

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

А.В. Рожков \* <sup>1</sup>, А.О. Сбойчаков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 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  $\sigma$  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

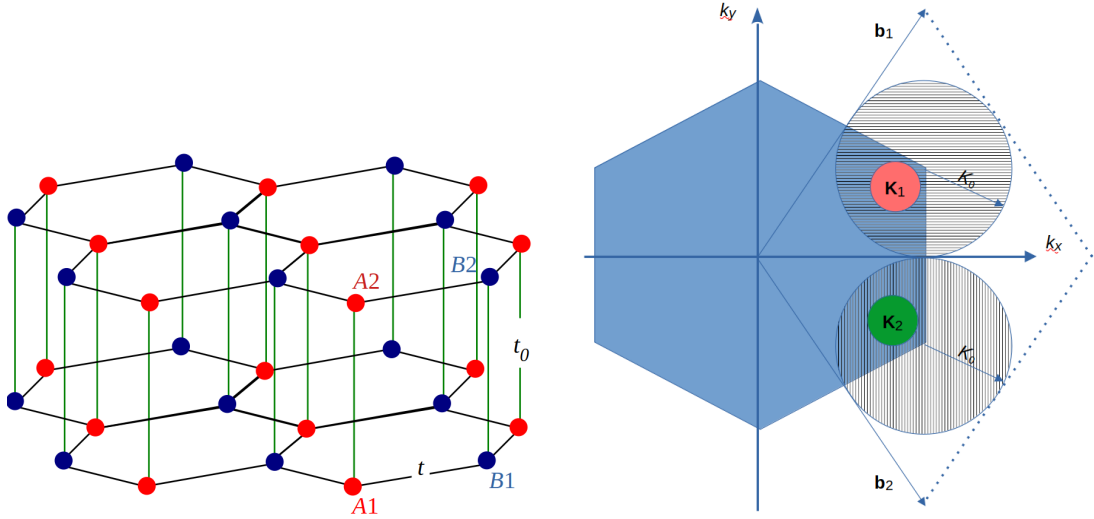


Рисунок 1 – Слева – кристаллическая структура АА-Г. Видны два слоя графена, уложенные один на другой так, что над каждым атомом нижнего слоя находится один атом верхнего слоя. Элементарная ячейка состоит из четырех атомов, обозначенных  $A1$ ,  $B1$ ,  $A2$  и  $B2$ . Амплитуда внутрислоевого перескока 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  $v_F = 3a_0 t/2$ . 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  $\xi$ , 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  $\sigma$  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  $\sigma$  и полным импульсом  $\mathbf{K}_2 + \mathbf{k}$ .

Для ясности и компактности обозначений удобно ввести мульти-индекс  $m$ , объединяющий индексы  $\xi$  и  $\sigma$ . 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  $\xi$  и  $\sigma$  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  $\hat{H}_{\text{int}}$  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:

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

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

$$\times \left( \hat{\gamma}_{\mathbf{q}2m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}3m} \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'3m'}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}2m'} + \hat{\gamma}_{\mathbf{q}3m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}2m} \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'2m'}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}3m'} \right),$$

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

$$\times \left( \hat{\gamma}_{\mathbf{q}2m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}3m} \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'2m'}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}3m'} + \hat{\gamma}_{\mathbf{q}3m}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}2m} \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'3m'}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{q}'-\mathbf{k}2m'} \right),$$

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  $4 \times 4$ , 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  $\xi$ . 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 АА-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.<sup>1\*</sup>, Sboychakov A.O.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 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

---