

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

Физические свойства графена

Научная сессия Отделения физических наук
Российской академии наук, 28 марта 2012 г.

PACS number: 01.10.Fv

DOI: 10.3367/UFNr.0182.201211h.1223

28 марта 2012 г. в конференц-зале Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (РАН) состоялась научная сессия Отделения физических наук РАН "Физические свойства графена".

Объявленная на web-сайте ОФН РАН www.gpad.ac.ru повестка заседания содержала следующие доклады:

1. **Фальковский Л.А.** (Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Москва, Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва). *Магнитооптика графена.*

2. **Варламов А.А.** (University of Rome "Tor Vergata", Italy). *Термоэлектрические свойства графена.*

Статьи, написанные на основе докладов, публикуются ниже.

PACS numbers: 68.65.Pq, 78.67.Wj, 81.05.ue

DOI: 10.3367/UFNr.0182.201211i.1223

Магнитооптика графеновых слоёв

Л.А. Фальковский

1. Введение

Большая часть обширной информации о графене хорошо укладывается в картину "бесщелевых дираковских фермионов". Согласно этой картине, в точках К зоны Бриллюэна (вершины шестиугольника) имеются две зоны без щели между ними и электронный спектр в достаточно широкой окрестности волновых векторов можно считать линейным. Очевидно, что для линейности спектра размер рассматриваемой окрестности должен быть мал по сравнению с размером зоны Бриллюэна, т.е. менее 10^8 см^{-1} , что предполагает не слишком большие концентрации n носителей заряда, $n \ll 10^{16} \text{ см}^{-2}$. Идеально чистый графен при нулевой температуре вообще не должен содержать носителей и уровень Ферми должен разделять зону проводимости и валентную зону. Однако чистый графен приготовить очень трудно, и минимальная концентрация, которую удалось получить на сегодня, составляет $n \sim 10^9 \text{ см}^{-2}$.

Л.А. Фальковский. Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Москва, РФ; Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Москва, РФ
E-mail: falk@itp.ac.ru

Здесь возникает следующий принципиальный вопрос: в какой мере кулоновское межэлектронное взаимодействие перенормирует исходный линейный спектр и не переходит ли графен в состояние диэлектрика со щелью?

Существует и практическая необходимость в щелевом материале для целей электроники. Поэтому популярными являются исследования графенового бислоя, к которому можно прикладывать постоянное напряжение, как к конденсатору, создавая тем самым энергетическую щель в спектре. Таким образом, физика в своём развитии за полвека совершила круг и вернулась к исследованию графита. Здесь должны быть названы имена Слончевского и Вейса, которые сформулировали [1] принцип описания слоистого вещества с сильным взаимодействием в слоях и слабым — между ними.

Пожалуй, основными методами изучения металлического состояния являются магнитотранспортные и магнитооптические исследования. В магнитном поле наблюдают эффекты Холла — классический и квантовый, а также поворот плоскости поляризации — эффект Фарадея (при прохождении света) и эффект Керра (при отражении). При описании графеновых слоёв, несмотря на относительную простоту представленной картины, возникают свои трудности, которые, как и достижения, являются предметом настоящей статьи.

2. Электронный спектр графена

Точки К зоны Бриллюэна обладают симметрией C_{3v} с осью третьего порядка и плоскостью симметрии. У этой группы имеется двумерное представление, базисом которого являются две функции, переходящие друг в друга при отражении, а при повороте приобретающие множители $\exp(\pm 2\pi i/3)$ соответственно. Из компонент отклонения импульса от точек К можно составить линейные комбинации $k_{\pm} = \mp i k_x - k_y$, преобразующиеся так же, как и функции базиса. Эффективный гамильтониан должен быть инвариантен относительно преобразования этой малой группы, и вблизи точки К мы имеем единственную возможность представить гамильтониан в линейном приближении:

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & vk_+ \\ vk_- & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где v — константа с размерностью скорости. Этот же гамильтониан возникает, естественно, и в приближении сильной связи.

Собственные значения матрицы в правой части (1) дают двухзонный бесщелевой спектр:

$$\varepsilon_{1,2} = \mp v \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \mp v k.$$

Таким образом, бесщелевой характер спектра является следствием симметрии, а тот факт, что уровень Ферми должен проходить через коническую точку К, вытекает просто из валентности углерода. Циклотронная масса для такого спектра имеет вид

$$m(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \frac{dS(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{v^2}$$

(где S — площадь поперечного сечения изоэнергетической поверхности), а концентрация носителей заряда при нулевой температуре выражается через химический потенциал μ :

$$n(\mu) = \frac{\mu^2}{\pi \hbar^2 v^2}.$$

Самый простой способ экспериментально проверить вид спектра заключается в использовании соотношения

$$m(\mu) \frac{v}{\hbar} = \mp \sqrt{\pi n(\mu)},$$

например, посредством измерения эффекта Шубникова — де Гааза, в котором циклотронная масса на уровне Ферми находится по температурной зависимости амплитуды осцилляций, а концентрация носителей — по их частоте. Обе эти величины измеряются при разной концентрации носителей, которая изменяется посредством вариации напряжения на "затворе". Такая проверка была произведена в работе [2], когда удалось получить очень чистые образцы с концентрацией носителей до 10^9 см^{-2} . Оказалось, что "постоянный" параметр v не является постоянным, а возрастает при малых концентрациях в три раза по сравнению со своим "нормальным" значением 10^8 см^{-1} при концентрациях, больших 10^{11} см^{-2} . Это результат межелектронного кулоновского взаимодействия, которое оказывается более эффективным, как и следовало ожидать, при малых концентрациях, когда экранирование отсутствует. Логарифмическая перенормировка скорости вследствие кулоновского взаимодействия для трёхмерного случая впервые была найдена Абрикосовым и Бенеславским [3], а для двумерного графена — Мищенко [4]. Интересно, что даже при самых малых концентрациях никаких признаков какого-либо фазового перехода не обнаружено. В соответствии с теорией кулоновское взаимодействие не нарушает обусловленного симметрией бесщелевого характера спектра.

3. Динамическая проводимость графена

Пожалуй, одним из наиболее ярких проявлений особого характера спектра графена является поведение его динамической, т.е. зависящей от частоты, проводимости (кондактанса). При больших частотах в оптической области пространственная дисперсия проводимости, а также частота столкновения носителей не существенны. Суммируя вклады конических точек (их две на элементарную ячейку), интегрируя по углу двумерного вектора $\mathbf{k}$ и переходя к переменной $\varepsilon = vk$, находим проводи-

мость [5–7]

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 \omega}{i\pi \hbar} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{|\varepsilon|}{\omega^2} \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} - \int_0^{+\infty} d\varepsilon \frac{f(-\varepsilon) - f(\varepsilon)}{(\omega + i\delta)^2 - 4\varepsilon^2} \right], \quad (2)$$

где $f(\varepsilon)$ — функция распределения, δ — малый параметр. Первое слагаемое в правой части (2), которое представляет собой внутризонный вклад, можно ещё раз проинтегрировать:

$$\sigma^{\text{intra}}(\omega) = \frac{2ie^2 T}{\pi \hbar (\omega + i\tau^{-1})} \ln \left(2 \cosh \frac{\mu}{2T} \right), \quad (3)$$

где ω мы заменили величиной $\omega + i\tau^{-1}$, для того чтобы учесть электронное затухание τ . В таком виде внутризонное слагаемое совпадает с классическим выражением Друде–Больцмана для проводимости. При низкой температуре, $\mu \gg T$, когда носители вырождены, внутризонное слагаемое приобретает "металлический" вид:

$$\sigma^{\text{intra}}(\omega) = \frac{ie^2 |\mu|}{\pi \hbar (\omega + i\tau^{-1})}. \quad (4)$$

Для чистого графена химический потенциал $\mu = 0$ (бесщелевой диэлектрик) и проводимость (3) пропорциональна температуре. Концентрацию носителей можно изменять либо допированием, либо с помощью постоянного электрического поля ("эффект поля").

Второе слагаемое в правой части (2), где δ — бесконечно малая величина, описывающее межзонные переходы, содержит как вещественную часть, которая возникает в результате обхода полюса и соответствует поглощению, так и мнимую. При нулевой температуре второй интеграл в правой части (2) может быть вычислен аналитически:

$$\sigma^{\text{inter}}(\omega) = \frac{e^2}{4\hbar} \left[\theta(\omega - 2\mu) - \frac{i}{2\pi} \ln \frac{(\omega + 2\mu)^2}{(\omega - 2\mu)^2} \right], \quad (5)$$

где θ — функция, которая выражает условие межзонных электронных переходов с порогом $\omega = 2\mu$. Логарифмическая особенность устраняется обрезанием температуры (или релаксацией носителей), и при конечной, но малой по сравнению с химическим потенциалом температуре в (5) следует сделать замену

$$\begin{aligned} \theta(\omega - 2\mu) &\rightarrow \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{\omega - 2\mu}{2T} \right), \\ (\omega - 2\mu)^2 &\rightarrow (\omega - 2\mu)^2 + (2T)^2. \end{aligned} \quad (6)$$

Из приведённых результатов можно сделать два основных вывода. Во-первых, на высоких частотах, $\omega \gg (T, \mu)$, проводимость оказывается в основном вещественной и независимой от каких-либо параметров:

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{4\hbar}.$$

В этой области частот, ограниченной сверху шириной зоны, порядка 3 эВ, проводимость, как мы видим, не зависит от материальных параметров, например от скорости v , и носит универсальный характер. Во-вто-

рых, в случае, когда в графене имеются вырожденные носители, при достаточно низких температурах, мнимая часть проводимости содержит логарифмическую сингулярность на пороге межзонного поглощения $\omega = 2\mu$, где вещественная часть испытывает конечный скачок. Эта особенность сглаживается при повышении температуры, а также вследствие конечности длины свободного пробега носителей. Для наблюдения особенности частота столкновений не должна превышать температуру, т.е. должна составлять величину 10–40 К в энергетических единицах. Эти выводы подтверждены экспериментами [8].

Универсальная проводимость приводит к любопытному следствию. Используя её значение, можно получить коэффициент прохождения T электромагнитной волны сквозь графен [9, 10]:

$$T = 1 - \frac{4\pi}{c} \operatorname{Re} \sigma(\omega) \cos \theta = 1 - \pi \frac{e^2}{\hbar c} \cos \theta, \quad (7)$$

где θ — угол падения света. Видим, что коэффициент прохождения света сквозь графеновый слой выражается через постоянную тонкой структуры квантовой электродинамики, к которой графен не имеет никакого отношения. Несколько экспериментальных групп [11, 12] подтвердили вычисленное значение коэффициента прохождения в широкой частотной области видимого спектра и для графена, и для бислоя, в котором отличие этого коэффициента от единицы вдвое больше (рис. 1).

4. Спектр графеновых слоёв в магнитном поле

Для графенового бислоя и графита в окрестности линии КН зоны Бриллюэна гамильтониан Слончевского – Вейса имеет вид

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \tilde{\gamma}_5 + U & vk_+ & \tilde{\gamma}_1 & \frac{\tilde{\gamma}_4 vk_-}{\gamma_0} \\ vk_- & \tilde{\gamma}_2 + U & \frac{\tilde{\gamma}_4 vk_-}{\gamma_0} & \frac{\tilde{\gamma}_3 vk_+}{\gamma_0} \\ \tilde{\gamma}_1 & \frac{\tilde{\gamma}_4 vk_+}{\gamma_0} & \tilde{\gamma}_5 - U & vk_- \\ \frac{\tilde{\gamma}_4 vk_+}{\gamma_0} & \frac{\tilde{\gamma}_3 vk_-}{\gamma_0} & vk_+ & \tilde{\gamma}_2 - U \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где $k_{\pm} = \mp ik_x - k_y$ — проекции квазиимпульса, v — параметр скорости в направлении графитовых слоёв, $\tilde{\gamma}_j$ — функции проекции k_z в направлении главной оси,

$$\tilde{\gamma}_2 = 2\gamma_2 \cos(2k_z d_0), \quad \tilde{\gamma}_5 = 2\gamma_5 \cos(2k_z d_0) + \Delta,$$

$$\tilde{\gamma}_i = 2\gamma_i \cos(k_z d_0), \quad i = 1, 3, 4,$$

$d_0 = 3,35 \text{ \AA}$ — расстояние между слоями в графите. Параметр скорости $v = 1,5a_0\gamma_0 = 10^8 \text{ см с}^{-1}$ связан с перекрытием $\gamma_0 \approx 3 \text{ эВ}$ волновых функций ближайших соседей, находящихся в одном слое на расстоянии $a_0 = 1,415 \text{ \AA}$. Параметры с $i = 1, 3, 4$, возникающие из-за перекрытия волновых функций ближайших соседей в направлении главной оси, на порядок меньше, чем γ_0 . В бислое в направлении главной оси имеется только один соседний слой, поэтому $\tilde{\gamma}_i = \gamma_i$ для $i = 1, 3, 4$, а поскольку следующий слой отсутствует, межслоевые интегралы

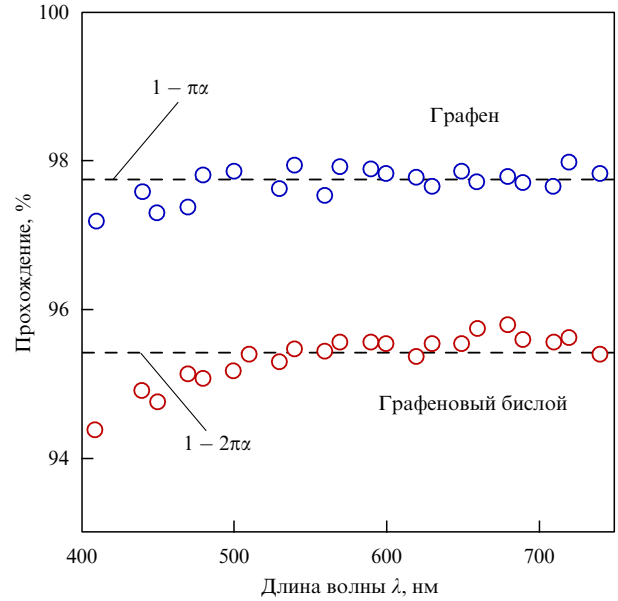


Рис. 1. Коэффициент прохождения света сквозь графен и графеновый бислой [11].

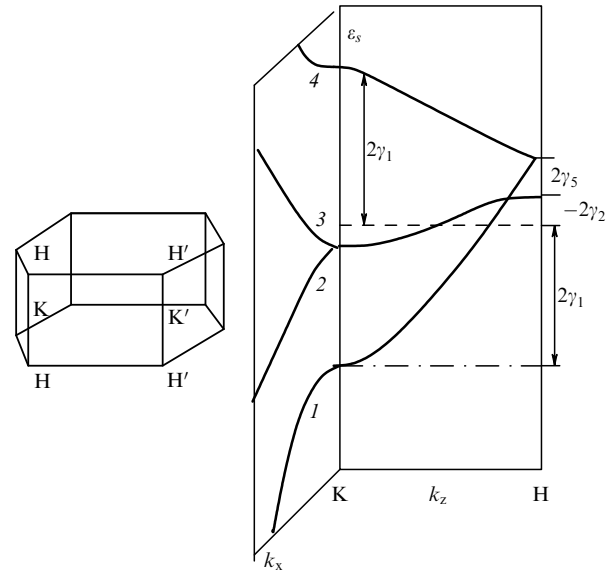


Рис. 2. Зона Бриллюэна и электронный спектр графита.

перекрытия с третьей сферой $\tilde{\gamma}_i = 0$ для $i = 2, 5$, но их приходится учитывать в графите.

В отсутствие магнитного поля спектр можно найти численно с помощью компьютера (рис. 2) и исследовать аналитически [13], а также изучить экспериментально особенности проводимости, связанные с переходами между зонами. В гамильтониане (8) имеется также параметр U , который важен в случае бислоя, когда к нему приложено постоянное напряжение в направлении главной оси. При любом значении квазиимпульса находим четыре собственных значения энергии, которые будем нумеровать нижним индексом $s = 1, 2, 3, 4$. При $k_x = k_y = 0$, т.е. на самой линии КН, и $U = 0$ имеется двукратное вырождение, $\varepsilon_2 = \varepsilon_3$, что является следствием симметрии. Во внешнем электрическом поле U в спектре появляется щель, с чем и связан в основном интерес к бислою. Кроме того, простое квадратичное поведение в

зонах, касающихся друг друга, приобретает форму "мексиканской шляпы". Есть ещё одна деталь, которую надо иметь в виду. Дело в том, что две точки, К и К', которые переходят одна в другую при поворотах и отражении $x \rightarrow -x$, не являются эквивалентными в бислюе: отражение соответствует перестановке $k_+ \leftrightarrow k_-$ в гамильтониане (1). Чтобы не заниматься перебором очевидных возможностей, ограничимся описанием спектра графита при $U = 0$ и в конце обратимся к бислюю.

Задача усложняется и становится гораздо более интересной при наличии магнитного поля. В магнитном поле B , параллельном главной оси, проекции квазиимпульса $k_{x,y}$ являются операторами с перестановочным соотношением $\{\hat{k}_+, \hat{k}_-\} = -2e\hbar B/c$, поэтому удобно ввести операторы рождения и уничтожения a^+ , a , изменяющие индекс Ландау на единицу:

$$\hat{k}_+ = \sqrt{\frac{2|e|\hbar B}{c}} a, \quad \hat{k}_- = \sqrt{\frac{2|e|\hbar B}{c}} a^+.$$

Для графена с помощью (1) находится явное выражение для спектра:

$$\varepsilon_{1,2} = \mp v \sqrt{\frac{2|e|\hbar B n}{c}},$$

где $n = 0, 1, \dots$

Собственные решения для матричного гамильтониана (8) будем искать в виде столбца

$$\psi_{sn}^\alpha(x) = \begin{Bmatrix} C_{sn}^1 \varphi_{n-1}(x) \\ C_{sn}^2 \varphi_n(x) \\ C_{sn}^3 \varphi_{n-1}(x) \\ C_{sn}^4 \varphi_{n-2}(x) \end{Bmatrix}, \quad (9)$$

где $\varphi_n(x)$ — ортогональные функции Эрмита с собственным числом Ландау $n \geq 0$. При заданном n состояния нумеруются зонным индексом $s = 1, 2, 3, 4$; мы используем обозначение $|sn\rangle$ для состояний, отсчитывая s по-прежнему снизу. Для краткости мы опускаем стандартные экспоненты, появляющиеся в калибровке Ландау, и будем учитывать вырождение по соответствующей компоненте квазиимпульса лишь в конечных результатах.

Легко увидеть, что если пренебречь членами с γ_3 , приводящими к тригональному искажению спектра, то каждая строка гамильтониана (8) оказывается пропорциональной определённой функции Эрмита, которую таким образом можно сократить. Приходим к задаче для собственных векторов C_{sn} и собственных значений:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\gamma}_5 - \varepsilon & \omega_c \sqrt{n} & \tilde{\gamma}_1 & \omega_4 \sqrt{n-1} \\ \omega_c \sqrt{n} & \tilde{\gamma}_2 - \varepsilon & \omega_4 \sqrt{n} & 0 \\ \tilde{\gamma}_1 & \omega_4 \sqrt{n} & \tilde{\gamma}_5 - \varepsilon & \omega_c \sqrt{n-1} \\ \omega_4 \sqrt{n-1} & 0 & \omega_c \sqrt{n-1} & \tilde{\gamma}_2 - \varepsilon \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} C_{sn}^1 \\ C_{sn}^2 \\ C_{sn}^3 \\ C_{sn}^4 \end{Bmatrix} = 0, \quad (10)$$

где $\omega_c = v\sqrt{2|e|\hbar B}/c$, $\omega_4 = \tilde{\gamma}_4 \omega_c / \gamma_0$.

При $n = 0$, как видно из (9), собственный вектор имеет одну ненулевую компоненту, $C_0 = (0, 1, 0, 0)$, и только одно (а не четыре) значение энергии

$$\varepsilon(n=0) = \tilde{\gamma}_2, \quad (11)$$

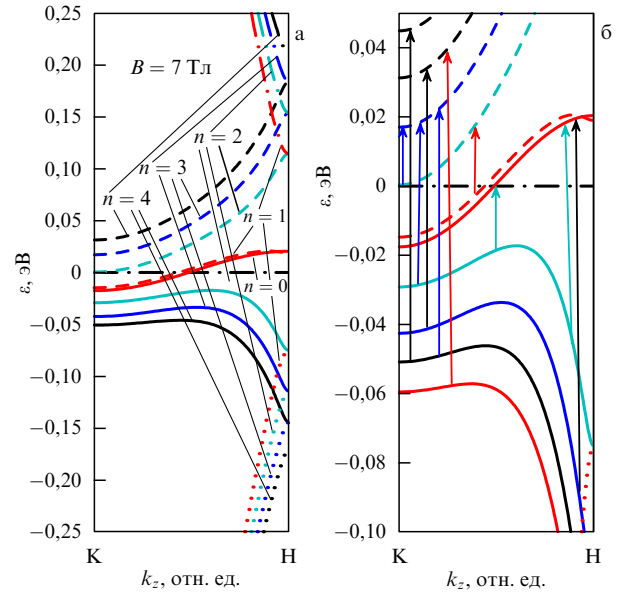


Рис. 3. (См. в цвете онлайн.) (а) Уровни Ландау ε_{sn} от $n = 0$ до $n = 4$ в четырёх зонах, $s = 1, 2, 3, 4$ (пунктирные сплошные, штриховые и штрихпунктирные кривые соответственно) в зависимости от проекции импульса k_z вдоль линии КН зоны Бриллюэна графита ($K = 0$, $H = \pi/2d_0$) для магнитного поля $B = 7$ Тл; зонные параметры приведены в таблице. (б) Увеличенный фрагмент рис. а для зон $s = 2, 3$.

зависящее от k_z и пересекающее уровень Ферми так, что электроны появляются в окрестности точки К (вплоть до уровня Ферми), а дырки — в окрестности точки Н (рис. 3).

При $n = 1$ из уравнений (9) видим, что четвёртую компоненту надо положить равной нулю, $C_{s1}^4 = 0$, и из первых трёх уравнений можно определить три уровня (а не четыре). Средний из них уровень $|21\rangle$ очень близок к $|10\rangle$, и в области k_z , где выполняется условие $\gamma_1/\cos z \gg \gamma_2$ и где находятся электроны, этот уровень имеет энергию

$$\varepsilon_2(n=1) = \tilde{\gamma}_2 - 2 \frac{\omega_c^2 \tilde{\gamma}_4}{\tilde{\gamma}_1 \gamma_0}. \quad (12)$$

Для $n \geq 2$ имеются четыре собственных значения при любом k_z . Энергии двух близких уровней с $s = 2, 3$ в той области, $\gamma_1/\cos z \gg \gamma_2$, где находятся электроны, выражаются как

$$\varepsilon_{2,3}(n) = \tilde{\gamma}_2 - \frac{\omega_c^2 \tilde{\gamma}_4}{\tilde{\gamma}_1 \gamma_0} (2n-1) \mp \frac{\omega_c^2}{\tilde{\gamma}_1} \sqrt{n(n-1)}. \quad (13)$$

4.1. Влияние тригонального искажения на спектр в магнитном поле

Несмотря на малость отношения γ_3/γ_0 , влияние тригонального искажения является существенным из-за вырождения, которое имеется на линиях КН. К настоящему времени предложено несколько способов учёта тригонального искажения. Среди них — два аналитических: теория возмущений [14] и квазиклассическое квантование [15]. Теорию возмущений для матричного гамильтониана удобно строить, рассматривая его функцию Грина

$$G_0^{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x') = \sum_{sn} \frac{\psi_{sn}^\alpha(x) \psi_{sn}^{*\beta}(x')}{\varepsilon - \varepsilon_{sn}}, \quad (14)$$

где верхние индексы принимают четыре значения в соответствии с матрицей гамильтониана, x и x' — координатные переменные.

Во втором приближении получаем поправку

$$\int dx_1 dx_2 G_0^{24}(x, x_1) V^{42}(x_1) G_0^{22}(x_1, x_2) V^{24}(x_2) G_0^{4\beta}(x_2, x')$$

и такое же слагаемое с перестановкой индексов $2 \leftrightarrow 4$. Матричные элементы возмущения V , нумеруемые верхними индексами, легко вычисляются с помощью функций (9), и для поправки к функции Грина (14) получаем выражение

$$\left(\frac{\omega_c \tilde{\gamma}_3}{\gamma_0} \right)^2 \sum_{s'sn} \frac{(n-2) |C_{sn}^4 C_{s',n-3}^2|^2 \psi_{sn}^\alpha(x) \psi_{sn}^{*\beta}(x')}{(\varepsilon - \varepsilon_{sn})(\varepsilon - \varepsilon_{s',n-3})(\varepsilon - \varepsilon_{sn})}. \quad (15)$$

Поправка (15) велика вблизи полюсов функции Грина. Поэтому для ε , близкого к ε_{sn} , мы можем во второй множитель знаменателя в (15) подставить ε_{sn} вместо ε . Таким образом, функция Грина вместе с поправкой имеет структуру

$$\frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{sn}} + \frac{\delta}{(\varepsilon - \varepsilon_{sn})^2},$$

что с точностью до членов второго порядка по δ можно представить как

$$\frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{sn} - \delta}.$$

Получившееся из (15) выражение позволяет записать поправку к собственному значению:

$$\delta \varepsilon_s(n) = \left(\frac{\omega_c \tilde{\gamma}_3}{\gamma_0} \right)^2 \sum_{s'} \left[\frac{(n-2) |C_{sn}^4 C_{s',n-3}^2|^2}{\varepsilon_s(n) - \varepsilon_{s'}(n-3)} + \frac{(n+1) |C_{sn}^2 C_{s',n+3}^4|^2}{\varepsilon_s(n) - \varepsilon_{s'}(n+3)} \right], \quad (16)$$

где члены с $n-3 < 0$ должны быть опущены.

Формула (16) содержит параметр данной теории возмущений. Заметим, что расстояние между невозмущёнными уровнями можно оценить, например, с помощью (13). Таким образом находим этот безразмерный параметр:

$$\left(\frac{\tilde{\gamma}_3 \tilde{\gamma}_1}{\gamma_0 \omega_c} \right)^2,$$

который оказывается меньше единицы в полях $B \gg 1$ Тл. Выпишем также уровень $|10\rangle$ вместе с поправкой:

$$\varepsilon_1(n=0) = \tilde{\gamma}_2 + \left(\frac{\omega_c \tilde{\gamma}_3}{\gamma_0} \right)^2 \sum_{s'} \frac{|C_{s'3}^4|^2}{\tilde{\gamma}_2 - \varepsilon_{s'}(3)}. \quad (17)$$

Зонная структура в магнитном поле представлена на рис. 3. Сравнение показывает, что наши выражения (16) и (17) для уровней дают те же результаты, что и численный метод обрезания матрицы бесконечного ранга [16]. Заметим, что полученные выражения применимы и к графеновому бислою, надо лишь положить $\gamma_2 = \gamma_5 = 0$ и $\tilde{\gamma}_i = \gamma_i$ для $i = 1, 3, 4$ и учесть поле U .

Квазиклассическое квантование, которое мы не будем здесь описывать, удобно в случае слабых магнитных полей и относительно чистых материалов с малой частотой столкновений, когда возможно наблюдение квантовых осцилляций.

5. Коэффициент прохождения и магнитооптические эффекты в графеновых слоях

При наличии магнитного поля принципиально новым является возникновение холловской компоненты проводимости, которую принято обозначать $\sigma_{xy}(\omega)$. Холловская проводимость нарушает вращательную симметрию вокруг главной оси, что приводит к эффектам Фарадея и Керра — повороту плоскости поляризации света при его прохождении и отражении. Электронные переходы теперь возможны как между зонными состояниями s , так и между различными уровнями Ландау n , поэтому появляются резонансные знаменатели $\Delta_{ss'n} = \varepsilon_{sn} - \varepsilon_{s',n+1}$. Техника вычислений коррелятора, определяющего ток и выражающегося через произведение двух функций Грина, остаётся в принципе такой же, как и в отсутствие магнитного поля.

Вычисления [13] приводят к следующему выражению для двух компонент проводимости графита в бесстолкновительном случае (когда частота столкновений Γ много меньше расстояния между уровнями):

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{xx}(\omega) \\ i\sigma_{xy}(\omega) \end{array} \right\} = i\sigma_0 \frac{4\omega_c^2}{\pi^2} \sum_{n,s,s'} \int_0^{\pi/2} dz \frac{\Delta f_{ss'n}}{\Delta_{ss'n}} |d_{ss'n}|^2 \times \\ \times [(\omega + i\Gamma + \Delta_{ss'n})^{-1} \pm (\omega + i\Gamma - \Delta_{ss'n})^{-1}], \quad (18)$$

где интегрирование проводится по половине зоны Бриллюэна, $0 < z < \pi/2$; в случае графена и бислоя оно отсутствует. Здесь $\Delta f_{ss'n} = f(\varepsilon_{s',n+1}) - f(\varepsilon_{sn})$ — разность функций распределения с учётом сдвига уровней из-за тригонального искажения, а матричный элемент дипольного момента

$$d_{ss'n} = C_{sn}^2 C_{s'n+1}^1 + C_{sn}^3 C_{s'n+1}^4 + \frac{\tilde{\gamma}_4}{\gamma_0} (C_{sn}^1 C_{s'n+1}^4 + C_{sn}^2 C_{s'n+1}^3)$$

выражается через компоненты волновой функции (9). Учтённые наиболее интенсивные электронные переходы удовлетворяют правилу отбора $\Delta n = 1$.

Кроме того, следует принять во внимание перенормировку дипольного момента, иначе говоря электрон-фотонной вершины, из-за тригонального искажения. Эта перенормировка приводит к дополнительным слабым линиям, получаемым заменой в (18) матричного элемента величиной

$$d_{ss'n} = \frac{\tilde{\gamma}_3}{\gamma_0} C_{sn}^2 C_{s'n+2}^4$$

и заменой $n+1 \rightarrow n+2$ с новым правилом отбора $\Delta n = 2$.

Результаты вычислений показаны на рис. 4, 5. Угол Керра достигает гигантской величины, более чем на порядок превышающей типичные для полупроводников значения. Осцилляции угла связаны с определёнными электронными переходами, и положение его максимумов (так же как и минимумов отражения) определяется либо границами уровней Ландау в точках К и Н, либо

Таблица. Параметры гамильтониана (8), связь их с обозначениями Слончевского–Вейса (SW) и числовые значения в [мэВ], полученные в экспериментальных работах [17, 18]

Гамильтониан (8)	γ_0	γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5	Δ	ε_F
	3050	360	-10,2	270	-150	-1,5	16	-4,1
SW [1]	γ_0	γ_1	$2\gamma_2$	γ_3	$-\gamma_4$	$2\gamma_5$	$\Delta + 2(\gamma_2 - \gamma_5)$	$2\gamma_2 + \varepsilon_F$
Mendez et al. [17]	3160	390	-20	276	44	38	8	-24
Doezema et al. [18]	3120	380	-21	315	120	-3	-2	—

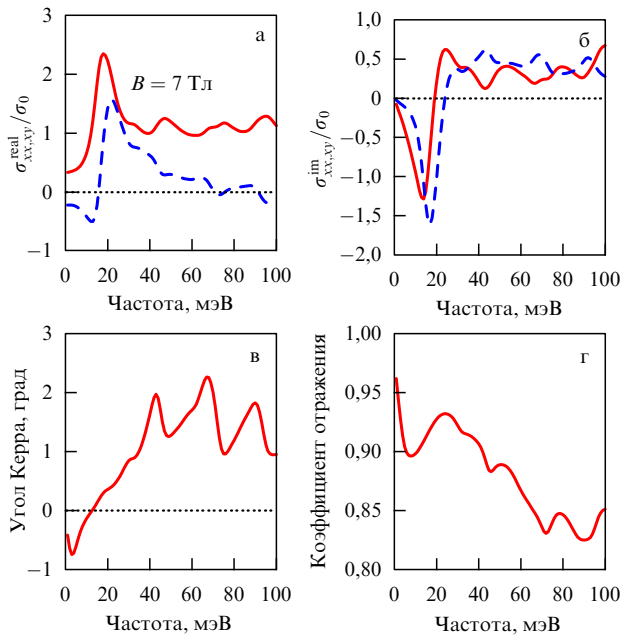


Рис. 4. Вещественная (а) и мнимая (б) части продольной (σ_{xx}) (сплошная кривая) и холловской (σ_{xy}) (штриховая кривая) динамической проводимости графита. Угол Керра (в) и коэффициент отражения (г) в магнитном поле $B = 7$ Тл при температуре $T = 0,1$ мэВ; электронная частота релаксации $\Gamma = 3,5$ мэВ.

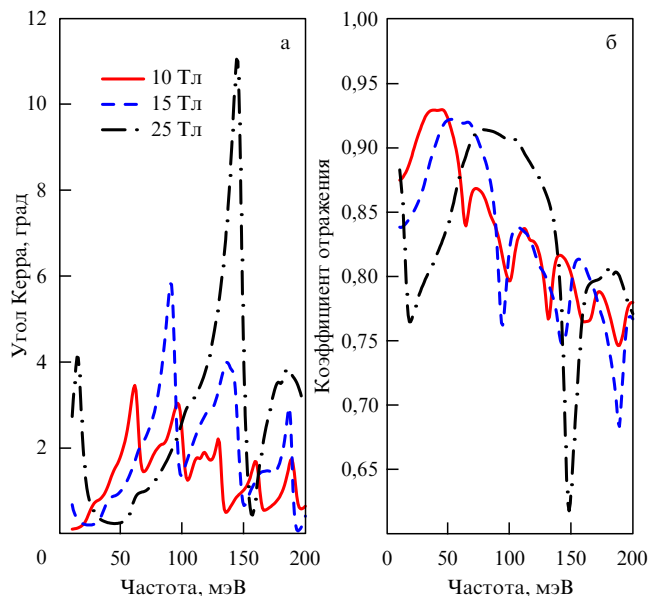


Рис. 5. Угол Керра (а) и коэффициент отражения от графита (б) в сильных магнитных полях 10, 15 и 25 Тл в зависимости от частоты электромагнитной волны.

пересечением этих уровней с уровнем Ферми (рис. 3б). Следует отметить, что дисперсия уровней влияет на положение оптических особенностей. Мы использовали параметры гамильтониана (8), приведённые в таблице. Их значения (см. также [19, 20]) отличаются от полученных в различных экспериментальных работах лишь потому, что нами принята иная форма записи гамильтониана, чем у Слончевского–Вейса (3-я строка таблицы). В экспериментальных значениях параметров γ_4 , γ_5 и Δ имеется значительный разброс — наши значения близки к полученным в работе [17]. Заметим, что в сильных магнитных полях ферми-уровень повышается до $\varepsilon_F \approx -1$ мэВ от значения, приведённого в таблице для слабых полей.

6. Заключение

Насколько нам известно, измерения углов Керра и Фарадея на графеновых слоях [21] проводились до настоящего времени лишь в Университете Женевы, и мы признательны А. Кузменко и J. Levallois за полезные дискуссии и предоставленную возможность ознакомиться с экспериментальными результатами до их опубликования.

Работа поддержана РФФИ (грант 10-02-00193-а), а также грантом SCOPES IZ73Z0_128026 Национального научного фонда Швеции и грантом 246937 программы SIMTECH (New Century of Superconductivity: Ideas, Materials and Technologies).

Список литературы

- Slonczewski J C, Weiss P R *Phys. Rev.* **109** 272 (1958)
- Elias D C et al. *Nature Phys.* **7** 701 (2011)
- Абрикосов А А, Бенеславский С Д *ЖЭТФ* **59** 1280 (1970) [Abrikosov A A, Beneslavskii S D *Sov. Phys. JETP* **32** 699 (1971)]
- Mishchenko E G *Phys. Rev. Lett.* **98** 216801 (2007)
- Falkovsky L A, Varlamov A A *Eur. Phys. J. B* **56** 281 (2007)
- Gusynin V P, Sharapov S G, Carbotte J P *Phys. Rev. Lett.* **96** 256802 (2006)
- Gusynin V P, Sharapov S G, Carbotte J P *Phys. Rev. B* **75** 165407 (2007)
- Li Z Q et al. *Nature Phys.* **4** 532 (2008)
- Falkovsky L A, Pershoguba S S *Phys. Rev. B* **76** 153410 (2007)
- Kuzmenko A B et al. *Phys. Rev. Lett.* **100** 117401 (2008)
- Nair R R et al. *Science* **320** 1308 (2008)
- Mak K F et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 196405 (2008)
- Falkovsky L A *Phys. Rev. B* **82** 073103 (2010)
- Фальковский Л А *Письма в ЖЭТФ* **94** 783 (2011) [Falkovsky L A *JETP Lett.* **94** 723 (2011)]
- Ozerin A Yu, Falkovsky L A, arXiv:1203.0157
- Nakao K J. *Phys. Soc. Jpn.* **40** 761 (1976)
- Doezema R E et al. *Phys. Rev. B* **19** 4224 (1979)
- Mendez E, Misu A, Dresselhaus M S *Phys. Rev. B* **21** 827 (1980)
- Kuzmenko A B et al. *Phys. Rev. B* **80** 165406 (2009)
- Brandt N B, Chudinov S M, Ponomarev Ya G *Semimetals I. Graphite and its Compounds* (Amsterdam: Elsevier, 1988)
- Crassee I et al. *Nature Phys.* **7** 48 (2011)

PACS numbers: 65.80.Ck, 72.15.Jf, 72.20.Pa, 72.80.Vp, 81.05.ue
DOI: 10.3367/UFNr.0182.201211j.1229

Аномальные термоэлектрические и термомагнитные свойства графена

А.А. Варламов, А.В. Кавокин,
И.А. Лукьянчук, С.Г. Шарапов

1. Введение

В настоящей статье представлены результаты недавних исследований некоторых аномалий термоэлектрических и термомагнитных свойств графена. Так, в разделе 3 показано, что наличие щели в дираковском спектре (возможность существования которой в определённых условиях активно обсуждается в литературе) при приближении химического потенциала к её краю приводит к появлению характерного пика в термоэдс. Высота этого пика может на порядок превосходить и без того большую величину термоэдс графена. Обнаруженный гигантский эффект связан с возникновением при приближении химического потенциала к краю щели нового канала рассеяния квазичастиц на примесях со временем релаксации, существенно зависящим от энергии. Рассмотрение, основанное на формализме Кубо, воспроизводит известные результаты для бесщелевого графена, однако демонстрирует неприменимость простой формулы Мотта в обсуждаемом случае.

В разделе 4 обсуждается специфика квантовых осцилляций коэффициента Нернста (КН), имеющих место в графене и графите при приложении достаточно сильных магнитных полей. Показано, как по характеру подобных осцилляций можно судить о характере спектра квазичастиц в образце.

2. Из истории термоэлектричества

Контроль тепловых потоков и минимизация соответствующих потерь являются важными факторами при проектировании современных элементов нанoeлектроники, в том числе основанной на применении графена [1]. Эксперименты показывают [2], что термоэлектрический эффект является ответственным за изменение температуры в области контактов вплоть до 30 % её величины и, таким образом, может играть существенную роль в охлаждении контактов. Измеряемая термоэдс графена достигает при комнатных температурах величины $k_B/e \sim 100$ мкВ К⁻¹ (здесь k_B — постоянная Больцмана, $-e < 0$ — заряд электрона).

Изучение термоэлектрических и термомагнитных явлений имеет двухвековую историю. Так, термоэлектри-

ческий эффект, заключающийся в возникновении электрического тока в цепи, состоящей из двух разных металлов, в которых поддерживаются различные температуры, был обнаружен в 1821 г. эстонско-немецким учёным Томасом Йоханом Зеебеком. Количественно эффект Зеебека характеризуется величиной дифференциальной термоэдс (коэффициент Зеебека) — возникающей в неоднородно нагретом проводнике термоэлектродвижущей силой, отнесённой к соответствующей разности температур:

$$S_{xx} = - \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{\Delta V}{\Delta T} = \frac{E_x}{\nabla_x T}.$$

Обычно термоэдс металлов невелика (около 10⁻⁸ В К⁻¹), однако в легированных полупроводниках и полуметаллах эта величина намного больше.

Более чем через столетие [3] англичанин Невилл Мотт нашёл важное соотношение между дифференциальной термоэдс и логарифмической производной продольной электрической проводимости металла $\sigma_{xx}(\mu, T)$:

$$S_{xx}(\mu, T) = - \frac{\pi^2}{3e} k_B T \frac{d}{d\mu} [\ln \sigma_{xx}(\mu, T = 0)], \quad (1)$$

где μ — химический потенциал носителей заряда, T — температура. Сегодня эта формула является базовой при анализе экспериментов, связанных с термоэлектричеством, однако известны многие аномальные ситуации, в которых поведение термоэдс не описывается формулой Мотта. Это и возрастание термоэдс металла при температурах, близких к температуре Кондо, и её аномалии при электронных топологических переходах, осцилляции в сильных магнитных полях. Одной из причин несостоятельности формулы Мотта является наличие, обусловленное теми или иными причинами, существенной зависимости времени релаксации носителей от энергии.

Среди множества известных термомагнитных явлений наиболее часто обсуждаются эффекты Нернста и Нернста–Эттингсгаузена, обнаруженные австрийскими учёными Альбертом фон Эттингсгаузенем и Вальтером Нернстом в 1886 г. Эффект Нернста в металле [4], являющийся тепловым аналогом эффекта Холла, заключается в возникновении электрического поля E_y , нормального ко взаимно перпендикулярным магнитному полю H ($\parallel z$) и градиенту температуры $\nabla_x T$. При этом предполагается, что все электрические цепи разорваны: $J_x = J_y = 0$, а тепловой поток вдоль оси y отсутствует (условия адиабатичности). Количественно эффект характеризуется коэффициентом Нернста:

$$v = \frac{E_y}{(-\nabla_x T) H}.$$

КН может изменяться, в зависимости от материала, в пределах нескольких порядков, от 7 мВ К⁻¹ Тл⁻¹ в случае висмута и вплоть до 10⁻⁵ мВ К⁻¹ Тл⁻¹ в "хороших" металлах [5].

Эффект Нернста–Эттингсгаузена является иной экспериментальной реализацией того же эффекта Нернста: через образец, помещённый в магнитное поле (направленное по оси z), пропускается электрический ток (вдоль оси y). При этом одновременно вдоль оси x возникает градиент температуры. Ниже мы не будем различать эти эффекты.

Микроскопическая природа эффекта Нернста оставалась неясной вплоть до 1948 г. — до тех пор пока

А.А. Варламов. Национальный исследовательский технологический университет "Московский институт стали и сплавов", РФ;

University of Rome "Tor Vergata", Italy

E-mail: varlamov@ing.uniroma2.it

А.В. Кавокин. Институт теоретической физики им. Л.Д. Дандау

РАН, РФ; University of Southampton, UK,

Санкт-Петербургский государственный университет, РФ

И.А. Лукьянчук. Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау

РАН, РФ; University of Picardie Jules Verne, France

С.Г. Шарапов. Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины, Украина

Е. Зондхеймер [6] не нашёл, используя кинетическое уравнение, выражение для КН вырожденного электронного газа с примесями, связав КН с производной холловского угла $\theta_H = \sigma_{xy}/\sigma_{xx}$ по энергии:

$$v(T) = -\frac{\pi^2}{3} \frac{cT}{eH_z} \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}} \right) = -\frac{\pi^2 T}{3m} \frac{d\tau(\varepsilon)}{d\varepsilon} \Big|_{\varepsilon=\mu}, \quad (2)$$

что позволило установить связь между этими двумя эффектами, а также сделало эффект Нернста важным инструментом в исследованиях характера рассеяния носителей заряда в полупроводниках. Здесь m — масса носителя заряда, $\tau(\varepsilon)$ — зависящее от энергии время релаксации.

В рамках теории Зондхеймера коэффициент v оказывается постоянным в слабых полях и убывает как H^{-2} в области достаточно сильных полей, когда циклотронная частота ω_c превышает величину τ^{-1} , обратную времени рассеяния. В 1964 г. Ю.Н. Образцов [7] обратил внимание на важность учёта при обсуждении эффекта Нернста так называемых токов намагниченности (т.е. электрических токов, возникающих вследствие неоднородной намагниченности образца).

В разделах 3 и 4 мы представим результаты двух недавних исследований [8, 9] необычных термоэлектрического и термомагнитного эффектов в такой "горячей" области физики конденсированного состояния, как изучение свойств графена и связанных с ним систем.

3. Термоэлектрический эффект в графене со щелью в спектре

Результаты экспериментов [10–13] по измерению термоэлектрического транспорта в графене в основном можно теоретически объяснить с помощью формулы Мотта. Тем не менее эти эксперименты показали, что формула Мотта (1) даёт результаты, не соответствующие экспериментальным данным, когда при высоких температурах μ оказывается вблизи точки Дирака, особенно в образцах графена с высокой подвижностью [13]. Теоретический анализ [14–16] показывает, что такое несоответствие связано с нарушением условий применимости формулы Мотта, которые имеют вид $T \ll |\mu|$ и/или $T \ll \zeta$ (где ζ — характерный масштаб энергий, при котором проводимость $\sigma_{xx}(\mu, T=0)$ изменяется вблизи поверхности Ферми).

Ниже мы покажем, что термоэдс в графене, имеющая уже достаточно большое значение, может быть ещё увеличена почти на порядок за счёт открытия щели Δ в спектре квазичастичных возбуждений. Это приводит к возникновению нового канала рассеяния квазичастиц, причём время релаксации сильно зависит от энергии, что приводит к возникновению гигантского пика термоэдс при приближении химического потенциала к краю щели. Такая картина очень похожа на хорошо известную аномалию термоэдс вблизи электронного топологического перехода (см. обзор [17]).

Отметим, что эксперименты [18, 19] указывают на наличие щели в спектре квазичастичных возбуждений в графене вблизи дираковской точки, связанное, по-видимому, с влиянием подложки. Для однослойного графена вопрос о наличии щели до конца не изучен. Поэтому полученные нами результаты позволяют предложить измерение термоэдс в качестве чувствительного метода обнаружения щели.

3.1. Рассеяние электронов в графене со щелью

В импульсном представлении гамильтониан графена имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int_{\text{BZ}} \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \Upsilon_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{p}) [\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{p}) - \mu \hat{\tau}_0] \Upsilon_{\sigma}(\mathbf{p}), \quad (3)$$

где

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{p}) = \hat{\tau}_+ \phi(\mathbf{p}) + \hat{\tau}_- \phi^*(\mathbf{p}) + \Delta \hat{\tau}_3,$$

$\hat{\tau}_0, \hat{\tau}_3$ и $\hat{\tau}_{\pm} = (\hat{\tau}_1 \pm i\hat{\tau}_2)/2$ — матрицы Паули, действующие в пространстве подрешёток на спиноры $\Upsilon_{\sigma}(\mathbf{p})$ и $\Upsilon_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{p}) = (a_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{p}), b_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{p}))$ с операторами рождения (уничтожения) электронов $a_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{p}), b_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{p})$ ($a_{\sigma}(\mathbf{p}), b_{\sigma}(\mathbf{p})$), которые соответствуют подрешёткам А и В, σ — спиновый индекс; интегрирование проводится по зоне Бриллюэна (BZ). В рассматриваемом случае отвечающая за дисперсию комплексная функция $\phi(\mathbf{p})$ вблизи двух независимых К-точек зоны Бриллюэна может быть выбрана в виде $\xi \equiv |\phi(\mathbf{p})| = \hbar v_F |\mathbf{p}|$, где v_F — скорость Ферми, а волновой вектор $\mathbf{p}$ отсчитывается от соответствующей К-точки. Наличие щели Δ нарушает эквивалентность подрешёток А и В, а спектр вблизи К-точек принимает вид $E(\mathbf{p}) = \pm(\hbar^2 v_F^2 \mathbf{p}^2 + \Delta^2)^{1/2} - \mu$.

Рассеяние на примесях рассмотрено с помощью техники Абрикосова–Горькова в рамках самосогласованного борновского приближения. При этом потенциал рассеяния выбран таким, чтобы можно было не учитывать рассеяния между разными долинами, тогда как в пределах одной долины он считается постоянным, равным $u(\mathbf{0})$. В результате мы получили следующее выражение для рассеяния на примесях:

$$\Gamma(\varepsilon) = \Gamma_0 \left(\frac{|\varepsilon + \mu|}{|\mu|} + \frac{\Delta^2}{|\varepsilon + \mu||\mu|} \right) \theta((\varepsilon + \mu)^2 - \Delta^2), \quad (4)$$

где $\Gamma_0 = 2\hbar/\tau_0$, τ_0 — характерное время релаксации, $\tau_0^{-1} = n_i |u(\mathbf{0})|^2 |\mu| / (4\hbar^3 v_F^2)$ [20], n_i — концентрация носителей; θ — функция Хевисайда. В представленных ниже результатах мы используем значение $\Gamma_0 = 20$ К, не учитывая его концентрационной зависимости. Из уравнения (4) видно, что при $(\varepsilon + \mu)^2 < \Delta^2$ рассеяние отсутствует. Тем не менее следует принять во внимание, что некоторые неучтённые в модели процессы приводят к конечному времени релаксации ниже края щели. При численных расчётах это учитывается добавлением к $\Gamma(\varepsilon)$ малого остаточного рассеяния γ_0 . Окончательные результаты практически не зависят от величины γ_0 .

3.2. Термоэдс в графене со щелью в спектре

С помощью формулы Кубо можно получить следующие выражения для электрической проводимости и термоэлектрического коэффициента:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{xx} \\ \beta_{xx} \end{array} \right\} = \frac{e^2}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon \mathcal{A}(\varepsilon, \Gamma(\varepsilon), \Delta)}{2T \cosh^2[\varepsilon/(2T)]} \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ \frac{\varepsilon}{eT} \end{array} \right\}, \quad (5)$$

где при ненулевой щели Δ функция $\mathcal{A}$ имеет вид [21, 22]

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\varepsilon, \Gamma(\varepsilon), \Delta) = & \frac{1}{2\pi^2} \left[1 + \frac{(\mu + \varepsilon)^2 - \Delta^2 + \Gamma^2(\varepsilon)}{2|\mu + \varepsilon| \Gamma(\varepsilon)} \times \right. \\ & \left. \times \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \frac{\Delta^2 + \Gamma^2(\varepsilon) - (\mu + \varepsilon)^2}{2|\mu + \varepsilon| \Gamma(\varepsilon)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

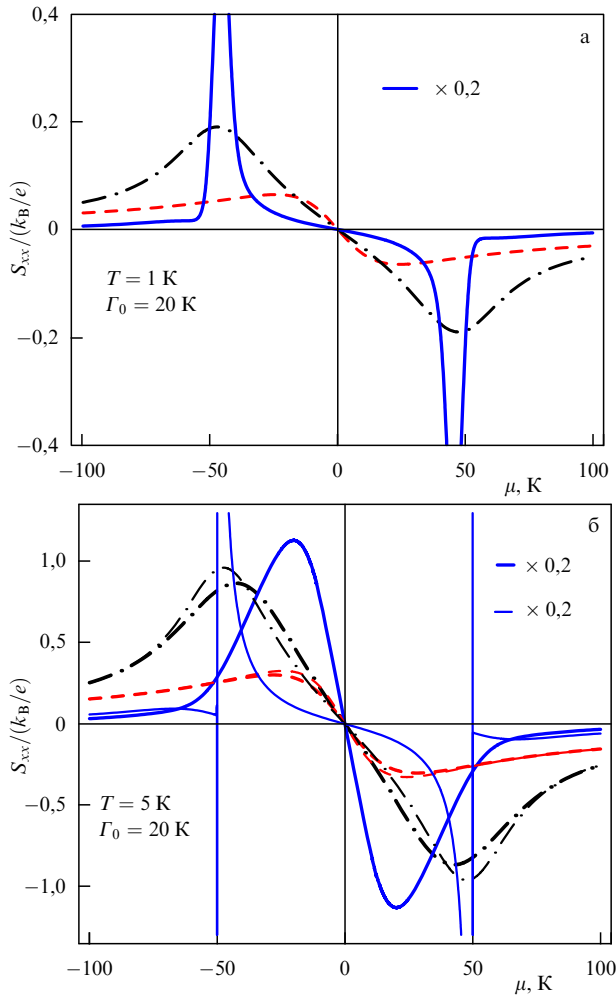


Рис. 1. (См. в цвете онлайн.) Термоэдс S_{xx} в единицах k_B/e как функция химического потенциала μ при (а) $T = 1$ К и (б) $T = 5$ К. Штриховая кривая соответствует независимому от энергии $\Gamma = \Gamma_0$ и $\Delta = 0$, штрихпунктирная жирная кривая — $\Gamma = \Gamma_0$ и $\Delta = 50$ К, сплошная жирная кривая — зависящему от энергии $\Gamma(\varepsilon)$ и $\Delta = 50$ К. Зависимости, представленные сплошными кривыми, умножены на 0,2. Тонкие кривые на рис. б получены с помощью формулы Мотта.

При $\Delta = 0$ уравнение (6) упрощается до вида, рассмотренного в работах [14, 16]. В этом случае, положив $\Gamma(\varepsilon) = \Gamma_0 = \text{const}$, при условии $|\mu| \gg T$, Γ_0 находим $\sigma_{xx} = e^2 |\mu| / (2\pi\hbar\Gamma_0)$ и $\beta_{xx} = \pi e T \text{sgn } \mu / (6\hbar\Gamma_0)$, в согласии с работой [22]. Тогда термоэдс $S_{xx} = -\beta_{xx} / \sigma_{xx}$ оказывается такой же, как и в обычных металлах, $S_{xx} = -(\pi^2/3e) T/\mu$, и совпадает с величиной, которая непосредственно следует из формулы Мотта (1).

Зависимость $S_{xx}(\mu)$ при $T = 1$ К и $T = 5$ К показана на рис. 1. Жирные штриховые кривые соответствуют случаю $\Delta = 0$, $\Gamma(\varepsilon) = \Gamma_0$, когда $\sigma_{xx}(\mu) \propto |\mu|$ и $S_{xx}(\mu) \propto 1/\mu$ при больших $|\mu|$. Выражения (5) и (6) также позволяют воспроизвести случай с ненулевой щелью и независимым от энергии $\Gamma(\varepsilon) = \Gamma_0$ [21, 22]. Соответствующие зависимости представлены жирными штрихпунктирными кривыми, вычисленными при $\Delta = 50$ К.

Наш основной результат, показанный жирными сплошными кривыми, получен для зависящего от энергии $\Gamma(\varepsilon)$, которое задаётся формулой (4), при $\Delta = 50$ К. Подчеркнём, что соответствующие значения $S_{xx}(\mu)$ были уменьшены в пять раз, для того чтобы показать их на фоне других кривых. Это означает, что пиковые значения

термоэдс по крайней мере в пять раз больше, чем величины термоэдс, полученные в случае $\Gamma(\varepsilon) = \text{const}$.

Существенного усиления термоэдс в случае зависящего от энергии $\Gamma(\varepsilon)$ можно ожидать даже исходя из формулы Мотта (1). Тем не менее формула (1) не может быть использована для количественного описания. Действительно, тонкие кривые на рис. 1б получены с использованием электрической проводимости при нулевой температуре $\sigma(\mu, T = 0) = (2e^2/\hbar) \mathcal{A}(0, \Gamma(0), \Delta)$ и формулы Мотта (1), тогда как жирные кривые — с использованием формулы Кубо как для σ_{xx} , так и для β_{xx} . Видно, что в случае $\Delta = 0$ и $\Gamma(\varepsilon) = \text{const}$ согласие между формулами Кубо и Мотта является очень хорошим, а при $T = 1$ К становится идеальным, поэтому результаты для формулы Мотта на рис. 1а не приведены. В то же время из рис. 1б видно, что в случае конечного значения Δ и $\Gamma(\varepsilon) = \text{const}$ расхождение результатов, полученных с помощью формул Кубо и Мотта, уже имеется, особенно вблизи $|\mu| = \Delta$. Наконец, в случае зависящего от энергии $\Gamma(\varepsilon)$ формула Мотта неприменима.

Особенность термоэдс заключается в её чувствительности к производной обратного времени рассеяния. В связи с этим наличие тета-функции в (4) сильно влияет на зависимость $S(\mu)$ вблизи $|\mu| \approx \Delta$. Здесь стоит напомнить ещё раз об очевидной аналогии между транспортом в графене со щелью и транспортом в металле вблизи электронного топологического перехода. Действительно, вблизи критического значения химического потенциала $\mu = \mu_c$, где изменяется связность ферми-поверхности, время релаксации квазичастиц становится существенно зависящим от энергии, что приводит к появлению хорошо известных изломов проводимости и пиков термоэдс [17].

4. Гигантские осцилляции коэффициента Нернста в графене

Гигантские осцилляции КН впервые были обнаружены экспериментально в 1959 г. Бергером с соавторами [25] на образцах цинка. Авторы работы [25] объяснили это явление пересечением уровнями Ландау химического потенциала. Как и в случае осцилляций де Гааза–ван Альфена намагниченности и Шубникова–де Гааза проводимости, поля, соответствующие осцилляциям КН, определяются условием Лифшица–Онсагера [23]:

$$S(\mu) = (k + \gamma_\sigma) 2\pi\hbar \frac{eH_{k\sigma}}{c}, \quad (7)$$

где $S(\mu)$ — площадь сечения ферми-поверхности, соответствующего орбитальному движению электронов при $p_z = 0$, k — целое число, $\gamma_\sigma = \gamma + 1/2 (m^*/m) \sigma$ с $\sigma = \pm 1$, $m^* = (1/2\pi) dS/d\mu$ — циклотронная масса электрона [23].

Совсем недавно эффект Нернста в графене был изучен экспериментально [11, 12], и соответствующие результаты были проанализированы в рамках стандартной теории [24]. Неожиданно обнаружилось, что при осцилляциях КН меняет знак в графене при полях, удовлетворяющих условию (7), в то время как в цинке [25] и висмуте [26] при соответствующих полях наблюдаются максимумы. Такое необычное поведение осцилляций $\nu(H)$ в графене не воспроизводится в трёхмерном графите.

Ещё одним замечательным свойством квантовых осцилляций оказывается зависимость их характера от

типа спектра носителей, а именно от значения топологического параметра γ [27, 28]: $\gamma = 1/2$ для нормальных носителей (NC) с параболическим двумерным (2D) спектром и линейным квантованием Ландау:

$$\text{NC: } \varepsilon(p_{\perp}) = \frac{p_{\perp}^2}{2m_{\perp}}, \quad \varepsilon_k = 2\mu_B H \frac{m}{m_{\perp}} \left(k + \frac{1}{2}\right),$$

и $\gamma = 0$ для дираковских фермионов (DF), имеющих линейный спектр с двумя ветвями и корневой зависимостью энергии уровней Ландау $\sim k^{1/2}$ в магнитном поле:

$$\text{DF: } \varepsilon(p_{\perp}) = \pm v|p_{\perp}|, \quad \varepsilon_k = \pm(4mv_F^2 \mu_B H k)^{1/2},$$

где $p_{\perp}$ и $m_{\perp}$ — импульс и эффективная масса в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, m — масса свободного электрона, v_F — его фермиевская скорость, $\mu_B = e/2mc$ — магнетон Бора.

Ниже мы воспользуемся простым термодинамическим подходом к описанию эффекта Нернста, который позволит связать соответствующие осцилляции с осцилляциями де Гааза–ван Альфена намагнитченности. Для обоих вкладов в КН — теплового (Зондхеймер) и соответствующего токам намагнитченности (Образцов) — найдены точные выражения как для параболического, так и для дираковского спектров. В случае последнего наши результаты прекрасно воспроизводят осцилляции КН, обнаруженные в экспериментах на графене [11, 12]. Замечательно, что их амплитуда, в отличие от таковой в случае параболического спектра, при увеличении фермиевской энергии (напряжение на затворе) убывает, а не возрастает. Форма осцилляций определяется температурной производной осцилляций де Гааза–ван Альфена.

4.1. Термодинамическое описание эффекта Нернста

Как было сказано в разделе 2, КН измеряется в отсутствие токов в системе. Поэтому электрохимический потенциал вдоль градиента температуры можно считать постоянным, $\mu + e\varphi = \text{const}$ (здесь φ — электростатический потенциал). Следовательно, влияние неоднородности температуры в образце определяется появлением вдоль её градиента эффективного электрического поля $E_x = \nabla_x \mu/e$. Таким образом, задача сводится к классической проблеме Холла, что позволяет легко найти тепловой вклад в КН:

$$v^{\text{term}} = \frac{\sigma_{xx}}{e^2 n c} \frac{d\mu}{dT}, \quad (8)$$

где n — концентрация носителей. Эта простая формула воспроизводит результат Зондхеймера для вырожденного электронного газа, флуктуационный вклад в КН в сверхпроводниках при температурах выше T_c и т.д. [30].

Второй вклад в КН, возникающий вследствие пространственной зависимости намагнитченности в образце [7], может быть найден из закона Ампера. Плотность тока намагнитченности $\mathbf{j}^{\text{mag}} = [c/(4\pi)] \nabla \times \mathbf{B}$, где $\mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{M}$, $\mathbf{H}$ — пространственно однородное магнитное поле, $\mathbf{M}$ — намагнитченность, которая может зависеть от температуры, а следовательно, и от координат. Связанная с намагнитченностью плотность тока $\mathbf{j}_y^{\text{mag}} = -c(dM/dT) \nabla_x T$, соответствующий вклад в нернстовское электрическое поле оказывается равным $E_y^{\text{mag}} = \rho_{yy} j_y^{\text{mag}}$ с ρ_{yy} в качестве диагональной компоненты

тензора удельного сопротивления ($\rho_{yy} = \rho_{xx}$). В результате вклад от токов намагнитченности в КН выражается как

$$v^{\text{mag}} = \frac{c\rho_{yy}}{H} \left(\frac{dM}{dT} \right). \quad (9)$$

Соотношения (8) и (9) позволяют понять физическую природу осцилляций КН в квантующих магнитных полях. В частности, из них видно, что КН зависит от диагональных компонент тензоров удельных проводимости и сопротивления, осцилляции которых в зависимости от магнитного поля являются не чем иным, как эффектом Шубникова–де Гааза. Однако в графене гигантские осцилляции КН наблюдаются и в режиме, когда эффект Шубникова–де Гааза мал (при $H < 3$ Тл) [12], поэтому гигантские осцилляции КН в последнем случае следует считать обусловленными другими сомножителями в выражениях (8) и (9), а именно температурными производными химического потенциала $d\mu/dT$ и намагнитченности dM/dT . Замечательно, что для получения явных выражений этих величин нам не понадобятся никаких дополнительных сведений о транспортных свойствах системы, указанные производные могут быть выражены в терминах термодинамического потенциала Ω :

$$\frac{d\mu}{dT} = \frac{\partial^2 \Omega}{\partial T \partial \mu} \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu^2} \right)^{-1}_T, \quad \frac{dM}{dT} = \frac{\partial^2 \Omega}{\partial T \partial H}. \quad (10)$$

Выражение для осциллирующей части термодинамического потенциала $\tilde{\Omega}$ в случае параболического спектра, полученное Шампелем и Минеевым [31] (см. также [32]), позднее было обобщено для произвольного спектра $\varepsilon_{\perp}(p_{\perp})$ Лукьянчуком [33] (см. также [34]). В 2D-случае

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega} = & \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \frac{\hbar^2 \omega_c^2}{\pi^2} \frac{1}{2} \sum_{l=1, \sigma=\pm 1}^{\infty} \frac{\psi(\lambda l)}{l^2} \exp\left(-\frac{2\pi l \Gamma}{\hbar \omega_c}\right) \times \\ & \times \cos\left[2\pi l \left(\frac{c}{e\hbar} \frac{S(\mu)}{2\pi H} - \gamma_{\sigma}\right)\right], \end{aligned} \quad (11)$$

с $\psi(\lambda l) = \lambda l / \sinh \lambda l$. Здесь $\lambda = 2\pi^2 T / (\hbar \omega_c)$, Γ — дингловское уширение уровня Ландау. С целью применения результатов как к параболическому, так и к дираковскому спектрам мы представим выражение (11) в наиболее общей форме, используя параметры S , m^* , ω_c и γ_{σ} . Для NC $S = 2\pi m_{\perp} \mu$, $m^* = m_{\perp}$, $\omega_c = eH/m_{\perp} c$, $\gamma_{\sigma} = 1/2 + (1/2)(m_{\perp}/m)\sigma$; для DF $S = \pi \mu^2/v^2$, $m^* = \mu/v^2$, $\omega_c = eHv^2/(\mu c)$, $\gamma_{\sigma} = 1/2 [\mu/(mv^2)]\sigma$. В результате осциллирующие части намагнитченности и химического потенциала могут быть выражены с учётом соотношения (10) в виде

$$\frac{d\tilde{\mu}}{dT} = -\frac{\text{Im} \Xi^{\{1\}}}{1 + 2 \text{Re} \Xi^{\{0\}}}, \quad \frac{d\tilde{M}}{dT} = \frac{n}{H} \frac{d\tilde{\mu}}{dT}, \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} \Xi^{\{\alpha\}} = & \frac{1}{2} \sum_{l=1, \sigma=\pm 1}^{\infty} \psi^{(\alpha)}(\lambda l) \exp\left(-\frac{2\pi l \Gamma}{\hbar \omega_c}\right) \times \\ & \times \cos\left[2\pi l \left(\frac{c}{e\hbar} \frac{S(\mu)}{2\pi H} - \gamma_{\sigma}\right)\right], \end{aligned} \quad (13)$$

$\psi^{(\alpha)}(x)$ — производная порядка $\alpha = 0, 1$ функции ψ . Из выражений (9) и (12) можно увидеть, что КН осциллирует пропорционально температурной производной намагниченности. Этот факт устанавливает важную универсальную, независимую от размерности и типа носителей, связь между осцилляциями КН и эффектом де Гааза — ван Альфена.

КН удобно представить в виде

$$v = v^{\text{term}} + v^{\text{mag}} = v_0(H) + \tilde{v}(H), \quad (14)$$

где $v_0(H)$ и $\tilde{v}(H)$ — соответственно фоновая и осциллирующая части. Фоновая часть может быть найдена в приближении теории Друде [30],

$$v_0(H) = \frac{\pi^2 \tau}{6m^* c} \left(\frac{T}{\varepsilon_F} \right) \frac{1}{1 + (\omega_c \tau)^2}. \quad (15)$$

Учёт токов намагниченности здесь приводит к появлению поправки порядка $(\varepsilon_F \tau)^{-2}$ по отношению к результату Зондхеймера (15).

Осциллирующая часть КН может быть представлена с учётом выражений (8), (9) и (12) как

$$\tilde{v}(H) = -2\pi\kappa(H) \frac{\text{Im} \Xi^{(1)}}{1 + 2 \text{Re} \Xi^{(0)}}, \quad (16)$$

где

$$\kappa(H) = \frac{\sigma_{xx}(H)}{e^2 n c} + \frac{c n \rho_{xx}(H)}{H^2}. \quad (17)$$

Выражение (16) описывает осцилляции КН в наиболее общем виде, справедливом для любого типа спектра носителей $\varepsilon_{\perp}(p_{\perp})$.

4.2. Форма осцилляций

и её зависимость от типа носителей

Проанализируем выражение (16) в пределе низких температур $2\pi^2 T < \hbar\omega_c$. При этом в (11) параметр $\lambda \ll 1$, следовательно, $\psi(\lambda l) \approx 1 - (1/6)\lambda^2 l^2$. Для $m^* < 0,02m$ и $H = 10$ Тл (типичные значения в экспериментах на графене) это требование означает, что $T < 10$ К. Поскольку $m^* \ll m$, мы можем пренебречь зеемановским расщеплением, приняв $\gamma_{\sigma} = 0$ для NC и $\gamma_{\sigma} = 1/2$ для DF. Ряды $\Xi^{(0)}$ и $\Xi^{(1)}$ в выражении (16) в этом случае могут быть просуммированы аналитически:

$$\tilde{v}^{(2D)}(\mu, H) = \frac{2\pi^3}{3} \frac{T}{\hbar\omega_c} \kappa(H) \times \frac{\sin 2\pi \{ [c/(e\hbar)] [S(\mu)/(2\pi H)] - \gamma \}}{\cosh [2\pi\Gamma/(\hbar\omega_c)] - \cos 2\pi \{ [c/(e\hbar)] [S(\mu)/(2\pi H)] - \gamma \}}. \quad (18)$$

В экспериментах по измерению КН в графене обычно число частиц n фиксировано, поэтому имеет место соотношение [31]

$$n = - \left(\frac{\partial \Omega(\mu)}{\partial \mu} \right)_{H, T} = 2 \frac{S(\mu)}{(2\pi\hbar)^2} - \left(\frac{\partial \tilde{\Omega}(\mu)}{\partial \mu} \right)_{H, T} = \text{const} \quad (19)$$

(мы принимаем объём $V = 1$). Это уравнение неявно определяет зависимость химического потенциала μ от H, T при заданном n . Заметим, что, согласно соотношению (19), химический потенциал μ является функцией магнитного поля H . Соответствующее выражение для

$S(\mu)$ имеет вид

$$\frac{c}{e\hbar} \frac{S(\mu)}{2H} = \pi^2 \frac{\hbar c}{e} \frac{n}{H} - \arctan \frac{\sin 2\pi [\pi(\hbar c/e) n/H - \gamma]}{\exp(2\pi\Gamma/\hbar\omega_c) + \cos 2\pi [\pi(\hbar c/e) n/H - \gamma]}. \quad (20)$$

Соотношение (20) даёт нам искомую зависимость $\mu(n, H)$. Подставляя (20) в уравнение (18), после довольно трудоёмких вычислений можно найти осциллирующую часть КН в явном виде:

$$\tilde{v}^{(2D)}(n, H) = \frac{2\pi^3}{3} \frac{T}{\hbar\omega_c} \frac{\kappa(H)}{\sinh(2\pi\Gamma/\hbar\omega_c)} \times \sin 2\pi \left(\pi \frac{\hbar c}{e} \frac{n}{H} - \gamma \right). \quad (21)$$

Как видно, (21) является сильно осциллирующей функцией, обращающейся в нуль при магнитных полях, при

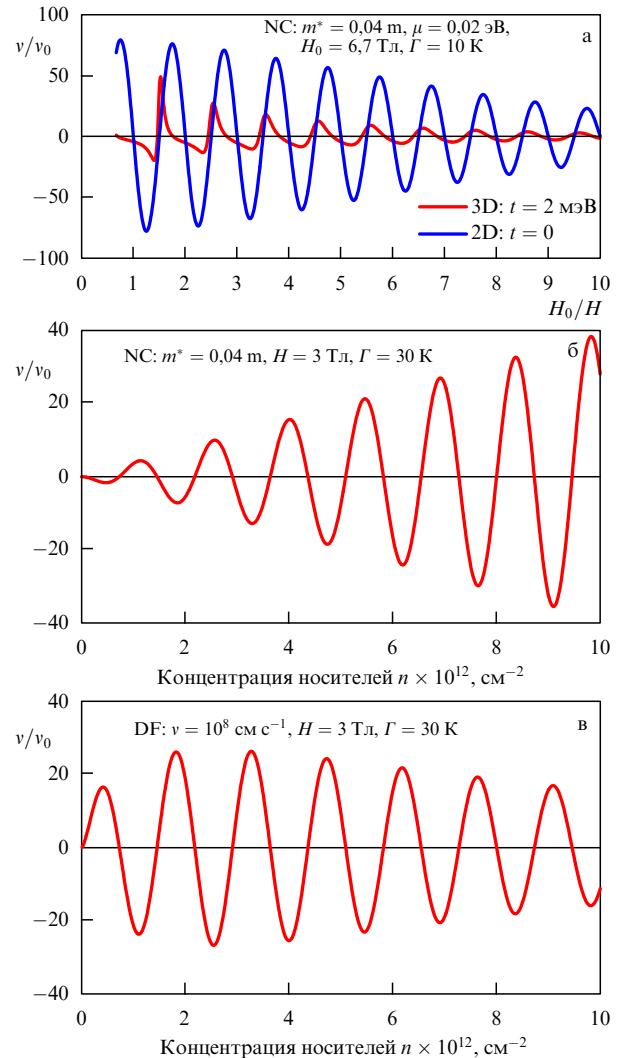


Рис. 2. Осцилляции КН в зависимости от величины, обратной магнитному полю (а), и концентрации для носителей с параболическим спектром (NC) (б) и дираковских фермионов (DF) (в). Зависимость $v(H^{-1})$ для DF имеет ту же форму, что и зависимость для NC, однако оказывается сдвинутой относительно последней на половину периода. Вертикальными прямыми указаны значения поля, при которых выполняется условие квантования (7).

которых уровни Ландау проходят через химический потенциал ($H = H_{k0}$ определяется условием (7)). Зависящий от магнитного поля множитель $\kappa(H)$, который определяется поведением магнетосопротивления, даётся выражением (17). При $\omega_c \tau \leq 1$, когда осцилляции Шубникова–де Гааза малы, $\kappa(H)$ можно оценить в приближении Друде. В частности, в пределе $\omega_c \tau \sim 1$, предполагая $\Gamma \sim \hbar/2\tau$, можно получить $\kappa(H) \sim \tau/(m^*c)$, и амплитуда осцилляций КН оказывается гигантской по сравнению с фоновой величиной: $\tilde{\nu}^{(2D)} \sim [\varepsilon_F/(\hbar\omega_c)] v_0$. В более сильных полях, $\omega_c \tau > 1$, в режиме квантового эффекта Холла, форма осцилляций КН начинает существенно определяться резкой зависимостью от магнитного поля магнетопроводимости и температуры Дингла. Это обстоятельство может быть учтено подстановкой соответствующих зависимостей в уравнения (16) и (17).

На рисунке 2 представлены осцилляции КН в зависимости от величины, обратной магнитному полю, рассчитанные для двумерной системы с параболическим и дираковским спектрами согласно выражению (21). Представленные результаты, как теоретические, так и экспериментальные, полученные на графене [11, 12], показывают синусоидальный профиль сигнала, амплитуда которого медленно убывает при возрастании концентрации носителей с дираковским спектром. Такое поведение противоречит теоретическим предсказаниям, основанным на классической формуле Мотта, применённой к бoльцмановскому газу электронов [11]. Наоборот, в случае носителей с параболическим спектром наша теория предсказывает возрастание амплитуды осцилляций с увеличением концентрации носителей. Последнее утверждение качественно согласуется с результатами, полученными с использованием формулы Мотта.

Работа выполнена при поддержке проекта SIMTECH (New Century of Superconductivity: Ideas, Materials and Technologies) № 246937 в рамках европейской программы FP7.

Список литературы

- Geim K L *Science* **324** 1530 (2009)
- Grosse K L et al. *Nature Nanotechnol.* **6** 287 (2011)
- Mott N F, Jones H *The Theory of the Properties of Metals and Alloys* 1st ed. (Oxford: Clarendon Press, 1936)
- Von Ettingshausen A, Nernst W *Ann. Physik* **265** 343 (1886)
- Behnia K, Méasson M-A, Kopelevich Y *Phys. Rev. Lett.* **98** 076603 (2007)
- Sondheimer E H *Proc. R. Soc. London A* **193** 484 (1948)
- Образцов Ю Н *ФТТ* **6** 414 (1964) [Obraztsov Yu N *Sov. Phys. Solid State* **6** 331 (1964)]
- Sharapov S G, Varlamov A A *Phys. Rev. B* **86** 035430 (2012)
- Luk'yanchuk I A, Varlamov A A, Kavokin A V *Phys. Rev. Lett.* **107** 016601 (2011)
- Wei P et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 166808 (2009)
- Zuev Y M, Chang W, Kim P *Phys. Rev. Lett.* **102** 096807 (2009)
- Checkelsky J G, Ong N P *Phys. Rev. B* **80** 081413(R) (2009)
- Wang D, Shi J *Phys. Rev. B* **83** 113403 (2011)
- Löfwander T, Fogelström M *Phys. Rev. B* **76** 193401 (2007)
- Hwang E H, Rossi E, Das Sarma S *Phys. Rev. B* **80** 235415 (2009)
- Ugarte V, Aji V, Varma C M *Phys. Rev. B* **84** 165429 (2011)
- Varlamov A A, Egorov V S, Pantsulaya A V *Adv. Phys.* **38** 469 (1989)
- Zhou S Y et al. *Nature Mater.* **6** 770 (2007)
- Li G, Luican A, Andrei E Y *Phys. Rev. Lett.* **102** 176804 (2009)
- Peres N M R, Lopes dos Santos J M B, Stauber T *Phys. Rev. B* **76** 073412 (2007)
- Gorbar E V et al. *Phys. Rev. B* **66** 045108 (2002)
- Gusynin V P, Sharapov S G *Phys. Rev. B* **71** 125124 (2005); *Phys. Rev. B* **73** 245411 (2006)
- Лифшиц И М, Косевич А М *ЖЭТФ* **29** 730 (1955) [Lifshits I M, Kosevich A M *Sov. Phys. JETP* **2** 636 (1956)]
- Bergman D L, Oganessian V *Phys. Rev. Lett.* **104** 066601 (2010)
- Bergeron C J, Grenier C G, Reynolds J M *Phys. Rev. Lett.* **2** 40 (1959)
- Behnia K, Méasson M-A, Kopelevich Y *Phys. Rev. Lett.* **98** 166602 (2007)
- Фальковский Л А *ЖЭТФ* **49** 609 (1965) [Falkovsky L A *Sov. Phys. JETP* **22** 423 (1966)]
- Mikitik G P, Sharlai Yu V *Phys. Rev. Lett.* **82** 2147 (1999)
- Serbyn M N et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 067001 (2009)
- Varlamov A A, Kavokin A V *Europhys. Lett.* **86** 47007 (2009)
- Champel T, Mineev V P *Phys. Mag. B* **81** 55 (2001)
- Bratkovsky A M, Alexandrov A S *Phys. Rev. B* **65** 035418 (2002)
- Luk'yanchuk I A, Kopelevich Y *Phys. Rev. Lett.* **93** 166402 (2004)
- Sharapov S G, Gusynin V P, Beck H *Phys. Rev. B* **69** 075104 (2004)