

Переход в полуметаллическое состояние графена на подложке

П. В. Ратников¹⁾

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 117924 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 декабря 2007 г.

После переработки 1 февраля 2008 г.

Показано, что в графене на подложке происходит переход из полупроводникового состояния с нулевой щелью в полуметаллическое состояние в зависимости от материала подложки. Проведен расчет энергии основного состояния электронного (дырочного) газа в рамках приближения хаотических фаз.

PACS: 71.15.Rf, 73.61.Wр, 73.90.+f

1. Введение. Одноатомный слой атомов углерода, образующих правильную гексагональную решетку (графен), обладает такой зонной структурой, что в трех K -точках и трех K' -точках зоны Бриллюэна энергетическая щель равна нулю [1]. Уравнение Шредингера в $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -приближении имеет вид [2]

$$\hat{H}_0 F(\mathbf{r}) = \varepsilon F(\mathbf{r}), \quad (1)$$

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} u\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & u\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}}' \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $u = \frac{3}{2}\gamma a_0 \approx 9.84 \cdot 10^7$ см/с – величина, аналогичная кейновскому матричному элементу скорости межзонных переходов в модели Дирака [3]; $\gamma \simeq 3$ эВ – зонный параметр, численно равный интегралу перекрытия атомных орбиталей, участвующих в химической связи атомов углерода в графене; $a_0 = 1.44 \text{ \AA}$ – межатомное расстояние в решетке графена; $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2)$ – матрицы Паули; $\hat{\mathbf{k}} = (\hat{k}_x, \hat{k}_y)$ и $\hat{\mathbf{k}}' = (\hat{k}_x, -\hat{k}_y)$, $\hat{k}_{x,y} = -i\partial_{x,y}$, $\hbar = 1$.

Унитарным преобразованием $\hat{U}_1 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix}$, где I – единичная матрица 2×2 , гамильтониан \hat{H}_0 приводится к виду

$$\hat{H}'_0 = \hat{U}_1 \hat{H}_0 \hat{U}_1^\dagger = \begin{pmatrix} u\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & -u\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

соответствующее уравнение с преобразованной волновой функцией $\varphi(\mathbf{r}) = \hat{U}_1 F(\mathbf{r})$ эквивалентно паре уравнений Вейля²⁾. Уравнение Вейля описывает в

квантовой электродинамике (КЭД) нейтрино – безмассовую релятивистскую частицу со спином $1/2$, однако при выводе уравнения (1) частицы предполагались бесспиновыми, поэтому в [1] было введено понятие псевдоспина. Как справедливо отмечено в [5], полная модель должна включать матричный гамильтониан 8×8 : 2-кратное долинное вырождение, 2-кратное вырождение по псевдоспину и 2-кратное вырождение по спину. Гамильтониан 8×8 можно редуцировать до гамильтониана 4×4 (3), если спин частиц учитывать в спин-неполяризованном состоянии в определении импульса Ферми, при этом кратность вырождения $\nu = \nu_{e,h} = 2$ ($\nu_{e,h}$ – долинное вырождение зоны проводимости или валентной зоны).

Чтобы получить уравнение Дирака, выполним еще одно унитарное преобразование $\hat{U}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & I \\ I & -I \end{pmatrix}$:

$$\hat{H}''_0 = \hat{U}_2 \hat{H}'_0 \hat{U}_2^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & u\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}} \\ u\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix} \equiv u\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{k}}, \quad (4)$$

где $\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$ – α -матрицы Дирака. Таким образом, носители тока в графене описываются в рамках модели Дирака с нулевой щелью $\Delta = 0$. Использование уравнения Дирака как матричного уравнения 4×4 в двумерной системе возможно потому, что в случае двух пространственных измерений матричное представление 4×4 можно использовать равноправно с матричным представлением 2×2 [6]. Этот факт позволяет перенести формализм диаграммной техники КЭД на случай двумерной системы дираковских фермионов (графен).

В настоящем письме показано, что возможен переход графена на подложке из полупроводникового состояния с нулевой щелью в полуметаллическое состояние в зависимости от материала подложки, причем этот переход происходит при $\alpha^* \simeq 1$, где $\alpha^* = e^2/\kappa_{\text{eff}}u$ – аналог постоянной тонкой структуры, численное значение которой зависит от диэлектри-

¹⁾ e-mail: ratnikov@ipi.ru

²⁾ На применение уравнения Вейля к задаче об описании носителей тока в бесщелевом полупроводнике, по-видимому, впервые указано в работе [4] в связи с возникновением аксиальной аномалии Адлера – Белла – Джакива в параллельных электрическом и магнитном полях.

ческих проницаемостей $\epsilon_{1,2}$ сред, окружающих графен: $\kappa_{\text{eff}} = (\epsilon_1 + \epsilon_2)/2$ аналогично тонкой пленке [7].

2. Энергия основного состояния (общее рассмотрение). Чтобы определить, является ли фаза бесщелевого полупроводника графена устойчивой по отношению к переходу в другую фазу, необходимо посчитать энергию основного состояния электронного (дырочного) газа, возникающего в графене при наложении электрического поля. Энергия основного состояния, приходящаяся на одну частицу, есть сумма трех слагаемых:

$$E_{gs} = E_{\text{kin}} + E_{\text{exch}} + E_{\text{corr}}, \quad (5)$$

$E_{\text{kin}} = \frac{2}{3}u p_F$ – средняя кинетическая энергия, где учтено, что, согласно уравнению (1), закон дисперсии носителей тока в окрестности K - и K' -точек зоны Бриллюэна линейен $\epsilon_{\mathbf{p}} = \pm u|\mathbf{p}|$ (+ соответствует электронам, – соответствует дыркам); $p_F = \sqrt{2\pi n_{2D}/\nu}$ – импульс Ферми, n_{2D} – двумерная концентрация частиц, ν – кратность вырождения, введенная ранее. Если уровень Ферми ϵ_F лежит выше $\epsilon = 0$, то в системе есть только электроны как носители тока в зоне проводимости с числом долин $\nu_e = 2$; если $\epsilon_F < 0$, то в системе есть только дырки как носители тока с $\nu_h = 2$. Положение уровня Ферми можно изменять приложением электрического поля [1]. Видно, что оба случая в модели Дирака равноправны. Ниже будем для определенности рассматривать случай электронов.

Обменная энергия дается диаграммой (см. рис.1)

$$E_{\text{exch}} = -\frac{\nu}{2n_{2D}} \int \frac{d^2\mathbf{p}d\epsilon}{(2\pi)^3} \frac{d^2\mathbf{k}d\omega}{(2\pi)^3} Sp \{ \Gamma^\mu(\mathbf{p}, \epsilon; \mathbf{k}, \omega) \times \\ \times G(\mathbf{p}, \epsilon) \gamma^\nu G(\mathbf{k}, \omega) \} D_{\mu\nu}^{(0)}(\mathbf{p} - \mathbf{k}, \epsilon - \omega), \quad (6)$$

где фотонный пропагатор $D_{\mu\nu}^{(0)}(\mathbf{p} - \mathbf{k}, \epsilon - \omega) \approx V(\mathbf{p} - \mathbf{k})\delta_{\mu 4}\delta_{\nu 4}$ (пренебрегается фотонными полюсами, вклад каждого из них в интеграл по частотам ϵ и ω порядка $(u/c)^2 \sim 10^{-5}$ по сравнению с вкладом

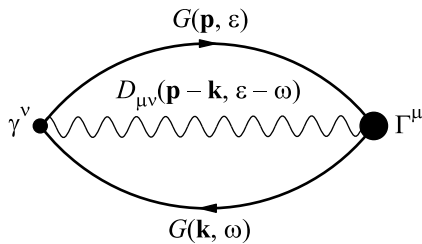


Рис.1. Обменная диаграмма

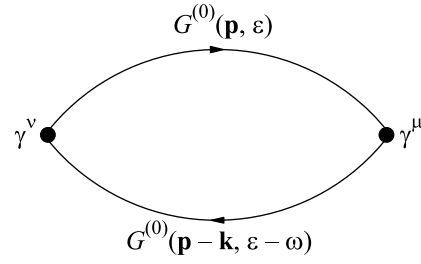


Рис.2. Поляризационный оператор нулевого приближения

полюсов функций Грина), $V(\mathbf{q}) = 2\pi e^2/\kappa_{\text{eff}}|\mathbf{q}|$ – закон Кулона в двумерном случае.

Корреляционная энергия дается формулой³⁾ [8]

$$E_{\text{corr}} = \frac{1}{2n_{2D}} \int \frac{d^2\mathbf{k}d\omega}{(2\pi)^3} \times \\ \times \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \left[\frac{-\lambda\nu V(\mathbf{k})\Pi_{44}(\mathbf{k}, i\omega)}{1 - \lambda\nu V(\mathbf{k})\Pi_{44}(\mathbf{k}, i\omega)} + \lambda\nu V(\mathbf{k})\Pi_{44}(\mathbf{k}, i\omega) \right]. \quad (7)$$

Поляризационный оператор в низшем порядке по взаимодействию $\Pi_{44}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega)$ (рис.2) рассчитывается по функциям Грина нулевого приближения [9]

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, \epsilon) = -\frac{u\hat{\mathbf{p}}}{(\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon + i\delta_-)(\epsilon_{\mathbf{p}} + \epsilon - i\delta_+)}, \quad (8)$$

$\hat{\mathbf{p}} = \gamma^\mu p_\mu$, $p_\mu = (\mathbf{p}, i\epsilon/u)$ (псевдоевклидова метрика); $\delta_\pm = \delta \text{sign}(\epsilon_F \pm \epsilon_{\mathbf{p}})$, $\delta \rightarrow +0$. После взятия интеграла по частоте $\Pi_{44}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega)$ равен [10]

$$\Pi_{44}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega) = 16 \int \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{\theta(|\mathbf{p}| - p_F)}{2\epsilon_{\mathbf{p}}} \times \\ \times \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p})^2 - \frac{|\mathbf{k}|^2 \epsilon_{\mathbf{p}}^2}{u^2}}{\left(|\mathbf{k}|^2 + \frac{\omega^2}{u^2} \right)^2 - 4 \left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} - \frac{i\epsilon_{\mathbf{p}}\omega}{u^2} \right)^2}. \quad (9)$$

Полный поляризационный оператор $\Pi_{44}(\mathbf{k}, i\omega)$ дается диаграммой рис.3 и является перенормированной величиной по отношению к $\Pi_{44}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega)$ за счет кулоновского взаимодействия.

3. Программа перенормировок. Соотношение для константы $u = \frac{3}{2}\gamma a_0$ было получено аналитически путем линеаризации в окрестности K - и K' -точек зоны Бриллюэна закона дисперсии, который

³⁾Формула (7) выведена в нерелятивистском случае и есть сумма вкладов кольцевых диаграмм всех порядков как наиболее расходящихся диаграмм. В релятивистском случае ситуация аналогичная, поэтому здесь используется та же формула с соответствующими поляризационными операторами.

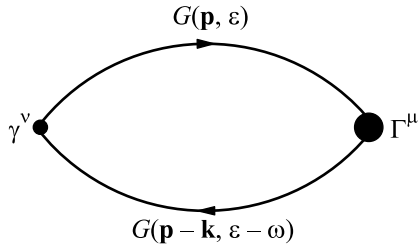


Рис.3. Полный поляризационный оператор

был получен решением уравнения Шредингера с гамильтонианом в приближении сильной связи, однако это приближение не учитывает взаимодействия между частицами как взаимодействие в многочастичной системе, то есть необходимо выполнить перенормировку константы u , учтя должным образом кулоновское взаимодействие. Ее перенормированное значение, вообще говоря, зависит от концентрации электронов.

Строго задача формулируется как задача о решении системы интегральных уравнений на точную функцию Грина $G(\mathbf{p}, \varepsilon)$, точный фотонный пропагатор $D_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \Omega)$ и вершинную функцию $\Gamma(\mathbf{p}, \varepsilon; \mathbf{p}', \varepsilon')$ (также на поляризационный оператор и собственно-энергетическую часть). Хотя решить эти уравнения приближенно можно, это выглядит слишком громоздко. Здесь воспользуемся теорией перенормировок, развитой в КЭД, фактически заменяя точную функцию Грина, точный фотонный пропагатор и вершинную функцию на соответствующие величины в низшем порядке по взаимодействию, помноженные на перенормировочные константы.

Исходим из двух предположений:

(i) заряд совпадает со значением физически наблюдаемого заряда (без учета среды)

$$e = e_0; \quad (10)$$

(ii) эффективная масса частиц остается равной нулю, то есть кулоновское взаимодействие не приводит к открытию щели вплоть до точки перехода в полуметаллическое состояние

$$\Delta \equiv 0. \quad (11)$$

Открытие щели энергетически не выгодно [11], что подтверждается на эксперименте.

Выпишем известные из теории перенормировок соотношения:

$$\Gamma^\mu = Z_1 \gamma^\mu, \quad (12)$$

$$G = Z_2^{-1} G^{(0)}, \quad (13)$$

$$D_{\mu\nu} = Z_3^{-1} D_{\mu\nu}^{(0)}. \quad (14)$$

Согласно теории перенормировок, заряд удовлетворяет соотношению [12]

$$e = Z_1^{-1} Z_2 Z_3^{1/2} e_0. \quad (15)$$

Учитывая равенство (10) и тождество Уорда $Z_1 = Z_2$, получаем $Z_3 = 1$, что и предполагалось в (6). Функция Грина удовлетворяет уравнению

$$G = G^{(0)} + G^{(0)} \Sigma G \quad (16)$$

с формальным решением

$$G^{-1} = G^{(0)-1} - \Sigma, \quad (17)$$

где $G^{(0)-1} = -u \hat{p}$, поэтому следует ожидать, что учет взаимодействия приведет к перенормировке единственного параметра в законе дисперсии – величины u , принимая во внимание (11). Собственно-энергетическую часть ищем в виде⁴⁾:

$$\Sigma(\mathbf{p}, \varepsilon) = Au \hat{p}, \quad (18)$$

откуда получаем

$$G^{-1}(\mathbf{p}, \varepsilon) = -u^* \hat{p}, \quad (19)$$

где $u^* = (1 + A)u$ – перенормированное значение величины u . Собственно-энергетическая часть дается выражением (рис.4)

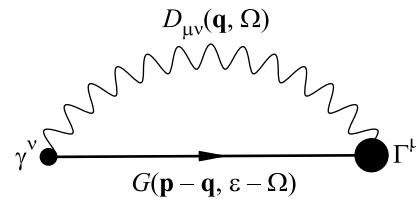


Рис.4. Собственно-энергетическая часть

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{p}, \varepsilon) = i \int \frac{d^2 \mathbf{q} d\Omega}{(2\pi)^3} \Gamma^\mu(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \varepsilon - \Omega; \mathbf{p}, \varepsilon) \times \\ \times G(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \varepsilon - \Omega) \gamma^\nu D_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \Omega). \end{aligned} \quad (20)$$

С учетом равенств (12), (13) и тождества Уорда

$$\Sigma(\mathbf{p}, \varepsilon) = i \int \frac{d^2 \mathbf{q} d\Omega}{(2\pi)^3} \gamma^\mu G^{(0)}(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \varepsilon - \Omega) \gamma^\nu D_{\mu\nu}^{(0)}(\mathbf{q}, \Omega). \quad (21)$$

⁴⁾Ниже показано, что Σ не зависит от частоты ε и $\Sigma(\mathbf{p}) = Au \gamma \mathbf{p}$, что, однако, не влияет на выражение (19), так как для $p_4 = ip_0$ под p_0 следует понимать ε/u^* .

После несложных вычислений (см. ниже) получаем

$$A = \alpha^* I \left(\frac{|\mathbf{p}|}{p_F} \right), \quad (22)$$

$$I(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - x^2 \sin^2 \varphi} \right) d\varphi, \quad (23)$$

то есть перенормированный закон дисперсии имеет вид

$$\varepsilon_{\mathbf{p}}^* = \pm u |\mathbf{p}| \left(1 + \alpha^* I \left(\frac{|\mathbf{p}|}{p_F} \right) \right). \quad (24)$$

Вычисление собственно-энергетической части. После взятия полюсного интеграла по Ω в (21) получаем выражения для вещественной и мнимой частей, которые рассмотрим по отдельности:

$$\text{Re} \Sigma(\mathbf{p}) = - \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{u \gamma^1 (p_1 - q_1)}{2\varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}} V(\mathbf{q}) \theta(|\mathbf{p} - \mathbf{q}| - p_F), \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma(\mathbf{p}) = & - \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{u \gamma^2 (p_2 - q_2)}{2\varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}} V(\mathbf{q}) \theta(|\mathbf{p} - \mathbf{q}| - p_F) + \\ & + \frac{1}{2} \gamma^0 \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} V(\mathbf{q}) \theta(|\mathbf{p} - \mathbf{q}| - p_F). \end{aligned} \quad (26)$$

Пусть \mathbf{p} направлен вдоль q_x , тогда $p_1 = p$ и $p_2 = 0$. Интеграл (25) есть разность двух интегралов (один с p_1 в числителе, второй – с q_1), оба расходятся при $q \gg p$; разложим подынтегральное выражение интеграла с q_1 до члена $\sim p/q^2$, именно этот член даст

$$\frac{\alpha^*}{4} u \gamma^1 p \ln \frac{q_c}{p_F},$$

где введено обрезание по импульсу сверху q_c , которое порядка половины расстояния между соседними K - и K' -точками зоны Бриллюэна: $q_c \simeq 2\pi/3\sqrt{3}a_0$ (на q_c перестает быть верным линейный закон дисперсии).

Для вычисления интеграла с p_1 введем безразмерную переменную $z = (q - p \cos \varphi)/p \sin \varphi$, после интегрирования по которой интеграл по углу преобразуется к виду

$$\begin{aligned} & - \frac{\alpha^*}{4\pi} u \gamma^1 p \int_0^{2\pi} d\varphi \ln \left(\frac{z_c + \sqrt{1 + z_c^2}}{z_0 + \sqrt{1 + z_0^2}} \right), \\ z_0 = & \frac{\sqrt{p_F^2 - p^2 \sin^2 \varphi}}{p |\sin \varphi|}, \quad z_c = \frac{q_c - p \cos \varphi}{p |\sin \varphi|}; \end{aligned}$$

учитывая, что $z_c \gg 1$, можно записать

$$\begin{aligned} & - \frac{\alpha^*}{4\pi} u \gamma^1 p \int_0^{2\pi} d\varphi \ln \left(z_c + \sqrt{1 + z_c^2} \right) \approx \\ & \approx - \frac{\alpha^*}{2} u \gamma^1 p \ln \frac{q_c}{p_F} + \frac{\alpha^*}{4\pi} u \gamma^1 p \int_0^{2\pi} d\varphi \ln \frac{y |\sin \varphi|}{2}. \end{aligned}$$

Собирая вместе эти интегралы, получаем для вещественной части

$$\text{Re} \Sigma(\mathbf{p}) = - \frac{\alpha^*}{4} u \gamma^1 p \ln \frac{q_c}{p_F} +$$

$$+ \frac{\alpha^*}{\pi} u \gamma^1 p \int_0^{\pi/2} d\varphi \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - \left(\frac{p}{p_F} \right)^2 \sin^2 \varphi} \right). \quad (27)$$

Первый член в (27) должен быть откинут по следующим причинам:

1) $q_c \gg p_F$, причем $\ln(q_c/p_F)$ может быть сколь угодно большим при сколь угодно малом p_F ; перенормировочный коэффициент величины u становится отрицательным и дальнейшее вычисление энергии основного состояния E_{gs} теряет смысл;

2) соответствующий вклад в коэффициент A не зависит от импульса частицы; следовало бы ожидать, что перенормировку величины u не “чувствуют” частицы с $p \rightarrow 0$, тогда как частицы с $p \rightarrow p_F$ наиболее “чувствительны” к ней, то есть нужно потребовать выполнения условия $A(0) = 0$.

В мнимой части (26) в первом интеграле интегрирование по углу дает нуль; отличный от нуля вклад есть

$$\text{Im} \Sigma(\mathbf{p}) = \frac{\alpha^*}{2} \gamma^0 u q_c - \frac{\alpha^*}{\pi} \gamma^0 E \left(\frac{p}{p_F} \right) u p_F, \quad (28)$$

где $E(x)$ – полный эллиптический интеграл второго рода. Первое слагаемое устраняется требованием $\text{Im} \Sigma_{Reg}(0) = 0$, то есть

$$\text{Im} \Sigma_{Reg}(\mathbf{p}) = \frac{\alpha^*}{\pi} \left[\frac{\pi}{2} - E \left(\frac{p}{p_F} \right) \right] \gamma^0 u p_F,$$

что представляет собой в перенормированной функции Грина сдвиг частоты ε , зависящий от импульса:

$$G^{-1}(\mathbf{p}, \varepsilon) = -(1 + A) u \gamma \mathbf{p} - i \{ \gamma^0 \varepsilon + \text{Im} \Sigma_{Reg}(\mathbf{p}) \},$$

однако этот сдвиг является слабо меняющейся функцией импульса, поэтому его можно заменить его средним значением, то есть константой, на которую можно сдвинуть интегрирование по частоте при расчетах диаграмм, значит, эту добавку можно откинуть. Окончательно, приходим к результату (22), (23).

4. Энергия основного состояния. Средняя кинетическая энергия теперь равна

$$E_{kin} = \frac{2}{3}u_F + \frac{2\alpha^*}{\pi}u_F \int_0^1 x^2 dx \int_0^{\pi/2} \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x^2 \sin^2 \varphi} \right) d\varphi \approx \left[\frac{2}{3} - 0.0342\alpha^* \right] u_F, \quad (29)$$

откуда видно, что перенормировка вносит вклад $\lesssim 0.1$; следует ожидать, что ее вклад в обменную и корреляционную энергии будет того же порядка (или еще меньше), поэтому имеет смысл для упрощения дальнейших выкладок сохранить линейный вид закона дисперсии, усреднив (22) по $|\mathbf{p}|$, и под u^* будем подразумевать $\bar{u}^* = (1 + \bar{A})u$ с константой

$$\bar{A} = \frac{\alpha^*}{\pi} \int_0^1 dx \int_0^{\pi/2} \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x^2 \sin^2 \varphi} \right) d\varphi \approx -0.0269\alpha^*. \quad (30)$$

Перенормировка для выражения обменной энергии (6) приводит к равенству $E_{exch} = Z_2^{-1}E_{exch}^{(0)}$, где $E_{exch}^{(0)}$ – обменная энергия, подсчитанная по перенормированным функциям Грина, фотонному пропагатору и вершине:

$$E_{exch}^{(0)} = -\frac{\alpha^* J}{2\pi} u_F, \quad (31)$$

$$J = \int_0^1 dx \int_0^1 dy \int_0^{2\pi} d\chi \frac{(1 + \cos \chi)xy}{\sqrt{x^2 + y^2 - 2xy \cos \chi}} = \frac{8}{3} \left(\mathcal{G} + \frac{1}{2} \right),$$

$\mathcal{G} = 0.915965\dots$ – постоянная Каталана.

При вычислении корреляционной энергии можно ограничиться вторым порядком теории возмущений – соответствующие диаграммы перенормируются⁵⁾ множителем Z_2^{-2} , поэтому $E_{corr} = Z_2^{-2}E_{corr}^{(0)}$. Дальнейший расчет, использующий асимптотики поляризованного оператора в низшем приближении по взаимодействию при больших и при малых передаваемых импульсах, приводит к выражению [11]

$$E_{corr}^{(0)} = -\frac{\alpha^{*2}\nu}{128\pi} \left(\frac{3\pi}{8} - \frac{25}{27} - \frac{1}{27\nu} \right) u_F. \quad (32)$$

Окончательный ответ для энергии основного состояния запишется в виде

$$E_{gs} = \left[\sqrt{2\pi} \left(\frac{2}{3} - 0.0342\alpha^* \right) - \frac{8(\mathcal{G} + \frac{1}{2})}{3\sqrt{2\pi}} \right] \times \frac{\alpha^*}{1 - 0.0269\alpha^*} - \frac{\nu}{64\sqrt{2\pi}} \left(\frac{3\pi}{8} - \frac{25}{27} - \frac{1}{27\nu} \right) \times \frac{\alpha^{*2}}{(1 - 0.0269\alpha^*)^2} \left] u \left(\frac{n_{2D}}{\nu} \right)^{1/2}. \quad (33)$$

5. Переход в полуметаллическое состояние.

Из полученного выражения (33) видно, что при $\alpha_0^* \approx 1.0204$ для $\nu = 2^6$ коэффициент при $u(n_{2D}/\nu)^{1/2}$ меняет знак и, учитывая, что энергия основного состояния является монотонно возрастающей по модулю функцией концентрации частиц, при отрицательном значении этого коэффициента системе двумерных безмассовых дираковских фермионов оказывается выгодным спонтанно рождасть электрон-дырочные пары, что является проявлением неустойчивости системы по отношению к кулоновскому взаимодействию. В таком случае происходит фазовый переход.

Как было отмечено выше, открытие щели энергетически не выгодно, поэтому этот переход является переходом из полупроводникового состояния с нулевой щелью в полуметаллическое состояние. Причем, он происходит в зависимости от значения параметра α^* , который зависит от значения диэлектрической проницаемости подложки. Таким образом, будет ли

⁵⁾ Число перенормируемых вершин вдвое меньше числа перенормируемых функций Грина, а половина вершин остается перенормированной, поэтому диаграмма n -го порядка перенормируется множителем Z_2^{-n} .

⁶⁾ Для $\nu = 1$ получаем $\alpha_{01}^* \approx 1.0214$ и $\alpha_{01}^* > \alpha_0^*$, что важно, если двигаться со стороны $\alpha^* < 1$, в таком случае переход происходит из спин-неполяризованной фазы в спин-поляризованную за счет изменения знака E_{gs} .

графен проявлять полупроводниковые или полуметаллические свойства, определяется материалом подложки. Также видно, что при положительном значении энергии основного состояния энергетически выгоднее спин-неполяризованное состояние с $\nu = 2$, а при смене знака – спин-поляризованное с $\nu = 1^7$), так что помимо перехода в полуметаллическое состояние одновременно с ним происходит переход в спин-поляризованное состояние.

Близость параметра α_0^* к единице указывает на то, что имеется тесная аналогия между рассмотренным случаем и неустойчивостью кулоновского поля заряда $Z = 137$ по отношению к спонтанному рождению электрон-позитронных пар в КЭД (эффективно постоянная тонкой структуры устремляется к единице). Возможно, что на самом деле точное значение параметра α^* , при котором происходит описанный переход, равно единице, а незначительное отличие α_0^* от единицы, полученное в данной работе, связано с неточностью принятого приближения.

6. Возможные экспериментальные наблюдения. Как показали проведенные эксперименты, параметр α^* изменяется в зависимости от материала подложки, например, для SiO_2 подложки $\kappa_{\text{eff}} = 5$ и $\alpha^* \approx 0.44$, а для SiC подложки $\kappa_{\text{eff}} = 3$ и $\alpha^* \approx 0.73$ [13], но для того, чтобы имел место переход, необходимо $\alpha^* \simeq 1$, что соответствует $\kappa_{\text{eff}} \simeq 2$.

Формально, в вакууме $\kappa_{\text{eff}} = 1$ и графен должен бы быть полуметаллом. Можно оценить величину перекрытия валентной зоны и зоны проводимости в полуметаллическом состоянии [11]:

$$\delta E \simeq \left(b - \frac{1}{b}\right) up_F, \quad (34)$$

где $b = \alpha^*/\alpha_0^*$, что имеет смысл только при $\alpha^* > \alpha_0^*$; из (34) следует, что $\delta E \propto n_{2D}^{1/2}$ ($p_F = \sqrt{2\pi n_{2D}}$). Электроны и дырки как носители тока при $T = 0$ могут появиться в графене, если он находится на подложке при наложении электрического поля (electric field effect), причем концентрация носителей тока пропорциональна приложенному напряжению $n_{2D} \propto V_g$ [1]. В отсутствие подложки $n_{2D} \equiv 0$ и $\delta E \equiv 0$, поэтому графен в вакууме остается бесщелевым полупроводником⁸). Значит, нужно искать материал подложки

с достаточно малой κ_{eff} , например, она может быть у подложки с регулярно расположенными дырочками или у некоторых метаматериалов. Наложение электрического поля для появления носителей тока в графене необязательно в случае, когда контакт графена с подложкой является контактом второго рода, то есть уровень $\varepsilon = 0$ в графене не лежит в запрещенной зоне материала подложки.

7. Обсуждение результатов работы. Главный качественный результат данной работы – наличие фазового перехода бесщелевой полупроводник – полуметалл в двухмерном случае при $\alpha^* \simeq 1$. Фаза бесщелевого полупроводника в этом случае устойчива при $\alpha^* \leq 1^9$), что является аналогом критерия устойчивости систем трехмерных нерелятивистских фермионов

$$\frac{1}{\varepsilon_{\text{tot}}(\mathbf{q}, 0)} \leq 1,$$

где $\varepsilon_{\text{tot}}(\mathbf{q}, 0)$ – статический предел полной диэлектрической функции.

В работах [14] исследовался переход полуметалл-полупроводник в неупорядоченных вырожденных полупроводниках. В качестве примеров таких систем рассматривались сплавы HgTe (полупроводники $A_{III}B_V$) и SnTe (полупроводники $A_{IV}B_{VI}$), а также “двумерный графит”, то есть графен. Переход возникает за счет рассеяния носителей тока на случайном потенциале и вызван их локализацией, однако кулоновское и спин-орбитальное взаимодействия не были включены в эту модель. В настоящей работе не рассматривается влияние беспорядка в графене на его транспортные свойства, но показано, что учет кулоновского взаимодействия приводит к качественно сходному результату.

В работе [15] рассмотрен случай “точки Ферми” – соприкосновения в одной точке зоны проводимости и валентной зоны при $\varepsilon_F = 0$, вследствие чего в функцию Грина не вошла энергия Ферми, а все последующие выкладки производились при $p_F \equiv 0$, что существенно отличается от поставленной в данной работе задачи: графен на подложке с ненулевой концентрацией носителей тока, то есть $p_F \neq 0$.

8. Заключение. В данной работе проведен расчет энергии основного состояния электронного (ды-

ла. Если преодолеть все эти трудности, то электроны можно “напылять” на графен, тогда необходимость в подложке как в источнике носителей тока отпадает и становится возможным полуметаллическое состояние.

⁹) При бесконечно малом превышении α^* над единицей система становится неустойчивой, однако при точном равенстве $\alpha^* = 1$ следует ожидать $E_{g_s} \equiv 0$, так что в этом случае система все еще остается устойчивой.

⁷) В формуле для p_F уже учтена спиновая двойка, поэтому в наших обозначениях, не меняя формул с ν , в спин-поляризованном случае нужно положить $\nu \rightarrow \nu_e, h/2$.

⁸) Есть также чисто технологическая трудность постановки эксперимента с подвешенным графеном в вакууме: возможно наличие большого числа дефектов типа вакансий или локальных разрывов. Не исключено, что пленка графена будет прогибаться, что приведет к появлению геометрического потенциа-

рочного) газа с учетом перенормировки величины u , на основе которого проанализирована устойчивость фазы бесщелевого полупроводника относительно перехода в полуметаллическую фазу. Получено условие возникновения такого перехода: $\alpha^* \simeq 1$. Указаны возможные системы для экспериментального наблюдения.

Автор выражает глубокую благодарность А.П. Силину за ценные советы в ходе выполнения работы и полезное обсуждение ее результатов.

-
1. K. S. Novoselov, *Nature* **438**, 197 (2005).
 2. T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 777 (2005).
 3. Б. А. Волков, Б. Г. Идлис, М. Ш. Усманов, *УФН* **65**, 799 (1995).
 4. H. Nielson and M. Ninomiya, *Phys. Lett. B* **130**, 389 (1983).
 5. M. W. C. Dharma-Wardana, *Phys. Rev. B* **75**, 075427 (2007).
 6. A. M. Tsvelik, *Quantum field theory in condensed matter physics*, Cambridge University Press, 2003.
 7. Л. В. Келдыш, *Письма в ЖЭТФ* **29**, 716 (1979).
 8. L. V. Keldysh, *Contemp. Phys.* **27**, 395 (1986).
 9. Н. В. Маркова, А. П. Силин, Препринт ФИАН № 52 (1993); N. V. Markova and A. P. Silin, *J. Moscow Phys. Soc.* **4**, 311 (1994).
 10. Л. Е. Печеник, А. П. Силин, *Краткие сообщения по физике ФИАН* № 5–6, 72 (1996).
 11. П. В. Ратников, А. П. Силин, *Краткие сообщения по физике ФИАН* № 1, 46 (2008).
 12. Е. С. Фрадкин, *ЖЭТФ* **26**, 751 (1954).
 13. A. Iyengar, J. Wang, H. A. Fertig, and L. Brey, *Phys. Rev. B* **75**, 125430 (2007).
 14. E. Fradkin, *Phys. Rev. B* **33**, 3257; 3262 (1986).
 15. А. А. Абрикосов, С. Д. Бенеславский, *ЖЭТФ* **59**, 1280 (1970).