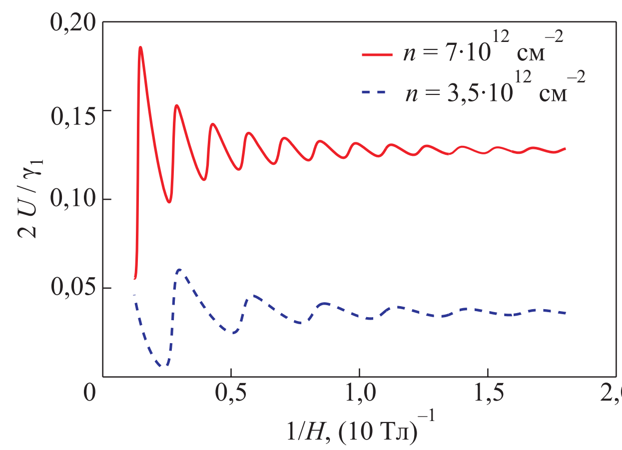

Рис. 5. Осцилляции запрещенной щели в единицах $\gamma_1 = 0{,}381$ эВ при заданном химическом потенциале при различных концентрациях носителей в слабом поле.

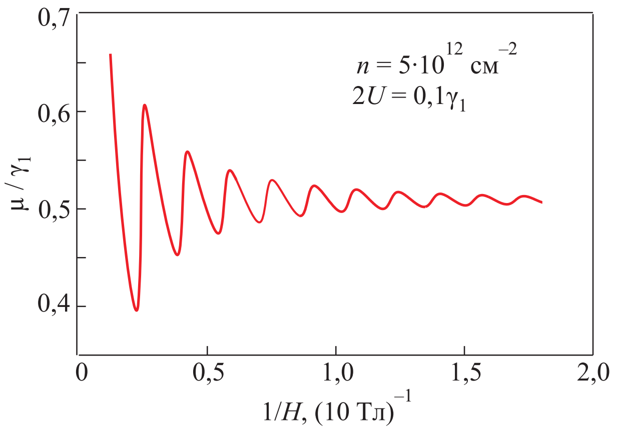

Рис. 6. Осцилляции химического потенциала в единицах γ_1 при заданной запрещенной щели.

ется, если использовать два затвора, как в эксперименте [11]. На рисунках видно, что в слабых полях, как и следует ожидать, осцилляции исчезают, а монотонный предел выходит на значение, которое можно проверить с помощью рис. 4. В сильном поле осцилляции щели и химпотенциала довольно велики, достигают 10% от монотонного значения и не вполне гармоничны по форме. Однако осцилляции концентрации носителей, как видно на рис. 7, существенно, более чем на порядок, меньше. Кроме того, они как бы раздваиваются. Это объясняется тем, что в уравнение (13) осциллирующее слагаемое входит нелинейным образом и интерферирует с особенностями, описывающими монотонное поведение.

Автор благодарен А. Озерину за участие в вычислениях. Работа поддержана грантом РФФИ № 10-02-00193-а и программой SCOPES (grant IZ73Z0_128026 of the Swiss NSF).

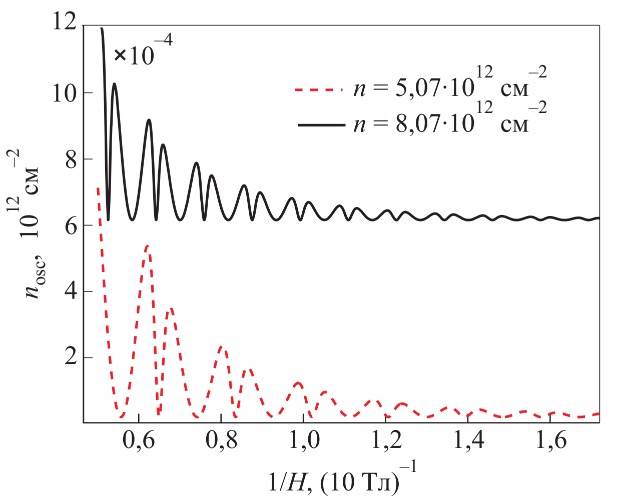

Рис. 7. Осцилляции концентрации носителей при заданном химическом потенциале при различных значениях концентрации носителей. Кривые смещены для наглядности.

1. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Doubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004); K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
2. E. McCann, *Phys. Rev.* **B74**, 161403(R) (2006).
3. L.A. Falkovsky, *Phys. Rev.* **B80**, 113413 (2009).
4. J.C. Slonchewski and P.R. Weiss, *Phys. Rev.* **109**, 272 (1958).
5. X.G.J.C. Charlier and J.P. Michenaud, *Phys. Rev.* **B43**, 4579 (1982).
6. A.B. Kuzmenko, I. Crassee, D. van der Marel, P. Blake, and K.S. Novoselov, *Phys. Rev.* **80**, 165406 (2009).
7. S.G. Sharapov, V.P. Gusynin, and H. Beck, *Phys. Rev.* **B69**, 075104 (2004).
8. K.F. Mak, C.H. Lui, J. Shan, and T.F. Heinz, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 256405 (2009).
9. R.R. Nair, P. Blake, A.N. Grigorenko, K.S. Novoselov, T.J. Booth, T. Stauber, N.M.R. Peres, and A.K. Geim, *Science* **320**, 5881 (2008).
10. Y. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M.C. Martin, A. Zettl, M.F. Crommie, Y.R. Shen, and F. Wang, *Nature* **459**, 820 (2009).
11. E.A. Henriksen and J.P. Eisenstein, *Phys. Rev.* **B82**, 041412(R) (2010).

Quantum oscillations in a gated graphene bilayer

L.A. Falkovskii

The oscillations of forbidden gap, chemical potential and carrier concentration on a graphene bilayer at a quasi-classical magnetic field and a transverse electrical one produced by gate voltage are considered.

PACS: 73.20.At Surface states, band structure, electron density of states;
73.21.Ac Multilayers;
73.43.–f Quantum Hall effects;
81.05.U– Carbon/carbon-based materials.

Keywords: graphene bilayer, tunable forbidden gap, quantum oscillations, Dingle factor.