

## ФИЗИКА НАШИХ ДНЕЙ

Оптические свойства графена  
и полупроводников типа  $A_4B_6$ 

Л.А. Фальковский

*Рассмотрена частотная дисперсия динамической проводимости графена, многослойной системы графеновых слоев и полупроводников  $A_4B_6$  в зависимости от температуры и концентрации носителей в области частот больших, чем частота релаксации носителей, но малых по сравнению с шириной зоны проводимости. Узкая запрещенная зона и линейность электронного спектра — общая черта этих материалов — приводят к особенностям у диэлектрической проницаемости (логарифмической в вещественной части и конечному скачку в мнимой) на пороге прямых межзонных переходов и, соответственно, к аномально большой величине диэлектрической постоянной у полупроводников  $A_4B_6$ . Рассчитанные и измеренные значения диэлектрических констант находятся в очень хорошем согласии друг с другом. Коэффициент прохождения через графен в оптическом диапазоне не зависит от частоты, а его отличие от единицы дает значение постоянной тонкой структуры. Различие в размерности, равной трем у полупроводников и двум у графена, выражается в различном характере плазмонов, а также электромагнитных волн, которые могут существовать при высоком допировании (или в условиях эффекта поля) вблизи порога поглощения.*

PACS numbers: 71.20.Nr, 78.20.Bh, 78.20.Ci, 78.66.Tr

DOI: 10.3367/UFNr.0178.200809b.0923

## Содержание

1. Введение (923).
  2. Электронные возбуждения с линейным спектром (924).
  3. Общее выражение для дисперсии проводимости зонного металла (925).
  4. Диэлектрическая проницаемость полупроводников IV–VI в оптической области (926).
  5. Динамическая проводимость графена (927).
  6. Электродинамика графеновых слоев (930).  
6.1. Оптика монослоя. 6.2. Спектроскопия графеновых сверхрешеток.
  7. Продольные плазмоны (932).
  8. Заключение (933).
- Список литературы (933).

## 1. Введение

Настоящий бум, который вызывает в последние два-три года графен (моноатомный слой графита, см. обзорные статьи [1–4]), побуждает обратиться и к его трехмерному аналогу — полупроводникам  $A_4B_6$ , у которых между

зоной проводимости и валентной зоной имеется узкая запрещенная щель  $\varepsilon_g \sim 0,1$  эВ. Впрочем, у графена эта щель еще меньше. Поскольку зона проводимости и валентная зона имеют здесь различную четность, спектр возбуждений является линейным в широком энергетическом интервале,  $\varepsilon_g \ll \varepsilon \ll \varepsilon_{at}$ , где  $\varepsilon_{at} \sim 5$  эВ — величина атомного масштаба. Это обстоятельство приводит к интересным особенностям у различных откликов. Так, еще раньше обсуждались и были наблюдаемы особенности магнитной восприимчивости PbTe [5, 6], а также диэлектрической [7] и магнитной [8] восприимчивости висмута, в спектре которого тоже имеется узкая запрещенная щель. Несомненный интерес представляет сопоставление диэлектрической проницаемости графена и узкощелевых полупроводников, для которых, в отличие от графена<sup>1</sup>, она достаточно хорошо экспериментально изучена [9, 10]. Такое сравнение дает возможность проверить справедливость самого подхода к графену как к системе "безмассовых дираковских фермионов".

В данной статье мы обсудим особенности диэлектрической проницаемости графена и полупроводников  $A_4B_6$ . На примере изотропной модели узкощелевого проводника диэлектрическая проницаемость при нулевой температуре вычислялась ранее в работе [11]. Для  $A_4B_6$  она рассматривалась в [12] в рамках теории электронного спектра, учитывающей различие потенциалов атомов свинца и, например, Te (или Se, или S) посредством параметра ионности. При этом узкая запрещенная щель

Л.А. Фальковский. Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН,  
ул. Косыгина 2, 119334 Москва, Российская Федерация  
Тел. (495) 137-32-44, (495) 702-93-17. Факс (495) 938-20-77  
E-mail: falk@itp.ac.ru

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,  
142190 Троицк, Московская обл., Российская Федерация

Статья поступила 31 марта 2008 г.

<sup>1</sup> Когда статья уже была направлена в печать, появилось сообщение о наблюдении динамической проводимости графена в оптической области [27].

вообще не вошла в результат. Компьютерные вычисления диэлектрической проницаемости (см. [13, 14]) проводились следующим образом. Сначала в некотором приближении, из первых принципов, рассчитывалась зонная структура этих полупроводников. Затем с помощью "золотого правила" Ферми вычислялась мнимая часть диэлектрической функции

$$\epsilon''(\omega) \sim \int |d_{vc}|^2 \delta[\epsilon_c(\mathbf{p}) - \epsilon_v(\mathbf{p}) - \hbar\omega] \frac{2d^3p}{(2\pi)^3}, \quad (1)$$

куда входит матричный элемент дипольного момента  $d_{vc}$ , а затем вещественная часть восстанавливалась с помощью соотношения Крамерса–Кронига. При таких вычислениях остаются невыясненными физические особенности проницаемости; кроме того, эти вычисления требуют известной изощренности, в частности, по той причине, что интеграл, определяющий вещественную часть, содержит сингулярности. Мы покажем, что, используя линейность электронного спектра и измеренные на опыте величины запрещенной щели и межзонного матричного элемента импульса, можно получить простые аналитические результаты для частот, соответствующих инфракрасной и видимой областям спектра. Рассматриваемые частоты ограничены сверху значением порядка 1 эВ, потому что лишь для этой области применима линейная аппроксимация электронного спектра.

## 2. Электронные возбуждения с линейным спектром

Типичный электронный спектр полупроводника IV–VI показан на рис. 1 для главных направлений в зоне Бриллюэна. В окрестности точки L две близкие зоны можно найти с помощью эффективного гамильтониана [15]:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_g & H_1 \\ H_1^+ & -\epsilon_g \end{pmatrix}, \quad H_1 = \begin{pmatrix} v_\ell p_z & v_t p_- \\ v_t p_+ & -v_\ell p_z \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где  $p_\pm = p_x \pm ip_y$ , а  $v_t$ ,  $v_\ell$  — константы. Значения этих констант почти не меняются от одного полупроводника IV–VI к другому [16, 17]:

$$v_\ell = 3,8 \times 10^7 \text{ см с}^{-1}, \quad v_t = 5,1 \times 10^7 \text{ см с}^{-1}. \quad (3)$$

На главной диагонали  $H$  в (2) можно написать квадратичные по  $p_j$  слагаемые, но мы этого не делаем, поскольку они вносят в проницаемость вклад, малый по параметру  $\epsilon_g/\epsilon_{at}$ .

Собственные значения гамильтониана

$$\epsilon_{1,2}(\mathbf{p}) = \pm [\epsilon_g^2 + v_\ell^2 p_z^2 + v_t^2 p_\pm^2]^{1/2} \quad (4)$$

двукратно вырождены по спину. Нам понадобятся матричные элементы скорости  $\mathbf{v} = \partial H / \partial \mathbf{p}$  в представлении, в котором гамильтониан диагонален. Легко найти соответствующее унитарное преобразование

$$U = \begin{pmatrix} \frac{k_z}{n_1} & \frac{k_-}{n_1} & \frac{k_z}{n_2} & \frac{k_-}{n_2} \\ \frac{k_+}{n_1} & -\frac{k_z}{n_1} & \frac{k_+}{n_2} & -\frac{k_z}{n_2} \\ a_1 & 0 & -a_2 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 & -a_2 \end{pmatrix},$$

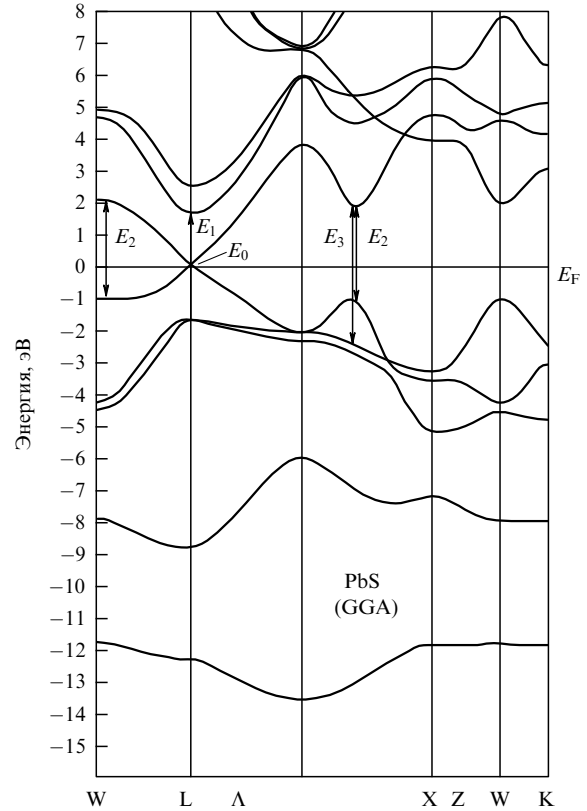


Рис. 1. Электронный спектр PbS [14]. GGA — обобщенное градиентное приближение.

где  $k_z = v_\ell p_z$ ,  $k_\pm = v_t p_\pm$ ,  $n_{1,2} = \sqrt{2\epsilon_1(\epsilon_1 \mp \epsilon_g)}$ ,  $a_{1,2} = \sqrt{(\epsilon_1 \mp \epsilon_g)/2\epsilon_1}$ , и матрицу скорости в этом представлении

$$U^{-1} \mathbf{v} U = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{11} & 0 & \mathbf{v}_{13} & \mathbf{v}_{14} \\ 0 & \mathbf{v}_{11} & -\mathbf{v}_{14}^* & \mathbf{v}_{13}^* \\ \mathbf{v}_{13}^* & -\mathbf{v}_{14} & -\mathbf{v}_{11} & 0 \\ \mathbf{v}_{14}^* & \mathbf{v}_{13} & 0 & -\mathbf{v}_{11} \end{pmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{11} &= \frac{\partial \epsilon_1}{\partial \mathbf{p}}, \\ \mathbf{v}_{13} &= -\frac{2\{\epsilon_g[v_\ell^2 p_z \mathbf{e}_z + v_t^2(p_x \mathbf{e}_x + p_y \mathbf{e}_y)] + i\epsilon_g v_t^2(p_x \mathbf{e}_y - p_y \mathbf{e}_x)\}}{n_1 n_2}, \\ \mathbf{v}_{14} &= \frac{2v_\ell v_t \epsilon_1(p_- \mathbf{e}_z - p_z \mathbf{e}_-)}{n_1 n_2} \end{aligned} \quad (5)$$

и  $\mathbf{e}_j$  — единичные орты, направленные вдоль координатных осей точки L.

Электронный спектр графена [18] показан на рис. 2. В графене запрещенная щель, которая имеет спин-орбитальное происхождение, не превышает 0,1 К. Мы пренебрежем ею с самого начала и будем рассматривать две вырожденные по спину зоны, которые описываются в окрестности точек K зоны Бриллюэна гамильтонианом

$$H(\mathbf{p}) = v_0 \begin{pmatrix} 0 & ip_\pm \\ -ip_\mp & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

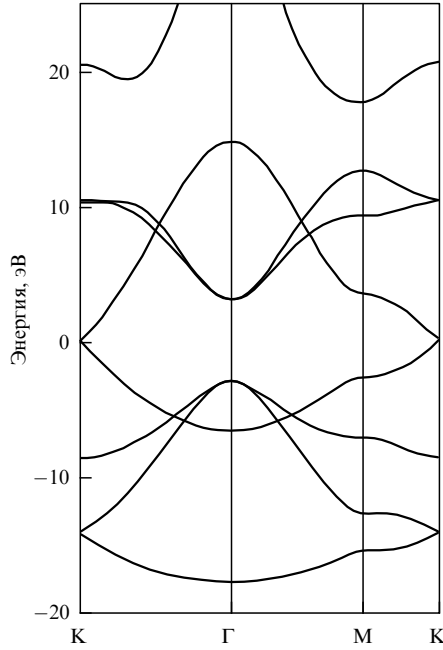


Рис. 2. Электронный спектр графена.

Собственные значения гамильтониана равны  $\varepsilon_{1,2} = \pm v_0 p$ , а матрица скорости в представлении, в котором гамильтониан диагонален, имеет вид

$$\mathbf{v} = \frac{v_0}{p} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x p_x + \mathbf{e}_y p_y & i(\mathbf{e}_x p_y - \mathbf{e}_y p_x) \\ -i(\mathbf{e}_x p_y - \mathbf{e}_y p_x) & -\mathbf{e}_x p_x - \mathbf{e}_y p_y \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где  $p = (p_x^2 + p_y^2)^{1/2}$ . Значение  $v_0$  измерено:  $v_0 = 10^8$  см  $\text{с}^{-1}$ .

Заметим, что вид гамильтонианов (2), (6) навязывается симметрией  $C_{3v}$  точек L и K и потому не связан с какими-либо модельными предположениями.

### 3. Общее выражение для дисперсии проводимости зонного металла

Общее выражение для проводимости электронов в металле можно получить, записав оператор тока

$$j_i(x) = e\tilde{\psi}^+(x')v_{x'x}^i\tilde{\psi}(x) - \frac{e^2}{c}\tilde{\psi}^+(x')(m^{-1})_{x'x}^{ij}\tilde{\psi}(x)A_j, \quad (8)$$

где  $x' \rightarrow x$ , а операторы скорости  $v_{x'x}^i$  и эффективной массы  $(m^{-1})_{x'x}^{ij}$  возникают при разложении гамильтониана по вектор-потенциалу  $A_j$  переменного поля. Знак "тильда" в обозначении оператора  $\tilde{\psi}$  означает, что его следует брать в представлении взаимодействия с возмущением

$$V = -\frac{e}{c} \int \psi^+(x')v_{x'x}^i\psi(x)A_i(x) d^{d+1}x, \quad (9)$$

где размерность интегрирования  $d$  равна 2 в случае графена и 3 в случае полупроводников IV–VI. Разлагая первое слагаемое в (8) по взаимодействию (9), мы приходим, как обычно, к запаздывающему коррелятору четырех  $\psi$ -операторов. При конечных температурах фурье-компонента этого коррелятора (по разности коор-

динат и мнимой временной переменной)

$$\mathcal{P}(\omega_l, \mathbf{k}) = T \sum_{\mathbf{p}, \omega_n} \text{Tr} \{ v^i \mathcal{G}(p_+) v^j \mathcal{G}(p_-) \}$$

выражается через температурную гриновскую функцию:

$$\mathcal{G}(p) = [i\omega_n - H(\mathbf{p})]^{-1},$$

где использовано обозначение  $p_{\pm} = (\omega_n \pm \omega_l/2, \mathbf{p} \pm \mathbf{k}/2)$ , выполняется суммирование по фермионным частотам  $\omega_n = 2\pi T(n + 1/2)$ , а шпур берется по зонному индексу гамильтониана. Например в случае графена этот шпур имеет вид

$$\text{Tr} \{ v^i \mathcal{G} v^j \mathcal{G} \} = v_{11}^i \mathcal{G}_{11} v_{11}^j \mathcal{G}_{11} + v_{22}^i \mathcal{G}_{22} v_{22}^j \mathcal{G}_{22} + v_{12}^i \mathcal{G}_{22} v_{21}^j \mathcal{G}_{11} + v_{21}^i \mathcal{G}_{11} v_{12}^j \mathcal{G}_{22}$$

в представлении, где гамильтониан и, следовательно, гриновская функция диагональны. Теперь легко выполняется суммирование по частотам  $\omega_n$ . Например для произведения гриновских функций с несовпадающими зонными индексами находим

$$T \sum_{\omega_n} \mathcal{G}_{11}(p_+) \mathcal{G}_{22}(p_-) = \frac{f[\varepsilon_1(\mathbf{p}_-)] - f[\varepsilon_2(\mathbf{p}_+)]}{i\omega_l - \varepsilon_2(\mathbf{p}_+) + \varepsilon_1(\mathbf{p}_-)},$$

где  $f(\varepsilon)$  — фермиевская функция с химическим потенциалом  $\mu$ . Переход к вещественной частоте внешнего поля осуществляется, как обычно, аналитическим продолжением с дискретного набора частот  $\omega_l = 2\pi l/T$ , что в данном случае можно сделать путем простой замены  $i\omega_l \rightarrow \omega + i\delta$ , где  $\delta$  — бесконечно малая положительная величина.

В формуле (8) еще имеется второе, "диамагнитное", слагаемое. Вместо того, чтобы его вычислять, можно воспользоваться тем соображением, что ток должен обращаться в нуль, если вектор-потенциал не меняется во времени и в пространстве. В данном случае, когда постоянного магнитного поля нет, это означает, что ток должен обращаться в нуль при нулевой частоте, и мы можем для определения полного тока просто вычесть из первого выражения его значение при  $\omega = 0$ . В результате находим проводимость

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(\omega, k) &= \\ &= 2ie^2 \sum \left\{ \frac{v_{11}^i v_{11}^j \{ f[\varepsilon_a(\mathbf{p}_-)] - f[\varepsilon_a(\mathbf{p}_+)] \}}{[\varepsilon_a(\mathbf{p}_+) - \varepsilon_a(\mathbf{p}_-)] [\omega - \varepsilon_a(\mathbf{p}_+) + \varepsilon_a(\mathbf{p}_-)]} + \right. \\ &\quad \left. + 2\omega \frac{v_{1a}^i v_{a1}^j \{ f[\varepsilon_1(\mathbf{p}_-)] - f[\varepsilon_2(\mathbf{p}_+)] \}}{[\varepsilon_2(\mathbf{p}_+) - \varepsilon_1(\mathbf{p}_-)] \{ (\omega + i\delta)^2 - [\varepsilon_2(\mathbf{p}_+) - \varepsilon_1(\mathbf{p}_-)]^2 \}} \right\}, \quad (10) \end{aligned}$$

где суммирование (интегрирование) проводится по двумерному квазиимпульсу  $\mathbf{p}$  в случае графена и по трехмерному — для полупроводников IV–VI, а кроме того, по зонному индексу  $a$  (суммирование по спину привело к множителю 2 перед знаком суммы).

Первое слагаемое в (10) представляет собой внутризонный вклад — в нем все величины относятся к одной энергетической зоне. В квазиклассическом пределе,  $kv \ll (T, \mu)$ , оно совпадает с обычным выражением Друде–Больцмана, и учет частоты столкновений сводится здесь, как известно, к замене бесконечно малой  $\delta$  на

частоту столкновений  $\tau^{-1}$ , т.е. к замене  $\omega \rightarrow \omega + i\tau^{-1}$ . Второе слагаемое в (10) описывает межзонные переходы, и в нем  $a \neq 1$ . Сумма квадратов стоящих здесь матричных элементов представляет квадрат дипольного момента и находится с помощью выражений (5) и (7).

Подчеркнем, что формула (10) имеет совершенно общий характер, поскольку при ее выводе [19] не были использованы какие-либо конкретные выражения для электронного спектра.

#### 4. Диэлектрическая проницаемость полупроводников IV – VI в оптической области

В оптической области пространственная дисперсия проводимости несущественна и мы можем в (10) устремить  $k \rightarrow 0$ . С помощью формул (5) находим для квадратов матричных элементов в (10):

$$(v_{11}^x)^2 = \frac{v_t^4 p_x^2}{\varepsilon_t^2},$$

$$v_{13}^x v_{31}^x + v_{14}^x v_{41}^x = v_t^2 \left( 1 - \frac{v_t^2 p_x^2}{\varepsilon_t^2} \right).$$

Интегрирование в формуле (10) удобно проводить, вводя энергетическую переменную  $\varepsilon$  согласно (4) и полярные углы:

$$p_z = \sqrt{\varepsilon^2 - \varepsilon_g^2} \frac{\cos \theta}{v_\ell},$$

$$p_x = \sqrt{\varepsilon^2 - \varepsilon_g^2} \frac{\sin \theta \cos \varphi}{v_t},$$

$$p_y = \sqrt{\varepsilon^2 - \varepsilon_g^2} \frac{\sin \theta \sin \varphi}{v_t}.$$

При интегрировании по углам недиагональные элементы тензора проводимости обращаются в нуль, как и должно быть в случае симметрии  $C_{3v}$ , которой обладает точка L. Таким образом, получаем для внутризонной проводимости

$$\sigma_{xx}^{\text{intra}}(\omega) = \frac{-ie^2}{3\pi^2 v_\ell \omega} \int_{\varepsilon_g}^{\varepsilon_{\text{at}}} [f'(\varepsilon) + f'(-\varepsilon)] (\varepsilon^2 - \varepsilon_g^2)^{3/2} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \quad (11)$$

и для межзонной проводимости

$$\sigma_{xx}^{\text{inter}}(\omega) = \frac{2ie^2 \omega}{3\pi^2 v_\ell} \times \int_{\varepsilon_g}^{\varepsilon_{\text{at}}} [f(-\varepsilon) - f(\varepsilon)] \frac{(\varepsilon^2 - \varepsilon_g^2)^{1/2}}{(\omega + i\delta)^2 - 4\varepsilon^2} \left( 1 + \frac{\varepsilon_g^2}{2\varepsilon^2} \right) d\varepsilon. \quad (12)$$

Последний интеграл расходится на верхнем пределе, где нельзя использовать линейное разложение спектра. Однако основной вклад в интеграл происходит от области  $\varepsilon_g \ll \varepsilon \ll \varepsilon_{\text{at}}$ . Поэтому с логарифмической точностью мы обрезаем интеграл при  $\varepsilon = \varepsilon_{\text{at}}$ . На рисунке 1, где показан электронный спектр рассматриваемых полупроводников, мы видим, что параметр обрезания  $\varepsilon_{\text{at}}$  должен приблизительно равняться 8 эВ.

В зоне Бриллюэна имеются четыре точки L, и надо просуммировать их вклады. При этом следует учесть, что компонента проводимости  $\sigma_{zz}$  в осях, связанных с точкой L, отличается от  $\sigma_{xx}$  заменой  $v_\ell$  на  $v_t^2/v_\ell$ . По-

вернув оси координат в каждой точке L к общим осям и суммируя по этим точкам, находим полную проводимость, у которой отличны от нуля лишь диагональные, равные друг другу компоненты  $\sigma(\omega)$ . Их можно получить, произведя в формулах (11) и (12) замену

$$\frac{1}{v_\ell} \rightarrow \frac{8}{3v_\ell} + \frac{4v_\ell}{3v_t^2} \equiv \frac{1}{v}.$$

По измеренным значениям (3) вычисляем величину  $v = 1,12 \times 10^7$  см с<sup>-1</sup>, общую для рассматриваемых полупроводников. Наконец, диэлектрическая проницаемость  $\epsilon(\omega)$  связана с проводимостью:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{4\pi i \sigma(\omega)}{\omega}, \quad (13)$$

где  $\epsilon_0$  представляет решеточный (фононный) вклад.

В предельном случае  $(T, \varepsilon_g) = 0$  получаем очень простой результат:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{e^2}{3\pi \hbar v} \left[ -\frac{4\mu^2}{\omega^2} + \ln \frac{4\varepsilon_{\text{at}}^2}{|\omega^2 - 4\mu^2|} + i\pi \theta(\omega - 2\mu) \right]. \quad (14)$$

Первое слагаемое в квадратных скобках — это друде-больцмановский внутризонный вклад, два других — логарифм и  $\theta$ -функция — результат межзонных переходов. На пороге поглощения,  $\omega = 2\mu$ , логарифмическая сингулярность имеется у вещественной части проницаемости. Она обрезается температурой. Вычисление показывает, что при низких, но конечных температурах следует произвести замену:

$$\omega^2 - 4\mu^2 \rightarrow |\omega^2 - 4\mu^2| + 4\omega T.$$

Если частота столкновений  $\nu$  носителей играет более существенную роль, чем температура, но мала в сравнении с химическим потенциалом, то соответствующая замена имеет вид

$$\omega^2 - 4\mu^2 \rightarrow [(\omega^2 - 4\mu^2)^2 + (2\omega\nu)^2]^{1/2},$$

$$\theta(\omega - 2\mu) \rightarrow \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left( \frac{\omega - 2\mu}{\nu} \right).$$

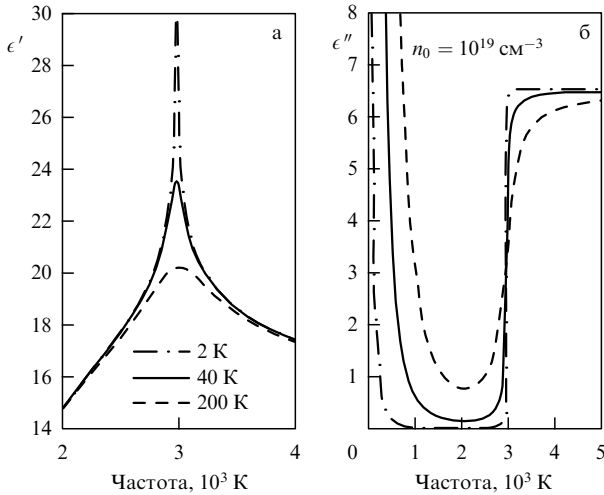
Простые формулы получаются и для чистых полупроводников при нулевой температуре, когда зона проводимости пуста, а валентная — заполнена. Мнимая часть проницаемости отлична от нуля при  $\omega > 2\varepsilon_g$ :

$$\epsilon''(\omega) = \frac{e^2}{3\hbar v \omega^3} (\omega^2 + 2\varepsilon_g^2) \sqrt{\omega^2 - 4\varepsilon_g^2}; \quad (15)$$

подобное выражение получено в работе [11]. Из формул (14), (15) видно, что мнимая часть проницаемости выходит на постоянное значение  $\epsilon''_0 = e^2/3\hbar v$  при  $\omega > 2 \max(\mu, \varepsilon_g)$ . Используя приведенное выше значение  $v$ , находим  $\epsilon''_0 = 6,5$  для всех рассматриваемых полупроводников.

В случае, когда носителей нет и  $\mu = 0$ , выражение для вещественной части проницаемости с логарифмической точностью по параметру  $1/\ln(\varepsilon_{\text{at}}/\varepsilon_g)$  можно записать в виде

$$\epsilon'(\omega) = \epsilon_0 + \frac{2e^2}{3\pi \hbar v} \ln \frac{\varepsilon_{\text{at}}}{\max\{\varepsilon_g, \omega/2\}}. \quad (16)$$



**Рис. 3.** Вещественная (а) и мнимая (б) части диэлектрической проницаемости полупроводника IV–VI; концентрация носителей (соответствующее значение химпотенциала  $\mu = 1491$  К при  $T = 0$  К предполагается большим по сравнению с величиной запрещенной зоны  $\varepsilon_g$ ) и их частота столкновений (в К) указаны на рисунке.

Отсюда и из (14) видно, что по сравнению с мнимой частью, вещественная часть диэлектрической проницаемости содержит большой логарифм. Кроме того, она, в отличие от мнимой части, зависит от конкретного материала через  $\varepsilon_g$  и убывает при  $\omega > 2 \max(\mu, \varepsilon_g)$ . Если частота  $\omega$  мала по сравнению с энергетической щелью  $2\varepsilon_g$ , можно получить для вещественной части выражение

$$\varepsilon_\infty = \varepsilon_0 + \frac{e^2}{3\pi\hbar v} \left( 2 \ln \frac{2\varepsilon_{at}}{\varepsilon_g} - \frac{5}{3} \right), \quad (17)$$

которое с точностью до членов  $2 \ln 2 - 5/3$ , т.е. с логарифмической точностью, совпадает с (16).

Фононные частоты в полупроводниках IV–VI порядка 100 К, т.е.  $10^{-2}$  эВ, а щель  $2\varepsilon_g \sim 0,15$  эВ. Поэтому под  $\varepsilon_\infty$  в соответствии с ее обозначением надо понимать высокочастотную диэлектрическую постоянную, положив при этом  $\varepsilon_0 = 1$ . Формула (17) с  $\varepsilon_g = 0,075$  эВ,  $\varepsilon_{at} = 8$  эВ и  $v = 1,12 \times 10^7$  см  $s^{-1}$  дает  $\varepsilon_\infty = 19,8$ .

Графики дисперсии диэлектрической проницаемости в инфракрасной области, построенные по полученным выше формулам для типичного значения  $\varepsilon_g = 0,1$  эВ, представлены на рис. 3. Их можно сравнить с результатами численных расчетов [14] и имеющихся измерений [9, 10], приведенными на рис. 4. Видно, что значение  $\varepsilon_0'' = 6,5$  и максимальное значение вещественной части  $\varepsilon'_{\max} \simeq 20-25$ , получаемые с помощью (12), в интервале между частотой  $2\varepsilon_g \simeq 0,15$  эВ рассматриваемого перехода и частотой  $\simeq 1,2$  эВ следующего перехода, воспроизводятся очень хорошо как численным расчетом, так и экстраполяцией измеренных значений со стороны более высоких частот  $\sim 0,5-0,8$  эВ, где  $\varepsilon''(\omega)$  выходит на плато. Кроме того, видно, что вещественная часть  $\varepsilon'(\omega)$  убывает, когда частота превышает пороговое значение  $2\varepsilon_g$  в согласии с выражением (16).

Принято считать, что одним из самых надежных способов определения щели в энергетическом спектре полупроводников является ее измерение по порогу оптического поглощения. Полученные результаты интерпретируются, в частности, как десятипроцентное

уменьшение щели у полупроводников IV–VI при повышении температуры от гелиевой до комнатной. Приведенные здесь вычисления позволяют оценить эффект влияния носителей на эти данные. На рисунке 5 видно, что присутствие небольшого числа носителей,  $\sim 10^{18}$  см  $^{-3}$ , может имитировать изменение щели с температурой.

Коэффициент отражения при нормальном падении излучения,

$$R = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1} \right|^2,$$

вычисленный по приведенным здесь формулам, показан на рис. 6. При низких частотах он определяется имеющимися в образце носителями. Затем коэффициент отражения быстро изменяется (от единицы до нуля) в окрестности частоты  $\omega_{pl}$ , приближенно определяемой уравнением

$$\varepsilon_0 - \frac{2e^2}{3\pi\hbar v} \left( \frac{2\mu^2}{\omega_{pl}^2} - \ln \frac{\varepsilon_{at}}{\mu} \right) = 0.$$

В этой области существенную роль играет большой логарифм, возникающий вследствие межзонных переходов. Далее значение коэффициента отражения  $\sim 0,4$  в основном определяется межзонным вкладом. На самом пороге  $\omega = 2\mu = 2982$  К, что отвечает концентрации носителей  $10^{19}$  см  $^{-3}$ , узкий пик в отражении, который должен наблюдаться при низких температурах и малых частотах релаксации носителей, повторяет форму вещественной части диэлектрической проницаемости. Условия его наблюдения можно записать в цифрах: температура  $T \sim 10$  К, время свободного пробега носителей  $\tau > 10^{-13}$  с при их концентрации  $10^{18}-10^{19}$  см  $^{-3}$ . При более высоких частотах межзонное поглощение (мнимая часть диэлектрической проницаемости) приводит к некоторому убыванию коэффициента отражения.

## 5. Динамическая проводимость графена

В зоне Бриллюэна графена имеются две точки К, в которых пересекаются зона проводимости и валентная зона. Суммируя вклады этих точек, интегрируя по углу двумерного вектора  $\mathbf{p}$  и переходя к переменной  $\varepsilon = v_0 p$ , находим проводимость [19, 21]

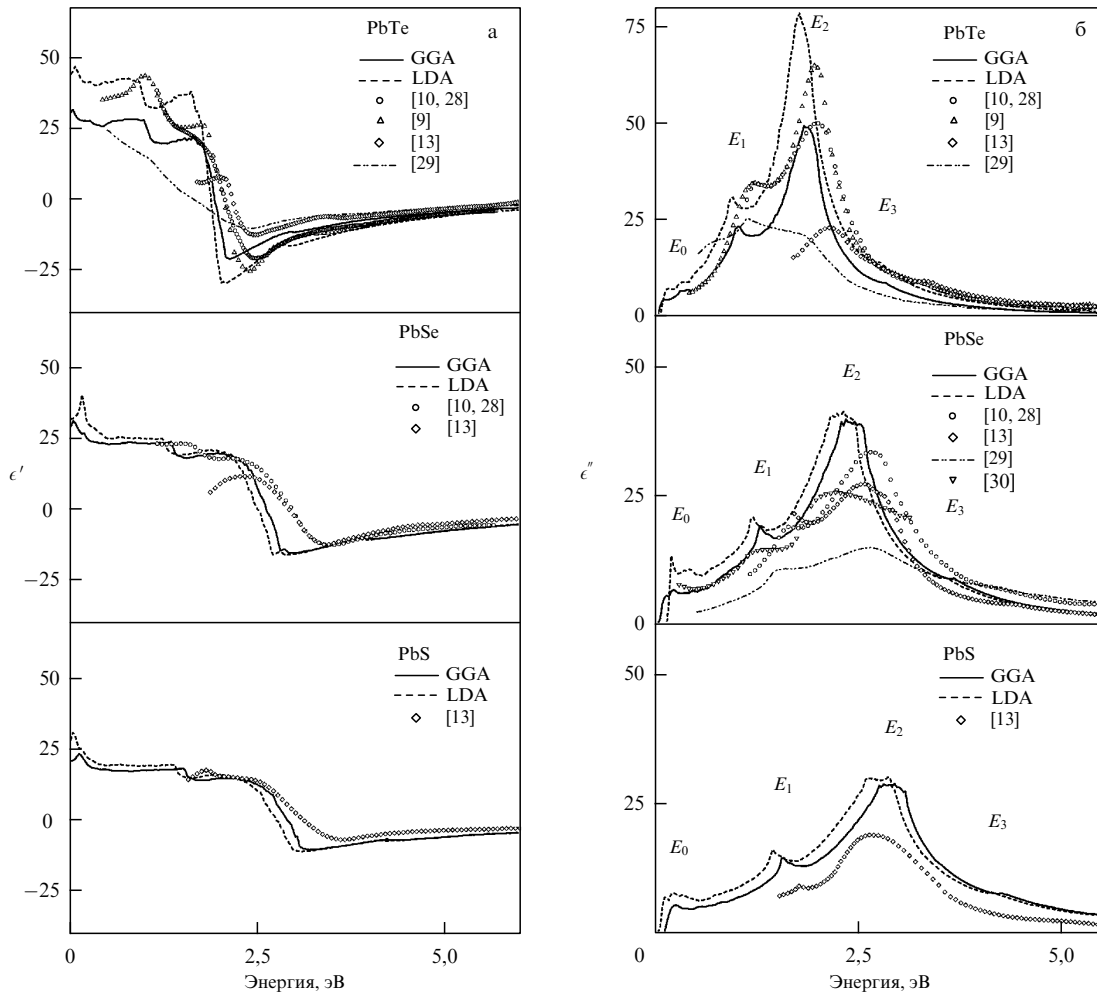
$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 \omega}{i\pi\hbar} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{|\varepsilon|}{\omega^2} \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} - \int_0^{+\infty} d\varepsilon \frac{f(-\varepsilon) - f(\varepsilon)}{(\omega + i\delta)^2 - 4\varepsilon^2} \right]. \quad (18)$$

Первое, внутризонное, слагаемое интегрируется:

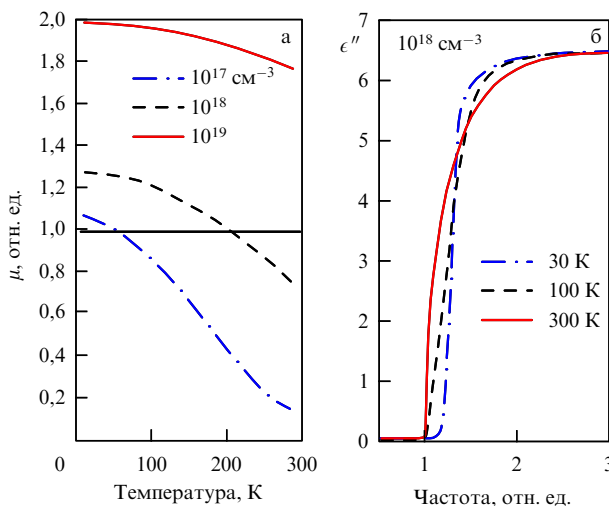
$$\sigma^{\text{intra}}(\omega) = \frac{2ie^2 T}{\pi\hbar(\omega + i\tau^{-1})} \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{\mu}{2T} \right) \right]; \quad (19)$$

здесь вместо  $\omega$  мы написали  $\omega + i\tau^{-1}$ , чтобы учесть электронное затухание. В таком виде внутризонное слагаемое совпадает с классическим выражением Друде–Больцмана для проводимости. При низкой температуре,  $\mu \gg T$ , когда носители вырождены, внутризонное слагаемое имеет вид

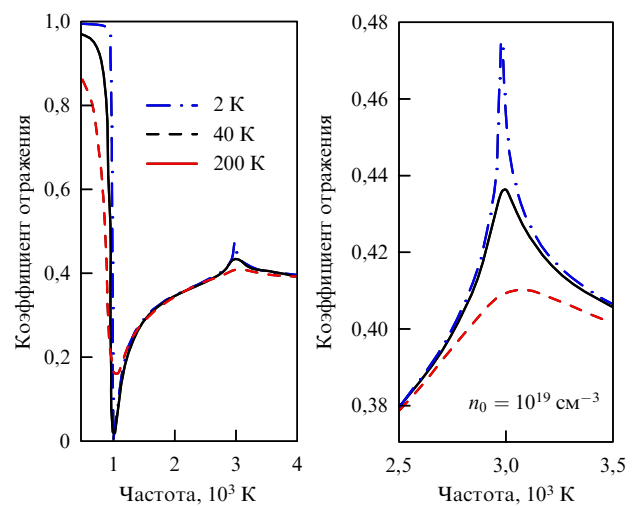
$$\sigma^{\text{intra}}(\omega) = \frac{ie^2 |\mu|}{\pi\hbar(\omega + i\tau^{-1})}. \quad (20)$$



**Рис. 4.** Вещественная (а) и мнимая (б) части диэлектрической проницаемости полупроводников IV – VI согласно численным расчетам разными методами (GGA — так называемое обобщенное градиентное приближение, LDA — приближение локальной плотности) и измерениям [14].



**Рис. 5.** (а) Зависимость химического потенциала (в единицах  $\epsilon_g = 0,075$  эВ) от температуры при трех значениях концентрации носителей (горизонтальная линия — положение дна зоны проводимости) и (б) мнимая часть диэлектрической проницаемости как функция частоты (в единицах  $2\epsilon_g$ ) при различных температурах в полупроводнике IV–VI. Щель  $2\epsilon_g$  в энергетическом спектре предполагалась не зависящей от температуры, однако изменение вида кривых при повышении температуры может привести к выводу об уменьшении щели, если ее связывать с порогом поглощения.



**Рис. 6.** Коэффициент отражения при нормальном падении для полупроводника IV–VI; значения параметров те же, что и на рис. 3.

У чистого графена химический потенциал  $\mu = 0$ , и высокочастотная проводимость (19) пропорциональна температуре. Концентрацию носителей можно менять либо допированием, либо с помощью постоянного электрического поля (эффект поля), при этом хими-

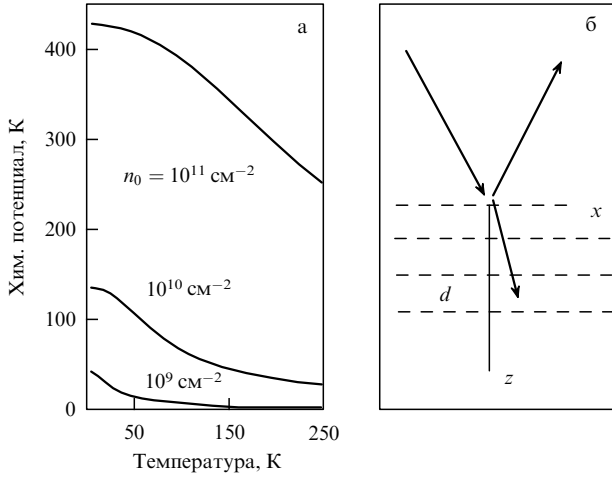


Рис. 7. (а) Зависимость химического потенциала графена от температуры для образцов с различной концентрацией носителей. (б) Геометрия рассеяния в случае многослойной системы.

ческий потенциал (рис. 7) находится из условия

$$n_0 = \frac{2}{\pi(\hbar v_0)^2} \int_0^{+\infty} \varepsilon [f(\varepsilon - \mu) - f(\varepsilon + \mu)] d\varepsilon, \quad (21)$$

где  $n_0$  — концентрация электронов и дырок. При низкой температуре оптическая проводимость, как видно из формулы (19), пропорциональна корню квадратному из концентрации, поскольку  $\mu = \hbar v_0 \sqrt{\pi n_0}$  (здесь и в дальнейшем мы для простоты записи ограничиваемся случаем  $\mu > 0$ ).

Межзонное слагаемое в выражении для проводимости (18) содержит как вещественную часть, которая возникает в результате обхода полюса и описывает поглощение, так и мнимую. При нулевой температуре соответствующий интеграл (18) легко берется:

$$\sigma^{\text{inter}}(\omega) = \frac{e^2}{4\hbar} \left[ \theta(\omega - 2\mu) - \frac{i}{2\pi} \ln \frac{(\omega + 2\mu)^2}{(\omega - 2\mu)^2} \right], \quad (22)$$

где  $\theta$ -функция выражает условие межзонных электронных переходов с порогом при  $\omega = 2\mu$ . Логарифмическая особенность обрезается температурой (или релаксацией носителей), и при конечной, но малой по сравнению с химическим потенциалом температуре в (22) следует сделать замену:

$$\begin{aligned} \theta(\omega - 2\mu) &\rightarrow \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left( \frac{\omega - 2\mu}{2T} \right), \\ (\omega - 2\mu)^2 &\rightarrow (\omega - 2\mu)^2 + (2T)^2. \end{aligned} \quad (23)$$

Для невырожденных носителей,  $\mu \ll T$ , межзонная проводимость равна

$$\sigma_2^{\text{inter}}(\omega) = -\frac{2ie^2}{\pi\hbar} \begin{cases} \frac{T}{\omega} \left[ \ln 2 + 6\zeta(3) \left( \frac{T}{\omega} \right)^2 \right], & \omega \gg 4T, \\ \frac{\omega}{16T} \ln \left( \frac{4T}{\omega} \right), & \omega \ll 4T, \end{cases}$$

где  $\zeta(3) = 1,20$ .

Для численных расчетов межзонной проводимости при конечных температурах удобно для разности фермиевских функций в подынтегральном выражении (18)

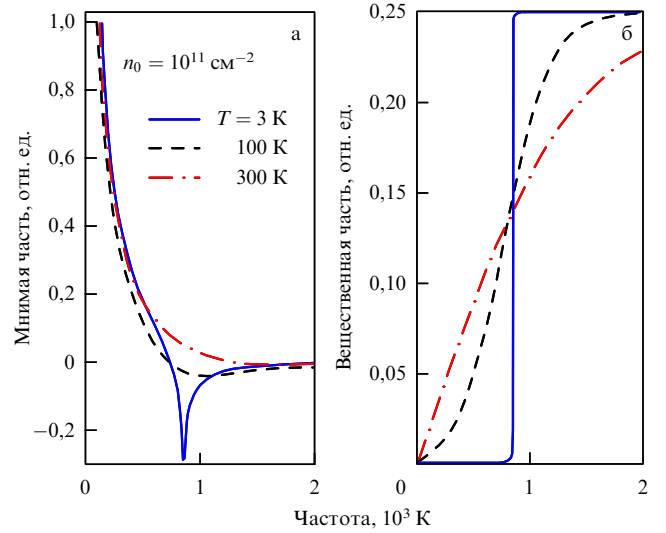


Рис. 8. Мнимая (а) и вещественная (б) части проводимости в единицах  $e^2/\hbar$  для графена с концентрацией носителей  $n_0 = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Значения химического потенциала  $\mu = 428, 389$  и  $214$  К соответственно, при температурах 3, 100 и 300 К, указанных на кривых, определяются уравнением (21). Особенность при  $\omega = 2\mu$ , видимая при низкой температуре, связана с порогом межзонных переходов.

ввести обозначение

$$G(\varepsilon) = f(-\varepsilon) - f(\varepsilon) = \begin{cases} \theta(\varepsilon - \mu), & \mu \gg T, \\ \tanh \left( \frac{\varepsilon}{2T} \right), & \mu \ll T. \end{cases} \quad (24)$$

Вычитая и добавляя в числителе подынтегрального выражения  $G(\omega/2)$  и замечая, что главное значение получившегося интеграла с  $G(\omega/2)$  равно нулю, мы приходим к интегралу от функции, не имеющей особенности:

$$\sigma^{\text{inter}}(\omega) = \frac{e^2}{4\hbar} \left[ G \left( \frac{\omega}{2} \right) - \frac{4\omega}{i\pi} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \frac{G(\varepsilon) - G(\omega/2)}{\omega^2 - 4\varepsilon^2} \right]. \quad (25)$$

Из полученных результатов можно сделать два основных вывода (рис. 8). Во-первых, на высоких частотах,  $\omega \gg (T, \mu)$ , проводимость в основном оказывается вещественной и не зависящей от каких-либо параметров:

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

Это универсальное значение отличается от значения, тоже универсального, которое принимает проводимость по постоянному току [22, 23]. Во-вторых, 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 10–40 К в энергетических единицах. Появление особенности приводит, как мы увидим, к существованию особых электромагнитных колебаний вблизи порога поглощения.

## 6. Электродинамика графеновых слоев

Для вычисления измеряемых на опыте оптических характеристик — коэффициентов отражения и преломления — от трехмерных полупроводников достаточно подставить приведенные в разделе 4 выражения для диэлектрической проницаемости в известные формулы Френеля. Однако дело обстоит сложнее с двумерными пленками типа графена. Будем исходить из уравнений Максвелла

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} = \epsilon_0 \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E} + \frac{4\pi i \omega}{c^2} \mathbf{j}, \quad (26)$$

где  $\mathbf{j}$  — ток проводимости,  $\epsilon_0$  — решеточный вклад в диэлектрическую постоянную. Рассмотрим сначала один [19, 24], а затем стопку [20] графеновых плоскопараллельных слоев (рис. 7б).

### 6.1. Оптика монослоя

Пусть свет, поляризованный в плоскости  $xz$  (плоскость падения), падает из вакуума на графеновую пленку при  $z = 0$  на подложке ( $z > 0$ ) с диэлектрической постоянной  $\epsilon_0 = \epsilon_s$ . Ток в пленке можно записать в виде

$$j_x = \sigma(\omega) \delta(z) E_x. \quad (27)$$

После преобразования Фурье по координате  $x$  уравнения Максвелла для двух компонент поля имеют вид

$$ik_x \frac{dE_z}{dz} - \frac{d^2 E_x}{dz^2} - \epsilon_0 \frac{\omega^2}{c^2} E_x = \frac{4\pi i \omega}{c^2} j_x, \quad (28)$$

$$ik_x \frac{dE_x}{dz} + \left( k_x^2 - \epsilon_0 \frac{\omega^2}{c^2} \right) E_z = 0.$$

Условие на скачок нормальной компоненты индукции дает

$$\epsilon_s E_z|_{z=+0} - E_z|_{z=-0} = 4\pi \int_{-0}^{+0} \rho(\omega, k_x, z) dz. \quad (29)$$

Плотность заряда связана с плотностью тока (27) уравнением непрерывности

$$\rho(\omega, k_x, z) = j_x(\omega, k_x, z) \frac{k_x}{\omega}.$$

Подставляя  $E_z$  из второго уравнения (28) в (29), находим граничное условие

$$\frac{\epsilon_s}{k_s^2} \frac{dE_x}{dz} \Big|_{z=+0} - \frac{1}{(k_z^i)^2} \frac{dE_x}{dz} \Big|_{z=-0} = \frac{4\pi \sigma(\omega)}{i\omega} E_x \Big|_{z=0}, \quad (30)$$

где

$$k_s = \sqrt{\epsilon_s \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 - k_x^2}, \quad k_z^i = \sqrt{\left( \frac{\omega}{c} \right)^2 - k_x^2}.$$

Это условие вместе с условием непрерывности компоненты поля  $E_x$  позволяет вычислить [20] амплитуды отраженной ( $r$ ) и прошедшей ( $t$ ) волн:

$$r = \frac{1 - C}{1 + C}, \quad t = \frac{2}{1 + C}, \quad (31)$$

где  $C = k_z^i [4\pi \sigma(\omega) / \omega + (\epsilon_s / k_s)]$ .

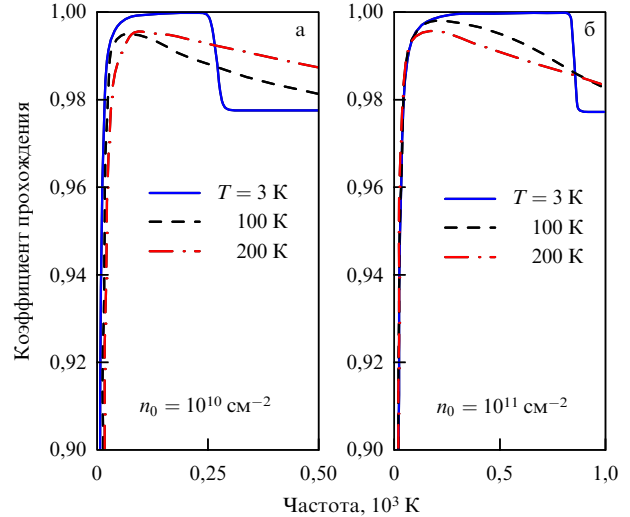


Рис. 9. Коэффициент прохождения в случае нормального падения для графена с концентрацией носителей  $n_0 = 10^{10} \text{ см}^{-2}$  (а) и  $n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-2}$  (б) в зависимости от частоты при температурах, указанных на кривых. Для графена с концентрацией  $n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-2}$  значения химического потенциала равны 428, 389 и 294 К при температурах 3, 100 и 200 К соответственно.

Очень простые результаты получаются для свободного графена в вакууме. В этом случае  $\epsilon_s = 1$  и  $k_s = k_z^i$ , а коэффициент  $C$  принимает значения, близкие к единице:

$$C = 1 + \frac{4\pi}{c} \sigma(\omega) \cos \theta, \quad (32)$$

где  $\theta$  — угол между нормалью и направлением распространения падающей волны. Из уравнения (31) получаем амплитуды отраженной и прошедшей волн:

$$r = -\frac{2\pi}{c} \sigma(\omega) \cos \theta, \quad t = 1 - \frac{2\pi}{c} \sigma(\omega) \cos \theta. \quad (33)$$

Коэффициент прохождения  $|t|^2$ , вычисленный с помощью уравнений (19), (25) и (31) для случая нормального падения на графен с концентрацией носителей  $10^{10}$  и  $10^{11} \text{ см}^{-2}$ , показан на рис. 9 в зависимости от частоты при различных температурах. На низких частотах существенна внутризонная проводимость, которая падает с увеличением частоты. Затем при частотах  $\omega > 2\mu$  коэффициент прохождения выходит на значение, определяемое межзонными переходами и отличающееся от единицы на величину порядка постоянной тонкой структуры  $e^2/\hbar c$ :

$$|t|^2 = 1 - \frac{4\pi}{c} \text{Re} \sigma(\omega) = 1 - \pi \frac{e^2}{\hbar c}, \quad (34)$$

где опущен член с логарифмической особенностью, поскольку он пропорционален квадрату постоянной тонкой структуры. Линейный по постоянной тонкой структуре эффект недавно измерен в оптической области в работе [27]. Измеренный коэффициент прохождения (рис. 10) хорошо согласуется с теоретическим значением (34) и не зависит от частоты в широком интервале видимого спектра, как это и предсказывалось в теории. В настоящее время выращиваются системы, состоящие из двух [25] и большего числа плоскопараллельных графеновых слоев, и на них, как и на трехмерных



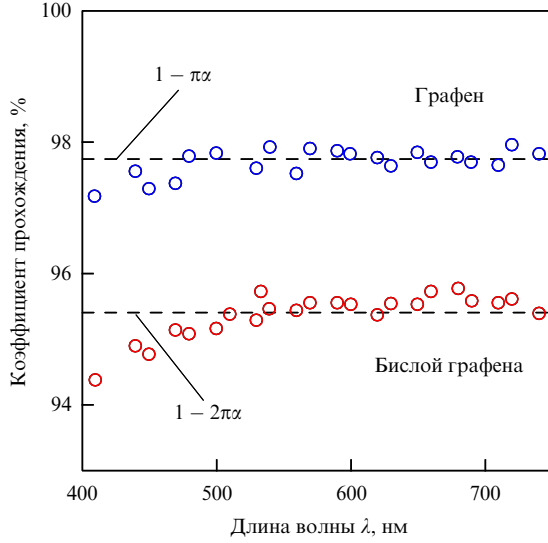


Рис. 10. Спектры пропускания для монослоя и бислоя графена в видимой области [27].

полупроводниках, особенности межзонного поглощения наблюдать гораздо легче.

**6.2. Спектроскопия графеновых сверхрешеток**

Очевидно, что задачу о нескольких графеновых слоях можно решить аналитически либо, когда число слоев невелико, рассматривая рассеяние на каждом слое в отдельности, либо в противоположном предельном случае, когда слоев много. В последнем случае можно начать с бесконечной последовательности слоев, а затем решать задачу о пленке с конечным числом слоев, налагая на ее границах соответствующие электродинамические граничные условия.

Итак, пусть имеется неограниченная система графеновых слоев с расстоянием  $d$  между ними (рис. 7б). Такую систему можно считать моделью графита, в котором  $d = 3,35 \text{ \AA}$  существенно больше межатомного расстояния в слое, и взаимодействие между слоями возникает лишь благодаря токам, текущим в слоях. Это взаимодействие описывается уравнениями Максвелла (26). Для компоненты поля  $E_x$  они сводятся к уравнению

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} + k_g^2 + 2k_g \mathcal{D} \sum_n \delta(z - nd) \right) E_x = 0, \tag{35}$$

где  $\mathcal{D} = 2i\pi\sigma(\omega)k_g/\epsilon_g\omega$ ,  $k_g = \sqrt{\epsilon_g(\omega/c)^2 - k_x^2}$ . Поскольку мы пренебрегаем процессами электронных перескоков между слоями, величина  $\epsilon_g \simeq 2,5$  представляет собой решеточный вклад в диэлектрическую восприимчивость графеновых слоев.

Уравнение (35) в случае неограниченной системы имеет два независимых решения в виде блоховских функций:

$$e_{1,2}(z) = \exp(\pm ik_z nd) \left\{ \sin k_g(z - nd) - \exp(\mp ik_z d) \times \right. \\ \left. \times \sin k_g[z - (n + 1)d] \right\}, \quad nd < z < (n + 1)d,$$

где квазимпульс  $k_z$  определяется дисперсионным уравнением

$$\cos k_z d = \cos k_g d - \mathcal{D} \sin k_g d. \tag{36}$$

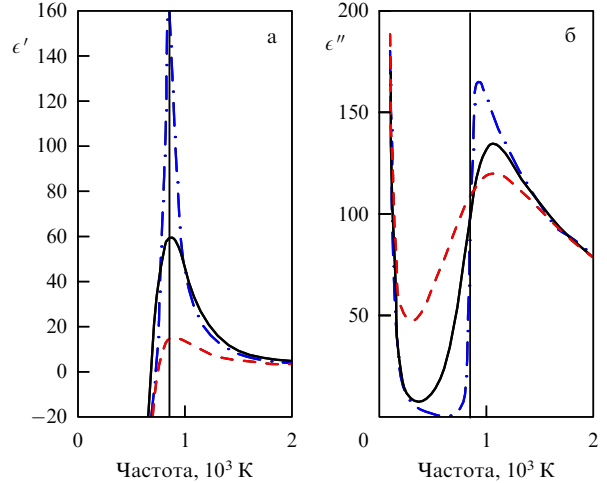


Рис. 11. Вещественная (а) и мнимая (б) части диэлектрической проницаемости  $\epsilon_{xx}$  для графеновой сверхрешетки с концентрацией носителей  $n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-2}$  в слое и расстоянием  $d = 3,35 \text{ \AA}$  между слоями при температурах 10 (штрихпунктир), 50 (сплошная линия) и 100 К (штриховая линия). Значения  $\mu = 428, 419$  и  $389 \text{ К}$  при температурах 3, 100 и 300 К соответственно определяются уравнением (21). Пик в вещественной части при низкой температуре связан с порогом межзонных переходов (скачок в мнимой части); положение порога  $\omega = 2\mu$  показано вертикальной прямой.

Эти решения представляют собой не что иное, как электромагнитные волны в анизотропной периодической среде.

Решение задачи упрощается в длинноволновом пределе,  $k_z, k_g \ll 1/d$ . В этом случае можно ввести диэлектрическую проницаемость не только в направлении, перпендикулярном слоям,  $\epsilon_{zz} = \epsilon_g \simeq 2,5$ , но и в параллельном направлении  $\epsilon_{xx} = \epsilon_g + 4\pi\sigma(\omega)/\omega d$ , где  $\sigma(\omega)$  — проводимость одного слоя (18).

В образце с графеновыми слоями ищем решение, как обычно, в виде суммы прошедшей и отраженной волн,  $E \propto \exp(ik_{xx}z \pm ik_z z)$  и получаем взамен (36) дисперсионное уравнение в виде

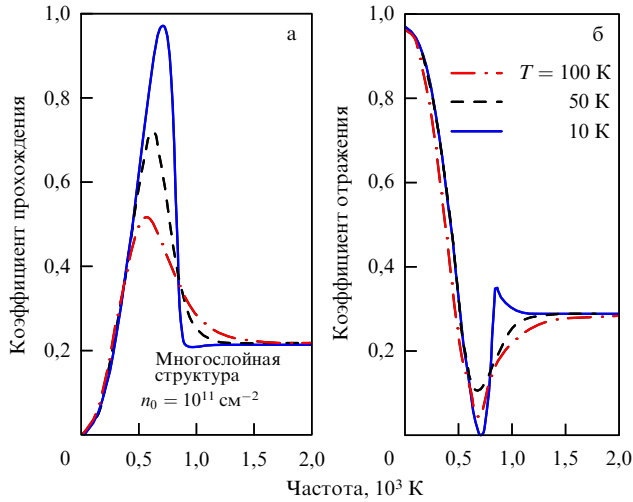
$$k_x^2 \epsilon_{xx} + k_z^2 \epsilon_{zz} = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \epsilon_{xx} \epsilon_{zz}. \tag{37}$$

Из этого уравнения следует, что при нормальном падении ( $k_x = 0$ ) незатухающие решения возможны лишь при условии, что вещественная часть  $\epsilon_{xx}$  положительна и больше мнимой части. А из уравнений (20), (22) видно, что для этого мнимая часть проводимости должна быть отрицательной и больше вещественной. Это условие выполняется несколько ниже порога поглощения, как это можно видеть и на рис. 11.

На границах пленки толщиной  $l$  должны выполняться условия непрерывности тангенциальных проекций электрического и магнитного полей. Решая обычную электродинамическую задачу об отражении и прохождении волн, например, р-поляризации, находим для амплитуд отраженной и прошедшей сквозь пластинку волн:

$$r = -1 + 2k_z \frac{(k_z + k_z^i)f - (k_z - k_z^i)f^{-1}}{(k_z + k_z^i)^2 f - (k_z - k_z^i)^2 f^{-1}}, \tag{38}$$

$$t = \frac{4k_z k_z^i}{(k_z + k_z^i)^2 f - (k_z - k_z^i)^2 f^{-1}},$$

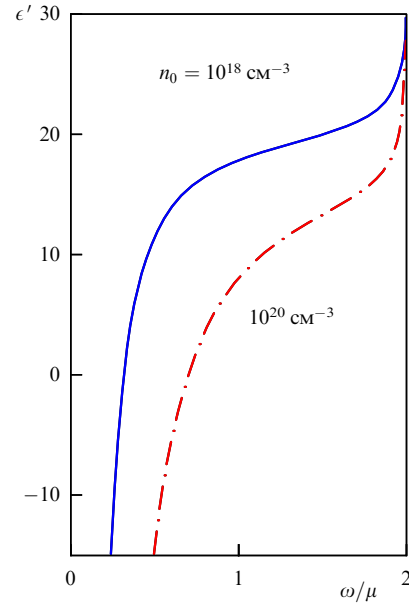


**Рис. 12.** Спектры пропускания и отражения при различных температурах от графеновой сверхрешетки с концентрацией носителей в слое  $n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-2}$  ( $\mu = 428 \text{ К}$  при  $T = 0$ ); расстояние между слоями  $d = 3,35 \text{ \AA}$ , толщина пленки  $l = 100d$ , нормальное падение.

где  $f = \exp(-ik_g l)$ ,  $k_z^i = (\omega/c) \cos \theta$ , и  $k_z$  определяется дисперсионным уравнением (37) с  $k_x = (\omega/c) \sin \theta$ . На рисунке 12 показаны рассчитанные коэффициенты пропускания и отражения для сверхрешетки из графеновых слоев в зависимости от частоты при различных температурах. Концентрация носителей задается либо допированием, либо с помощью внешнего постоянного электрического поля.

Обращают на себя внимание две особенности коэффициента отражения. Во-первых, провал в окрестности порога межзонных переходов  $\omega = 2\mu$  (на рис. 12 при 856 К). При повышении температуры (или увеличении частоты релаксации носителей) этот провал размывается, поскольку он существует лишь при достаточно большом значении логарифма в мнимой части проводимости (22). Таким образом, резкий провал в отражении связан с возбуждением электромагнитных волн в сверхрешетке. Их спектр дается уравнениями (36), (37). Подчеркнем, что эти возбуждения отличаются как от обычных продольных плазмонов в трехмерных системах с квадратичным спектром и щелью, так и от бесщелевых плазмонов в двумерных системах, которые возбуждаются лишь в условиях полного внутреннего отражения. Они напоминают те волны, которые обнаруживаются, например, в окрестности циклотронного резонанса.

Во-вторых, после глубокого падения коэффициент отражения становится существенно меньше своего допорогового значения. Это прямой результат межзонного поглощения, т.е.  $\theta$ -образной сингулярности в реальной части проводимости (24). Заметим, что обсуждаемые особенности контролируются функциями, быстро меняющимися в окрестности  $\omega \approx 2\mu$ , но, в отличие от случая монослоя, они множатся на безразмерный фактор  $e^2/\hbar\epsilon_g\omega d$ , который может быть порядка единицы. Сравнение с монослоем на рис. 9б демонстрирует это отличие. Наблюдение особенностей отражения при низких температурах и на образцах с малой частотой релаксации носителей дает прямой способ измерения концентрации и подвижности носителей.



**Рис. 13.** Зависимость вещественной части диэлектрической проницаемости от частоты (в единицах химического потенциала) при  $T = 0$  для полупроводника IV–VI с щелью  $2\epsilon_g = 870 \text{ К}$ . Концентрация носителей указана на кривых, соответствующие значения  $\mu$  равны 1112 и 3327 К.

## 7. Продольные плазмоны

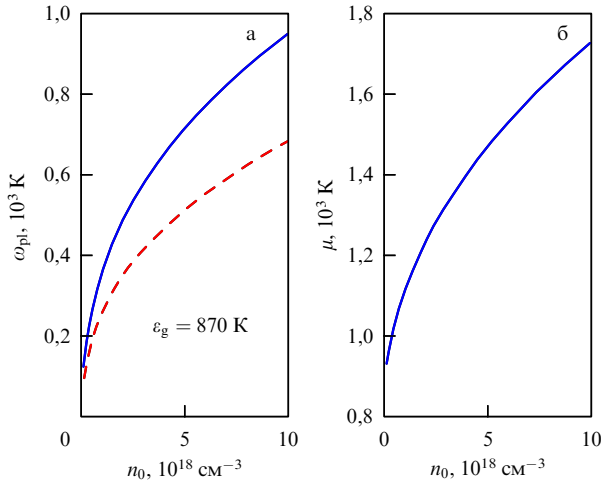
Обычные продольные плазмоны могут существовать в электронной плазме как полупроводников IV–VI, так и графена. В трехмерных полупроводниках их спектр имеет щель и квадратичную дисперсию, в двумерном графене — это бесщелевые возбуждения с корневой дисперсией  $\omega \propto \sqrt{k}$ . Однако в узкощелевых материалах их частота необычным образом зависит от концентрации носителей благодаря существенному вкладу межзонных переходов в диэлектрическую проницаемость, выражение для которой приводилось в разделе 4 в различных предельных случаях. Выпишем ее здесь в случае  $T = 0$  для области  $\omega < 2\mu$ , где затухание вследствие межзонных переходов отсутствует.

Для полупроводников IV–VI с вырожденными носителями диэлектрическая проницаемость, определяемая уравнениями (11) и (12), имеет вид (рис. 13)

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{e^2}{3\pi\hbar v} \left[ -\frac{(\mu^2 - \epsilon_g^2)^{3/2}}{\mu b^2} + 2 \ln \frac{2\epsilon_{at}}{\mu + \sqrt{\mu^2 - \epsilon_g^2}} + \frac{\epsilon_g^4/\mu b^2}{\mu + \sqrt{\mu^2 - \epsilon_g^2}} + F(\omega) \right], \quad (39)$$

где

$$F(\omega) = \frac{2b^4 - \epsilon_g^2 b^2 - \epsilon_g^4}{b^3 |\epsilon_g^2 - b^2|^{1/2}} \times \begin{cases} \arcsin \frac{b}{\epsilon_g} - \arcsin \frac{b\sqrt{\mu^2 - \epsilon_g^2}}{\epsilon_g \sqrt{\mu^2 - b^2}}, & b < \epsilon_g, \\ \ln \frac{b\sqrt{\mu^2 - \epsilon_g^2} + \mu\sqrt{b^2 - \epsilon_g^2}}{(b + \sqrt{b^2 - \epsilon_g^2})\sqrt{\mu^2 - b^2}}, & b > \epsilon_g, \end{cases} \quad (40)$$



**Рис. 14.** Зависимость плазменной частоты от концентрации носителей (а) при  $T = 0$  для полупроводника IV–VI с  $\varepsilon_g = 870$  К; штриховая кривая построена в пренебрежении частотной дисперсией диэлектрической проницаемости. (б) Зависимость химического потенциала от концентрации носителей.

$b = \omega/2$ . Это выражение при  $\varepsilon_g = 0$  совпадает с (14), а при  $\omega \rightarrow 0$  дает

$$\begin{aligned} \epsilon(\omega \rightarrow 0) = & \epsilon_0 + \frac{e^2}{3\pi\hbar v} \left[ -4 \frac{(\mu^2 - \varepsilon_g^2)^{3/2}}{\mu\omega^2} + 2 \ln \frac{2\varepsilon_{at}}{\mu + \sqrt{\mu^2 - \varepsilon_g^2}} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{3} \left[ 1 - \frac{(\mu^2 - \varepsilon_g^2)^{3/2}}{\mu^3} \right] - 2 \left( 1 - \frac{\sqrt{\mu^2 - \varepsilon_g^2}}{\mu} \right) \right]. \quad (41) \end{aligned}$$

С помощью условия  $\epsilon(\omega) = 0$  и уравнения, определяющего концентрацию носителей,

$$n_0 = \frac{4(\mu^2 - \varepsilon_g^2)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3 v_\ell v_t^2},$$

находим частоту плазменных волн в зависимости от концентрации носителей (рис. 14). Внутризонный вклад в диэлектрическую проницаемость пропорционален  $\mu^2$  при значениях химического потенциала больших запрещенной щели, как это видно из формулы (39). Плазменная частота, грубо говоря, пропорциональна квадратному корню из концентрации носителей заряда,  $\omega_{pl} \sim \sqrt{n_0}$ , как и в обычной плазме. Однако вследствие зависимости межзонного вклада от частоты, плазменная частота оказывается существенно больше (сплошная кривая), чем то значение, которое получается, если этой частотной дисперсией пренебречь (штриховая кривая).

Для графена спектр продольных плазмонов находится [19, 26] с помощью уравнения (35). Вне слоя  $z \neq 0$  убывающее на  $\pm z$  решение ищем, соответственно, в виде  $E_x = C \exp(\mp \kappa z)$ , где  $\kappa = ik_g$ . Подставляя это в условие

$$E_x'|_{z=+0} - E_x'|_{z=-0} = -2ikDE_x|_{z=0}, \quad (42)$$

которое следует непосредственно из (35), находим спектр двумерных плазмонов:

$$-2\pi i \kappa \sigma(\omega) = \omega. \quad (43)$$

Это уравнение имеет для  $\omega$  и  $\kappa$  вещественное решение, как можно увидеть из выражений (19) и (22), в той области низких частот, где внутризонная проводимость играет главную роль. Сохраняя лишь внутризонное слагаемое, получаем

$$\omega^2 = \frac{8e^2 T \kappa}{\hbar} \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{\mu}{2T} \right) \right],$$

причем в выражении для  $\kappa$  обычно можно пренебречь временным запаздыванием, т.е. членом с  $\omega^2/c^2$ :  $\kappa = |k_x|$ . Отметим необычную зависимость плазменной частоты от концентрации носителей:  $\omega \propto n_0^{1/4}$  при низких температурах.

## 8. Заключение

Очевидно, что полупроводники IV–VI и графен имеют много общего — малую запрещенную щель и широкий линейный участок в электронном спектре. Это обстоятельство, несмотря на различие в их размерности, приводит к похожим особенностям в проводимости — логарифмической у мнимой части и скачку у вещественной, которые размываются с повышением температуры или при увеличении частоты релаксации носителей. Статическая диэлектрическая проницаемость рассматриваемых полупроводников IV–VI, а также проницаемость в инфракрасной области, рассчитанная с использованием этой простой модели электронного спектра, находится в очень хорошем согласии с численными расчетами и имеющимися экспериментальными результатами. Измеренное недавно значение коэффициента прохождения для графена в видимой области спектра, равное  $1 - \pi e^2/\hbar c$ , с высокой точностью согласуется с рассчитанным в рамках очень простых представлений о природе этого уникального материала. Другие любопытные свойства графена (в инфракрасной области и при варьировании концентрации носителей или температуры), несомненно, будут привлекать внимание исследователей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 07-02-00571.

## Список литературы

1. Castro Neto A H et al., cond-mat 0709.1163
2. Ando T *Phys. Rev. E* (2008) (in press)
3. Geim A K, Novoselov K S *Nature Mater.* **6** 183 (2007)
4. Avouris P, Chen Z, Perebeinos V *Nature Nanotechnol.* **2** 605 (2007)
5. Фальковский Л А, Бродовой А В, Лашкарев Г В *ЖЭТФ* **80** 334 (1981) [Falkovsky L A, Brodovoi A V, Lashkarev G V *Sov. Phys. JETP* **53** 170 (1981)]
6. Волков Б А, Ручайский О М *ФТТ* **40** 57 (1998) [Volkov B A, Ruchaiskii O M *Phys. Solid State* **40** 50 (1998)]
7. Абрикосов А А *ЖЭТФ* **44** 2039 (1963) [Abrikosov A A *Sov. Phys. JETP* **17** 1372 (1963)]
8. Бенеславский С Д, Фальковский Л А *ЖЭТФ* **69** 1063 (1975) [Beneslavsky S D, Falkovsky L A *Sov. Phys. JETP* **42** 541 (1975)]; Brandt N B, Semenov M V, Falkovsky L A *J. Low Temp. Phys.* **27** 75 (1977)
9. Korn D M, Braunstein R *Phys. Rev. B* **5** 4837 (1972)
10. Suzuki N, Sawai K, Adachi S *J. Appl. Phys.* **77** 1249 (1995)
11. Васью Ф Т *ФТП* **9** 1565 (1975)
12. Волков Б А, Кушнир В П, Панкратов О А *ФТТ* **24** 415 (1982) [Volkov B A, Kushnir V P, Pankratov O A *Sov. Phys. Solid State* **24** 235 (1982)]
13. Kohn S E et al. *Phys. Rev. B* **8** 1477 (1973)

14. Albanesi E A, Peltzer y Blanca E L, Petukhov A G *Comput. Mater. Sci.* **32** 85 (2005)
15. Dalen R, in *Solid State Physics: Advances in Research and Applications* Vol. 26 (Eds F Seitz, D Turnbull, H Ehrenreich) (New York: Academic Press, 1973) p. 179
16. Preier H *Appl. Phys.* **20** 189 (1979)
17. Bauer G, in *Narrow Gap Semiconductors, Physics and Applications* (Lecture Notes in Physics, Vol. 133, Ed. W Zawadzki) (Berlin: Springer-Verlag, 1980)
18. Fretigny C, Saito R, Kamimura H *J. Phys. Soc. Jpn.* **58** 2098 (1989)
19. Falkovsky L A, Varlamov A A *Eur. Phys. J. B* **56** 281 (2007)
20. Falkovsky L A, Pershoguba S S *Phys. Rev. B* **76** 153410 (2007)
21. Gusynin V P, Sharapov S G, Carbotte J P *Phys. Rev. B* **75** 165407 (2007)
22. Novoselov K S et al. *Science* **306** 666 (2004); *Nature* **438** 197 (2005)
23. Zhang Y et al. *Phys. Rev. Lett.* **94** 176803 (2005); *Nature* **438** 201 (2005)
24. Mikhailov S A, Ziegler K *Phys. Rev. Lett.* **99** 016803 (2007)
25. Abergel D S L, Russell A, Fal'ko V I *Appl. Phys. Lett.* **91** 063125 (2007); arXiv:0705.0091
26. Hwang E H, Das Sarma S *Phys. Rev. B* **75** 205418 (2007)
27. Nair R R et al. *Science* **320** 1308 (2008)
28. Suzuki N, Adachi S *Jpn. J. Appl. Phys.* **33** 193 (1994)
29. Cardona M, Greenaway D L *Phys. Rev.* **133** A1685 (1964)
30. Moss T S *Optical Properties of Semiconductors* (London: Butterworth, 1959) p. 189

### Optical properties of graphene and IV – VI semiconductors

L.A. Falkovsky

*Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences,  
ul. Kosygina 2, 119334 Moscow, Russian Federation*

*Tel. (7-495) 137-32 44, (7-495) 702-93 17. Fax (7-495) 938-20 77*

*E-mail: falk@itp.ac.ru*

*Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences,  
142190 Troitsk, Moscow region, Russian Federation*

The dynamic conductivity of graphene, multilayer graphene, and IV – VI semiconductors is evaluated for nonzero temperatures and carrier densities in the optical range, where the frequency is larger than the carrier relaxation rate but low in comparison with the width of the conduction band. The narrow gap and linearity of the electron spectrum are the common features of these two- and three-dimensional materials. As a consequence, the dielectric function has a singularity (logarithmic in the real part and step-like in the imaginary part) at the threshold of the direct interband transitions. The light reflection/transmission coefficients calculated and observed are in excellent agreement. The graphene transmittance in the visible range is independent of frequency and takes the universal value given by the fine-structure constant. The difference in the dimensionality between graphene and IV – VI semiconductors results in the modification of plasmon dispersion.

PACS numbers: 71.20.Nr, 78.20.Bh, 78.20.Ci, 78.66.Tr

DOI: 10.3367/UFNr.0178.200809b.0923

Bibliography — 30 references

*Received 31 March 2008*

*Uspekhi Fizicheskikh Nauk* **178** (9) 923 – 934 (2008)

*Physics – Uspekhi* **51** (9) (2008)