

УПОРЯДОЧЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ В МОДЕЛИ АА ГРАФЕНА С ГРУППОЙ СИММЕТРИЙ SU(4)

А.В. Рожков *¹, А.О. Сбойчаков¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

Статья поступила в редакцию 15.05.2024

Одобрена после рецензирования 20.05.2024

Принята к публикации 21.05.2024

Аннотация

В работе мы обсуждаем классификацию упорядоченных состояний для модели двухслойного АА графена, основанную на матричной группе SU(4). Теория со столь широкой группой симметрий возникает из-за объединения спинового и т.н. долинного вырождений в широкий мультиплет, типичный для графена и других двумерных материалов на его основе. Мы описываем построение эффективной модели, демонстрирующей SU(4)-инвариантность, и намечаем этапы исследования полученного гамильтониана на основе метода среднего поля. Упорядоченные состояния такой системы описываются единым SU(4)-инвариантным уравнением самосогласования. Мы явно сконструируем три различных класса решений выведенного уравнения самосогласования, а также обобщим имеющуюся в литературе топологическую схему классификации упорядоченных фаз на случай двухслойного АА графена.

Ключевые слова: двухслойный АА графен, упорядоченное состояние, группа SU(4)

EDN DOKXRI

doi:[10.24412/2949-0553-2024-210-18-22](https://doi.org/10.24412/2949-0553-2024-210-18-22)

1. Введение

Данная статья посвящена теоретическому исследованию электронной жидкости двухслойного АА-графена (АА-Г). Конкретный вопрос, который мы хотели бы рассмотреть, – это проблема классификации низкотемпературных несверхпроводящих упорядоченных состояний АА-Г. Как мы увидим, изучаемая система обладает значительным набором таких состояний, и в такой ситуации задача классификации стоит весьма остро. Кроме этого, исследование относительно простого АА-Г может помочь нам распространить предлагаемый подход на другие типы порядков (в частности, сверхпроводящие) и другие типы систем, таких как подкрученные двухслойки и двухслойный АБ графен. В данной статье мы изложим лишь основные технические идеи подхода. Дополнительные подробности можно почерпнуть в работе [1].

2. Описание системы и одночастичной модели

Мы исследуем возможные упорядоченные состояния двухслойного графена с АА упаковкой. Кристаллическая структура этого материала изображена на Рис. 1. Гамильтониан сильной связи для такой кристаллической структуры имеет следующий вид

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle \mathbf{mn} \rangle l \sigma} \left(\hat{d}_{\mathbf{m}lA\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{n}lB\sigma} + \text{h.c.} \right) - t_0 \sum_{\mathbf{n}a\sigma} \left(\hat{d}_{\mathbf{n}1a\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{n}2a\sigma} + \text{h.c.} \right). \quad (1)$$

В данном выражении $\hat{d}_{\mathbf{n}l\sigma}^\dagger$ и $\hat{d}_{\mathbf{n}l\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона со спином σ в слое $l = 1, 2$ на подрешетке $a = A, B$ в элементарной ячейке \mathbf{n} . Запись $\langle \mathbf{mn} \rangle$ обозначает, что узел подрешетки A в элементарной ячейке \mathbf{m} и узел подрешетки B в элементарной ячейке \mathbf{n} образуют пару ближайших соседей. Амплитуда $t = 2,7 \text{ эВ}$ ($t_0 = 0,35 \text{ эВ}$) в ур. (1) описывает перескок на ближайшие атомы внутри (между) слоями.

* Автор, ответственный за переписку: Александр Владимирович Рожков, alex.vl.rozhkov@yandex.ru

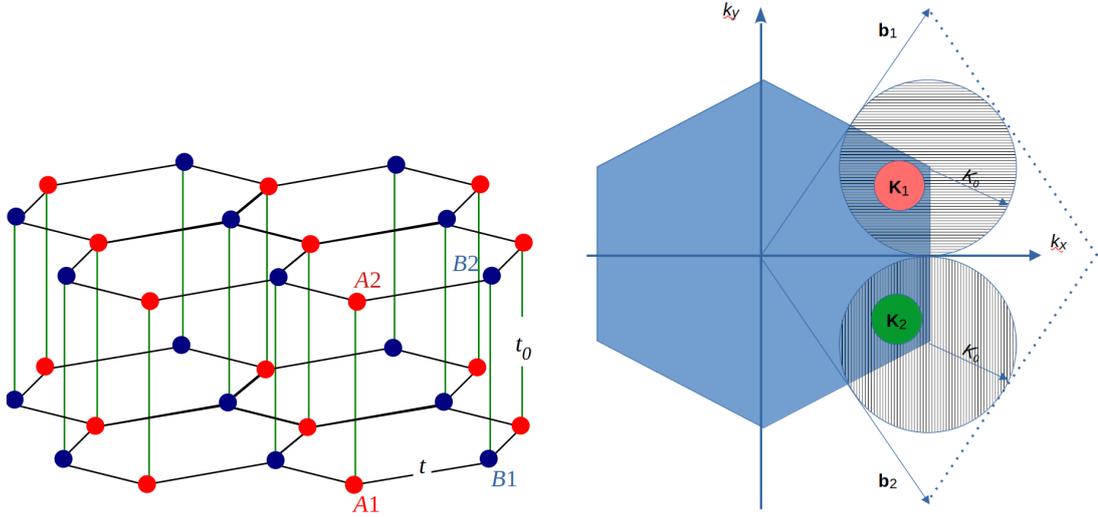


Рисунок 1 – Слева – кристаллическая структура АА-Г. Видны два слоя графена, уложенные один на другой так, что над каждым атомом нижнего слоя находится один атом верхнего слоя. Элементарная ячейка состоит из четырех атомов, обозначенных $A1$, $B1$, $A2$ и $B2$. Амплитуда внутрислоевого перескока обозначена t , а t_0 обозначает амплитуду межслоевого перескока. Справа – зона Бриллюэна (голубой шестиугольник) и элементарная ячейка Вигнера-Зейца (ромб) для АА-Г. Показаны элементарные вектора обратной решетки $\mathbf{b}_{1,2}$. Символы $\mathbf{K}_{1,2}$ отмечают точки Дирака (углы зоны Бриллюэна). Долины вокруг каждой точки Дирака заштрихованы.

Известно, что данный тип двухслойного графена обладает так называемым идеальным нестингом: в каждой долине имеется один электронный лист поверхности Ферми (ПФ), а также почти точно совпадающий с ним дырочный лист ПФ. Чтобы доказать это, необходимо диагонализировать гамильтониан (1). В результате можно получить следующую форму гамильтониана:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}s\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}}^{(s)} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}s\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}s\sigma}. \quad (2)$$

В этой формуле зонные энергии $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(s)}$ равны

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{(1)} = -t_0 - t|f_{\mathbf{k}}|, \quad \epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} = -t_0 + t|f_{\mathbf{k}}|, \quad \epsilon_{\mathbf{k}}^{(3)} = +t_0 - t|f_{\mathbf{k}}|, \quad \epsilon_{\mathbf{k}}^{(4)} = +t_0 + t|f_{\mathbf{k}}|, \quad (3)$$

где функция $f_{\mathbf{k}} = 1 + 2 \exp(3ik_x a_0/2) \cos(\sqrt{3}k_y a_0/2)$ задается через расстояние между ближайшими атомами углерода a_0 . Опираясь на хорошо известные свойства функции f , несложно установить, что зоны $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2,3)}$ доходят до уровня Ферми $\epsilon_F = 0$, при этом возникшая поверхность Ферми (ПФ) задается уравнением $v_F|\mathbf{q}| = t_0$, где $\mathbf{q} = \mathbf{K}_{1,2} - \mathbf{k}$, а скорость Ферми равна $v_F = 3a_0t/2$. Здесь важно отметить, что уравнение на ПФ (i) не зависит от номера зоны, а также (ii) не зависит от номера точки Дирака. Обстоятельство (i) прямо указывает на нестинг ПФ в нашей модели АА-Г. Что касается (ii), данное свойство является проявлением т.н. долинного вырождения, постоянно возникающего в графене и материалах на его основе. Формально долинное вырождение может быть выражено в виде формулы

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{(s)} \approx (-1)^s (v_F|\mathbf{q}| - t_0), \quad (4)$$

верной для зон $s = 2, 3$ вблизи обоих точек Дирака.

3. SU(4)-инвариантная модель

Нестинг делает систему восприимчивой к диэлектрическим неустойчивостям разного вида. Из-за восьмикратного вырождения ПФ (двукратное вырождение по спину, по зоне и по точке Дирака) количество упорядоченных состояний может быть велико. В такой ситуации возникает вопрос о возможности классификации упорядоченных фаз. Мы предлагаем схему такой классификации на основе группы симметрий SU(4). Оказывается, что при некоторых предположениях группа симметрий гамильтониана включает в себя матричную группу SU(4), действующую в четырехмерном спин-долинном пространстве. Подобную модель мы сконструируем, упрощая гамильтониан (2) так, чтобы новый (эффективный) гамильтониан учитывал долинное вырождение как свою явную симметрию. С этой целью рассмотрим гамильтониан вида:

$$\hat{H}_0 \approx \sum_{s=2,3, |\mathbf{k}| < K_0} (-1)^s (v_F|\mathbf{k}| - t_0) \sum_{\xi\sigma} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}s\xi\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}s\xi\sigma}, \quad (5)$$

где мы ввели долинный индекс ξ , принимающий значения $\xi = \mathbf{K}_1$ или $\xi = \mathbf{K}_2$. Геометрическое построение, вводящее долины в обратном пространстве, представлено справа на Рис. 1. Таким образом, при $\xi = \mathbf{K}_1$ оператор $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}s\xi\sigma}^\dagger$ рождает электрон в зоне s со спином σ и полным импульсом $\mathbf{K}_1 + \mathbf{k}$. Аналогично при $\xi = \mathbf{K}_2$ оператор $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}s\xi\sigma}^\dagger$ рождает электрон в зоне s со спином σ и полным импульсом $\mathbf{K}_2 + \mathbf{k}$.

Для ясности и компактности обозначений удобно ввести мульти-индекс m , объединяющий индексы ξ и σ . Это позволяет упростить ур. (5), записав его таким образом:

$$\hat{H}_0 \approx \sum_{s=2,3,|\mathbf{k}|<K_0} (-1)^s (v_F |\mathbf{k}| - t_0) \sum_m \hat{\gamma}_{\mathbf{k}sm}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}sm}, \quad (6)$$

где суммирование по ξ и σ символически заменено на суммирование по m .

Такая запись позволяет явно продемонстрировать SU(4)-инвариантность рассматриваемой модели. С этой целью возьмем произвольную матрицу \hat{U} , принадлежащую группе SU(4): $\hat{U} \in \text{SU}(4)$. Обозначим ее матричные элементы как $u_{mm'}$ и введем следующее преобразование Боголюбова:

$$\hat{\gamma}_{\mathbf{k}sm} \rightarrow \sum_{m'} u_{mm'} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}sm'}. \quad (7)$$

Легко проверить, что такое преобразование оставляет гамильтониан (6) неизменным. Мы доказали, что группа SU(4) входит в группу симметрий эффективной одночастичной модели АА-Г.

Теперь необходимо изучить вопрос об инвариантности гамильтониана взаимодействия относительно преобразований (7). В самом общем виде взаимодействие можно выразить так:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2N_c} \sum_{\mathbf{k}l'l'a'a'} V_{\mathbf{k}aa'}^{ll'} \hat{\rho}_{\mathbf{k}la} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}l'a'}. \quad (8)$$

Вектор \mathbf{k} – передаваемый импульс, функция $V_{\mathbf{k}aa'}^{ll'}$ – фурье-образ потенциальной энергии $V_{aa'}^{ll'}(\mathbf{R})$, описывающей взаимодействие электрона в слое l на подрешетке a с другим электроном в слое l' на подрешетке a' . Оператор $\hat{\rho}_{\mathbf{k}la}$ – это компонента Фурье одноузлового оператора плотности частиц. Анализ показывает, что оператор взаимодействия \hat{H}_{int} самого общего вида не является инвариантным относительно преобразований (7). Однако, если допустить, что взаимодействие $V_{aa'}^{ll'}(\mathbf{R})$ является дальнедействующим, то можно показать, что неинвариантные члены малы. Инвариантная часть взаимодействия может быть записана как сумма трех слагаемых:

$$\hat{H}_{\text{int}}^{\text{eff}} = \hat{H}_{\text{dir}}^{\text{eff}} + \hat{H}_{\text{ex}}^{\text{eff}} + \hat{H}_{\text{u}}^{\text{eff}}, \quad (9)$$

где прямое взаимодействие $\hat{H}_{\text{dir}}^{\text{eff}}$, обменное взаимодействие $\hat{H}_{\text{ex}}^{\text{eff}}$ и Umklapp $\hat{H}_{\text{u}}^{\text{eff}}$ задаются следующими выражениями:

$$\hat{H}_{\text{dir}}^{\text{eff}} = \frac{1}{16N_c} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{k}mm'} V_+(\mathbf{k}) \left[1 + e^{i(\phi_{\mathbf{q}} - \phi_{\mathbf{q}+\mathbf{k}})} \right] \left[1 + e^{i(\phi_{\mathbf{q}'} - \phi_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}})} \right] \left(\hat{\gamma}_{\mathbf{q}2m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}2m} + \hat{\gamma}_{\mathbf{q}3m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}3m} \right) \times \left(\hat{\gamma}_{\mathbf{q}'2m'}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}2m'} + \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'3m'}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}3m'} \right), \quad (10)$$

$$\hat{H}_{\text{ex}}^{\text{eff}} = \frac{1}{16N_c} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{k}mm'} V_-(\mathbf{k}) \left[1 - e^{i(\phi_{\mathbf{q}} - \phi_{\mathbf{q}+\mathbf{k}})} \right] \left[1 - e^{i(\phi_{\mathbf{q}'} - \phi_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}})} \right] \times \left(\hat{\gamma}_{\mathbf{q}2m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}3m} \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'3m'}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}2m'} + \hat{\gamma}_{\mathbf{q}3m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}2m} \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'2m'}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}3m'} \right), \quad (11)$$

$$\hat{H}_{\text{u}}^{\text{eff}} = \frac{1}{16N_c} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\mathbf{k}mm'} V_-(\mathbf{k}) \left[1 - e^{i(\phi_{\mathbf{q}} - \phi_{\mathbf{q}+\mathbf{k}})} \right] \left[1 - e^{i(\phi_{\mathbf{q}'} - \phi_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}})} \right] \times \left(\hat{\gamma}_{\mathbf{q}2m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}3m} \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'2m'}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}3m'} + \hat{\gamma}_{\mathbf{q}3m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}2m} \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'3m'}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}2m'} \right), \quad (12)$$

где $V_{\pm}(\mathbf{k}) = \sum_{aa'} (V_{\mathbf{k}aa'}^{11} \pm V_{\mathbf{k}aa'}^{12}) / 4$. Суммирование по парным мульти-индексам в уравнениях (10-12) гарантирует SU(4)-инвариантность этих выражений. Доказательство этого утверждения полностью аналогично доказательству инвариантности ур. (6).

4. Метод среднего поля

Для исследования упорядоченных фаз в предложенной SU(4)-инвариантной модели АА-Г мы будем опираться на приближение среднего поля при нулевой температуре $T = 0$. Для этого нужно

ввести параметр порядка. Как следствие широкой группы симметрий матричной природы, удобно считать, что параметр порядка Q – это матрица 4×4 , преобразующаяся под действием $SU(4)$. Параметр порядка связывается с «аномальными» средними следующим образом:

$$\hat{Q} = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{p}} \left(\bar{V}_+ \langle \hat{\Theta}_{\mathbf{p}} \rangle + \bar{V}_- \langle \hat{\Theta}_{\mathbf{p}}^\dagger \rangle \right). \quad (13)$$

В этой формуле \bar{V}_\pm – взаимодействие, усредненное по ПФ, а «аномальные» средние $\langle \hat{\Theta}_{\mathbf{p}} \rangle$ являются математическим ожиданием (средним значением), вычисленным по отношению к упорядоченному основному состоянию, для операторной матрицы $\hat{\Theta}_{\mathbf{q}}$, заданной своими матричными элементами $\Theta_{\mathbf{q}mm'} = \hat{\gamma}_{\mathbf{q}3m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}2m'}$. Это позволяет вывести следующую форму среднеполевого гамильтониана взаимодействия:

$$\hat{H}_{\text{int}}^{\text{MF}} = - \sum_{\mathbf{q}} \text{Tr} \left(\hat{Q}^\dagger \hat{\Theta}_{\mathbf{q}} + \hat{\Theta}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{Q} \right). \quad (14)$$

Учитывая эту формулу, а также выражения (6) и (13), мы выводим уравнение самосогласования на параметр порядка \hat{Q} :

$$(\bar{V}_+^2 - \bar{V}_-^2) \hat{Q} h(\hat{Q}^\dagger \hat{Q}) = \bar{V}_+ \hat{Q} - \bar{V}_- \hat{Q}^\dagger, \quad (15)$$

в котором функция h задана интегралом:

$$h(\hat{Q}^\dagger \hat{Q}) = \frac{1}{2} \int_0^{3t} \frac{\nu(\varepsilon) d\varepsilon}{\sqrt{(\varepsilon - t_0)^2 + \hat{Q}^\dagger \hat{Q}}}, \quad (16)$$

так что $\nu(\varepsilon) \approx \varepsilon / (\sqrt{3\pi} t^2)$ – это плотность состояний для графена, вычисленная на одну спиновую проекцию и на одну долину. Интегрирование выполняется от нижнего до верхнего края зоны.

Уравнение самосогласования может быть несколько упрощено, если воспользоваться сингулярным разложением матрицы параметр порядка: $\hat{Q} = \hat{U} \hat{D} \hat{V}^\dagger$ и $\hat{Q}^\dagger = \hat{V} \hat{D} \hat{U}^\dagger$, где матрицы \hat{U} и \hat{V} унитарны, а \hat{D} диагональна, с неотрицательными элементами $d_i \geq 0$, $i = 1, \dots, 4$. Тогда ур. (15) может быть переписано в следующем виде:

$$\left[\bar{V}_+ - (\bar{V}_+^2 - \bar{V}_-^2) h(\hat{D}^2) \right] \hat{D} = \bar{V}_- \hat{W} \hat{D} \hat{W}, \quad (17)$$

где $\hat{W} = \hat{U}^\dagger \hat{V} \in U(4)$.

5. Решения уравнения самосогласования

Наша следующая задача – решить полученное уравнение самосогласования. Каждое найденное решение соответствует низкотемпературной упорядоченной фазе АА-Г. К сожалению, нам не удалось доказать, что мы знаем все возможные решения уравнения самосогласования. Тем не менее, мы смогли явно сконструировать три типа решений, каждый такой тип обладает своим физическим смыслом.

Во-первых, можно искать эрмитовы решения ур. (15). Как показано в работах [1, 2], эрмитовы решения могут быть сгруппированы в три топологически неэквивалентных класса. Первый класс описывает волну зарядовой плотности. Второй класс включает в себя волну спиновой плотности, волну долинной плотности и волну спин-долинной плотности. Упорядоченные фазы, образующие класс номер три, – это комбинации всех вышеупомянутых типов волн плотности.

Во-вторых, матрица \hat{Q} может быть антиэрмитовой. В такой ситуации упорядоченные фазы характеризуются спонтанными межслоевыми кольцевыми токами. В зависимости от топологического класса решения эти токи могут переносить зарядовые, спиновые, долинные и спин-долинные кванты.

И в-третьих, матрица параметра порядка может быть ни эрмитовой, ни антиэрмитовой, но диагонализуемой, причем такой, что ее собственные значения либо чисто действительные, либо чисто мнимые. Упорядоченные состояния, соотносящиеся с такими \hat{Q} , будут одновременно демонстрировать токовые и зарядовые упорядочения.

6. Заключение

Благодаря особенностям сотовой решетки, одноэлектронная дисперсия в графене и системах на его основе характеризуется дополнительным квантовым числом, долинным индексом ξ . Хотя во многих

отношениях индекс долины отличается от спинового квантового числа, для графена и материалов на его основе мы можем сформулировать теорию, которая включает эти два квантовых числа на равных. В нашей статье мы описали построение такой теории для AA-Г. Конечно же, SU(4)-симметричная теория для материала на основе графена не может являться точной моделью, детально описывающей электронные свойства материала. Тем не менее это полезный теоретический инструмент. Исследование SU(4)-симметричных моделей следует рассматривать как физически мотивированный подход, позволяющий разработать классификационную схему упорядоченных состояний в материалах на основе графена. Предложенный подход сводит воедино как уже хорошо известные «зарядово-упорядоченные», так и менее изученные «токо-упорядоченные» состояния, а также обнаруживает ранее, по-видимому, не обсуждавшиеся гибридные виды состояний со спонтанно нарушенной симметрией, объединяющие в себе как «зарядовые», так и «токовые» параметры порядка. Представляется перспективным поиск новых типов решений уравнения самосогласования (или доказательства, что таковых не существует), а также расширение формализма на сверхпроводящие параметры порядка и на другие материалы.

Список литературы

- [1] Rozhkov A. V., Sboychakov A. O., Rakhmanov A. L. Ordering in the SU(4)-symmetric model of AA bilayer graphene // *Phys. Rev. B.* — 2023. — Nov. — Vol. 108. — P. 205153. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.108.205153>.
- [2] Nandkishore R., Levitov L. Quantum anomalous Hall state in bilayer graphene // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Sep. — Vol. 82, no. 11. — P. 115124.

ORDERED STATES IN THE SU(4)-SYMMETRIC MODEL OF AA BILAYER GRAPHENE

Rozhkov A.V.^{1*}, Sboychakov A.O.¹

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

* alex.vl.rozhkov@yandex.ru

Abstract

In this paper we discuss the classification of ordered states for model of bilayer AA graphene based on the SU(4) matrix group. Such a wide group of symmetries arises due to the unification of spin and the so-called valley degeneracy into a broad multiplet, typical for graphene and other two-dimensional materials based on it. We describe the construction of an effective theory demonstrating the SU(4) invariance, and discuss the mean field investigation of the resulting Hamiltonian. Ordered states of such a system are represented by a unifying SU(4)-invariant self-consistency equation. We will explicitly construct three different classes of solutions for the derived self-consistency equation. Using the SU(4) invariance, we generalize a previously published topological classification scheme for non-superconducting ordered states in bilayer AA graphene.

Key words: bilayer AA graphene, ordered state, SU(4) group
