

ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В СВЕРХРЕШЕТКЕ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА В ПРИСУТСТВИИ ПОСТОЯННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

С. Ю. Глазов¹, Н. Е. Мещерякова²

¹Волгоградский государственный социально-педагогический университет,
Волгоград, Россия

²Волгоградский Институт Бизнеса, Волгоград, Россия

¹ser-glazov@yandex.ru., ²dandelion1@yandex.ru

Рассмотрена генерация высших гармоник плотности тока сверхрешеткой на основе графена на полосчатой подложке под влиянием постоянного и переменного электрических полей, поляризованных вдоль оси сверхрешетки. Электронная система описана с помощью кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации. Исследована зависимость амплитуды высших гармоник от характеристик приложенных полей. Показана возможность усиления и подавления гармоник плотности тока.

Ключевые слова: сверхрешетка, графен.

1. Введение

В последнее время активно изучаются сверхрешетки (СР) на основе графена [1] – [9], которые могут быть сформированы путем создания в образце дополнительного периодического потенциала. Например, в работе [8] предложена модель СР на основе графена, образующаяся за счет периодической модуляции запрещенной зоны. Такая модуляция возможна в графене, осажденном на подложку из периодически чередующихся полосок, например, SiO_2 и SiC . Материал SiO_2 не влияет на зонную структуру графена, в то время как SiC способствует возникновению запрещенной зоны в спектре графена, т.е. образованию щелевой модификации графена. Слои SiC расположены таким образом, что его гексагональная кристаллическая решетка располагается под гексагональной решеткой графена. При этом в областях графенового слоя над слоями SiC образуется энергетическая щель в зонной структуре графена, равная 0,26 эВ.

Возможность проявления ряда нелинейных физических эффектов в графене и структурах на его основе связана с непараболичностью и неаддитивностью его энергетического спектра. Например, нелинейный электромагнитный отклик в графене изучен в [10]. Генерация второй гармоники в графене исследована экспериментально [11], [12] и теоретически [13]. В [14],[15] рассмотрена генерация высших гармоник углеродными нанотрубками полупроводникового типа. Генерация второй гармоники в полупроводниковых СР при совместном влиянии постоянного и переменного электрических полей изучена в [16].

Внимание к подобным нелинейным электромагнитным процессам вызвано возможностью их использования при исследовании физических свойств наноструктур, для управления характеристиками электромагнитного излучения, что находит свое применение в оптике и наноэлектронике.

В этой связи представляется актуальным исследовать генерацию высших гармоник сверхрешеткой на основе графена, взаимодействующей с переменным электрическим полем в присутствии постоянного электрического поля. Предполагается, что электрические поля поляризованы вдоль оси графеновой СР.

2. Основные уравнения

Рассмотрим отклик СР на основе графена, образующейся за счет периодической модуляции запрещенной зоны [8], на действие постоянного и переменного электрических полей, приложенных вдоль оси СР. Геометрия задачи приведена на рис. 1.

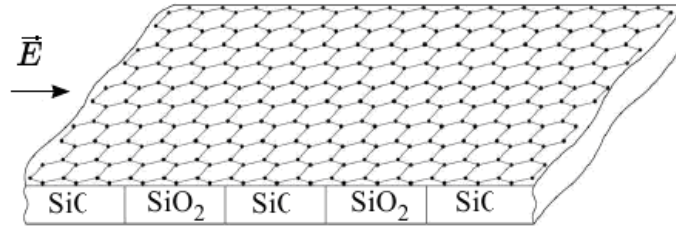


РИС. 1. Геометрия задачи

Закон дисперсии носителей заряда в СР на основе графена на полосчатой подложке в одноминзонном приближении хорошо описывается следующим выражением [9]:

$$\varepsilon(\vec{p}) = \Delta \left(f_1 + \sqrt{f_2^2 + f_3^2 (p_y d / \hbar)^2 + f_4^2 (1 - \cos(p_x d / \hbar))} \right), \quad (1)$$

где Δ — полуширина запрещенной зоны щелевой модификации графена, p_x , p_y — компоненты квазиимпульса электрона, $d = d_1 + d_2$ — период СР, d_1 и d_2 — ширины полосок бесщелевого и щелевого графена, а коэффициенты f_i подбираются численно на основе непосредственного решения дисперсионного соотношения из [8]. Спектр (1) периодичен по p_x и сохраняет неаддитивность, присущую спектру графена.

Плотность тока j_x , текущего вдоль оси СР определяется по формуле

$$j_x = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^2} \int v_x(\vec{p}) f(\vec{p}) d^2\vec{p}, \quad (2)$$

где e — заряд электрона, $f(\vec{p})$ — неравновесная функция распределения носителей, v_x — скорость движения электронов вдоль оси СР. Для нахождения функции распределения носителей рассмотрим классическое уравнение Больцмана в приближении постоянного времени релаксации

$$\frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} + e\vec{E} \frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial \vec{p}} = -\nu (f(\vec{p}, t) - f_0(\vec{p})), \quad (3)$$

где $\vec{E} = (E_1 + E_0 \cos \omega t, 0)$ — суммарная напряженность электрического поля, E_1 — модуль напряженности постоянного электрического поля, E_0 и ω — амплитуда и частота переменного электрического поля, ν — обратное время релаксации, определяемое всеми процессами, $f_0(\vec{p})$ — фермиевская равновесная функция распределения

$$f_0(\vec{p}) = C [1 + \exp(\varepsilon(\vec{p})/k_b T)]^{-1}, \quad (4)$$

где k_b — постоянная Больцмана, T — температура, C — нормировочная константа.

Разложим скорость носителей $v_x(\vec{p})$ в ряд Фурье. Решая (3) методом характеристик, подставляя результат и $v_x(\vec{p})$ в (2), после преобразований, получим выражение для плотности тока

$$j_x = j_0 \sum_l B_l \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sin \varphi_n J_n \left(l \frac{eE_0 d}{\hbar \omega} \right) \cos \left(l \frac{eE_0 d}{\hbar \omega} \sin \omega t - n \omega t - \varphi_n \right), \quad (5)$$

где $j_0 = en\Delta df_4^2/\pi\hbar$, n – концентрация электронов в зоне проводимости, $J_n(x)$ – функция Бесселя 1-го рода n -го порядка

$$B_l = \frac{1}{A} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(z) \sin(lz) dz}{\sqrt{f_2^2 + f_3^2 y^2 + f_4^2 (1 - \cos(z))}} \times \\ \times \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos(lx) dx dy}{1 + \exp \left(\delta \left\{ f_1 + \sqrt{f_2^2 + f_3^2 y^2 + f_4^2 [1 - \cos(x)]} \right\} \right)},$$

$$A = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[1 + \exp(\delta \{ f_1 + \sqrt{f_2^2 + f_3^2 y^2 + f_4^2 [1 - \cos(x)]} \}) \right]^{-1} dx dy,$$

$$\delta = \Delta/k_b T, \quad \Omega = eE_1 d/\hbar, \quad \sin \varphi_n = 1/\sqrt{1 + (l\Omega/\nu + n\omega)^2},$$

$$\cos \varphi_n = (l\Omega/\nu + n\omega)/\sqrt{1 + (l\Omega/\nu + n\omega)^2}, \quad \omega = \omega/\nu.$$

Разложим функцию плотности тока (5) в ряд Фурье:

$$j(t) = a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos k\omega t + b_k \sin k\omega t), \quad (6)$$

где

$$a_0 = j_0 \sum_l B_l \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2 \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \sin \varphi_n \cos \varphi_n, \quad (7)$$

$$a_k = j_0 \sum_l B_l \left\{ J_0 \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) J_k \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) (\sin \varphi_k \cos \varphi_k + (-1)^k \sin \varphi_{-k} \cos \varphi_{-k}) + \right. \\ \left. + \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \left[J_{k-2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) (\sin^2 \varphi_{k-2n} - (-1)^{k-2n} \sin^2 \varphi_{-(k-2n)}) - J_{k+2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \times \right. \right. \\ \left. \times (\sin^2 \varphi_{k+2n} - (-1)^{k+2n} \sin^2 \varphi_{-(k+2n)}) \right] + J_{2n-1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \left[J_{k+2n-1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \times \right. \\ \left. \times (\sin \varphi_{k+2n-1} \cos \varphi_{k+2n-1} - (-1)^{k+2n-1} \sin \varphi_{-(k+2n-1)} \cos \varphi_{-(k+2n-1)}) - J_{k-2n+1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \times \right. \\ \left. \left. \times (\sin \varphi_{k-2n+1} \cos \varphi_{k-2n+1} - (-1)^{k-2n+1} \sin \varphi_{-(k-2n+1)} \cos \varphi_{-(k-2n+1)}) \right] \right\}, \quad (8)$$

$$\begin{aligned}
b_k = j_0 \sum_l B_l \left\{ -J_0 \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) J_k \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) (\sin^2 \varphi_k - (-1)^k \sin^2 \varphi_{-k}) + \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) \times \right. \\
\times \left[J_{k-2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) (\sin \varphi_{k-2n} \cos \varphi_{k-2n} + (-1)^{k-2n} \sin \varphi_{-(k-2n)} \cos \varphi_{-(k-2n)}) - J_{k+2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) \times \right. \\
\times (\sin \varphi_{k+2n} \cos \varphi_{k+2n} + (-1)^{k+2n} \sin \varphi_{-(k+2n)} \cos \varphi_{-(k+2n)}) \left. \right] + J_{2n-1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) \times \\
\times \left[J_{k-2n+1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) (\sin^2 \varphi_{k-2n+1} + (-1)^{k-2n+1} \sin^2 \varphi_{-(k-2n)}) - J_{k+2n-1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) \times \right. \\
\left. \left. \times (\sin^2 \varphi_{k+2n-1} + (-1)^{k+2n-1} \sin^2 \varphi_{-(k+2n-1)}) \right] \right\}. \quad (9)
\end{aligned}$$

Непосредственно из анализа формул (8) и (9) следует, что амплитуды четных гармоник тока $\sqrt{a_k^2 + b_k^2}$, при $k = 2, 4, \dots$ в случае отсутствия постоянного поля $E_1 \neq 0$ равны нулю, поскольку при этом $\sin \varphi_k = \nu / \sqrt{\nu^2 + k^2 \omega^2}$, $\cos \varphi_k = k\omega / \sqrt{\nu^2 + k^2 \omega^2}$, и выполняются равенства вида: $\sin \varphi_k \cos \varphi_k + \sin \varphi_{-k} \cos \varphi_{-k} \equiv 0$ и $\sin^2 \varphi_k - \sin^2 \varphi_{-k} \equiv 0$. При этом нечетные гармоники тока присутствуют. Аналогичный вывод о генерации нечетных гармоник в углеродных нанотрубках под воздействием переменного электрического поля приведен в работе [15].

Дальнейший анализ формул (8), (9) в силу их сложности производился численно.

3. Основные результаты численного анализа

При условии равенства ширин полос щелевой и бесщелевой модификаций графена ($d_1 = d_2$), а также в отсутствие сдвига между серединой запрещенной зоны щелевой модификации и дираковской точкой бесщелевой модификации были подобраны коэффициенты для закона дисперсии (1): $f_1 = -0.007479$, $f_2 = 0.428302$, $f_3 = 0.251077$, $f_4 = 0.327737$. Относительная ошибка в расчете спектра (1) составляет не более 1%. Одноминизонным приближением можно пользоваться при выполнении условия $4\hbar v_f \leq \Delta d$, где $v_f \approx 10^8$ см/с- скорость Ферми в графене. Оно накладывает ограничения на температуру T , частоту переменного и напряженность постоянного электрического поля: $k_b T \ll \varepsilon_g$, $\hbar\omega \ll \varepsilon_g$, $eE_1 d \ll \varepsilon_g$. Ширина запрещенной зоны между первой и второй минизонами $\varepsilon_g \approx 0.6\Delta$. Энергетическая щель между самой нижней минизонной для электронов и самой верхней минизонной для дырок равна $\varepsilon_{g0} \approx 0.9\Delta$. С учетом этого были выбраны следующие параметры: $T \sim 70^\circ K$, $n \sim 10^{10}$ см⁻², $\nu \sim 10^{11}$ с⁻¹, $d \sim 10^{-6}$ см, $2\Delta \approx 0.26 eV (SiC)$, $j_0 \approx 40$ МА/см. Численный анализ показал, что коэффициенты B_l быстро убывают с ростом номера l .

На рис. 2 представлены графики зависимости амплитуды первой гармоники тока $\sqrt{a_1^2 + b_1^2}$ от безразмерной величины амплитуды переменного поля $eE_0 d / \hbar\nu$ для разных значений постоянного поля E_1 . Из графиков видно, что амплитуда первой гармоники тока с ростом амплитуды переменного поля испытывает сложные убывающие осцилляции. Это дает возможность в широком интервале значений управлять амплитудой данной гармоники с помощью переменного электрического поля. Особенно перспективным в плане практического приложения представляется начальная область полей, поскольку именно здесь амплитуда осцилляций максимальна. С увеличением напряженности постоянного поля хорошо виден сдвиг главного максимума амплитуды в сторону больших значений амплитуды

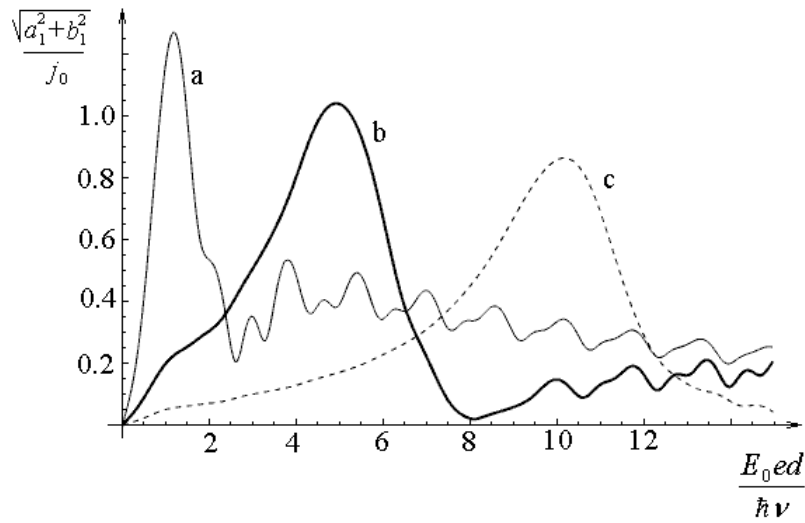


РИС. 2. Зависимость первой гармоники плотности тока от амплитуды переменного электрического поля: а) $eE_1 d / \hbar \nu = 1$, б) $eE_1 d / \hbar \nu = 5$, в) $eE_1 d / \hbar \nu = 10$; $\omega / \nu = 0.5$

переменного электрического поля. Увеличение частоты приложенного поля ω также приводит к растяжению графика вдоль оси X, и как следствие, смещению максимумов амплитуды гармоники в сторону больших амплитуд напряженности приложенного поля.

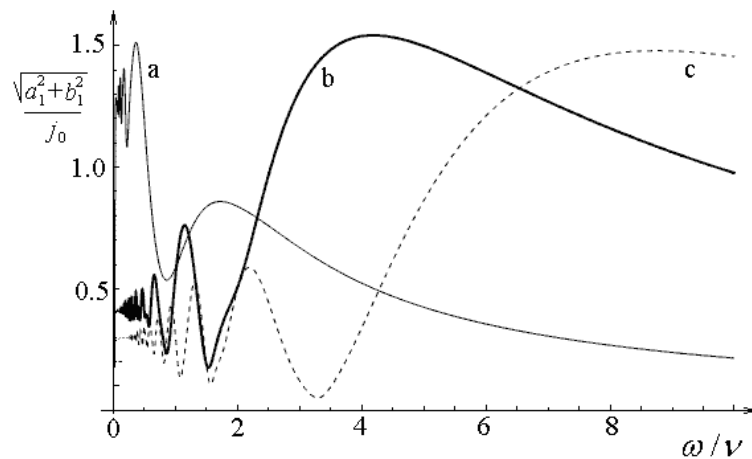


РИС. 3. Зависимость первой гармоники плотности тока от частоты переменного электрического поля: $eE_1 d / \hbar \nu = 1$; а) $eE_0 d / \hbar \nu = 1$, б) $eE_0 d / \hbar \nu = 5$, в) $eE_0 d / \hbar \nu = 10$

Амплитуда первой гармоники тока от величины обезразмеренной напряженности постоянного поля также испытывает сложные убывающие осцилляции. Несмотря на сложный, осциллирующий характер зависимостей можно отметить, что наложение на систему постоянного и переменного электрического поля приводит к ослаблению первой гармоники.

Зависимость амплитуды первой гармоники тока от частоты переменного электрического поля для разных значений амплитуды переменного поля $eE_0 d / \hbar \nu$ приведена на рис. 3.

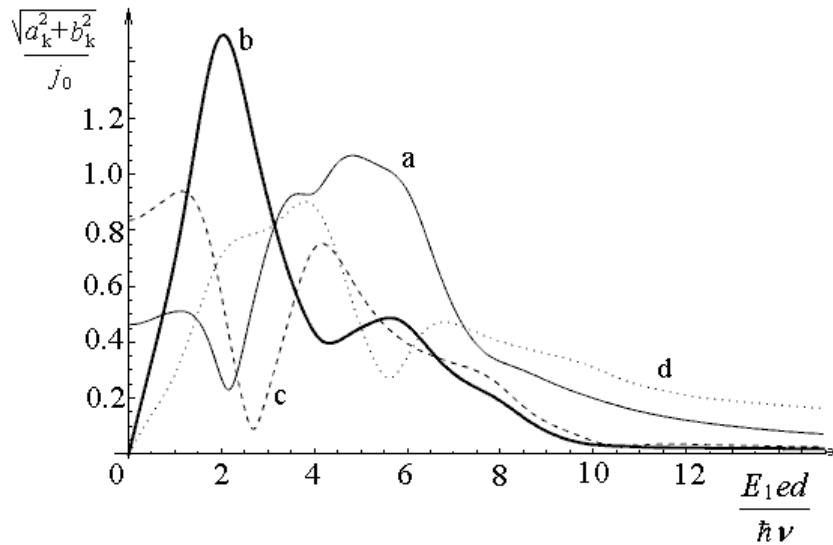


РИС. 4. Зависимость амплитуды первой (a), второй (b), третьей (c) и четвертой (d) гармоник от постоянного электрического поля: $eE_0 d / \hbar \nu = 5$, $\omega / \nu = 2$

Из графиков видно, что амплитуда первой гармоники тока с ростом частоты переменного поля испытывает сложные осцилляции.

Меняя характеристики приложенных полей E_1 , E_0 и ω , можно добиться существенного подавления или усиления соответствующей гармоники. На рис. 4 хорошо видно усиление второй гармоники (кривая b) при подавлении остальных при $eE_1 d / \hbar \nu = 2.5$ и небольшое преобладание четвертой гармоники (кривая d) при $eE_1 d / \hbar \nu > 8$.

В отличие от полупроводниковых СР [16], в СР на основе графена описанные выше осцилляции гармоник плотности тока должны наблюдаться при значительно меньших электрических полях.

4. Заключение

В заключении сформулируем основные выводы из данной работы:

- (1) Получено и численно проанализировано выражение для амплитуд высших гармоник плотности тока в СР на основе графена под воздействием постоянного и переменного электрических полей, поляризованных вдоль ее оси.
- (2) Наложение на систему постоянного поля приводит к возникновению четных гармоник плотности тока, в то время как первая гармоника ослабляется.
- (3) Зависимости амплитуд высших гармоник плотности тока от характеристик приложенных к системе полей имеет немонотонный, осциллирующий характер. Это дает возможность в широком интервале значений управлять амплитудой гармоники.
- (4) При определенных соотношениях величин E_1 , E_0 , ω и ν возможно усиление одних гармоник и подавление других.

Работа поддержана грантом РФФИ №10-02-97001-р_поволжье_a.

Литература

- [1] Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Белова Е.Э. и др. Сверхрешетки металл – полупроводник (полуметалл) на графитовом листе с вакансиями // Письма в ЖЭТФ. — 2006. — 84(3). — С. 141-145.
- [2] Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Белова Е.Э. и др. Сверхрешетки, состоящие из “линий” адсорбированных пар атомов водорода на графене // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — 85(1). — С. 84-89.

- [3] Sevincli H., Topsakal M., Ciraci S. Superlattice structures of graphene-based nanoribbons // *Phys. Rev. B.* — 2008. — 78. — P. 245402-245409.
- [4] Isacsson A., Jonsson L.M., Kinaret J.M. et al. Electronic superlattices in corrugated graphene // *Phys. Rev. B.* — 2008. — 77. — P. 035423-135428.
- [5] Крючков С.В., Кухарь Е.И., Яковенко В.А. Взаимное выпрямление двух синусоидальных волн с ортогональными плоскостями поляризации в сверхрешетке на основе графена // *Известия РАН. Серия физическая.* — 2010. — 74(12). — С. 1749-1751.
- [6] Barbier M., Vasilopoulos P., Peeters F.M. Single-layer and bilayer graphene superlattices: collimation, additional Dirac points and Dirac lines // *Phil. Trans. R. Soc. A.* — 2010. — 368. — P. 5499-5524.
- [7] Bolmatov D., Chung-Yu Mou Graphene-based modulation-doped superlattice structures // *ЖЭТФ.* — 2011. — 139(1). — P. 119-125.
- [8] Ратников П. В. Сверхрешетка на основе графена на полосчатой подложке // *Письма в ЖЭТФ.* — 2009. — 90(6). — С. 515-520.
- [9] Завьялов Д.В., Конченков В.И., Крючков С.В. Выпрямление поперечного тока в сверхрешетке на основе графена // *ФТП,* — 2012. — 46(1). — С. 113-120.
- [10] Mikhailov S.A. Non-linear electromagnetic response of graphene // *Europhys. Lett.* — 2007. — 79. — P. 27002-27008.
- [11] Dean J.J., van Driel H.M. Second harmonic generation from graphene and graphitic films // *Appl. Phys. Lett.* — 2009. — 95. — P. 261910-261912.
- [12] Dean J.J., van Driel H.M. Graphene and few-layer graphite probed by second-harmonic generation: Theory and experiment // *Phys. Rev. B.* — 2010. — 82. — P. 125411-125421.
- [13] Glazov M.M. Second harmonic generation in graphene // *Письма в ЖЭТФ,* — 2011. — 93(7). — С. 403-413.
- [14] Белоненко М.Б., Глазов С.Ю., Мещерякова Н.Е. Нелинейная проводимость однослойных углеродных нанотрубок типа “зигзаг” // *Известия РАН. Серия физическая.* — 2009. — 73(12). — С. 1709-1712.
- [15] Белоненко М.Б., Глазов С.Ю., Мещерякова Н.Е. Влияние постоянного электрического поля на процесс генерации высших гармоник в углеродных нанотрубках полупроводникового типа // *Оптика и спектроскопия.* — 2010. — 108(5). — С. 818-823.
- [16] Shmelev G.M., Valgutskova E.N., Epshtein E.M. On the second harmonic generation in superlattices // *arXiv:cond-mat/0410246.* — 2004.