На правах рукописи

Чэнь Сяосин

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ И ФЛУКТУАЦИИ В ГРАФЕНЕ

Специальность: 01.04.10 – Физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург 2011

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном электротехническом университете «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук,
доцент Ктиторов Сергей Андреевич

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук,
профессор, ведущий научный сотрудник
Физико-технического института
им. А.Ф. Иоффе РАН — Давыдов Сергей Юрьевич

кандидат технических наук,
заместитель директора
НОЦ "Нанотехнологии" СПбГЭТУ — Афанасьев Алексей Валентинович

Ведущая организация – Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Защита состоится «22» декабря 2011 г. в 15 час. на заседании совета по защите докторских и кандидатских диссертаций Д 212.238.04 Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина) по адресу: 197376, Санкт-Петербург, ул. проф. Попова, 5.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке университета.

Автореферат разослан «21» ноября 2011 г.

Ученый секретарь
совета по защите докторских
и кандидатских диссертаций
д.ф.-м.н., профессор — Мошников В.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА

1. <u>Актуальность темы</u>:

Первое отделение моноатомного слоя графита, получившего название *графен*, послужила началом бурного развития экспериментальных и теоретических исследований этого объекта. Присуждение нобелевской премии по физике в 2010 году А. Гейму и К. Новоселову означало признание важности этих исследований. Интерес к графену обусловлен как уникальными физическими свойствами этого объекта, так и перспективами его применения в электронике. Среди важных необычных свойств графена можно отметить аномально высокую фермиевскую скорость (~10^8 см/с) и подвижность носителей заряда (~$2{\cdot}10^5$ см^2 В$^{-1}$с$^{-1}$), что важно для повышения быстродействия электронных приборов. Одной из интересных особенностей электронного спектра графена является закон дисперсии, имеющий вид двуполостного конуса вблизи критических точек в зоне Бриллюэна, характерный для бесщелевых полупроводников первого рода. Это позволяет описывать соответствующие электронные состояния с помощью двухзонного уравнения, математически эквивалентного уравнению Дирака для двухкомпонентного спинора. Однако, некоторые особенности электронных состояний графена не могут быть описаны уравнением Дирака и требуют явного учета кристаллической структуры объекта.

Другой важной особенностью графена является двухмерность кристаллической структуры, так что монослойный или бислойный лист графена можно рассматривать как мембрану с поверхностным натяжением. С этой стороны возникает одна фундаментальная физическая проблема в связи с получением монослойного графена – вопрос о возможности существования устойчивых двумерных кристаллических структур при конечной температуре. Ландау и Пайерлс показали, что для двумерных кристаллических систем в гармоническом приближении амплитуда флуктуационных колебаний атомов расходится логарифмически в плоскости в длинноволновом пределе. Мермин и Вагнер доказали, что длинноволновые флуктуации разрушают дальний порядок в двумерной системе. Кроме того, длинноволновые флуктуации смещений атомов расходятся и в перпендикулярном направлении плоскости кристалла. Но все эти суждения обоснованы для строго плоской структуры в гармоническом приближении. При образовании статических волн изгиба плоскости или учете ангармонической поправки происходит стабилизация состояния системы.

2. Основная цель диссертационной работы состоит в том, чтобы построить простую теоретическую модель, позволяющую адекватно описывать поведение электронов и фононов в графене с учетом особенностей симметрии его кристаллической структуры при разрушении дальнего порядка, т.е. при наличии дефектов и примеси или сильном электрон-фононном взаимодействии. В рамках этой модели проанализировать характерные свойства электронной и фононной подсистем.

Для достижения поставленной цели в диссертационной работе предстояло решить следующие **задачи**:

• построение функции Грина с решеточной особенностью, с помощью которой можно аналитически исследовать электронные состояния и их плотность в идеальном кристалле, а так же оптическое поглощение света в идеальном и неупорядоченном кристаллах;

• теоретическое исследование с помощью решёточной функции Грина влияния точечных дефектов и локальной примеси на плотность, резонансы и рассеяние электронных состояний;

• проанализировать поведение электронных состояний в модели блоховских осцилляций при однородном электрическом поле;

• предложить возможность динамического рождения щелей в электронном спектре при сильном электрон-фононном взаимодействии в модели Гросса – Неве в (2+1) -мерном пространстве;

• предложить так же возможность существования доменов инверсии зон благодаря электрон-фононному взаимодействию;

• построить модель дискретного бризера в двумерной решетке.

3. Методами исследования являются теория функций Грина в конденсированной среде, зонная теория полупроводников, метод континуального интегрирования, теория систем линейных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами и теория нелинейных волн.

4. <u>Положения, выносимые на защиту</u>:

1. Построена приближенная решеточная функция Грина для монослойного графена, учитывающая реальную кристаллическую структуру и особенности Ван Хова, с помощью которой можно аналитически описывать локализованные электронные состояния и оптическое поглощение. В частности, с ее помощью получены характеристические уравнения для связанных и резонансных электронных состояний, вычислен интервал энергий $|\varepsilon| < t = 2v_F/3a$ (где $t \approx 2,8$ эВ – 1/6 ширины разрешенной зоны), в котором существуют острые резонансы в рассеянии электронов; вычислен оптический коэффициент поглощения графена в широком диапазоне частот фотонов, как в области применимости уравнения Дирака, так и за ее пределами, где сказывается влияние особенностей Ван Хова.

2. Найдены квазиклассические поправки к условиям квантования уровней Ваннье-Штарка, вызванные взаимодействием зон при $eEa/t << 1$.

3. Показана возможность флуктуационного рождения щели и доменов при достаточно сильном электрон-фононном взаимодействии. Найден порог образования щели по величине константы электрон-фононного взаимодействия: $g > g_{cr} \approx 0,8$ эВ/см.

4. Показана возможность существования дискретного бризера в двумерной решетке. Получена зависимость частоты нелинейных колебаний центрального узла от их амплитуды. Отмечено, что амплитуда колебания в относительно широком диапазоне частот достаточно медленно убывает, а вблизи порога сильно убывает до нуля за счет связанных состояний.

5. <u>Достоверность и обоснованность</u> проведенных расчетов и результатов обеспечена обоснованностью применяемых методов математической физики и теории полупроводников, сопоставлением полученных нами теоретических результатов в некоторых предельных областях с экспериментальными и теоретическими результатами, представленными в работах других авторов, апробацией основных научных результатов на научных, научно-технических конференциях, семинарах, симпозиумах различного уровня, публикацией в научных реферируемых журналах.

6. <u>Научная новизна работы</u>:

- Впервые показана возможность флуктуационного рождения щели в электронном спектре и существования доменов инверсии зон благодаря сильному электрон-фононному взаимодействию. Найдена критическая константа электрон-фононного взаимодействия, при котором возникает щель.
- Сформулирована и проанализирована аналитически решаемая модель нелинейного дискретного бризера в двумерной решетке, получена зависимость частоты бризера от его амплитуды.
- Получен коэффициент оптического поглощения в графене в широком диапазоне частот.

7. <u>Научное и практическое значение работы</u>

Результаты диссертационной работы могут быть использованы для объяснения оптических и кинетических свойств монослойного графена. Предложенная диссертантом модельная решеточная функция Грина может быть использована другими авторами для осуществления количественных аналитических вычислений при дальнейшем изучении кинетики и оптики графена. Методы, развитые в диссертации, могут послужить основой для разработки лекционного курса по теории низкоразмерных бесщелевых полупроводников и соответствующих курсовых работ.

8. <u>Личное участие</u> автора в получении представленных результатов состоит в том, что все включенные в диссертацию материалы получены им лично или при его непосредственном участии.

9. <u>Апробация работы</u>.

Основные научные выводы и положения докладывались на следующих конференциях: 11th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures, St. Petersburg, October 3-7, 2011; Научно – технические конференции профессорско-преподавательского состава СПбГЭТУ, СПб, 2009, 2010, 2011, а также на семинарах в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе.

10. Публикации:

Основные теоретические и практические результаты диссертации опубликованы в 4 научных статьях и докладах, из них по теме 4, среди которых 2 публикации в ведущих рецензируемых изданиях, рекомендованных в действующем перечне ВАК, 1 в другом издании, доклад доложен и получил одобрение на 1 международной конференции. Список публикаций приведен в конце реферата.

11. Структура и объем диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы, включающего *126* наименований. Работа изложена на *108* страницах машинописного текста, содержит *28* рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цель и задачи исследования, отмечены научная новизна и практическая значимость основных полученных научных результатов, перечислены научные положения, выносимые на защиту.

Первая глава носит обзорный характер.

Приведен обзор современных научных публикаций по кристаллической структуре и электронному спектру в монослойном графене. Теоретическое исследование поведения электронов в двумерном гексагональном кристалле было начато в середине 20-го века, в одной из первых работах [1] была предложена модель приближения сильной связи для описания электронных состояний в монослойном графите. Характерной особенностью электронного спектра графена является линейная дисперсионная зависимость вблизи критических дираковских точек, движение электронов в данном случае может быть описано уравнением Дирака для безмассового фермиона [2].

Приведены результаты работ [3,4], в которых было применено приближение линейной дисперсии электронов с помощью метода функции Грина в конденсированной среде для модели сильной связи в графене. Было отмечено, что данное решение является хорошим приближением в случае, если возмущение, вызванное дефектами или внешним полем, является плавным в масштабе периодичности решетки и слабым по сравнению с шириной разрешенной зоны. В противном случае, для некоторых интересующих нас величин, например плотности электронных состояний, выше упомянутая модель не дает правильный результат в пределе больших энергий ($E > 2v_F/3a \approx 2{,}8$ *эВ*).

В обзоре также рассмотрено влияние точечных дефектов, находящихся на одной из подрешеток [3,5]. Дана общая оценка разрабатываемой в настоящее время модели для описания рассеяния электронных состояний.

Приведены сведения об устойчивости при конечной температуре двумерной кристаллической структуры. В работах Пайерлса, Ландау, Мермина и Вагнера было обосновано утверждение о том, что двумерный кристалл с дальним порядком не может существовать из-за логарифмически расходящейся интенсивности термодинамических флуктуаций. Было отмечено, что данное утверждение обосновывается только при гармоническом приближении и для абсолютно плоского кристалла.

Глава заканчивается формулированием цели и задач исследования.

Вторая глава посвящена построению аналитически решаемой модели приближения сильной связи с помощь функции Грина, в которой учитывается сложная геометрическая симметрия графена. Чтобы учитывать трансляционную симметрию необходимо учесть важный факт, что в элементарной ячейке графена имеются два атома.

В первом разделе рассматривается функция Грина для графена без дефектов в рамках приближения линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО). Функция Грина при этом является матричной [3]:

$$G\left(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'}, \varepsilon\right) = \int\limits_{BZ} \frac{d^2\vec{k}}{A_{BZ}} \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\left(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'}\right)}}{\varepsilon^2 - \left|t_{\vec{k}}\right|^2} \begin{pmatrix} \varepsilon & -t_{\vec{k}} \\ -t^*_{\vec{k}} & \varepsilon \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

где:

$$t_{\vec{k}} = t\left(1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2}\right), \qquad (2)$$

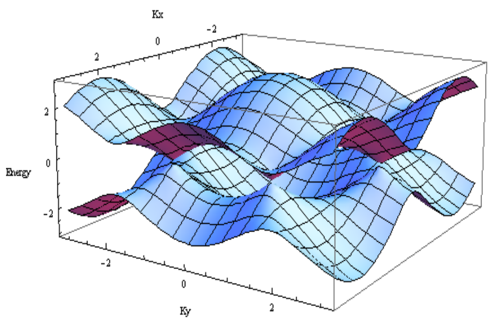
где $t = 2v_F/3a$ – параметр масштаба ширины разрешенной зоны. $\pm\left|t_{\vec{k}}\right|$ является собственной энергией электрона, и содержит сложную комбинацию тригонометрических функций. Данная функция аналитически вычисляется крайне сложно, нами были приняты две аппроксимации:

Первая – приближение простой тригонометрической дисперсии, функция $t_{\vec{k}}$ заменяется на приближенное выражение:

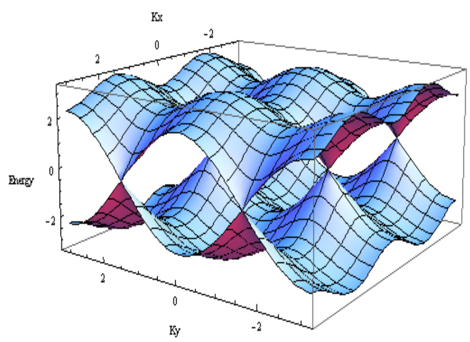
$$t_{\vec{\kappa}} = v_F\left(\frac{4}{3\sqrt{3}a} i\sin\kappa_x \pm \frac{4}{3\sqrt{3}a}\cos\kappa_y\right), \qquad (3)$$

В этом случае гексагональная решетка превращается в топологически эквивалентную.

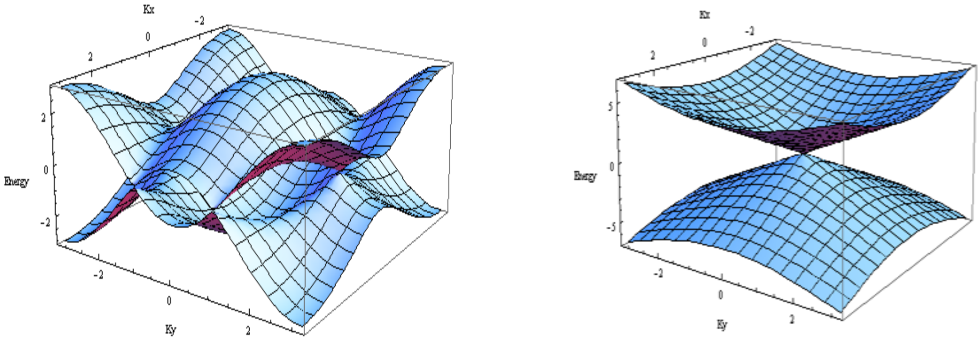
Вторая аппроксимация решеточной функции Грина для гексагональной решетки с учетом взаимодействия ближайших соседей – метод быстрого преобразования Хоригучи, впервые полученный в работе [6]. Метод представляет собой преобразование гексагональной решетки в треугольную решетку. С помощью данного метода мы можем получить функцию Грина быстро в виде полного эллиптического интеграла. Следуя Хоригучи, функция Грина для гексагональной решетки может быть выражена через функцию Грина для треугольной решетки. В рисунке 1 изображены точная и приближенная дисперсии энергии электронов.



а



б



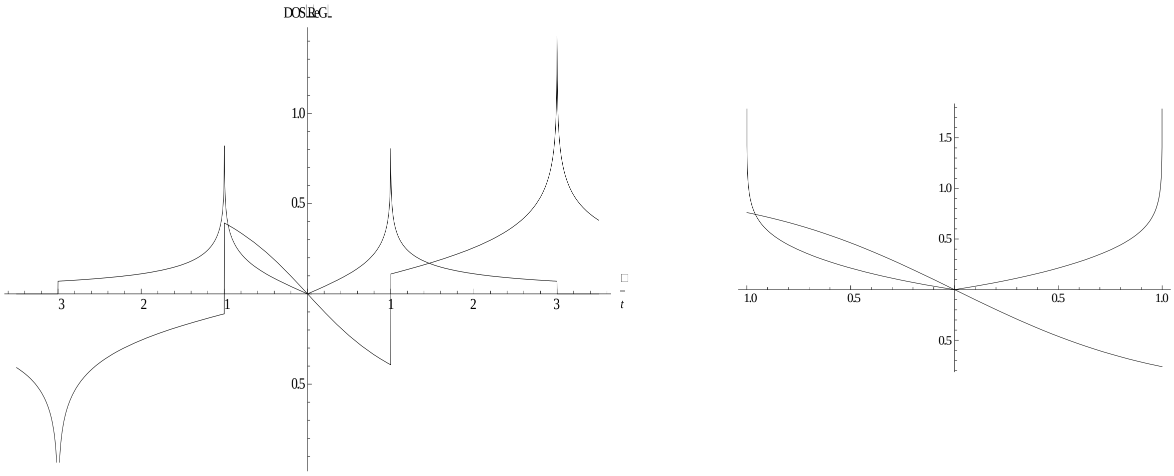
в *д*

Рис.1 Зависимости энергии электронов от волнового вектора, а) при точной формуле, б)в приближении простой тригонометрической дисперсии, в) в приближении быстрого преобразования Хоригучи, д) в линейном приближении вблизи точек Дирака

Таким образом, были вычислены диагональные элементы функции Грина:

$$G_0^{AA}(0,0;\varepsilon)=\frac{\varepsilon}{4\pi}g(\varepsilon)K\left[k(\varepsilon)\right], \tag{4}$$

где: $K\left[k(\varepsilon)\right]$ - полный эллиптический интеграл первого рода и имеет логарифмические особенности, порождающие ванхововские особенности плотности состояний в полюсах $k(\varepsilon)$, и $g(\varepsilon)=4/\left(3\varepsilon^2-4t^2\right)$, $k(\varepsilon)=\left(3\varepsilon^2/4t^2-1\right)^{-1}$ для первого приближения, $g(\varepsilon)=8\left[\varepsilon-1\right]^{-3/2}\left[\varepsilon+3\right]^{-1/2}$, $k(\varepsilon)=4\varepsilon^{1/4}\left[\varepsilon-1\right]^{-3/2}\left[\varepsilon+3\right]^{-1/2}$ для второго, соответственно. Также были получены недиагональные элементы в разных случаях. С помощью диагональных элементов функции Грина для чистого графена получена плотность электронных состояний. Действительная часть функции Грина в зоне, где $|\varepsilon| < t$ имеет отрицательный знак производной по энергии. В этом случае имеет место резонансное электронное состояние.



а б

Рис.2 а) Плотность электронных состояний и действительная часть функции Грина от энергии для графена, б) ширина резонансных состояний

Во втором разделе второй главы была рассмотрена проблема электронных состояний при наличии дефектов. Рассматривается графен с дефектами с потенциалом, действующим на одну из подрешеток. Были найдены поперечное сечение и тангенс фазы рассеяния. Рассмотрена проблема дефекта с потенциалом в виде столбца, действующим на все диагональные элементы функции Грина. Для этого случая получено характеристическое уравнение. Было отмечено, что в случае, когда один из элементов потенциала дефекта равен нулю, получается квазиоднозонная ситуация, напоминающая ситуацию с уравнением Шрёдингера.

В третьем разделе было вычислен коэффициент оптического поглощения в широком диапазоне частот фотонов в чистом и неупорядоченном графене.

В третьей главе рассматривается квантование электронных состояний под действием внешнего однородного электрического поля. В идеальном кристалле внешнее электрическое поле E приводит к локализации волновых функций электронов. При этом квазинепрерывные зоны распадаются на эквидистантные уровни (так называемая “лестница Ваннье-Штарка”) [7]. Дистанция между уровнями $\Delta\varepsilon = eEa\xi$, где a – расстояние между ближайшими атомами, e – заряд электрона, ξ – геометрический фактор порядка единицы; его величина зависит от направления вектора электрического поля.

В графене уравнение для волновых функций – дираковских спиноров, описывающее воздействие внешнего электрического поля принимает вид:

$$\left(\varepsilon - H_E\right)\psi_j\left(\vec{k}\right) = \begin{pmatrix} \varepsilon - ie\vec{E}\dfrac{d}{d\vec{k}} & -t_{\vec{k}} \\ -t_{\vec{k}}^{\ *} & \varepsilon - ie\vec{E}\dfrac{d}{d\vec{k}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \tag{5}$$

Исключив один из элементов волновой функции, получим дифференциальное уравнение второго порядка для *u*:

$$\frac{d^2u}{d\vec{k}^2} + \left(\frac{2i\varepsilon}{e\vec{E}} - \frac{1}{t_{\vec{k}}}\frac{dt_{\vec{k}}}{d\vec{k}}\right)\frac{du}{d\vec{k}} + \left(\frac{\left|t_{\vec{k}}\right|^2 - \varepsilon^2}{e^2E^2} - \frac{i\varepsilon}{e\vec{E}t_{\vec{k}}}\frac{dt_{\vec{k}}}{d\vec{k}}\right)u = 0\,. \tag{6}$$

Сделаем замену переменной:

$$u\left(\vec{k}\right) = w\left(\vec{k}\right)\exp\left[-\int\frac{d\vec{k}}{2}\left(\frac{2i\varepsilon}{e\vec{E}} - \frac{1}{t_{\vec{k}}}\frac{dt_{\vec{k}}}{d\vec{k}}\right)\right]. \tag{7}$$

Здесь функция *u* периодическая, т.е. удовлетворяет граничным условиям, а функция *w* нет. Уравнение становится уравнением без первой производной, и в силу малости *eEa/t << 1* можно пренебречь слагаемыми, содержащими *eE*, получим уравнение Матье:

$$e^2E^2\frac{d^2w}{d\vec{k}^2} + \left(\left|t_{\vec{k}}\right|^2 - 2\varepsilon^2\right)w = 0\,. \tag{8}$$

Если электрическое поле направлено по направлению одной из кристаллографических осей, чтобы по соответствующему волновому вектору зона была узкой (означает , что по этому направлению будет квантование электронных состояний), то проблема становится одномерной. Это означает что Функция *w* может быть записана через функцию Блоха $w_{m,x}\left(k\right) = \exp\left(ixk\right)\upsilon_{m,x}\left(k\right)$. $\upsilon_{m,x}$ – периодическая по *2π/a* в *k* пространстве, и $w_{m,x}\left(k\right) = w_{m,x+a}\left(k\right)$.

В уравнении (8) наблюдается аномальный знак энергии и потенциала, следует решать, найдя собственные значения с отрицательным знаком. В случае *eEa/t << 1*, амплитуда “потенциала” $\left|t_{\vec{k}}\right|^2$ велика, уравнение (8) можно решать квазиклассически.

Связь между собственной энергией и координатой (в роли волнового вектора для обычного случая):

$$\varepsilon_m\left(x\right) = -\Delta_m\cos\left(x/a\right), \tag{9}$$

где Δ_m □ $1/\sqrt{\lambda}\exp\left(-8/\lambda\right)$ и $\lambda = eEa/t$.

Условие квантования принимает вид:

$$x-\frac{\varepsilon}{eE_x}=na\,. \tag{10}$$

Четвертая глава посвящена проблеме флуктуационной устойчивости графена в модели Гросса-Неве.

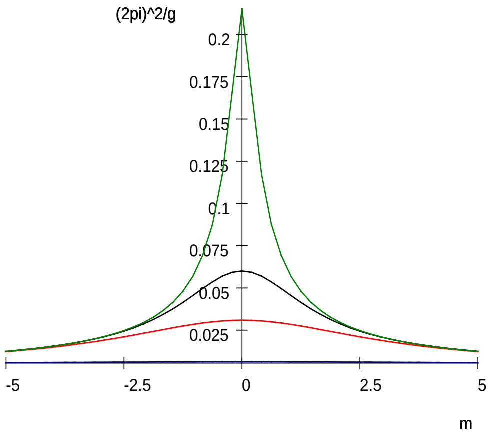
В первом разделе четвертой главы рассматривается возможность динамического рождения щели в электронном спектре монослойного графена. Хотя бесщелевой электронный спектр графена считается надежно установленным [2], однако существует ряд работ, где рассмотрены случаи, когда может возникать небольшая щель. Нами была предложена альтернативная возможность: динамическое нарушение симметрии, сопровождающееся возникновением щели благодаря достаточно сильному электрон-фононному взаимодействию. Аналогичное явление хорошо изучено в теории сверхпроводимости, квантовой теории поля и теории бесщелевых полупроводников. Стоит заметить, что размерность системы играет решающую роль. Поскольку бесщелевой спектр электронов в графене связан с симметрией решетки, следовательно, для рождения щели необходимо нарушение симметрии. Здесь мы изучаем частный случай спонтанного нарушения симметрии, который не проявляет себя на уровне теории самосогласованного поля Ландау, а требует учета однопетлевых поправок теории возмущений.

Лагранжиан дираковских электронов, взаимодействующих с фононами, имеет вид:

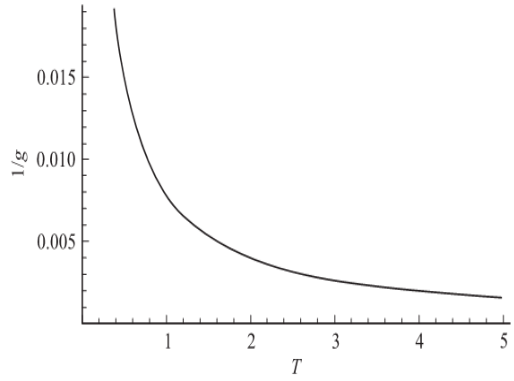
$$L=\sum_{\mu=1}^{2}\sum_{a=1}^{2}\left(i\hbar v_F\bar{\psi}_a\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi_a-i\hbar\bar{\psi}_a\gamma^{0}\partial_0\psi_a-g\varphi\bar{\psi}_a\psi_a\right)+\rho\omega_0^2\varphi^2/2\,, \tag{12}$$

где $\gamma^x = i\sigma_y$, $\gamma^y = -i\sigma_x$, $\gamma^0 = \sigma_z$ — матрицы Паули, ψ — 2-спин ор (аналогичен 2-вектору, но в спинорном пространстве), $\psi_a = \gamma^0\psi^{\dagger}$ — сопряженный по Дираку спинор, т. е. эрмитово-сопряженный и умноженный на гамма-матрицу, ρ — двумерная массовая плотность решетки, φ — скалярное поле, представляющее оптический фонон со спектром $\omega(k_x , k_y)= \omega_0$, g — константа электрон-фононного взаимодействия, v_F — скорость электронов вблизи вершины конуса, $\partial_\mu = \partial/\partial x_\mu$, $\partial_0 = \partial/\partial t$. Принимаем стандартную процедуру метода самосогласованного поля при условии стационарности действия, и просуммируем по мацубаровским частотам, в результате получаем уравнение самосогласования для щели:

$$\frac{(2\pi)^2}{\tilde{g}} = \tilde{T}\ln\left[ch\left(\frac{\sqrt{\tilde{\Lambda}^2+\tilde{g}^2\phi^2}}{2\tilde{T}}\right)\right] - \tilde{T}\ln\left[ch\left(\frac{\tilde{g}\phi}{2\tilde{T}}\right)\right]. \tag{13}$$



а



б

Рис. 3. а) Графическое решение уравнения самосогласования. По оси абсцисс отложена безразмерная масса (щель) m, по оси ординат — обратная безразмерная константа связи g^{-1}, б) граница щелевого и бесщелевого состояний на плоскости обратная безразмерная константа связи g^{-1} и температура T.

Для графена (в 2+1 мерном случае) было получено пороговое значение безразмерной константы взаимодействия. Щель возникает при $\tilde{g} > \tilde{g}_c = (2\pi)^2/\tilde{\Lambda}$ ($g > g_{cr} \approx 0,8$ эВ/см). Щель соответственно пропорциональна отклонению константы взаимодействия от критической: $m \propto \Delta(g - g_c)$. Приравняв в уравнении (13) величину щели нулю, мы получаем зависимость порогового значения безразмерной константы взаимодействия от температуры (рис. 3б). Таким образом, мы показали, что при определенных условиях достаточно сильное электрон-фононное взаимодействие может привести к динамическому рождению щели в электронном спектре моноатомного графена. Присутствие щели является необходимым условием для работы большинства электронных приборов, поэтому понимание природы щели важно для возможных приложений.

Во втором разделе рассматривается возможность возникновения доменов. Согласно квантовой теории поля получен производящий функционал. Принимая стандартную процедуру по эффективному действию $S_{eff} = \int d^2 d\tau \left[U\left(\tilde{\phi}\right) + \frac{Z}{2}\left(\nabla\tilde{\phi}\right)^2 + \ldots \right]$, разложенному по градиенту классического поля, получаем уравнение для неоднородных электронных состояний:

$$\Delta\tilde{\phi} + \alpha\tilde{\phi} + \beta\tilde{\phi}^3 = 0 \qquad (14)$$

Уравнение (14) имеет два однородных состояния, связанные солитонным решением. Отрицательный знак массы означает инверсию зон. В нашем случае в отличии от доменов в ферромагнетике и сегнетоэлектрике, устоичивость доменов определяется минимизацией Гауссовой кривизны изгиба плоскости.

В пятой главе рассмотрена проблема дискретного нелинейного бризера в двухмерной решетке. Понятие бризера введено при столкновении солитона с антисолитоном. Когда солитон и антисолитон имели точно совпадающие параметры, они при столкновении образуют локализованную квазичастицу, которая обладает временной периодичностью, пространственной локализованностью и достаточно продолжительным временем жизни. Конечно, чтобы получить бризерные решения, уравнение должно удовлетворять очень строгим условиям, в первую очередь условию интегрируемости. Для непрерывного нелинейного уравнения решение чувствительно зависит от формы уравнения, малейшее изменение формы нарушает точную интегрируемость, а вместе с ней пропадают и бризеры. Нелинейные дискретные бризеры (НДБ) [8] являются новыми объектами, привлекающими к себе большое внимание исследователей, поскольку дискретность в большой степени снимает зависимость бризерного решения от начальных условий и формы уравнения движения. Привлекает их удивительная стабильность, особенно принимая во внимание тот факт, что соответствующие системы не являются вполне интегрируемыми.

Рассматривается двумерная квадратная решетка. Уравнение движения для бризера фононов имеет вид:

$$\ddot{u}_{m,n} - b\left(4u_{m,n} - u_{m+1,n} - u_{m-1,n} - u_{m,n+1} - u_{m,n-1}\right) + \frac{\partial U}{\partial u_{m,n}} = 0, \qquad (15)$$

где $U(u_{m,n}) = \frac{\alpha}{2}u_{m,n}^2 - \frac{\beta}{4}u_{m,n}^4 + \frac{\gamma}{6}u_{m,n}^6 + \ldots$ – нелинейный потенциал.

Потенциальная функция должна удовлетворять двум условиям: во-первых, она должна обеспечивать существование нетривиалных решений и, следовательно система должна иметь не менее двух точек равновесия *dU(u)/du=0*; во-вторых, должна быть обеспечена по крайней мере локальная устойчивость относительно малых, но конечных возмущений везде вдали от бризера

Нами была предложена модель приближения с одноузельной нелинейностью $\alpha u_n^2 = \alpha v_{0,1}^2 \delta_{n,0}$. Во многих работах по существованию и стабильности бризера, обнаружено, что амплитуда бризера локализована в довольно узкой окрестности некоторого узла решетки. В силу симметрии и в приближении вращающейся волны получаем уравнения самосогласования для амплитуды:

$$v_{nm,1} = \frac{\alpha' v_{00,1}^2}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dk_x dk_y \exp(ik_x n + ik_y m)}{\alpha' + 2 - 2\cos(k_x) + 2 - 2\cos(k_y) - \omega'^2} . \qquad (16)$$

Получена зависимость амплитуды центрального узла от частоты:

$$u_{00,1} = \frac{\pi\left(\alpha + 4b - \omega^2\right)}{2\beta K\left[\dfrac{4b}{\left(\alpha + 4b - \omega^2\right)}\right]} . \qquad (17)$$

Отмечено, что амплитуда колебания в относительном широком диапазоне частот достаточно медленно убывает, а вблизи порога сильно убывает до нуля за счет связанных состояний.

В **заключении** сформулированы основные научные результаты и выводы, полученные автором в ходе решений поставленных задач.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Построена модельная функция Грина, аналитически описывающая главные особенности электронных состояний монослойного графена, учитывающая симметрию кристаллической решетки и ванхововские особенности.
2. С помощью модельной электронной функции Грина, учитывающей дискретность кристаллической решетки, вычислены плотность состояний и коэффициент оптического поглощения для чистого и неупорядоченного монослойного графена.

3. Получено характеристическое уравнение для связанных и резонансных электронных состояний при наличии точечного дефекта. Проанализирован случай, когда отличен от нуля матричный элемент потенциала дефекта на одной из подрешеток графена. При выводе характеристического уравнения использована полученная нами модельная электронная функция Грина.

4. Получена система уравнений, определяющая квантование электронного спектра в присутствии однородного электрического поля (блоховские осцилляции). Установлено нарушение эквидистантности уровней Ваннье-Штарка, благодаря ***kp*** взаимодействию зон.

5. Показана возможность флуктуационного рождения щели в электронном спектре, благодаря сильному электрон-фононному взаимодействию.

6. Проанализирована возможность существования доменов инверсии зон благодаря электрон-фононному взаимодействию.

7. Построена и проанализирована модель дискретного бризера в двумерной решетке в приближении одноузельной нелинейности.

Публикации в изданиях, рекомендованных в перечне ВАК:

1. С.А. Ктиторов, А.М. Прудан, Сяосин Чэнь, Неравновесные состояния ангармонических фононов // Физика твердого тела - 2009 - Т. 51 - Вып. 8 - С. 1504-1508

2. С.А. Ктиторов, Сяосин Чэнь, Динамическое рождение щели в монослойном графене // Письма в журнал технической физики - 2010 - Т. 36 - Вып. 9 - С. 90-94

Другие статьи и материалы конференции:

1. Ktitorov S.A., Chen Xiaoxing. Dynamical creation of gap in the monolayer graphene // arXiv:0910.3319v1 [cond-mat.mes-hall] 17 Oct 2009

2. Ktitorov S.A., Chen Xiaoxing. Electronic states of the monolayer graphene in the tight-binding approximation / Электронные состояния в монослойном графене в приближении сильной связи [Текст] // 11th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures: Book of abstracts - P. 171 October 3-7 - 2011 - St. Petersburg

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ:

[1]. Wallace P.R. The Band Theory of Graphite // Phys. Rev. - 1947 - V. 71 - N. 9 - P. 622.

[2]. Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R., Novoselov K.S., and Geim A.K. The electronic properties of graphene // Rev. Mod. Phys. - 2009 - N. 81 - P.109

[3]. Basko D.M. Resonant low-energy electron scattering on short-range impurities in graphene // arXiv:0806.2785v4 [cond-mat.mtrl-sci] 26 Sep 2008

[4]. Фальковский Л.А. Оптические свойства графена и полупроводников A_4B_6 // Успехи физических наук - 2008 - Т. 175 - № 9 - С. 923-934

[5]. Feher A., Господарев И.А., Гришаев В.И., Кравченко К.В., Манжелий Е.В., Сыркин Е.С., Феодосьев С.Б. Влияние дефектов на квазичастичные спектры графита и графена // Физика низких температур - 2009 - Т. 35 - № 8/9 - С. 862-871

[6]. Horiguchi T. Lattice Green's functions for the triangular and honeycomb lattices // J. of Math. Phys. - 1972 - V. 13 - N. 9 - P. 1411-1419

[7]. Wannier G. Wave Functions and Effective Hamiltonian for Bloch Electrons in an Electric Field // Phys. Rev. - 1960 - V. 117 - P. 432-439

[8]. Flach S., Willis C.R. Discrete Breathers // Phys. Rep. - 1998 - V. 295 - P. 181