

УДК 519.63

Численное исследование спектральных свойств деформированного листа графена*

Гришанов Е. Н., Грязева О. С.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Аннотация: В статье представлены результаты численного моделирования деформированного листа графена с различными типами периодических деформаций. Моделирование проводилось с использованием разработанной программы для численного исследования спектральных свойств периодических наноструктур в магнитных полях. Проведено сравнение спектральных свойств оператора модели для различных типов деформаций.

Ключевые слова: деформированный графен, явнорешаемые модели, теория самосопряженных расширений.

1. Построение математической модели

С момента первых экспериментальных работ [1] интерес к исследованию двумерного монослоя углерода, называемого графеном, неизменно возрастал. Особый интерес представляет изучение влияния различного рода дефектов на свойства графена. Помимо дефектов самой кристаллической структуры, таких как дефект Стоуна – Уэйлса, лист графена может быть деформирован различным образом как в результате взаимодействия с материалом подложки так и в следствии чисто механического воздействия [2]. При этом на листе графена могут появляться волны, "кочки" и другие подобные структуры [3, 4]. Как показано в работе [5], такие деформации могут оказывать существенное влияние на транспортные свойства графена. В этой связи представляет интерес построение математической модели листа графена с различного рода периодическими деформациями и исследование влияния этих деформаций на спектральные свойства модели.

Построение математической модели заряженной частицы (электрона) в графене с периодическими деформациями, помещенном в однородное магнитное поле, будем проводить при помощи метода, предложенного в работе [6]. Рассмотрим оператор Ландау – гамильтониан заряженной частицы с зарядом e и массой m , помещенной в однородное магнитное поле \mathbf{B}

$$H_L = \frac{\hbar}{2m} \left(i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2, \quad (1)$$

где c – скорость света, $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ – векторный потенциал магнитного поля. Считаем, что оператор (1) задан на пространстве $L^2(\mathbf{R}^3)$. Будем моделировать взаимодействие рассматриваемой частицы с атомами углерода в графене при помощи возмущения оператора (1) потенциалами нулевого радиуса, расположенными в узлах $2d$ -периодической решетки $\Gamma = \Lambda + K$, где Λ – решетка Браве рассматриваемой системы, а K – множество узлов (атомов) в элементарной ячейке. Выберем элементарную ячейку таким образом, чтобы ее размеры оказались равными для всех трех рассматриваемых в настоящей работе структур: графена без деформаций (Рис. 1), волнообразно деформированного графена (Рис. 2) и

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Республики Мордовия в рамках научного проекта №18-41-130004.

графена с периодическими деформациями типа "кочка" (Рис. 3). Обозначим через \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 образующие решетки Λ . Возмущенный оператор формально запишем в виде

$$\hat{H} = H_L + \sum_{\gamma \in \Gamma} \hat{\alpha} \delta_{\gamma}, \quad (2)$$

где $\hat{\alpha}$ – коэффициент, описывающий взаимодействие с единичным атомом, а $\delta_{\gamma} \psi = \psi(\gamma)$.

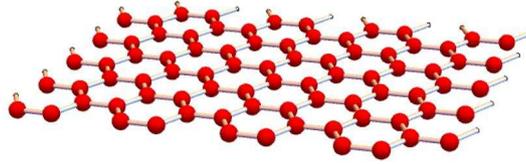


Рис. 1. Лист графена без деформаций.

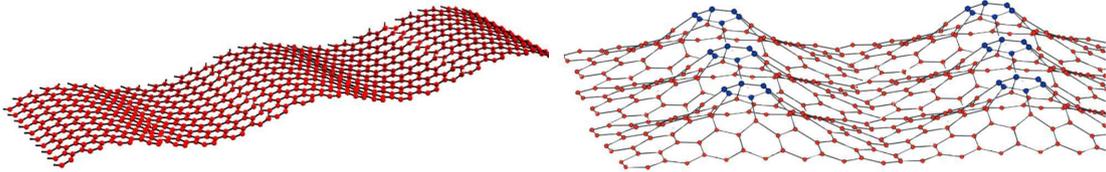


Рис. 2. Волнообразно деформированный графен. Рис. 3. Графен с периодическими деформациями типа "кочка".

Для построения гамильтониана модели воспользуемся процедурой сужения – расширения [7]. Рассмотрим оператор

$$H^0 = \sum_{\gamma \in \Gamma}^{\oplus} H_{\gamma}, \quad (3)$$

где $H_{\gamma} = H_L$. Обозначим через S сужение H^0 на пространство

$$\mathcal{D} = \{\psi \in D(H^0) : \psi(\gamma) = 0\}. \quad (4)$$

Для пары операторов H^0, S все самосопряженные расширения S , дизъюнктивные с H^0 , получим при помощи формулы М.Г. Крейна для резольвент

$$R_A(z) = R^0(z) - G(z)[Q(z) - A]^{-1}G^*(\bar{z}), \quad (5)$$

где R_A – резольвента расширения, R^0 – резольвента H^0 , G и Q – Γ -функция и Q -функция Крейна соответственно. Каждому оператору A , заданному в т.н. пространстве граничных значений, размерность которого совпадает с индексом дефекта S , соответствует определенное самосопряженное расширение H_A оператора S . Среди всех таких расширений условиям задачи будут соответствовать лишь те, которые будут инвариантны относительно магнитных трансляций на векторы решетки Браве Γ . Согласно [6], в рассматриваемом случае оператор A можно выбрать в виде $A = \alpha I$, где параметр $\alpha = 0.0934219$ выбирается из физических соображений. Здесь и далее в расчетах использована т.н. атомная система единиц, в которой $\hbar = e = c, m = \frac{1}{2}$.

Из (5) получим следующее выражение для функции Грина G_A оператора H_A .

$$G_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) - \sum_{\gamma, \gamma' \in \Gamma} [Q(z) - A]_{\gamma, \gamma'}^{-1} G_0(\mathbf{r}, \gamma; z) G_0(\gamma', \mathbf{r}'; z), \quad (6)$$

где G_0 – функция Грина для невозмущенного оператора, явное выражения которой известно из [8]

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \frac{m\sqrt{\xi}}{2\pi\hbar^2} \exp \left[-\pi i \xi (\mathbf{r} \times \mathbf{r}') - \pi \xi \frac{(\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp)^2}{2} \right] \int_0^\infty \frac{\exp \left[-\pi \xi \left(\frac{\mathbf{r}_\perp^2}{e^t - 1} + \frac{\mathbf{r}'_\perp^2}{t} \right) \right]}{(1 - e^{-t}) \sqrt{t} \exp \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{z}{4\pi\xi} \right) t \right]} dt. \quad (7)$$

Здесь \mathbf{r}_\perp – проекция вектора \mathbf{r} на плоскость решетки Браве Λ , а $\mathbf{r}_\parallel = \mathbf{r} - \mathbf{r}_\perp$, ξ – плотность потока магнитного поля через элементарную ячейку решетки, выраженная в квантах. Выражение для Q -функции также известно и элементы ее матрицы имеют вид

$$Q(\gamma, \gamma'; z) = \begin{cases} G_0(\gamma, \gamma'; z), & \text{при } \gamma \neq \gamma'; \\ \frac{m\sqrt{\xi} \mathcal{Z} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{z}{4\pi\xi} \right)}{2\hbar^2 \sqrt{\pi}}, & \text{при } \gamma = \gamma', \end{cases} \quad (8)$$

где \mathcal{Z} – это ζ -функция Гурвица. Как показано в [6], в случае рациональных значений потока магнитного поля $\eta = N/M$ ($N \in \mathbf{Z}$, $M \in \mathbf{N}$) через элементарную ячейку решетки Λ при помощи разложения представления группы магнитных трансляций по спектру неприводимых задача исследования спектра гамильтониана модели H_A может быть сведена к решению т.н. дисперсионного уравнения

$$\det[\tilde{Q}(\mathbf{p}; z) - \tilde{A}(\mathbf{p})] = 0, \quad (9)$$

где $\mathbf{p} \in \mathbf{T}_\eta^2 = [0; 1/M) \times [0; 1)$. Матрицы \tilde{A} и \tilde{Q} имеют блочную структуру с размерами блоков $|K| \times |K|$. Причем матрица \tilde{A} – диагональна, а матрица \tilde{Q} состоит из блоков вида

$$\begin{aligned} \tilde{Q}(\mathbf{p}; m, \mathbf{k}; m', \mathbf{k}'; z) &= \\ &= \exp[\pi i (m - m') \xi (\mathbf{k} \times \mathbf{a}_2)] \sum_{\lambda \in \Lambda} Q(\lambda_1 \mathbf{a}_1 + (\lambda_2 M + m - m') \mathbf{a}_2 + \mathbf{k}, \mathbf{k}'; z) \cdot \\ &\cdot \exp \left[\pi i \xi (\mathbf{k} \times (\lambda_1 \mathbf{a}_1 + \lambda_2 M \mathbf{a}_2)) - 2\pi i (\lambda \mathbf{p} + \eta \lambda_1 (\lambda_2 M + m + m')/2) \right], \end{aligned} \quad (10)$$

где $\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in K$, $m, m' = 0, \dots, M - 1$, $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2)$. Таким образом, расчетные формулы получены в явном виде.

2. Численный анализ и обсуждение результатов

Из (5) ясно, что спектр гамильтониана модели H_A будет состоять из двух множеств – спектра невозмущенного оператора H_0 и решений дисперсионного уравнения (9). Известно, что

$$\sigma(H_L) = \{ \hbar\omega(l + 1/2) : l \in \mathbf{Z}_+ \}, \quad \omega = \frac{|e\mathbf{B}|}{2c}.$$

Следовательно, спектр H_0 состоит из бесконечное число раз вырожденных спектральных чисел из $\sigma(H_L)$. Решениями (9) будут $|K|M$ непрерывно зависящих от $\mathbf{p} \in \mathbf{T}_\eta^2$ функций $z_l(\mathbf{p})$, определяющих зоны в спектре H_A .

Уравнение (9) было решено численно при помощи специально разработанной программы для вычислительного кластера. Расчеты выполнялись на вычислительном кластере факультета математики и информационных технологий Национального исследовательского Мордовского государственного университета им. Н.П. Огарёва. По результатам проведенного численного моделирования построены диаграммы зависимости энергии заряженной частицы (в электрон-вольтах) от потока магнитного поля (в квантах) через элементарную ячейку решетки периодов Λ . Полученные диаграммы приведены на Рис. 4, Рис. 5 и Рис. 6.

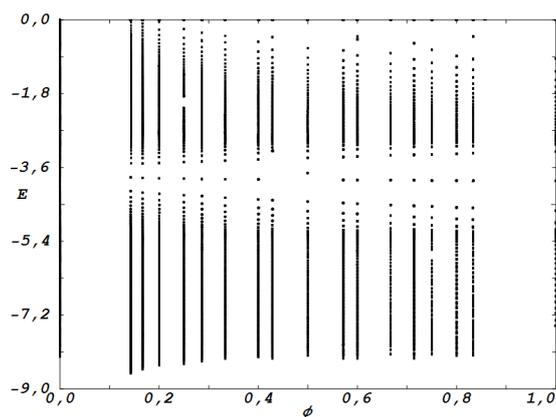


Рис. 4. Диаграмма "поток-энергия" для листа графена без деформаций.

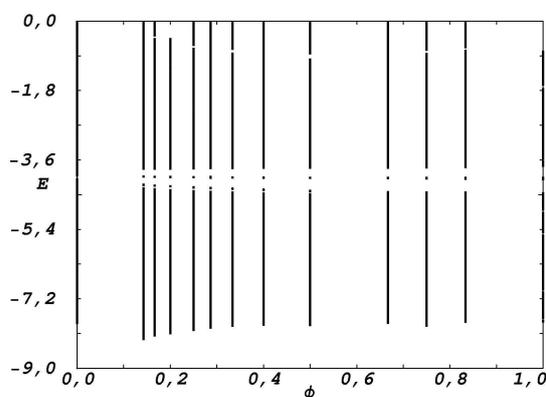


Рис. 5. Диаграмма "поток-энергия" для волнообразно деформированного графена.

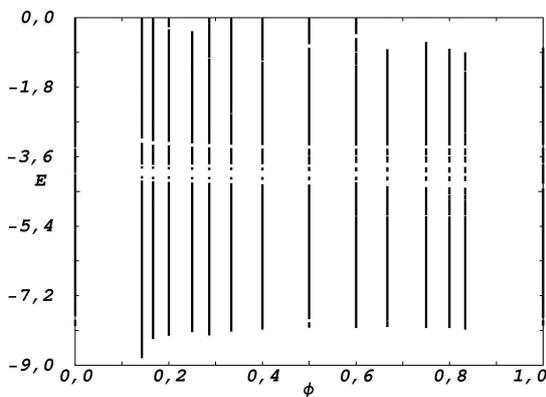


Рис. 6. Диаграмма "поток-энергия" для графена с деформациями типа "кочка".

Анализ построенных диаграмм показывает, что деформации рассмотренных типов приводят к существенному изменению спектра графена, а значит и его транспортных свойств. В частности, необходимо отметить появление небольших лакун в спектре деформированного графена в случае отсутствия внешнего магнитного поля. В то же время, при наличии магнитного поля ширина зон в спектре деформированного графена возрастает и лакуны уменьшаются.

Литература

1. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*. 2004. vol. 306. pp. 666–669.
2. Deng S., Berry V. Wrinkled, rippled and crumpled graphene: an overview of formation mechanism, electronic properties, and applications. *Materials Today*. 2016. pp. 197-212.
3. Partovi-Azar P., Nafari N., Reza Rahimi Tabar M. Interplay between geometrical structure and electronic properties in rippled free-standing graphene. *Physical Review B* 83. 2011. pp. 165434.

4. Lee J.-K., et al. Modification of electrical properties of graphene by substrate-induced nanomodulation. *Nano Letters* 13. 2013. pp. 3494.
5. Teague M.L., et al. Evidence for strain-induced local conductance modulations in single-layer graphene on SiO_2 . *Nano Letters* 9. 2009. pp. 2542-2546.
6. Geyler V.A., Pavlov B.S., Popov I.Yu. One-Particle Spectral Problem for Superlattice with a Constant Magnetic Field. *Atti Sem. Mat. Fis. Univ. Modena* 46. 1998. pp. 79-124.
7. Павлов Б.С. Теория расширений и явнорешаемые модели // УМН, 1987. Т. 42, вып. 6(258). С. 99–131.
8. Гейлер В.А., Демидов В.В. Спектр трехмерного оператора Ландау, возмущенного периодическим точечным потенциалом// ТМФ, 1995. Т. 103, № 2. С. 283–294.

MSC2020 34G10, 58D25

Numerical Investigation on the Spectral Properties of Deformed Graphene Sheet

E. N. Grishanov, O. S. Gryazeva

National Research Mordovia State University

Abstract: The article presents the numerical modeling results of deformed graphene sheet with different types of periodic deformations. Simulation was carried out using a developed program for numerical investigation on the spectral properties of periodic nanostructures in magnetic fields. The spectral properties of the model operator for different types of deformations were compared.

Keywords: deformed graphene, explicit solveble models, the theory of self-adjoint extensions.

References

1. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*. 2004. Vol. 306. pp. 666–669.
2. Deng S., Berry V. Wrinkled, rippled and crumpled graphene: an overview of formation mechanism, electronic properties, and applications. *Materials Today*. 2016. pp. 197-212.
3. Partovi-Azar P., Nafari N., Reza Rahimi Tabar M. Interplay between geometrical structure and electronic properties in rippled free-standing graphene. *Physical Review B* 83. 2011. pp. 165434.
4. Lee J.-K., et al. Modification of electrical properties of graphene by substrate-induced nanomodulation. *Nano Letters* 13. 2013. pp. 3494.
5. Teague M.L., et al. Evidence for strain-induced local conductance modulations in single-layer graphene on SiO_2 . *Nano Letters* 9. 2009. pp. 2542-2546.
6. Geyler V.A., Pavlov B.S., Popov I.Yu. One-Particle Spectral Problem for Superlattice with a Constant Magnetic Field. *Atti Sem. Mat. Fis. Univ. Modena* 46. 1998. pp. 79-124.

7. Pavlov B.S. The theory of extensions and explicitly-solvable models. *Russ. Math. Surv.* 1987. vol. 42, No. 6. pp. 127–168. (in Russian).
8. Geyler V.A., Demidov V.V. Spectrum of three-dimensional Landau operator perturbed by a periodic point potential. *TMF.* 1995. vol. 103, No. 2. pp. 283-294. (in Russian).