

## برهمکنش گرافن گاف دار با پالس لیزری فوق کوتاه

احمدی، ژرار؛ گودرزی، هادی؛ جعفری دولاما، اکبر

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه، ارومیه

### چکیده

فرمیون دیراک در شبکه لانه زنبوری گرافن با جرم موثر غیر صفر در نظر گرفته شده و بنا به طول زمان پراکندگی شبه ذرات در این شبکه، پالس لیزر فمتوثانیه برای برهمکنش با الکترون‌ها انتخاب شده است. بردار موج تعمیم یافته الکترون‌های نسبیتی برهمکنش کننده با میدان الکتریکی دامنه لیزری، به المان ماتریسی دوقطبی الکتریکی وابسته به زمان منجر می‌شود. نهایتاً، دانسیته احتمال مربوط به انتقال جمعیت ترازهای لاندائو در منطقه اول بریلونن با استفاده از معادلات جفت شده سیستم دو حالت محاسبه شده و تاثیر گاف انرژی گرافن در انتقال جمعیت بطور صریح بررسی می‌شود.

## Interaction of gapped graphene with ultrashort laser pulse

Ahmadi, Zorar ; Goudarzi, Hadi ; Jafari Dolama, Akbar

Department of Physics, Urmia University, Urmia

### Abstract

*The Dirac fermions in honeycomb graphene lattice are taken to possess non-zero effective mass, and the femtosecond laser pulse is involved to interact with electrons due to the duration of scattering time of quasi particles in this lattice. Generalized wave vector of relativistic electrons interacting with electric field related to the amplitude of laser pulse leads to time dependent electric dipole matrix element. Finally, using the coupled differential equations of a two-state system, the density of probability of population transition of Landau levels is calculated in the first Brillouin zone, and effect of energy gap on the population transition is investigated.*

PACS No.78, 81

### مقدمه

در طول تابش پالس به تراز رسانش گذار انجام داده بودند، بعد از قطع پالس لیزری به تراز ظرفیت برگشت می‌کنند [۴]. چنین اندرکنشی در نیمه رسانای بدون گاف گرافن با خواص عجیب الکترونیکی و فیزیکی منجر به نتایج متفاوت می‌شود [۵]. در شبکه دوبعدی لانه زنبوری گرافن خالص نشان داده شده است که فرایند ذکر شده کاملاً برگشت ناپذیر است، به طوری که بعد از پایان یافتن پالس درصد قابل توجهی از جمعیت در تراز رسانش تا زمان پراکندگی الکترون باقی می‌ماند. اگرچه عدم وجود باند گاف حول نقاط دیراک در طیف انرژی گرافن ایده آل، برای بسیاری از کاربردها یک نوع محدودیت است اما خوشبختانه به روش‌های متعددی می‌توان باند گاف قابل توجهی در گرافن بوجود آورد.

اندرکنش پالس لیزری با یک ساختار ماده چگال در طول چند دهه اخیر موضوع تحقیقات تئوری و آزمایشگاهی زیادی را به خود اختصاص داده است [۵-۱]. وقتی میدان الکتریکی لیزر از نظر فرکانسی با میدان‌های الکتریکی داخلی جامدات قابل مقایسه باشد، آنگاه اندرکنش جامد با چنین پالسی سبب بوجود آمدن تغییرات چشمگیری در دینامیک الکترون داخل جامد در طول تابش پالس می‌شود. در مورد دی الکتریک‌ها پارامتر اصلی که اندرکنش بین جامد و پالس را مشخص می‌کند باند گاف بین تراز اشغال شده ظرفیت و تراز خالی رسانش است. دینامیک الکترون در این حالت برگشت پذیر است، به این معنا که الکترون‌هایی که

$$H = H_0 + e\vec{F}(t) \cdot \vec{r} \quad (2)$$

که  $H_0$  هامیلتونی گرافن دار در غیاب پالس لیزری است.

$$H_0 = \begin{pmatrix} \alpha - E_F & \gamma f(\vec{k}) \\ \gamma f^*(\vec{k}) & -\alpha - E_F \end{pmatrix} \quad (3)$$

$\gamma = -3.03$  (eV) انتگرال همپوشانی و  $\alpha = m\sigma_z$  جمله مربوط به گاف گرافن و  $E_F$  سطح انرژی فرمی است.

$$f(\vec{k}) = \exp(ia_k x / \sqrt{3}) + 2\exp(-iak_x / 2\sqrt{3}) \cos(ak_y / 2) \\ = |f(\vec{k})| e^{i\phi_k} \quad (4)$$

$\epsilon_{c,v} = \pm \sqrt{\alpha^2 + \gamma^2 |f(\vec{k})|^2} - E_F$  ویژه مقادیر انرژی هامیلتونی رابطه ۳ هستند که مقادیر مثبت و منفی به ترتیب به تراز های رسانش و ظرفیت مربوط می شوند. ویژه توابع مربوطه نیز به فرم زیر هستند.

$$\Psi_k^c(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\phi_k} \sqrt{\frac{\epsilon_c + E_F + \alpha}{\epsilon_c}} \\ \sqrt{\frac{\epsilon_c + E_F - \alpha}{\epsilon_c}} \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\Psi_k^v(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{i\phi_k} \sqrt{\frac{\epsilon_c + E_F - \alpha}{\epsilon_c}} \\ \sqrt{\frac{\epsilon_c + E_F + \alpha}{\epsilon_c}} \end{pmatrix} \quad (6)$$

وقتی که طول پالس از زمان پراکندگی الکترون کمتر باشد، آنگاه دینامیک الکترون در حضور میدان الکتریکی خارجی همدوس خواهد بود و می تواند بوسیله معادله وابسته به زمان شرودینگر توصیف شود. میدان الکتریکی پالس باعث جفت شدن حالت هایی از تراز ظرفیت با تراز رسانش می شود، در نتیجه الکترون ها مجدداً بین این دو تراز توزیع خواهند شد. در فضای شبکه وارون دینامیک الکترون، به وسیله قضیه شتاب تعریف می شود:

$$\hbar \frac{d\vec{k}(t)}{dt} = e\vec{F}(t) \quad (7)$$

برای یک الکترون با شبه تکانه اولیه  $\vec{q}$  بردار موج وابسته به زمان  $\vec{k}(\vec{q}, t)$  از حل رابطه (۷) بدست خواهد آمد. توابع موج متناظر توابع هاستون هستند.

$$\Phi_{\delta\vec{q}}^{(H)}(\vec{r}, t) = \Psi_{\vec{k}(\vec{q}, t)}^{\delta}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 E_{\delta}[\vec{k}(\vec{q}, t_1)]} \quad (8)$$

در رابطه اخیر  $\delta = (c, v)$  به ترتیب متناظر با تراز های رسانش و ظرفیت است. با استفاده از توابع هاستون به عنوان پایه، حل عمومی معادله شرودینگر به صورت زیر خواهد بود.

$$\Psi_{\vec{q}}(\vec{r}, t) = \sum_{\delta=c,v} \beta_{\delta\vec{q}}(t) \Phi_{\delta\vec{q}}^{(H)}(\vec{r}, t) \quad (9)$$

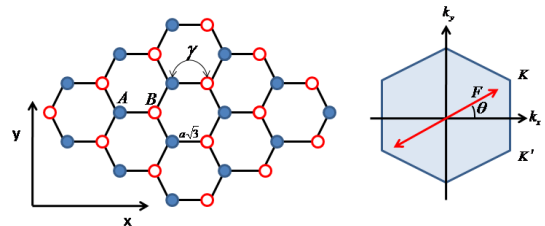
تعدادی از روش های ایجاد باند گاف در گرافن از قبیل جفت کردن گرافن با یک زیرلایه، بایاس الکتریکی، یا وجود حفره هایی در شبکه اتمی گرافن در منبع [۶] معرفی شده اند. هدف ما در این مقاله آن است که به صورت کاملاً تئوری تاثیر وجود باند گاف و سطح انرژی فرمی روی انتقال جمعیت در گرافن دارای گاف که در معرض تابش میدان فوق کوتاه لیزر قرار گرفته است، را بررسی نماییم.

## مدل و فرمالیسم

یک پالس اپتیکی را در نظر می گیریم که به صورت عمودی روی گرافن تک لایه دارای گاف تابیده می شود، برای جلوگیری از اثرات پراکندگی، باید طول عمر پالس از زمان پراکندگی الکترون  $\sim (10-100)$  fs کمتر باشد. پالس لیزری را به صورت زیر در نظر می گیریم، که در حقیقت یک حالت ایده آل سازی از فرم پالس هایی است که اخیراً در آزمایش استفاده شده اند [۹]

$$F(t) = F_0 e^{-u^2} (1 - 2u^2) \quad (1)$$

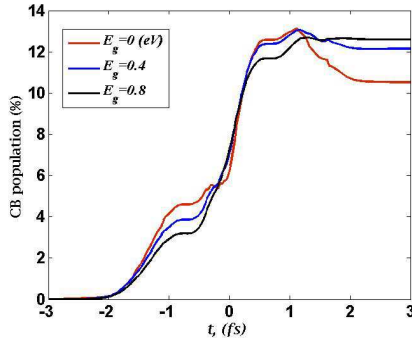
در این رابطه  $F_0$  دامنه است که به توان پالس مربوط می شود،  $u = t/\tau$  که  $t$  زمان و  $\tau$  طول پالس است که در محاسبات  $\tau = 1$  fs تنظیم شده است. ویژگی دیگر پالس این است که  $\int_{-\infty}^{\infty} F(t) dt = 0$  به طوری که مساحت زیر نمودار همواره صفر است. فرض می شود که پالس قطبیده خطی باشد و با محور X زاویه  $\theta$  بسازد. سیستم مختصات X, y در صفحه گرافن انتخاب می شود، شکل ۱:



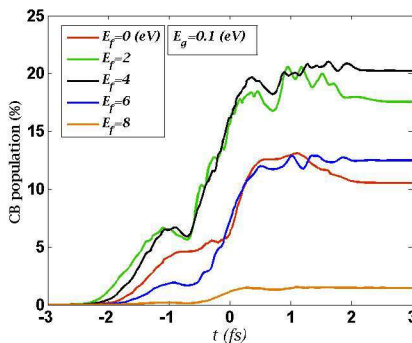
شکل ۱: شکل سمت چپ شبکه شش ضلعی گرافن با دو زیر شبکه A, B را نشان می دهد که در آن  $a = 2.46 \text{ \AA}$  ثابت شبکه است و شکل سمت راست منطقه اول بریلوئن در فضای وارون گرافن را نشان می دهد که در آن نقاط دیراک  $(K, K')$  مشخص شده اند. پیکان قرمز رنگ جهت قطبش میدان الکتریکی پالس اپتیکی را نشان می دهد.

هامیلتونی شبه ذرات گرافن دار در میدان اپتیکی به فرم زیر است:

در نمودار ۱ جمعیت تراز رسانش به صورت تابعی از زمان به ازای سه باند گاف مختلف مشاهده می‌شود، ویژگی اصلی این نمودار برگشت ناپذیری دینامیک الکترون پس از خاموش شدن پالس اپتیکی در  $t \approx 2.25 \text{ fs}$ ، با وجود گاف انرژی است.



نمودار ۱: جمعیت تراز رسانش  $N_{CB}(t)$ ، به ازای مقادیر مختلف باند گاف، به صورت تابعی از زمان نشان داده شده است ( $E_F = 0(eV), \theta = 0$ ). افزایش باند گاف تا حدود  $1(eV)$  تأثیر چشمگیری روی مقدار انتقال جمعیت ندارد، اما باعث منطبق شدن مقادیر ماکزیمم و باقیمانده جمعیت روی هم می‌شود، در نمودار ۳ این تأثیر به وضوح مشخص شده است. افزایش سطح انرژی فرمی تا حد  $E_F \approx 3(eV)$ ، باعث افزایش انتقال جمعیت به تراز رسانش می‌گردد، در  $E_F$  های بزرگتر از این حد نتیجه عکس می‌شود، به طوری که در  $E_F \approx 9(eV)$ ، انتقال جمعیت به تراز رسانش صفر می‌گردد. دلیل این امر به المان های ماتریسی دو قطبی برمی‌گردد.



نمودار ۲: جمعیت تراز رسانش  $N_{CB}(t)$ ، به ازای مقادیر مختلف انرژی فرمی، به صورت تابعی از زمان نشان داده شده است ( $\theta = 0$ ).

$D_i(\vec{k})$  ها در حالت  $E_F = 0(eV)$  در نقاط دیراک تکینه اند، و این تکینگی باعث انتقال جمعیت قابل توجهی از تراز ظرفیت به تراز رسانش می‌شود. ایجاد باند گاف کوچک در نمودار پاشندگی انرژی گرافن، تکینگی مذکور در نقاط دیراک را تغییر نمی‌دهد، به

به دلیل دینامیک عمومی الکترون در فضای وارون، حالت های کوانتومی از تراز رسانش و ظرفیت که شبه تکانه اولیه  $\vec{q}$  یکسان دارند، در زمان های مختلف بردار موج  $\vec{k}(\vec{q}, t)$  برابر خواهند داشت. از این رو المان های ماتریسی دو قطبی که تراز های رسانش و ظرفیت را در حضور میدان الکتریکی خارجی با هم جفت می‌کند، در فضای وارون قطری هستند. ضرایب بسط رابطه (۹) معادلات جفت شده زیر صدق می‌کنند:

$$\begin{aligned} \frac{d\beta_{c\vec{q}}(t)}{dt} &= -i \frac{\vec{F}(t) \cdot \vec{Q}(t)}{\hbar} \beta_{v\vec{q}}(t) \\ \frac{d\beta_{v\vec{q}}(t)}{dt} &= -i \frac{\vec{F}(t) \cdot \vec{Q}^*(t)}{\hbar} \beta_{c\vec{q}}(t) \end{aligned} \quad (10)$$

$Q_{\vec{q}}(t) = \vec{D}[\vec{k}(\vec{q}, t)] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\eta \{E_c[\vec{k}(\vec{q}, \eta)] - E_v[\vec{k}(\vec{q}, \eta)]\}}$   
 $\vec{D}(\vec{k}) = [D_x(\vec{k}), D_y(\vec{k})]$   
 رسانش و ظرفیت با بردار موج  $\vec{k}$  است.

$D_i(\vec{k}) = \langle \Psi_{\vec{k}}^c | e \vec{r} | \Psi_{\vec{k}}^v \rangle$  (۱۱)  
 بعد از جایگذاری توابع موج (۵) و (۶) در رابطه (۱۱) المان های ماتریسی دو قطبی  $D_i(\vec{k})$  به صورت زیر بدست خواهند آمد.

$$\begin{aligned} D_i(\vec{k}) &= Z_i \sqrt{\frac{(\epsilon_c + E_F)^2 - \alpha^2}{\epsilon_c^2}} - i \frac{e}{2} \frac{\frac{\alpha}{\epsilon_c^2} \frac{\partial \epsilon_c}{\partial k_i}}{\sqrt{\frac{(\epsilon_c + E_F)^2 - \alpha^2}{\epsilon_c^2}}}, \quad (i = x, y) \\ Z_x &= \frac{ea}{2\sqrt{3}} \frac{1 + \cos(\frac{ak_y}{2}) \left[ \cos(\frac{3ak_x}{2\sqrt{3}}) - 2 \cos(\frac{ak_y}{2}) \right]}{1 + 4 \cos(\frac{ak_y}{2}) \left[ \cos(\frac{3ak_x}{2\sqrt{3}}) + \cos(\frac{ak_y}{2}) \right]} \\ Z_y &= \frac{ea}{2} \frac{\sin(\frac{ak_y}{2}) \sin(\frac{3ak_x}{2\sqrt{3}})}{1 + 4 \cos(\frac{ak_y}{2}) \left[ \cos(\frac{3ak_x}{2\sqrt{3}}) + \cos(\frac{ak_y}{2}) \right]} \end{aligned} \quad (12)$$

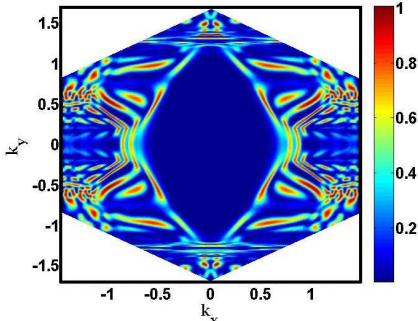
با در نظر گرفتن شرایط اولیه  $(\beta_{v\vec{q}}, \beta_{c\vec{q}}) = (1, 0)$  می‌توان جفت معادلات (۱۰) را حل کرد. جفت شدن تراز ها برای الکترونی که قبل از تابش پالس در تراز ظرفیت قرار داشته است، توسط مولفه وابسته به زمان  $|\beta_{c\vec{q}}(t)|^2$  مشخص می‌شود. جمعیت کل تراز رسانش به وسیله رابطه زیر تعریف می‌شود.

$$N_{CB}(t) = \sum_{\vec{q}} |\beta_{c\vec{q}}(t)|^2 \quad (13)$$

در رابطه ۱۴ روی کل منطقه اول بریلوئن جمع زده می‌شود.

## تحلیل نتایج

الکترون‌ها در جهت میدان الکتریکی (هم جهت با  $k_x$ ) شتاب گرفته و زمانی که به نقاطی که در آن المان ماتریسی دو قطبی تکنیه است می‌رسند، به تراز بالاتر گذار انجام می‌دهند.



نمودار ۵: خطوط رنگی نشان دهنده باقی مانده جمعیت تراز رسانش است، فقط منطقه اول بریلوئن نشان داده شده است ( $E_F = 3, E_g = 1(eV), \theta = 0$ ).

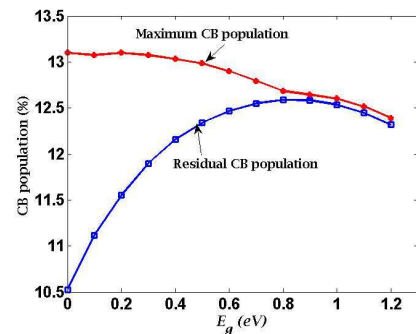
### نتیجه گیری

تابش پالس لیزری فوق کوتاه روی گرافن گاف دار موجب انتقال الکترون از تراز ظرفیت به تراز رسانش می‌شود به طوری که بعد از پایان یافتن پالس، دینامیک سیستم برگشت ناپذیر است. افزایش باند گاف در گرافن تا حدود  $1eV$ ، تاثیر چشمگیری روی جمعیت تراز رسانش ندارد. افزایش سطح انرژی فرمی تا حدود  $E_F \approx 3(eV)$  سبب افزایش جمعیت تراز رسانش می‌شود، از آن حد بیشتر افزایش سطح انرژی فرمی باعث کاهش جمعیت تراز رسانش می‌شود. همان طور که بحث شد دلیل موارد فوق به تکنیه شدن المان ماتریسی دو قطبی در تعداد نقاط مختلف، در اثر تغییرات در باند گاف و سطح انرژی فرمی مربوط می‌شود.

### مرجع‌ها

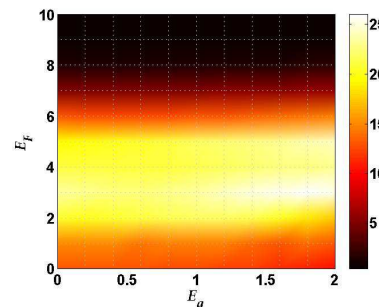
- [۱] M. Gertsvolf, M. Spanner, D. M. Rayner, and P. B. Corkum; “*JPhys. B* **43**”; 131002 (2010).  
 [۲] A. V. Mitrofanov, A. J. Verhoef, E. E. Serebryannikov, J. Lumeau, L. Glebov, A. M. Zheltikov, and A. Baltuška; “*Phys. Rev. Lett.* **106**”; 147401 (2011).  
 [۳] M. Lenzner, J. Kruger, S. Sartania, Z. Cheng, C. Spielmann, G. Mourou, W. Kautek, and F. Krausz; “*Phys. Rev. Lett.* **80**”; 4076 (1998).  
 [۴] V. Apalkov and M. I. Stockman; “*Phys. Rev. B* **86**”; 165118 (2012).  
 [۵] H. K. Kellardeh, V. Apalkov and M. I. Stockman; “*Phys. Rev. B* **91**”; 045439 (2015).  
 [۶] T. G. Pedersen, A-P. Jauho and K. Pedersen; “*Phys. Rev. B* **79**”; 113406 (2009).  
 [۷] E. H. Hwang and S. Das Sarma; “*Phys. Rev. B* **77**”; 195412 (2008).  
 [۸] A. Tomadin, D. Brida, G. Cerullo, A. C. Ferrari, and M. Polini; “*Phys. Rev. B* **88**”; 035430 (2013).  
 [۹] A. Schiffrin, T. Paasch-Colberg, N. Karpowicz, V. Apalkov, D. Gerster, S. Muhlbrandt, M. Korbman, J. Reichert, M. Schultze, S. Holzner et al; “*Nature (London)*”; **493**, 70 (2012).

همین دلیل وجود باند گاف های کوچک (البته منطقی) تاثیر چندانی روی انتقال جمعیت ندارد.



نمودار ۳: ماکزیمم و باقیمانده جمعیت تراز رسانش به صورت تابعی از باند گاف نشان داده شده است ( $E_F = 0(eV), \theta = 0$ ).

علاوه بر این افزایش سطح فرمی سبب می‌شود که ویژه مقادیر انرژی تراز رسانش  $E_g$ ، در تعداد نقاط بیشتری صفر شوند، این خود باعث تکنیه شدن المان های ماتریسی دو قطبی در ریشه های  $E_g$  می‌شود، در نتیجه شاهد افزایش انتقال جمعیت در اثر افزایش انرژی فرمی خواهیم بود.



نمودار ۴: خطوط رنگی نشان دهنده ماکزیمم جمعیت تراز رسانش است، محور افقی باند گاف و محور عمودی سطح انرژی فرمی را نشان می‌دهد ( $\theta = 0$ ).

افزایش انرژی فرمی بیشتر از حدود  $3(eV)$ ، صفر شدن تعداد نقاط کمتری را در نمودار پاشندگی انرژی در منطقه اول بریلوئن نتیجه می‌دهد. به همین دلیل در  $E_F$  های بزرگتر شاهد کاهش انتقال جمعیت هستیم. این مطالب در نمودار ۲ و ۴ به خوبی نشان داده شده‌اند. در نمودار ۴ ماکزیمم جمعیت تراز رسانش (خطوط رنگی) به صورت تابعی از باند گاف و سطح انرژی فرمی نمایش داده شده است. مشاهده می‌شود که تاثیر وجود باند گاف روی انتقال جمعیت در مقایسه با تاثیر انرژی فرمی روی انتقال جمعیت ناچیز است. نمودار ۵ باقی مانده جمعیت تراز رسانش (خطوط رنگی)، را به صورت تابعی از بردار موج برای منطقه اول بریلوئن نشان می‌دهد. نقاط قرمز رنگ بیانگر حداکثر احتمال انتقال جمعیت اند.