

## Генерация высших гармоник в щелевой модификации графена в присутствии статического и переменного электрических полей

П. В. Бадикова,\* С. Ю. Глазов†

Волгоградский государственный социально-педагогический университет,  
факультет математики, информатики и физики, кафедра общей физики  
Россия, 400001, Волгоград, ул. Академическая, 12

В работе исследован отклик щелевой модификации графена на внешние постоянное и переменное электрические поля без использования низкоэнергетического приближения для энергии носителей заряда, что позволяет изучать эффекты в более широкой области параметров приложенных электрических полей. Электронная система описана с помощью кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации. Изучена зависимость амплитуды высших гармоник от характеристик приложенных полей.

PACS: 72.80.Vp

УДК: 537.9

Ключевые слова: щелевая модификация графена, проводимость, амплитуда высших гармоник.

Несмотря на большое количество интересных эффектов, имеющих место в бесщелевом графене, для практической реализации многих электронных устройств наряду с высокой подвижностью носителей заряда необходимо наличие щели в энергетическом спектре образца. Такая запрещенная зона может возникать в графене помещенном на подложку. В монослойном графене на подложке h-BN запрещенная зона составляет 53 мэВ [1,2], на подложке SiC  $\approx 0.26$  эВ [1]. В другой модификации графена — графене — энергетическая щель равна 5.4 эВ [3].

Энергетический спектр электронов в щелевой модификации графена в приближении сильной связи можно описать в виде

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \pm \sqrt{\Delta^2 + t^2 \left[ 1 + 4 \cos \left( p_y a / \sqrt{3} \right) \times \right.} \\ \left. \times \left( \cos(p_x a) + \cos \left( p_y a / \sqrt{3} \right) \right) \right]}, \quad (1)$$

где  $t \approx 2.7$  эВ,  $a = 3b/2\hbar$ ,  $b = 0.142$  нм — расстояние между соседними атомами углерода в графене,  $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ . Разные знаки относятся к зоне проводимости и валентной зоне. Наличие запрещенной зоны в спектре (1) позволяет вести расчеты в однозонном приближении, накладывая условия на параметры

Рассмотрим отклик графена на действие постоянного и переменного электрических полей, приложенных вдоль оси  $x$ .  $\mathbf{E} = (E_1 + E_0 \cos \omega t, 0)$  — суммарная напряженность электрического поля,  $E_1$  — модуль напряженности постоянного электрического поля,  $E_0$  и  $\omega$  — амплитуда и частота переменного электрического поля. Плотность тока  $j_x$  текущего вдоль оси  $x$  определяется по формуле

$$j_x = e \sum_{\mathbf{p}} v_x(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}), \quad (2)$$

где  $e$  — заряд электрона,  $f(\mathbf{p})$  — неравновесная функция распределения носителей. Для нахождения функции распределения носителей использовано классическое уравнение Больцмана в приближении постоянного времени релаксации. Будем считать электронный газ невырожденным.

Скорость движения электронов вдоль оси  $x$  имеет вид

$$v_x = - \frac{2at^2 \cos(p_y a / \sqrt{3}) \sin(p_x a)}{\sqrt{\Delta^2 + t^2 \left[ 1 + 4 \cos(p_y a / \sqrt{3}) \left( \cos(p_x a) + \cos(p_y a / \sqrt{3}) \right) \right]}}. \quad (3)$$

внешних полей и температуру.

\*E-mail: polin.badicova@gmail.com

†E-mail: ser-glazov@yandex.ru

Разложив скорость носителей в ряд Фурье, подставив решение уравнения Больцмана в (2) после преобразований, получим окончательное выражение для плотности тока

$$j_x = j_0 \sum_l B_l \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sin \varphi_n J_n \left( l \frac{eE_0 a}{\omega} \right) \cos \left( l \frac{eE_0 a}{\omega} \sin \omega t - n \omega t - \varphi_n \right), \quad (4)$$

где  $j_0 = 4aent^2/\pi\Delta$ ,  $n$  – концентрация электронов в зоне проводимости,  $J_n(x)$  – функция Бесселя 1-го рода  $n$ -го порядка,

$$B_l = \frac{1}{A} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{-\cos(y) \sin(z) \sin(lz) dz}{\sqrt{1 + \gamma [1 + 4 \cos(y) (\cos(z) + \cos(y))]} } \times \\ \times \int_{-\pi}^{\pi} \exp \left( -\delta \sqrt{1 + \gamma [1 + 4 \cos(y) (\cos(x) + \cos(y))]} \right) \cos(lx) dx dy,$$

$$A = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp \left( -\delta \sqrt{1 + \gamma [1 + 4 \cos(y) (\cos(x) + \cos(y))]} \right) dx dy,$$

$\sin \varphi_n = \frac{1}{\sqrt{1 + (l\Omega/\nu + nw)^2}}$ ,  $\delta = \Delta/k_B T$ ,  $\Omega = eE_1 a$ ,  $\gamma = (t/\Delta)^2$ ,  $w = \omega/\nu$ ,  $\nu$  – частота столкновений.

Таким образом, основная информация об исследуемом полупроводниковом материале содержится в коэффициентах  $B_l$  и  $j_0$ .

Для нахождения гармоник тока разложим функцию плотности тока (4) в ряд Фурье:

$$j(t) = a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos k\omega t + b_k \sin k\omega t), \quad (5)$$

где  $a_0 = j_0 \sum_l B_l \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2 \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) \sin \varphi_n \cos \varphi_n$ ,

$$a_k = j_0 \sum_l B_l \left\{ J_0 \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) J_k \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) (\sin \varphi_k \cos \varphi_k + (-1)^k \sin \varphi_{-k} \cos \varphi_{-k}) + \right. \\ \left. + \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) \left[ J_{k-2n} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) (\sin^2 \varphi_{k-2n} - (-1)^{k-2n} \sin^2 \varphi_{-(k-2n)}) - \right. \right. \\ \left. \left. - J_{k+2n} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) (\sin^2 \varphi_{k+2n} - (-1)^{k+2n} \sin^2 \varphi_{-(k+2n)}) \right] + \right. \\ \left. + J_{2n-1} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) \left[ J_{k+2n-1} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) (\sin \varphi_{k+2n-1} \cos \varphi_{k+2n-1} - (-1)^{k+2n-1} \sin \varphi_{-(k+2n-1)} \cos \varphi_{-(k+2n-1)}) - \right. \right. \\ \left. \left. - J_{k-2n+1} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) (\sin \varphi_{k-2n+1} \cos \varphi_{k-2n+1} - (-1)^{k-2n+1} \sin \varphi_{-(k-2n+1)} \cos \varphi_{-(k-2n+1)}) \right] \right\},$$

$$b_k = j_0 \sum_{l,s} B_l \left\{ -J_0 \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) J_k \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) (\sin^2 \varphi_k - (-1)^k \sin^2 \varphi_{-k}) + \right. \\ \left. + \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) \left[ J_{k-2n} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) (\sin \varphi_{k-2n} \cos \varphi_{k-2n} + (-1)^{k-2n} \sin \varphi_{-(k-2n)} \cos \varphi_{-(k-2n)}) - \right. \right. \\ \left. \left. - J_{k+2n} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) (\sin \varphi_{k+2n} \cos \varphi_{k+2n} + (-1)^{k+2n} \sin \varphi_{-(k+2n)} \cos \varphi_{-(k+2n)}) \right] + \right. \\ \left. + J_{2n-1} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) \left[ J_{k-2n+1} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) (\sin^2 \varphi_{k-2n+1} + (-1)^{k-2n+1} \sin^2 \varphi_{-(k-2n+1)}) - \right. \right. \\ \left. \left. - J_{k+2n-1} \left( \frac{eE_0 a l}{\hbar\omega} \right) (\sin^2 \varphi_{k+2n-1} + (-1)^{k+2n-1} \sin^2 \varphi_{-(k+2n-1)}) \right] \right\}.$$

Амплитуда  $k$ -ой гармоники плотности тока  $j_k = \sqrt{a_k^2 + b_k^2}$ .

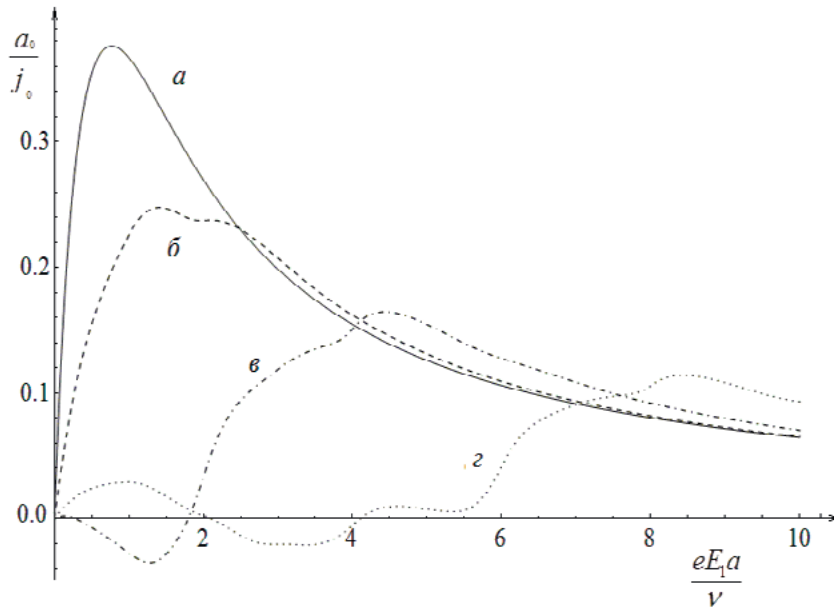


Рис. 1: Зависимость постоянной составляющей плотности тока от постоянного электрического поля при  $\omega/\nu = 2$ ,  $a - eE_0a/\nu = 0.1$ ;  $b - eE_0a/\nu = 1.5$ ;  $v - eE_0a/\nu = 4.0$ ;  $z - eE_0a/\nu = 8.0$ .

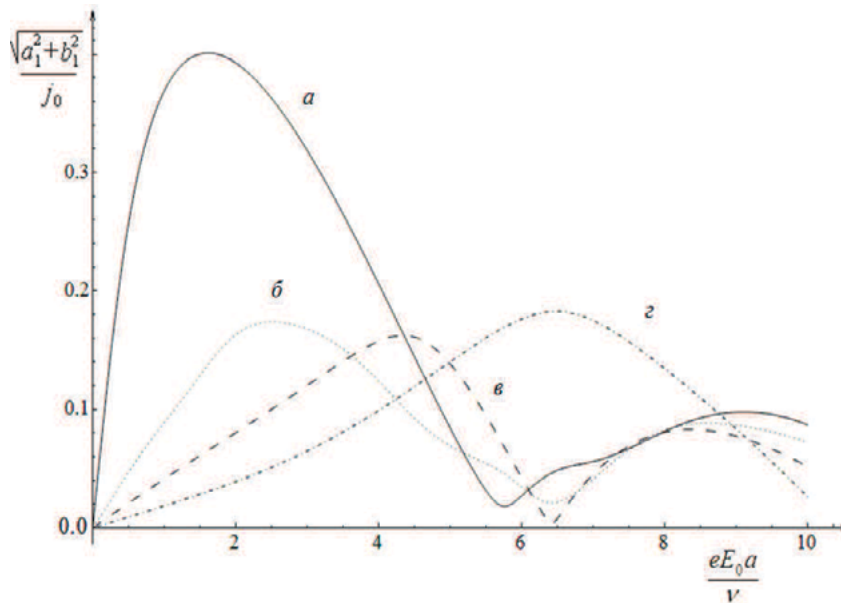


Рис. 2: Зависимость первой гармоники плотности тока от амплитуды переменного электрического поля при  $\omega/\nu = 2$ ,  $a - eE_1a/\nu = 0.1$ ;  $b - eE_1a/\nu = 1.0$ ;  $v - eE_1a/\nu = 4.0$ ;  $z - eE_1a/\nu = 6.0$ .

На рис. 1 представлена зависимость постоянной составляющей плотности тока от напряженности постоянного электрического поля при  $\omega/\nu = 2$ .

На рис. 2 приведена зависимость первой гармоники плотности тока от амплитуды переменного электрического поля при  $\omega/\nu = 2$ .

Зависимости амплитуд высших гармоник плотности тока от характеристик приложенных к системе полей

имеют немонотонный характер. Это дает возможность в широком интервале значений управлять амплитудой гармоники. Меняя характеристики приложенных полей  $E_1$ ,  $E_0$  и  $\omega$ , можно добиться существенного подавления или усиления соответствующей гармоники (см. рис. 3).

Условия применимости однозонного приближения:  $k_B T \ll 2\Delta$ ,  $\hbar\omega \ll 2\Delta$ ,  $eE\lambda \ll \epsilon_g$ ,  $\lambda$  — средняя длина свободного пробега носителей заряда (для графе-

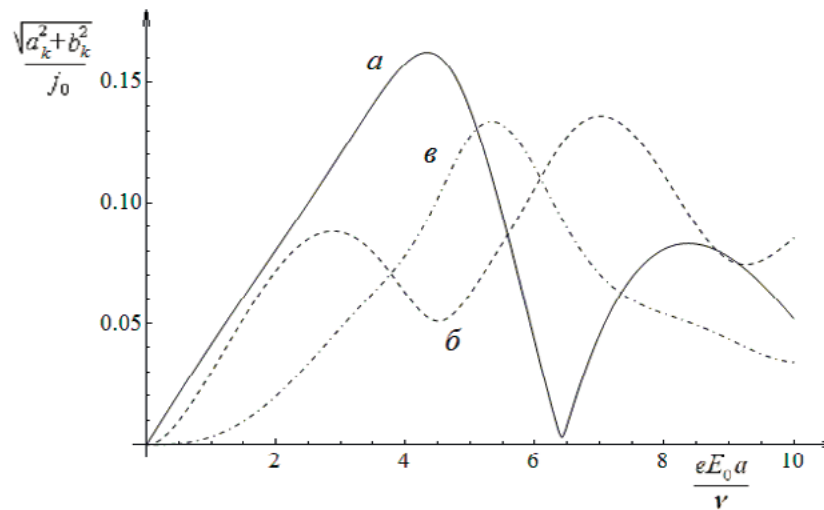


Рис. 3: Зависимость амплитуды первой (а), второй (б) и третьей (в) гармоник от амплитуды переменного электрического поля при  $\omega/\nu = 2$ ,  $eE_1 a/\nu = 4.0$ .

на  $\lambda \approx 10^{-4} - 10^{-5}$  см),  $\epsilon_g$  — ширина зоны проводимости ( $\epsilon_g = 3t$ ). Сделаем численные оценки:  $\Delta = 1.2$  эВ,  $T \leq 300$  К,  $\omega \leq 10^{14}$  с $^{-1}$ ,  $E \leq 10^5$  В/см,  $n \approx 10^{10}$  см $^{-2}$ ,  $\nu \approx 10^{11} - 10^{12}$  с $^{-1}$ ,  $j_0 \approx 0.4$  А/см.

В заключении сформулируем основные выводы из данной работы:

1. Исследована постоянная составляющая плотности тока в щелевой модификации графена в присутствии постоянного и переменного электрических полей. Найдены значения параметров приложенных полей, при которых возможен эффект абсолютной отрицательной проводимости.
2. Получено и численно проанализировано выражение для амплитуд высших гармоник плотности

тока в щелевой модификации графена под воздействием постоянного и переменного электрических полей.

3. Зависимость амплитуд гармоник плотности тока от характеристик приложенных к системе полей имеет немонотонный, осциллирующий характер. Это дает возможность в широком интервале значений управлять амплитудой гармоник за счет повышения вероятности многоквантовых процессов с ростом интенсивности поля.
4. При определенных соотношениях параметров приложенных полей выявлено существенное превалирование одних гармоник над другими.

[1] Zhou S. Y. Nature Mater. **6**. P. 770. (2007).

[2] Giovannetti G. Phys. Rev. B. **76**. P. 073103. (2007).

[3] Elias D. S. Science. **323**. P. 610. (2009).

## Generation of higher harmonics in the gap modification graphene in the presence of static and alternating electric fields

P. V. Badicova<sup>a</sup>, S. Yu. Glazov<sup>b</sup>

Faculty of Mathematics, Computer Science and Physics, Volgograd State Social Pedagogical University  
Volgograd, 400001 Russia

E-mail: <sup>a</sup>polin.badicova@gmail.com, <sup>b</sup>ser-glazov@yandex.ru

We have studied the response of the graphene with a gap to external dc and ac electric fields without using of low-energy approximation for the energy carrier that allows us to study the effects of a broader range of parameters of applied electric fields. The electronic system of graphene described by Boltzmann's kinetic equation in the constant relaxation-time approximation. The amplitude of the higher harmonics on the characteristics of applied fields is studied.

PACS: 72.80.Vr

Keywords: the graphene with a gap, conductivity, amplitude of the higher harmonics.

Received 27.07.2015.

**Сведения об авторах**

1. Бадикова Полина Вячеславовна — студент; тел.: +7 (905) 390-47-28, e-mail: polin.badicova@gmail.com.
2. Глазов Сергей Юрьевич — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: +7 (905) 433-64-98, e-mail: ser-glazov@yandex.ru.