

Известия НАН Армении, Физика, т.59, №4, с.468–474 (2024)

УДК 538.9

DOI:10.54503/0002-3035-2024-59.4-468

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ МЕЛКОЙ ПРИМЕСИ В МОНОСЛОЙНОМ ГРАФЕНЕ В ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А.А. АВЕТИСЯН, А.П. ДЖОТЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: adjotyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 1 ноября 2024 г.)

Вариационным методом исследуются энергии основного $1S$ и первых трех возбужденных уровней $2S$, $2P^-$ и $2P^+$ мелкой примеси в монослое графена с открытой энергетической щелью, в перпендикулярном магнитном поле. Получены зависимости энергий примесных уровней от величины магнитного поля и для различных значений параметра «толщины» b «сглаженного» кулоновского потенциала. Возможность управления положением энергетических уровней примеси и расстоянием между ними в графене путем изменения величины магнитного поля и параметра b открывает возможность реализации новых схем для рассмотрения когерентного взаимодействия лазерных импульсов с графеновыми системами.

1. Введение

Известной особенностью графена является необычная дисперсия его носителей заряда [1–3]. Дираковский электронный спектр сделал графен многообещающим материалом для различных областей применения, например, в области информационных технологий с целью миниатюризации элементов, вnano- и оптоэлектронике или для создания химических сенсоров нового поколения [4]. Открытие энергетической щели между зоной проводимости и валентной зоной монослоя графена сделало возможным его применение для создания транзисторов. Как известно, один из способов открытия щели состоит в помещении монослоя на полярную подложку [5–7]. Электронные свойства дираковских материалов с запрещенной щелью зависят от величины щели, и, следовательно, перспективны для nano- и оптоэлектроники [8, 9]. Второй путь управления энергетической щелью в монослое графена состоит в использовании сильных нерезонансных электромагнитных полей на основе «инженерии Флоке» [10–12]. В работе [10] теоретически было показано, что взаимодействие электронов в щелевых материалах Дирака с таким полем может существенно перенормировать запрещенные зоны, а перенормированные электронные параметры зависят от поляризации электромагнитного поля.

Хотя и известно, что графен обладает высокой структурной стабильностью, существующие методы получения монослоев графена неизбежно приводят к наличию в них некоторого количества дефектов [13]. Кроме того, примеси могут

вводиться в графен целенаправленно для контролируемого изменения его физических свойств. В настоящее время большое внимание уделяется исследованию кулоновской проблемы и примесных состояний в графене [4, 14–17]. Этот интерес обусловлен возможностью управления положением энергетических уровней мелкой примеси в однослоином графене с открытой энергетической щелью в зависимости от эффективного параметра тонкой структуры и величины щели [17]. Применение магнитного поля перспективно для исследования фундаментальных свойств графена и дает дополнительный внешний регулируемый параметр для желаемого изменения энергетического спектра примесных состояний.

Возможность варьирования положением энергетических уровней примеси может открыть новые пути для создания когерентной суперпозиции энергетических состояний и для когерентного переноса населенностей между ними путем применения частотно чирпированных лазерных импульсов [18]. С использованием вариационного подхода в работе [19] были определены энергии основного $1S$ и первых двух возбужденных $2S$ и $2P^+$ состояний мелкой донорной примеси в монослое графена с открытой щелью в перпендикулярном магнитном поле. Вырождение между состояниями $2S$ и $2P^+$ было снято магнитным полем, что дало возможность получения квантовой системы с Λ -конфигурацией рабочих состояний. Исследуемая в работе [19] Λ -конфигурация была получена при фиксированном значении энергетической щели и величине перпендикулярного монослою магнитного поля. Представляет интерес исследование примесной задачи для реально допустимой области значений щели и магнитного поля. В данной работе исследуются энергии основного $1S$ и первых трех возбужденных уровней $2S$, $2P^-$ и $2P^+$ в зависимости от величины приложенного к графену перпендикулярного магнитного поля и параметра «толщины» b «сглаженного» кулоновского потенциала. Возможность управления положением энергетических уровней примеси и расстоянием между ними позволит реализовать перестраиваемую схему Λ -атома, а также создание схем нового типа с V- и «лестничной» конфигурациями уровней для дальнейшего рассмотрения когерентного взаимодействия лазерных импульсов с этими системами.

2. Теория

Уравнение для спинорной компоненты ϕ в монослое графена в перпендикулярном к графену магнитном поле \mathbf{B} , в цилиндрических координатах ρ, φ, z , с векторным потенциалом \mathbf{A} с компонентами $A_\varphi = B\rho/2$, $A_r = 0$, в присутствии одновалентной примеси имеет вид

$$\left[\frac{U^2}{4} + (v_F \hat{p})^2 + v_F^2 \frac{m^2 \omega^2 \rho^2}{4} \right] \phi - i m v_F^2 \hbar \omega \frac{\partial \phi}{\partial \varphi} = \left(E + \frac{e^2}{\chi(\rho+b)} \right)^2 \phi, \quad (1)$$

где U – щель между зоной проводимости и валентной зоной, масса электрона $m = U/2v_F^2$ в монослое определяется величиной щели, $v_F = \sqrt{3}\gamma_0 a_0 / 2\hbar \approx 10^6$ м/сек – скорость Ферми, где параметр сильной связи $\gamma_0 \approx 3.1$ эВ описывает взаимодействие между атомами A и B в одной плоскости, a_0 – постоянная решетки; $\omega = eB/mc$ – циклотронная частота, χ – диэлектрическая проницаемость

системы графен–подложка, $\chi = (\chi_1 + \chi_2)/2$, определяемая диэлектрическими проницаемостями χ_1 и χ_2 сред, окружающих монослои; магнитное квантовое число $m=0, \pm 1$. Рассмотрим одновалентные примеси, обычно используемые в графене [13]. Как и в работе [17], учтем конечное внеплоскостное расширение волновой функции и используем выражение $V(\rho) = e^2/\chi(\rho+b)$ для «сглаженного» кулоновского потенциала с параметром «толщины» b . В качестве пробных функций основного и возбужденного состояний примесного электрона для задачи со «сглаженным» кулоновским потенциалом, воспользуемся решениями для двумерного квантового гармонического осциллятора [20–22]. Для основного состояния примесного электрона в перпендикулярном магнитном поле вариационная функция имеет вид:

$$\phi_{1S} = N_1 \exp(-\lambda \rho^2), \quad (2)$$

где нормировочная константа равна $N_1 = 1/\sqrt{2\pi A}$, $A_1 = \int_0^\infty e^{-2\lambda\rho^2} \rho d\rho = 1/4\lambda$, а вариационный параметр λ находится процедурой минимизации энергии. Для состояния $2S$ выбираем пробную функцию в виде

$$\phi_{2S} = N_3 (1 - \delta \rho^2) \exp(-\lambda \rho^2), \quad (3)$$

где δ – второй вариационный параметр, $N_3 = 1/\sqrt{2\pi A_3}$, $A_3 = \int_0^\infty (1 - \delta \rho^2)^2 e^{-2\lambda\rho^2} \rho d\rho$.

Для состояний $2P^+$ и $2P^-$ выбираем пробную функцию в виде:

$$\phi_{2P\pm} = N_2 \exp(-\lambda \rho^2) \rho \exp(\pm i\varphi), \quad (4)$$

с нормировочной константой $N_2 = \sqrt{1/\pi A_2}$, $A_2 = \int_0^\infty e^{-2\lambda\rho^2} \rho^3 d\rho = 1/8\lambda^2$. Полную

энергию для примесных состояний находим после процедуры минимизации энергии для различных значений параметра b и магнитного поля.

Уравнение для определения энергии $1S$ и $2S$ состояний водородоподобной примеси в графене в перпендикулярном магнитном поле, в безразмерных единицах (примесные энергии и величина щели измеряются в эффективных Ридбергах $R^* = me^4/2\chi^2 \hbar^2$, а длины ρ и b – в эффективных боровских радиусах $a_B^* = \hbar^2 \chi / me^2$) имеет вид:

$$\left(E^2 + \frac{4E}{(\rho+b)} + \frac{4}{(\rho+b)^2} \right) \phi = \left(\frac{U^2}{4} + \frac{4}{\alpha^2} \hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{\gamma^2 \rho^2}{\alpha^2} \right) \phi, \quad (5)$$

где $\alpha = e^2 / \chi \hbar v_F \approx 2.2/\chi$ – параметр тонкой структуры монослоя, зависящий от диэлектрической проницаемости χ системы графен–подложка, b – безразмерный параметр толщины, $\gamma = \hbar\omega / 2R^*$.

В безразмерных единицах уравнение для определения энергии состояний $2P^+$, $2P^-$ ($m=\pm 1$) принимает вид:

$$\left(E^2 + \frac{4E}{(\rho+b)} + \frac{4}{(\rho+b)^2} \right) \phi_{2P^\pm} = \left(\frac{U^2}{4} + \frac{4}{\alpha^2} \hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{\gamma^2 \rho^2}{\alpha^2} \pm \frac{4\gamma}{\alpha^2} \right) \phi_{2P^\pm}. \quad (6)$$

3. Результаты и их обсуждение

В этом разделе приведены результаты численных расчетов для примесных энергий, полученные с использованием уравнений (2)–(6). Энергии рассчитаны на основе указанных уравнений при минимизирующих энергию значениях вариационных параметров, определяемых для каждого значения магнитного поля и параметра b . На рис.1, в эффективных Ридбергах $R^* = me^4/2\chi^2 \hbar^2$, представлены зависимости энергий $1S$, $2S$, $2P^+$, а также $2P^-$ состояний от магнитного поля в единицах $\gamma = \hbar\omega/2R^*$ для фиксированных значений параметра толщины $b=0.01$ и параметра эффективной тонкой структуры $\alpha = e^2/\chi\hbar\nu_F = 0.225$ ($\chi \approx 10$). Из рис.1 видно, что полная энергия состояния $2P^-$ превышает энергию состояния $2S$ при малых и промежуточных значениях магнитного поля. Пересечение кривых для $2S$ и $2P^-$ происходит при значении параметра магнитного поля $\gamma = 6.5$. Аналогичное поведение примесных энергий электрона, связанного с кулоновским центром, локализованным в полупроводнике вблизи интерфейса полупроводник–диэлектрик–металл, было найдено в работе [23]. На рис.2. показаны зависимости энергий $2S$ и $2P^-$ состояний примесного электрона в графене от магнитного поля для различных значений параметра толщины: $b=0.01$ и $b=0.05$ при $\chi \approx 10$. При фиксированном значении магнитного поля $\gamma \approx 10$ относительная разность энергий $2S$ состояний при $b=0.01$ и $b=0.05$ равна 5%, в то время как для энергии $2P^-$ она значительно меньше и составляет примерно 1% (на рис.2 не приведена кривая для $2P^-$ при $b=0.05$, т.к. последняя практически совпадает с кривой при $b=0.01$). Различие в поведении кривых для $2S$ и $2P^-$ состояний можно объяснить различной конфигурацией волновых функций: из-за локализации $2P^-$ состояния в плоскости монослоя, оно менее чувствительно к изменению параметра толщины. Как видно из рис.2, при уменьшении величины b от $b=0.05$ до $b=0.01$ точка пересечения кривых смещается вправо от точки с координатой

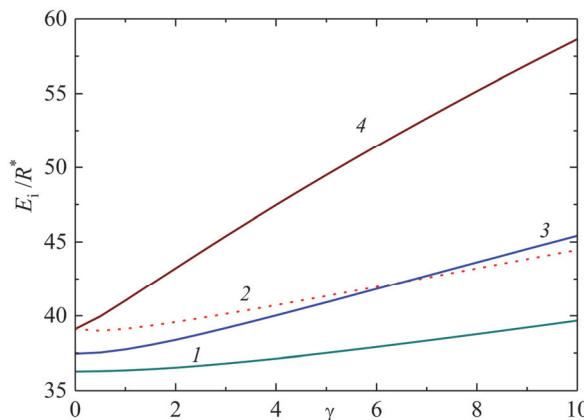


Рис.1. Зависимости полных энергий $1S$, $2S$, $2P^-$ и $2P^+$ состояний в монослоином графене в магнитном поле в зависимости от параметра $\gamma = \hbar\omega/2R^*$ ($R^* = 2$ мэВ): кривая 1 описывает состояние $1S$, кривая 2 – $2P^-$, кривая 3 – $2S$, кривая 4 – $2P^+$; параметр толщины $b = 0.01$, $\chi \approx 10$ ($i = 1–4$).

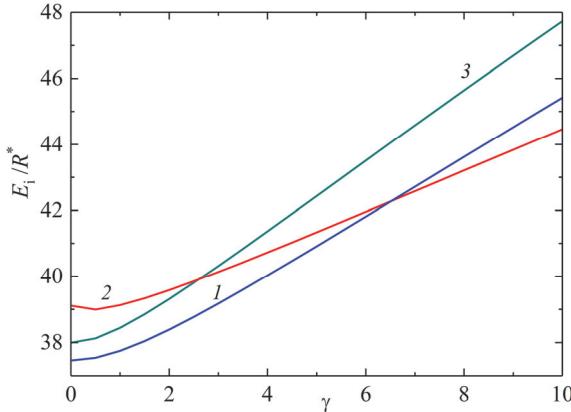


Рис.2. Зависимости полных энергий $2S$ и $2P^-$ состояний в монослоистом графене в магнитном поле в зависимости от параметра $\gamma = \hbar\omega/2R^*$ ($R^* = 2$ мэВ) при $\chi \approx 10$: кривая 1 – состояние $1S$ ($b = 0.01$), кривая 2 – состояние $2P^-$ ($b = 0.01$), кривая 3 – $2S$, параметр толщины $b = 0.05$.

$\gamma \approx 2.6$ к точке с $\gamma \approx 6.5$.

Как видно из рис.1 и рис.2, при значениях магнитного поля больших, чем $\gamma = 6.5$, примесные уровни образуют лестничную систему со следующим расположением уровней: $1S$, $2P^-$, $2S$ и $2P^+$. Дипольные переходы разрешены между ближайшими уровнями и запрещены между первым и третьим, равно как и между вторым и четвертым уровнями системы. Как следует из рис.1, низшие уровни $1S$, $2S$ и $2P^+$ могут образовывать в промежуточных магнитных полях ($\gamma \leq 6$ и для $b=0.01$) гибкую схему, аналогичную Λ -атому, исследованному в работе[19], в которой $1S$ и $2S$ являются двумя метастабильными состояниями. Для $b=0.05$ состояние $2S$ является метастабильным лишь при $\gamma \leq 2$. Заметим, что при $b=0.01$, для сильных магнитных полей с $\gamma \geq 6$ состояние $2S$ не метастабильно, т.к. электрон может релаксировать на низший уровень $2P^-$.

На рис 3 показаны зависимости энергий $2S$ и $2P^-$ состояний от параметра толщины b для фиксированных значений $\chi \approx 10$ и магнитного поля. Кривые 1 и 4 описывают поведение состояния $2S$ от параметра толщины b при $\gamma = 5$ и $\gamma = 3$. Кривые 2 и 3 приведены для состояния $2P^-$ соответственно для значений $\gamma = 5$ и $\gamma = 3$. Такое поведение кривых можно объяснить большей скоростью роста полной энергии для состояния $2S$ при увеличении b по сравнению с ростом энергии для $2P^-$.

Параметр b «сглаженного» кулоновского потенциала определяется внеплоскостным расширением электронной волновой функции в направлении, перпендикулярном к монослою. Величина b зависит от диэлектрической проницаемости окружающих графен сред [20, 24] и может увеличиваться или уменьшаться соответствующим подбором подложки и среды над слоем. Возможность варьирования b может быть использована на эксперименте для создания новых схем

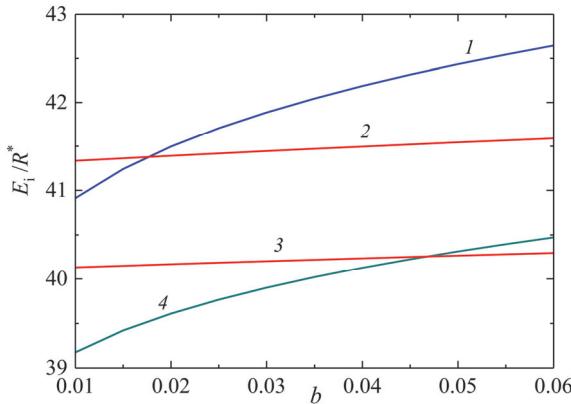


Рис.3. Зависимости полных энергий $2S$ и $2P^-$ состояний в графене в магнитном поле в зависимости от параметра толщины b ($R^* = 2$ мэВ, $\chi \approx 10$): кривая 1 описывает состояние $2S$, $\gamma = 5$, кривая 2 – состояние $2P^-$ при $\gamma = 5$, кривая 3 – $2P^-$ при $\gamma = 3$, кривая 4 – $2S$ при $\gamma = 3$.

когерентного переноса населенностей между квантовыми состояниями в поле частотно-чипированных лазерных импульсов (см. работы [18, 19]).

4. Заключение

Вариационным методом получены энергии основного $1S$ и первых трех возбужденных $2S$, $2P$ и $2P^+$ уровней мелкой примеси в однослойном графене с открытой щелью, в перпендикулярном магнитном поле. Полученные зависимости энергий примесных уровней от величины магнитного поля, и параметра «толщины» b , могут быть полезны дляnanoэлектроники, а также для создания новых квантовых систем с V-образной и «лестничной» конфигурациями энергетических состояний для дальнейшего рассмотрения различных когерентных явлений, основанных на взаимодействии лазерных импульсов с этими системами.

Работа выполнена при поддержке Комитета Науки РА в рамках научно-исследовательского проекта № 21AG-1C048.

ЛИТЕРАТУРА

1. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. *Science*, **306**, 666 (2004).
2. B. Partoens, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B*, **74**, 075404 (2006).
3. W. Bao, L. Jing, J. Velasco, Y. Lee, G. Liu, D. Tran, B. Standley, M. Aykol, S.B. Cronin, D. Smirnov, M. Koshino, E. McCann, M. Bockrath, C.N. Lau. *Nature Phys*, **7**, 948 (2011).
4. Ю.В. Скрипник, В.М. Локтев. *Физика низких температур*, **44**, 1417 (2018).
5. C.R. Dean, A.F. Young, I. Meric, C Lee, L. Wang, S. Sorgenfrei, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim. *Nature Nanotech.*, **5**, 722 (2010).
6. B. Sachs, T.O. Wehling, M.I. Katsnelson, A.I. Lichtenstein. *Phys. Rev. B*, **84**, 195414 (2011).

7. S.Y. Zhou, G.-H. Gweon, A.V. Fedorov, P.N. First, W.A. de Heer, D.H. Lee, F. Guinea, A.H. Castro Neto, A. Lanzara. *Nature Mater.*, **6**, 770 (2007).
8. R.M. Westervelt. *Science*, **320**, 324 (2008).
9. Sh. Sato. *Japan. J Appl. Phys.*, **54**, 040102 (2015).
10. O.V. Kibis, K. Dini, I.V. Iorsh, I.A. Shelykh. *Phys. Rev. B*, **95**, 125401 (2017).
11. A. Iurov, L. Zhemchuzhna, G. Gumbs, D. Huang, W.K. Tse, K. Blaise, C. Ejiogu. *Scientific Rep.*, **12**, 21348 (2022).
12. V. Iorsh, D.D. Sedov, S.A. Kolodny, R.E. Sinit斯基, O.V. Kibis. *Phys. Rev. B*, **109**, 035104 (2024).
13. P.T. Araujo, M. Terrones, M.S. Dresselhaus. *Materials Today*, **15**, 98 (2012).
14. H. Avetissian, G. Mkrtchian, K. Batrakov, S. Maksimenko, A. Hoffmann. *Phys. Rev. B*, **88**, 165411 (2013).
15. H.K. Avetissian, S.S. Israelyan, H.H. Matevosyan, G.F. Mkrtchian. *Phys. Rev. B*, **105**, 063504 (2022).
16. N.M.R. Peres, R.M. Ribeiro, A.H. Castro Neto. *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 055501 (2010).
17. А.П. Джоян, А.А.Аветисян. *Известия НАН Армении, Физика*, **59**, 166 (2024).
18. G.P. Djotyan, J.S. Bakos, Zs. Sörlei. *J. Szigeti. Phys. Rev. A*, **70**, 063406 (2004).
19. А.П. Джоян, Г.П. Джоян, А.А.Аветисян. *Известия НАН Армении, Физика*, **59**, 293 (2024).
20. M.F. Martins Quintela, N.M. Peres. *The European Physical Journal B*, **93**, 1 (2020).
21. M.A. Semina. *Phys. Sol. Stat.* **61**, 2218 (2019).
22. F. Graselli. *Amer. J. Phys.*, **85**, 834 (2017).
23. B. Li, A.P. Djotyan, Y.L. Hao, A.A. Avetisyan, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B*, **87**, 075313 (2013).
24. G.F. Mkrtchian, A. Knorr, M. Selig. *Phys. Rev. B*, **100**, 125401 (2019).

ENERGY LEVELS OF A SHALLOW IMPURITY IN MONOLAYER GRAPHENE IN A PERPENDICULAR MAGNETIC FIELD

A.A. AVETISYAN, A.P. DJOTYAN

In this work the energies of the ground $1S$ and first excited states $2S$, $2P^-$ and $2P^+$ of a shallow donor impurity in graphene monolayer with opened energy gap in a perpendicular magnetic field are investigated using a variational approach. The dependences of impurity energies on the gap and magnetic field for the various values of the fine structure parameter and thickness parameter of soft Coulomb potential are obtained. The ability to control the position of impurity energy levels and the distance between them in graphene by changing the energy gap and magnetic field will allow the implementation of new schemes for considering coherent phenomena under the action of laser pulses.