

ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ПОДКРУЧЕННОМ ДВУХСЛОЙНОМ ГРАФЕНЕ ПРИ БОЛЬШИХ УГЛАХ ПОДКРУТКИ: ПЕРЕНОРМИРОВКА ПАРАМЕТРОВ ФЕРМИ-ЖИДКОСТИ

Сбойчаков А.О. *¹, Рожков А.В.¹

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

Статья поступила в редакцию 06.11.2023

Одобрена после рецензирования 30.11.2023

Принята к публикации 28.12.2023

Аннотация

В работе исследуется влияние электрон-электронного взаимодействия на свойства электронной жидкости подкрученного двухслойного графена. Рассматриваются структуры, имеющие небольшой размер сверхъячейки, что соответствует большим углам подкрутки. В этом случае одноэлектронный спектр имеет щель, которая возникает на уровне Ферми за счет гибридизации электронов, движущихся в разных слоях. Электрон-электронное взаимодействие перенормирует параметры одночастичного гамильтониана. Эффективное взаимодействие вычисляется с помощью приближения хаотических фаз. Используя однопетлевую собственнo-энергетическую диаграмму, мы рассчитываем квазичастичный вычет, а также перенормировку щели и скорости Ферми как функции затравочной щели. Мы показываем, в частности, что перенормированная щель может превосходить затравочное значение примерно в два раза.

Ключевые слова: графен, электронная структура, электрон-электронное взаимодействие

EDN FLXFW

doi:[10.24412/2949-0553-2023-57-4-14](https://doi.org/10.24412/2949-0553-2023-57-4-14)

1. Введение

Когда совмещаются две периодические структуры с близкими, но неидентичными параметрами, может возникнуть необычное визуальное явление – узор муара. В последние десятилетия системы с муаром стали активно изучаться в физике твердого тела. В контексте таких исследований муар может возникнуть в двух ситуациях. Во-первых, при наложении двухмерной системы (например, графена) на подложку с похожими, но несовпадающими параметрами решетки. Во-вторых, при наложении двух одинаковых двухмерных систем, чьи кристаллические оси не параллельны друг другу, но составляют конечный угол (т.н. угол подкрутки). В данной работе мы будем исследовать подкрученный двухслойный графен, который относится к системам второго типа.

Итак, в подкрученном двухслойном графене [1] один слой графена уложен на другой, и при этом кристаллические оси двух слоев образуют угол θ . Подкрутка приводит к образованию периодического узора муара с периодом $L_M = a/[2 \sin(\theta/2)]$, где a – постоянная решетки однослойного графена. А кроме этого, поворот одного слоя относительно другого нарушает трансляционную симметрию на период решетки графена. Однако при некоторых соизмеримых значениях θ в системе возникает сверхструктура. Размер сверхъячейки, вообще говоря, немонотонно зависит от угла подкрутки. Но для структур, у которых сверхъячейка совпадает с ячейкой муара, размер сверхъячейки монотонно увеличивается при уменьшении угла подкрутки [1].

Электронный спектр подкрученного двухслойного графена на низких энергиях существенно зависит от угла подкрутки. В случае когда размер сверхъячейки достаточно мал (что соответствует большим углам подкрутки), в спектре может возникнуть щель [2–4], причем величина щели, вообще

* Автор, ответственный за переписку: Артем Олегович Сбойчаков, sboycha@mail.ru

говоря, немонотонно зависит от угла подкрутки [4]. Однако при $\theta \lesssim 10^\circ$ щель становится пренебрежимо малой для любого типа сверхструктур. При углах $1^\circ \lesssim \theta \lesssim 10^\circ$ спектр на низких энергиях состоит из двух дважды вырожденных конусов Дирака [5, 6], центрированных в точках Дирака зоны Бриллюэна сверхрешетки \mathbf{K}_1 и \mathbf{K}_2 . Скорость Ферми этих конусов меньше, чем у однослойного графена. Она монотонно уменьшается при уменьшении угла подкрутки. Перенормировка скорости Ферми может быть значительной, но образец остается полуметаллом. Однако при так называемом магическом угле подкрутки $\theta_c \approx 1^\circ$ в системе появляется поверхность Ферми даже при нулевом допировании. Спектр на низких энергиях отличается от дираковского; он состоит из четырех плоских зон, отделенных щелями от низкоэнергетических и высокоэнергетических дисперсионных зон [1, 7, 8]. Ширина плоских зон имеет минимум при $\theta = \theta_c$.

Большое внимание как теоретиков, так и экспериментаторов в настоящее время уделяется исследованию подкрученного двухслойного графена при магическом угле подкрутки. Это связано с открытием в этой системе моттовских диэлектрических состояний [9, 10] и сверхпроводимости [10, 11]. Ввиду наличия плоских зон на уровне Ферми, учет электрон-электронного взаимодействия становится совершенно необходимым для понимания природы диэлектрических, а возможно и сверхпроводящих фаз в этом материале. Электрон-электронное взаимодействие может приводить к нетривиальным эффектам и при промежуточных углах подкрутки, $1^\circ \lesssim \theta \lesssim 10^\circ$. Так, в работе [12] показано, что приложение разности потенциалов между слоями подкрученного двухслойного графена может приводить к возникновению экситонного параметра порядка, контролируемого межслоевым кулоновским отталкиванием.

В то же время роль электрон-электронного взаимодействия для сверхструктур с небольшим размером сверхъячейки (от нескольких десятков до нескольких сотен атомов на сверхъячейку, это соответствует большим углам подкрутки) практически не изучалась. Данная работа призвана частично устранить этот пробел. В работе мы рассматриваем сверхструктуры, для которых характерно наличие щели в спектре, возникающей за счет гибридизации дираковских электронов, движущихся в разных слоях подкрученного двухслойного графена. Мы показываем, что электрон-электронное взаимодействие перенормирует такие параметры Ферми-жидкости, как скорость Ферми, щель в спектре, а также квази-частичный вычет. Мы анализируем зависимость этих параметров как функцию величины затравочной щели.

2. Одночастичный гамильтониан подкрученного двухслойного графена при больших углах подкрутки. Спектральная щель

Графен обладает шестиугольной кристаллической решеткой, состоящей из двух треугольных подрешеток A и B . В подкрученном двухслойном графене слой 2 повернут относительно слоя 1 на угол θ . В данной работе, как и в большинстве работ по данной теме, мы будем считать, что нулевой угол подкрутки соответствует структуре АВ (более подробную информацию о конфигурациях двухслойного графена и о геометрии подкрученного двухслойного графена можно найти в обзоре [1]). Когда угол подкрутки удовлетворяет уравнению

$$\cos \theta = \frac{3m_0^2 + 3m_0r + r^2/2}{3m_0^2 + 3m_0r + r^2}, \quad (1)$$

где m_0 и r – натуральные взаимно простые числа, система обладает сверхструктурой. Число элементарных ячеек каждого слоя графена в сверхъячейке равно $N_{sc} = (3m_0^2 + 3m_0r + r^2)/g$, где $g = 1$ если $r \neq 3n$ (n – натуральное число) или $g = 3$ в обратном случае. Число атомов углерода в сверхъячейке равно $4N_{sc}$.

Зона Бриллюэна каждого слоя графена имеет шестиугольную форму. Зона Бриллюэна слоя 2 повернута относительно зоны Бриллюэна слоя 1 на угол θ вокруг Γ точки. Зона Бриллюэна сверхрешетки также имеет шестиугольную форму, но меньшую по размеру. Электроны в графене на низких энергиях имеют импульсы вблизи точек Дирака, располагающихся в углах зоны Бриллюэна. Две неэквивалентные точки Дирака слоя 1 равны $\mathbf{K} = \{0, 4\pi/(3a)\}$ и $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$, где $a = 2.46 \text{ \AA}$ – постоянная решетки графена.

Неэквивалентные точки Дирака слоя 2, обозначаемые нами как \mathbf{K}_θ и \mathbf{K}'_θ , получаются из точек \mathbf{K} и \mathbf{K}' поворотом на угол θ . Для соизмеримых θ , точки Дирака \mathbf{K} , \mathbf{K}' и \mathbf{K}_θ , \mathbf{K}'_θ оказываются попарно эквивалентными, т.е. они отличаются друг от друга на некоторый вектор обратной сверхрешетки \mathbf{G} . Какие точки эквивалентны друг другу, зависит от типа сверхструктуры. Для сверхструктур с $r \neq 3n$, где n натуральное число, имеем $\mathbf{K} \sim \mathbf{K}'_\theta$ и $\mathbf{K}' \sim \mathbf{K}_\theta$. В противном случае, будем иметь $\mathbf{K} \sim \mathbf{K}_\theta$ и $\mathbf{K}' \sim \mathbf{K}'_\theta$. В данной работе мы будем рассматривать только сверхструктуры с $r \neq 3n$. В частности, нас интересует случай $r = 1$, когда сверхъячейка совпадает с ячейкой муара (о соответствии между сверхъячейкой и ячейкой муара см., например, работу [1]).

Перейдем теперь к изучению электронных свойств при больших углах подкрутки (условие, при котором угол можно считать большим, будет дано ниже). Рассмотрим электрон, движущийся в слое 1 с импульсом $\mathbf{k}_1 = \mathbf{K} + \mathbf{p}_1$, и электрон, движущийся в слое 2 с импульсом $\mathbf{k}_2 = \mathbf{K}'_\theta + \mathbf{p}_2$, где \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 достаточно малы. Поскольку точки \mathbf{K} и \mathbf{K}'_θ эквивалентны, то существует ненулевой матричный элемент перехода электрона из слоя 1 в слой 2, при котором $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 \equiv \mathbf{p}$. В подходе, который был впервые предложен в работе [2], учитываются только такие переходы из слоя 1 в слой 2. При этом без учета межслоевой гибридизации электроны в каждом слое описываются безмассовым уравнением Дирака. Введем четырехкомпонентный спинор

$$\Psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger = (\psi_{\mathbf{p}1A\sigma}^\dagger, \psi_{\mathbf{p}1B\sigma}^\dagger, \psi_{\mathbf{p}2A\sigma}^\dagger, \psi_{\mathbf{p}2B\sigma}^\dagger), \quad (2)$$

где $\psi_{\mathbf{p}i\alpha\sigma}^\dagger$ – оператор рождения электрона с импульсом \mathbf{p} в слое i ($= 1, 2$) в подрешетке α ($= A, B$) с проекцией спина σ . Отметим, что импульс \mathbf{p} отсчитывается от точки \mathbf{K} в случае $i = 1$ или от точки \mathbf{K}'_θ когда $i = 2$. Одночастичный гамильтониан тогда можно представить в виде

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \Psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \hat{H}_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}\sigma}, \quad (3)$$

где 4×4 матрицу $\hat{H}_{\mathbf{p}}$ можно записать в блочном виде как [2]

$$\hat{H}_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} v_F \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} & \hat{T}'_{12} \\ \hat{T}'_{12}{}^\dagger & -v_F \boldsymbol{\sigma}_\theta^* \mathbf{p} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

В этом выражении v_F – скорость Ферми электронов в графене, $\boldsymbol{\sigma}$ – матрицы Паули, действующие в пространстве подрешеток, «подвернутые» матрицы Паули $\boldsymbol{\sigma}_\theta$ определяются так:

$$\boldsymbol{\sigma}_\theta = e^{i\sigma_z \theta/2} \boldsymbol{\sigma} e^{-i\sigma_z \theta/2}. \quad (5)$$

И, наконец, символ \hat{T}'_{12} в ур. (4) – это матрица 2×2 , задающая гибридизацию одноэлектронных состояний, локализованных в разных слоях. Элементы матрицы \hat{T}'_{12} могут быть вычислены в приближении сильной связи, если задаться функцией $t_\perp(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, определяющей амплитуду перескока электрона с узла в позиции \mathbf{r}' слоя 2 на узел в позиции \mathbf{r} слоя 1. Тогда матрица \hat{T}'_{12} имеет вид [4]

$$(\hat{T}'_{12})_{\alpha\beta} = \frac{1}{N_{sc}} \sum'_{\mathbf{nm}} t_\perp(\mathbf{r}_\mathbf{n}^{1\alpha}, \mathbf{r}_\mathbf{m}^{2\beta}) e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{r}_\mathbf{n}^{1\alpha} - \mathbf{r}_\mathbf{m}^{2\beta})} e^{-i\mathbf{G}_0 \mathbf{r}_\mathbf{m}^{2\beta}}. \quad (6)$$

Векторы $\mathbf{r}_\mathbf{n}^{i\alpha}$ в этой формуле определяют позиции атомов углерода в слое i в подрешетке α [\mathbf{n} – вектор из натуральных чисел], а вектор $\mathbf{G}_0 = \mathbf{K} - \mathbf{K}'_\theta$ – определенный вектор обратной сверхрешетки для структур с $r \neq 3n$. Штрих у знака суммы означает, что суммирование по \mathbf{m} осуществляется по узлам слоя 2 внутри одной сверхъячейки, тогда как суммирование по \mathbf{n} осуществляется по всем узлам слоя 1.

В работе [2] в рамках континуальной модели из симметричных соображений было показано, что для структур с $r \neq 3n$ матрица \hat{T}'_{12} должна иметь вид

$$\hat{T}'_{12} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta e^{i\phi'} \\ \Delta e^{i\psi'} & 0 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где Δ , ϕ' и ψ' – вещественные параметры, зависящие от сверхструктуры. Численные расчеты элементов матрицы \hat{T}'_{12} по формуле (6), выполненные в работе [4] для разных сверхструктур, полностью подтвердили справедливость формулы (7). Отметим, что фактическое отличие формулы (7) от приведенной в работе [2] связано с тем, что угол подкрутки $\theta = 0$ соответствовал там структуре AA, а не AB.

В дальнейшем нам будет удобно выполнить унитарное преобразование $\Psi_{\mathbf{p}\sigma} \rightarrow \hat{U} \Psi_{\mathbf{p}\sigma}$, где матрица \hat{U} имеет вид

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & e^{-i\sigma_z \theta/2} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

В этом выражении σ_0 есть единичная матрица 2×2 . После такого унитарного преобразования гамильтониан $\hat{H}_{\mathbf{p}}$ приобретает вид

$$\hat{H}_{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{H}_{\mathbf{p}} \hat{U} = \begin{pmatrix} v_F \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} & \hat{T}_{12} \\ \hat{T}_{12}{}^\dagger & -v_F \boldsymbol{\sigma}^* \mathbf{p} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где

$$\hat{T}_{12} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta e^{i\phi} \\ \Delta e^{i\psi} & 0 \end{pmatrix}, \quad \phi = \phi' - \frac{\theta}{2}, \quad \psi = \psi' + \frac{\theta}{2}. \quad (10)$$

m_0	r	θ [град]	N_{sc}	Δ [мэВ]	ϕ [рад]	ψ [рад]
1	1	21.79°	7	86	-2.89	2.89
1	2	32.20°	13	40	-0.80	-1.30
2	1	13.17°	19	25	-0.02	-2.08
3	1	9.43°	37	13	2.89	-0.80

Таблица 1: Значения Δ , ϕ и ψ для некоторых сверхструктур с небольшим значением N_{sc} и достаточно большим углом подкрутки θ .

Собственные значения и собственные вектора гамильтониана (9) можно вычислить аналитически. Их удобно параметризовать двумя индексами, $s = \mp 1$ и $\nu = \mp 1$. Энергетический спектр дается выражением

$$\varepsilon_{\mathbf{p}}^{(s\nu)} = s \sqrt{\Delta^2 \cos^2 \left(\frac{\phi - \psi}{2} \right) + \left[v_{\text{FP}} p + \nu \Delta \sin \left(\frac{\phi - \psi}{2} \right) \right]^2}. \quad (11)$$

Из этого выражения видно, что спектр обладает щелью. Значение щели равно

$$\Delta_g = 2\Delta \left| \cos \left(\frac{\phi - \psi}{2} \right) \right|. \quad (12)$$

Если разность $\phi - \psi$ не слишком близка к $\pm\pi$, то значение щели будет порядка Δ . Собственные функции гамильтониана (9) равны

$$\Phi_{\mathbf{p}}^{(s\nu)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} s e^{i(\frac{\phi+\psi}{2} + \chi_{\mathbf{p}}^{\nu})} \\ i\nu e^{i(\frac{\phi+\psi}{2} + \varphi_{\mathbf{p}})} \\ i s \nu e^{i(\chi_{\mathbf{p}}^{\nu} + \varphi_{\mathbf{p}})} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (13)$$

где $\varphi_{\mathbf{p}}$ – полярный угол вектора \mathbf{p} , а функция $\chi_{\mathbf{p}}^{\nu}$ равна

$$\chi_{\mathbf{p}}^{\nu} = \arg \left[\Delta \cos \left(\frac{\phi - \psi}{2} \right) + i \left(v_{\text{FP}} p + \nu \Delta \sin \left(\frac{\phi - \psi}{2} \right) \right) \right]. \quad (14)$$

Расчеты, сделанные в работах [2–4], показывают, что наибольшее значение параметра Δ соответствует сверхструктуре $m_0 = 1$, $r = 1$ ($\theta \cong 21.79^\circ$, $N_{sc} = 7$). Эта сверхструктура имеет наименьшее значение N_{sc} из всех сверхструктур с $r \neq 3n$. При этом само значение Δ зависит от параметризации амплитуд межслоевых перескоков $t_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Так, расчеты, сделанные в работе [4], дают $\Delta \approx 86$ мэВ (при этом $\phi = -\psi \cong -2.89$ радиан). В то же время в работе [3] использовалась другая параметризация для $t_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, что дало на порядок меньшее значение $\Delta \approx 7$ мэВ. Наконец, в работе [2] приводится оценка $\Delta \sim 10$ мэВ.

В таблице 1 приведены значения Δ , ϕ и ψ для некоторых сверхструктур. Расчет выполнен нами по формуле (6) с $t_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, взятым из работы [4]. Из этой таблицы видно, что Δ уменьшается с увеличением размера сверхъячейки (этот размер пропорционален N_{sc}). Это связано с негативной интерференцией слагаемых в сумме (6). В то же время Δ немонотонно зависит от угла подкрутки θ . Это объясняется тем, что небольшое отклонение θ от соизмеримого значения с небольшим N_{sc} приводит к резкому увеличению размера сверхъячейки. Этот вопрос подробно обсуждается в работе [4].

Матрица (10) гибридизует электроны с импульсами в окрестности точки \mathbf{K} , движущиеся в слое 1, и электроны с импульсами в окрестности точки \mathbf{K}'_{θ} , движущиеся в слое 2. Аналогично можно построить гамильтониан для электронов в слое 1 с импульсами в окрестности точки \mathbf{K}' и электронов в слое 2 с импульсами в окрестности точки \mathbf{K}_{θ} .

В заключении этого раздела рассмотрим условие применимости гамильтониана (4). Как уже было сказано, используемое приближение справедливо при больших углах подкрутки. Количественно это условие можно записать в виде

$$v_{\text{F}} \Delta K \gg \tilde{t}_{\perp}, \quad \Delta K = |\mathbf{K} - \mathbf{K}_{\theta}| = \frac{8\pi}{3a} \sin \frac{\theta}{2}, \quad (15)$$

где $\tilde{t}_{\perp} \approx 0.4 \max(t_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))$ [6]. Величина ΔK уменьшается при уменьшении угла подкрутки. Когда условие (15) перестает выполняться, необходимо учитывать гибридизацию электронов в слое 1 с импульсами вблизи точки \mathbf{K} (или \mathbf{K}') и электронов в слое 2 с импульсами вблизи точки \mathbf{K}_{θ} (или \mathbf{K}'_{θ}). Это может быть сделано путем построения эффективных континуальных моделей [5, 6] или в приближении

сильной связи [7, 8]. Для оценки скорости Ферми можно использовать выражение $v_F = \sqrt{3}ta/2$, где $t = 2.7\text{эВ}$ – амплитуда перескока между ближайшими атомами в графене [1]. Принимая также для оценки [1, 6] $\tilde{t}_\perp = 0.16\text{эВ}$, получим, что $v_F\Delta K < 10\tilde{t}_\perp$ при $\theta \lesssim 10^\circ$. В дальнейшем мы будем считать условие (15) выполненным.

3. Электрон-электронное взаимодействие. Собственно-энергетическая функция в приближении хаотических фаз

Гамильтониан (4) описывает одноэлектронные свойства подкрученного графена. В полный гамильтониан системы мы добавим теперь член, описывающий электрон-электронное взаимодействие. В данной работе мы будем учитывать только дальнедействующее кулоновское отталкивание. При этом мы будем различать внутрислоевое и межслоевое взаимодействие. Тогда гамильтониан взаимодействия будет иметь вид

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\substack{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}\sigma\sigma' \\ ij\alpha\beta}} \psi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}i\alpha\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{p}i\alpha\sigma} V_{ij}(\mathbf{q}) \psi_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}j\beta\sigma'}^\dagger \psi_{\mathbf{p}'j\beta\sigma'}. \quad (16)$$

В этом выражении \mathcal{N} есть число элементарных ячеек каждого слоя графена в образце, а функция $V_{ij}(\mathbf{q})$ может быть записана в матричном виде как

$$\hat{V}(\mathbf{q}) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon q} \begin{pmatrix} 1 & e^{-qd} \\ e^{-qd} & 1 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

где $d = 3.35\text{Å}$ – расстояние между слоями, а ϵ – диэлектрическая проницаемость среды, в которую помещен образец. Диагональные элементы матрицы описывают внутрислоевое взаимодействие, а недиагональные – межслоевое. Отметим, что функция $V_{ij}(\mathbf{q})$ не зависит от подрешеточных индексов. Это приближение справедливо, если переданный импульс \mathbf{q} достаточно мал, $qa \ll 2\pi$. В этом случае гамильтониан взаимодействия сохраняет свой вид после унитарного преобразования $\Psi_{\mathbf{p}\sigma} \rightarrow \hat{U}\Psi_{\mathbf{p}\sigma}$ с \hat{U} из уравнения (8). Отметим также, что гамильтониан (16) учитывает только взаимодействие электронов в одной долине $(\mathbf{K}, \mathbf{K}'_\theta)$, т.е. взаимодействие электронов с импульсами вблизи точки \mathbf{K} , если они движутся в слое 1, и электронов с импульсами вблизи точки \mathbf{K}'_θ , если они движутся в слое 2. В принципе можно учесть также взаимодействие электронов в разных долинах, $(\mathbf{K}, \mathbf{K}'_\theta)$ и $(\mathbf{K}', \mathbf{K}_\theta)$. Однако для целей данного исследования, изучения перенормировки параметров гамильтониана (4), учет таких слагаемых не приведет ни к каким новым результатам.

Основным объектом данного исследования является матричная собственно-энергетическая функция $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$, порождаемая взаимодействием (16). Относительная величина электрон-электронного взаимодействия в графене может быть оценена с помощью безразмерного параметра $\alpha = e^2/(\epsilon v_F)$ [13]. Подставляя сюда скорость Ферми $v_F = \sqrt{3}ta/2$ с $t = 2.7\text{эВ}$, получим, что $\alpha \cong 2.5$ при $\epsilon = 1$. Таким образом, взаимодействие в графене является достаточно сильным. Поэтому мы не будем вычислять $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ по теории возмущений, а воспользуемся здесь широко используемым приближением хаотических фаз (ПХФ). Для однослойного графена такой подход использовался, например, в работах [14–16]. Допустимость данного приближения будет обсуждаться в разделе 5.

В приближении хаотических фаз экранированное кулоновское взаимодействие $V_{ij}^{\text{RPA}}(\omega, \mathbf{q})$ есть не только функция переданного импульса \mathbf{q} , но и частоты ω . Она определяется путем решения матричного уравнения

$$\hat{V}^{\text{RPA}}(\omega, \mathbf{q}) = \hat{V}(\mathbf{q}) + \hat{V}(\mathbf{q})\hat{\Pi}(\omega, \mathbf{q})\hat{V}^{\text{RPA}}(\omega, \mathbf{q}), \quad (18)$$

где $\hat{\Pi}(\omega, \mathbf{q})$ – поляризационный оператор. Матрица $\hat{\Pi}$ есть матрица 2×2 , компоненты которой равны [13] (при нулевом допировании и нулевой температуре)

$$\Pi_{ij}(\omega, \mathbf{q}) = N \sum_{s\nu s'\nu'} \int \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{\Theta(-\varepsilon_{\mathbf{p}}^{(s\nu)}) - \Theta(-\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{(s'\nu')})}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{p}}^{(s\nu)} - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{(s'\nu')} + i0 \operatorname{sgn}(\omega)} \left(\sum_{\alpha} \Phi_{\mathbf{p}i\alpha}^{(s\nu)} \Phi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}i\alpha}^{(s'\nu')*} \right) \left(\sum_{\beta} \Phi_{\mathbf{p}j\beta}^{(s\nu)*} \Phi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}j\beta}^{(s'\nu')} \right), \quad (19)$$

где $\Theta(E)$ – функция Хевисайда, а $N = 4 = 2 \times 2$ – параметр вырождения (один множитель, равный 2, получается за счет вырождения по спину, другой – за счет вырождения по долинам). На языке диаграмм Феймана уравнение (18) изображено на рисунке 1(а).

Собственно-энергетическая функция $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ есть матрица 4×4 , также как и гамильтониан (9). В приближении хаотических фаз диаграмма, соответствующая $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$, изображена на рисунке 1(б). В аналитическом виде компоненты матрицы $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ определяются следующими интегралами

$$\Sigma_{i\alpha, j\beta}(\omega, \mathbf{p}) = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} G_{i\alpha, j\beta}(\omega - \omega', \mathbf{p} - \mathbf{q}) V_{ij}^{\text{RPA}}(\omega', \mathbf{q}), \quad (20)$$

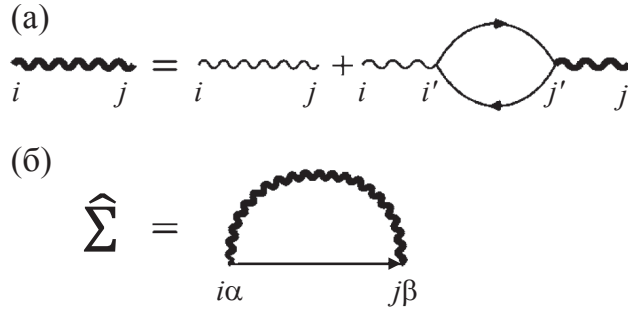


Рисунок 1 – (а) Приближение хаотических фаз. Схематическое изображение уравнения (18) на матрицу экранированного кулоновского взаимодействия $\hat{V}^{\text{RPA}}(\omega, \mathbf{q})$. (б) Диаграмма, соответствующая собственно-энергетической функции $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ в приближении хаотических фаз.

где $\hat{G}(\omega, \mathbf{p})$ – функция Грина гамильтониана (9), компоненты которой можно записать в виде

$$G_{i\alpha, j\beta}(\omega, \mathbf{p}) = \sum_{s\nu} \frac{\Phi_{\mathbf{p}i\alpha}^{(s\nu)} \Phi_{\mathbf{p}j\beta}^{(s\nu)*}}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{p}}^{(s\nu)} + i0 \operatorname{sgn}(\omega)}. \quad (21)$$

В данной работе нас интересует вещественная часть собственно-энергетической функции. Мнимая часть, определяющая квазичастичное затухание, будет вычислена отдельно. Мы будем вычислять компоненты матрицы $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ при малых значениях ω и \mathbf{p} . Частотно-импульсная зависимость различных компонентов собственно-энергетической функции различна. Рассмотрим для примера, как вычисляются диагональные компоненты $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$. Можно показать, что в наинишем порядке по ω и \mathbf{p} диагональные компоненты матрицы $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ не зависят от импульса и пропорциональны первой степени частоты. Раскладывая $G_{i\alpha, i\alpha}(\omega - \omega', -\mathbf{q})$ в ряд по ω с точностью до первого порядка, получим

$$G_{i\alpha, i\alpha}(\omega - \omega', -\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\nu} \frac{\omega'}{\omega'^2 - (\varepsilon_{\mathbf{q}}^{1\nu})^2 + i0} - \frac{\omega}{2} \sum_{\nu} \frac{\omega'^2 + (\varepsilon_{\mathbf{q}}^{1\nu})^2}{[\omega'^2 - (\varepsilon_{\mathbf{q}}^{1\nu})^2 + i0]^2} + o(\omega). \quad (22)$$

Вклад в действительную часть интеграла (20) от первого слагаемого равен нулю. Вклад от второго слагаемого может быть вычислен путем поворота Вика [17]. Интеграл по частоте ω' вдоль вещественной оси равен интегралу вдоль мнимой оси $\omega' = iq_0$. Используя выражение (11) для $\varepsilon_{\mathbf{q}}^{1\nu}$, в результате получим

$$\Sigma_{i\alpha, i\alpha}(\omega, \mathbf{p}) \cong -\frac{\omega}{2} \sum_{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_0}{2\pi} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{q_0^2 - v_{\text{F}} q^2 - \Delta^2 - 2\Delta\nu v_{\text{F}} q \sin \frac{\phi - \psi}{2}}{[q_0^2 + v_{\text{F}} q^2 + \Delta^2 + 2\Delta\nu v_{\text{F}} q \sin \frac{\phi - \psi}{2}]^2} V_{ii}^{\text{RPA}}(iq_0, \mathbf{q}). \quad (23)$$

Тройной интеграл в этой формуле логарифмически расходится при $\Delta \rightarrow 0$. Мы будем вычислять его с логарифмической точностью. В этом случае можно положить $\Delta = 0$ в определении поляризационного оператора (19), т.е. считать, что $\Pi_{ij}(iq_0, \mathbf{q})$ сводится к поляризационному оператору однослойного графена. Это заведомо верно при $q_0, v_{\text{F}} q \gtrsim \Delta$. Аналитическое выражение для поляризационного оператора графена известно [13]. В результате мы можем записать

$$\Pi_{ij}(iq_0, \mathbf{q}) \cong -\delta_{ij} \frac{N}{16} \frac{q^2}{\sqrt{q_0^2 + v_{\text{F}}^2 q^2}}. \quad (24)$$

Введем сферические координаты (Q, ϑ, φ) , так что $q_0 = Q \cos \vartheta$, $v_{\text{F}} q_x = Q \sin \vartheta \cos \varphi$ и $v_{\text{F}} q_y = Q \sin \vartheta \sin \varphi$. Подставляя формулу (24) в уравнение (18) и разрешая его относительно V_{ij}^{RPA} , получим, что при $qd \lesssim 1$

$$V_{ij}^{\text{RPA}}(iq_0, \mathbf{q}) \approx \frac{8\lambda v_{\text{F}}^2}{NQ \sin \vartheta} \frac{1}{1 + \lambda \sin \vartheta}, \quad (25)$$

где

$$\lambda = \frac{\pi e^2 N}{4\epsilon v_{\text{F}}} = \frac{\pi \alpha N}{4}. \quad (26)$$

Заметим, что функция $V_{ij}^{\text{RPA}}(iq_0, \mathbf{q})$ не зависит от слоевых индексов. Подставляя выражение (25) в формулу (23), мы производим интегрирование по Q , ϑ и φ . Интегрирование по Q с логарифмической точностью дает множитель $\ln(\Lambda/\Delta)$, где Λ – параметр ультрафиолетового обрезания порядка

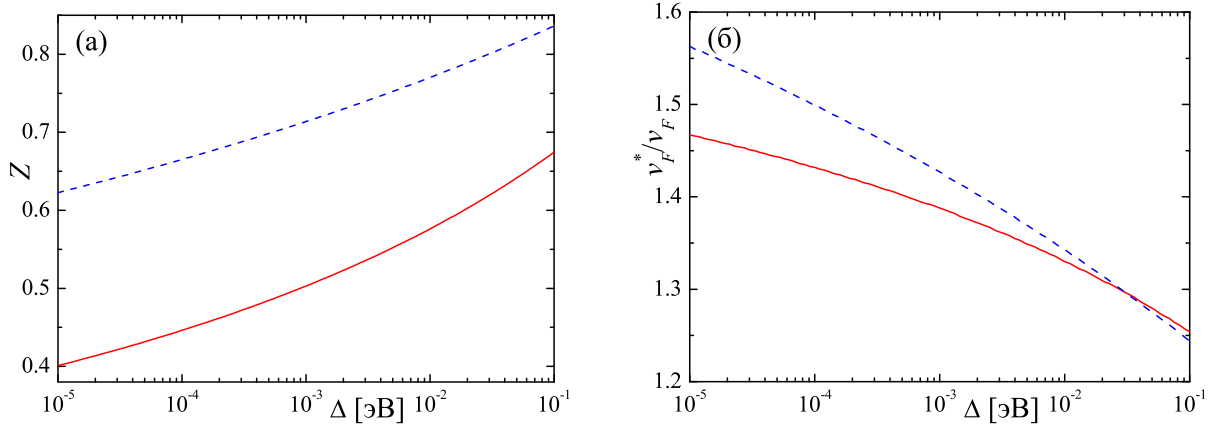


Рисунок 2 – Зависимости квазичастичного вычета Z (а) и перенормированной скорости Ферми v_F^* (б) от затравочного параметра Δ . Сплошные (красные) кривые соответствуют $\epsilon = 1$ ($\lambda \cong 7.87$), тогда как пунктирные (синие) – $\epsilon = 3$ ($\lambda \cong 2.62$).

полуширины зоны графена $\Lambda \sim 3t$. В результате будем иметь

$$\Sigma_{i\alpha,i\alpha}(\omega, \mathbf{p}) \cong -\omega [F_c(\lambda) - F_s(\lambda)] \ln \frac{\Lambda}{\Delta}, \quad (27)$$

где

$$F_c(\lambda) = \frac{2\lambda}{\pi^2 N} \int_0^\pi d\vartheta \frac{\cos^2 \vartheta}{1 + \lambda \sin \vartheta}, \quad F_s(\lambda) = \frac{2\lambda}{\pi^2 N} \int_0^\pi d\vartheta \frac{\sin^2 \vartheta}{1 + \lambda \sin \vartheta}. \quad (28)$$

Интегралы в уравнениях (28) можно взять аналитически. Это дает

$$F_c(\lambda) = \frac{4}{\pi^2 N} \left[\frac{F_0(\lambda) - \frac{\pi}{2}}{\lambda} + 1 \right], \quad F_s(\lambda) = \frac{4}{\pi^2 N} \left[\frac{\frac{\pi}{2} - (1 - \lambda^2)F_0(\lambda)}{\lambda} - 1 \right], \quad (29)$$

где

$$F_0(\lambda) = \begin{cases} \frac{\arccos(\lambda)}{\sqrt{1-\lambda^2}}; & \lambda < 1 \\ \frac{\ln(\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 1})}{\sqrt{\lambda^2 - 1}}; & \lambda > 1 \end{cases}. \quad (30)$$

При $\lambda \ll 1$, будем иметь

$$F_c(\lambda) \approx \frac{\lambda}{\pi N} - \frac{4\lambda^2}{3\pi^2 N}, \quad F_s(\lambda) \approx \frac{\lambda}{\pi N} - \frac{8\lambda^2}{3\pi^2 N}, \quad F_c(\lambda) - F_s(\lambda) \approx \frac{4\lambda^2}{3\pi^2 N}. \quad (31)$$

Когда $\lambda \gg 1$, то

$$F_c(\lambda) \approx \frac{4}{\pi^2 N} [\ln(2\lambda) - 1] + \frac{2}{\pi\lambda N}, \quad F_s(\lambda) \approx \frac{4}{\pi^2 N} - \frac{2}{\pi\lambda N}, \quad F_c(\lambda) - F_s(\lambda) \approx \frac{4}{\pi^2 N} [\ln(2\lambda) - 2] + \frac{4}{\pi\lambda N}. \quad (32)$$

Аналогично вычисляются другие компоненты матрицы $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$. Например, первый не исчезающий член в разложении $\Sigma_{i\alpha,i\beta}(\omega, \mathbf{p})$ по ω и \mathbf{p} при $\alpha \neq \beta$ пропорционален первой степени импульса \mathbf{p} . Результат можно записать в виде

$$\Sigma_{1\alpha,1\beta}(\omega, \mathbf{p}) \cong v_F(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})_{\alpha\beta} F_c(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta}, \quad \Sigma_{2\alpha,2\beta}(\omega, \mathbf{p}) \cong -v_F(\boldsymbol{\sigma}^*\mathbf{p})_{\alpha\beta} F_c(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta}, \quad \alpha \neq \beta. \quad (33)$$

Что касается компонентов $\Sigma_{i\alpha,j\beta}(\omega, \mathbf{p})$ при $i \neq j$, то некоторые из них отличны от нуля уже при $\omega = v_F \mathbf{p} = 0$. Проводя аналогичные вычисления, получим

$$\Sigma_{1\alpha,2\beta}(\omega, \mathbf{p}) \cong \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} F_c(\lambda) + e^{i\psi} F_s(\lambda) \\ e^{i\psi} F_c(\lambda) + e^{i\phi} F_s(\lambda) & 0 \end{pmatrix}_{\alpha\beta} \Delta \ln \frac{\Lambda}{\Delta}, \quad \Sigma_{2\alpha,1\beta}(\omega, \mathbf{p}) = \Sigma_{1\beta,2\alpha}^*(\omega, \mathbf{p}). \quad (34)$$

Все выписанные компоненты $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ представляют собой ведущие слагаемые, расходящиеся при $\Lambda \rightarrow \infty$.

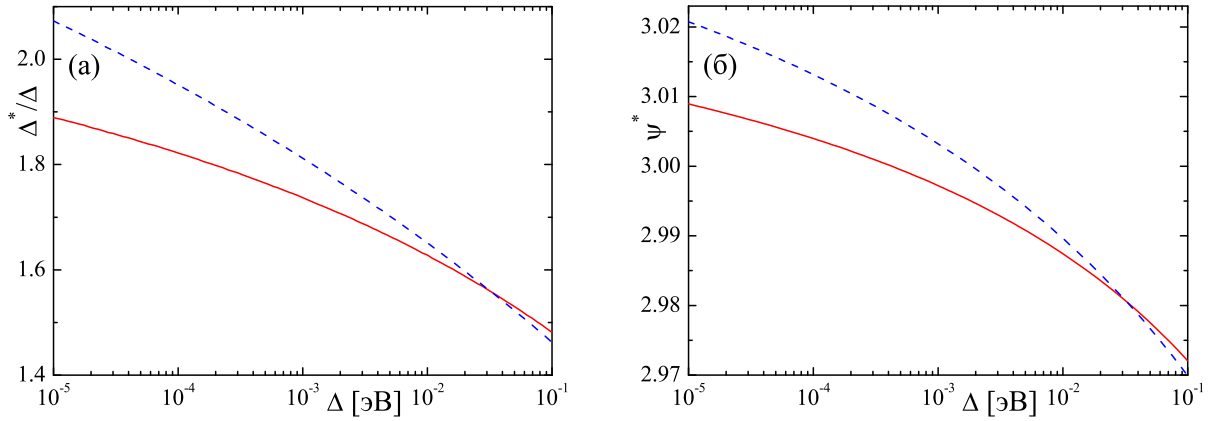


Рисунок 3 – Зависимости Δ^*/Δ (а) и перенормированного параметра ψ^* (б) от затравочного параметра Δ . Сплошные (красные) кривые соответствуют $\epsilon = 1$ ($\lambda \cong 7.87$), тогда как пунктирные (синие) – $\epsilon = 3$ ($\lambda \cong 2.62$).

4. Перенормировка параметров модели

Расчет $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ позволяет получить функцию Грина взаимодействующих электронов

$$\hat{\mathcal{G}}(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{\hat{G}^{-1}(\omega, \mathbf{p}) - \hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})}. \quad (35)$$

Учитывая выражения (27), (33) и (34) для компонентов матрицы $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$, мы можем переписать выражение (35) в виде

$$\hat{\mathcal{G}}(\omega, \mathbf{p}) = \frac{Z}{\omega - \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{p}} - i\hat{\Sigma}''(\omega, \mathbf{p})}, \quad (36)$$

где Z – квазичастичный вычет, равный

$$Z = \frac{1}{1 + [F_c(\lambda) - F_s(\lambda)] \ln \frac{\Lambda}{\Delta}}, \quad (37)$$

$\hat{\Sigma}''(\omega, \mathbf{p})$ – мнимая часть $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$, которую мы здесь не вычисляем, а матрица $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{p}}$ имеет структуру гамильтониана (9) с перенормированными коэффициентами $v_{\mathbf{F}}^*$, Δ^* , ϕ^* и ψ^* . Так, перенормированная скорость Ферми равна

$$v_{\mathbf{F}}^* = v_{\mathbf{F}} Z \left[1 + F_c(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} \right]. \quad (38)$$

Анализируя структуру компонентов матрицы (34), можно показать, что перенормированная Δ^* имеет вид

$$\Delta^* = \Delta Z \sqrt{\left[1 + F_c(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} \right]^2 + F_s(\lambda)^2 \ln^2 \frac{\Lambda}{\Delta} + 2 \left[1 + F_c(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} \right] F_s(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} \cos(\phi - \psi)}, \quad (39)$$

в то время как перенормированные ϕ^* и ψ^* равны

$$\begin{aligned} \phi^* &= \arg \left\{ \cos \phi \left[1 + F_c(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} \right] + \cos \psi F_s(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} + i \left[\sin \phi \left[1 + F_c(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} \right] + \sin \psi F_s(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} \right] \right\}, \\ \psi^* &= \arg \left\{ \cos \psi \left[1 + F_c(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} \right] + \cos \phi F_s(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} + i \left[\sin \psi \left[1 + F_c(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} \right] + \sin \phi F_s(\lambda) \ln \frac{\Lambda}{\Delta} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (40)$$

Проанализируем теперь зависимости перенормированных параметров модели от величины затравочного параметра Δ . Стоит отметить, что каждая сверхструктура характеризуется не только своим Δ , но также и параметрами ϕ и ψ . Мы, однако, будем считать ϕ и ψ фиксированными. Мы положим их равными $\phi = -\psi = -2.89$ радиан, что соответствует сверхструктуре $m_0 = r = 1$ с параметризацией $t_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ из работы [4]. Во всех расчетах мы положим также $\Lambda = 3t = 8.1$ эВ. На рисунке 2 представлены зависимости Z и $v_{\mathbf{F}}^*$ от Δ , построенные при двух значениях диэлектрической проницаемости среды: $\epsilon = 1$ ($\lambda \cong 7.87$) и $\epsilon = 3$ ($\lambda \cong 2.62$). Квазичастичный вычет Z уменьшается с уменьшением Δ , при этом $Z(\epsilon = 1) < Z(\epsilon = 3)$ для любого Δ . Согласно формуле (37), $Z \rightarrow 0$ при $\Delta \rightarrow 0$. Скорость Ферми $v_{\mathbf{F}}^*$, наоборот, растет с уменьшением Δ . При этом оказывается, что $v_{\mathbf{F}}^*(\epsilon = 1)$ может быть как меньше, так и

больше $v_F^*(\epsilon = 3)$ в зависимости от значения Δ . Согласно нашим расчетам, скорость Ферми стремится к конечному значению $v_F^*/v_F \rightarrow F_c(\lambda)/[F_c(\lambda) - F_s(\lambda)]$ при $\Delta \rightarrow 0$. При этом перенормировка оказывается порядка $v_F^*/v_F \sim 1.5$ [см., рис. 2(б)].

На рисунке 3 представлены зависимости Δ^*/Δ , а также параметра ψ^* от Δ . Так же как и для других параметров, мы построили эти зависимости при двух значениях ϵ ($\epsilon = 1$ и $\epsilon = 3$). Отношение Δ^*/Δ растет с уменьшением Δ . Так же как и для скорости Ферми, мы видим, что $\Delta^*(\epsilon = 1)$ может быть как меньше, так и больше $\Delta^*(\epsilon = 3)$ в зависимости от значения Δ . Параметр Δ^* стремится к нулю при $\Delta \rightarrow 0$, т.е. спонтанной щели не возникает, однако отношение Δ^*/Δ стремится к конечному значению при $\Delta \rightarrow 0$. При малых Δ перенормировка щели достигает значений порядка 2. Что касается параметра ψ^* , его перенормировка незначительна при любых Δ , как это следует из рисунка 3(б). Заметим также, что поскольку мы положили $\phi = -\psi$, то согласно формуле (40), мы имеем $\phi^* = -\psi^*$ при любых Δ .

Завершая этот раздел, сравним полученные результаты с экспериментальными данными. Энергетическая щель Δ_g в подкрученном двухслойном графене экспериментально наблюдалась в работе [18]. Угол подкрутки образца составлял величину $\theta \approx 30^\circ$. Величина щели оценивалась из вольт-амперной характеристики и из температурных зависимостей проводимости σ и электронной концентрации n , полученной из холловских измерений. Так, авторы показали, что проводимость и концентрация носителей следуют термоактивационному закону $\ln \sigma, \ln n \propto \Delta_g/T$ с $\Delta_g \approx 80$ мэВ. Согласно таблице 1, углу подкрутки $\theta \approx 30^\circ$ хорошо соответствует сверхструктура $m_0 = 1, r = 2$ ($\theta = 32.20^\circ$). Воспользуемся для $t_\perp(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ параметризацией, предложенной в работе [4]. Тогда для такой сверхструктуры найдем $\Delta = 40$ мэВ, $\phi = -0.8$ и $\psi = -1.3$. Используя формулы (39) и (40), вычислим $\Delta_g = 2\Delta^* |\cos[(\phi^* - \psi^*)/2]| \approx 128$ мэВ (при $\epsilon = 1$). Таким образом, мы получили оценку на щель, которая сопоставима и даже несколько выше экспериментального значения. Отметим, однако, что другие параметризации амплитуд межслоевых перескоков $t_\perp(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ дают меньшее затравочное значение параметра Δ и, как следствие, меньшее значение щели Δ_g [2, 3]. В этом случае роль перенормировки Δ будет более существенной.

5. Обсуждение и выводы

Итак, расчет компонентов матрицы $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ позволяет нам определить, как электрон-электронное взаимодействие перенормирует параметры одночастичного гамильтониана (9). Мы вычисляем собственно-энергетическую функцию $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ в приближении хаотических фаз. Это позволяет нам единым образом рассмотреть, как предел слабой, $\alpha = e^2/(\epsilon v_F) \ll 1$, так и сильной, $\alpha > 1$, связи. Приближение хаотических фаз является неконтролируемым. Однако считается, что оно является хорошим приближением для графеноподобных систем [13]. Это связано с тем, что каждая диаграмма, содержащая электронную петлю, наподобие той, что изображена на рисунке 1(а), входит с весом $N = 4$ по сравнению с другими диаграммами. Таким образом, вычисленные нами функции $F_c(\lambda)$ и $F_s(\lambda)$, входящие в компоненты матрицы $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$, корректно воспроизводят предел $N \gg 1$ вне зависимости от значения α .

Вычисляемая нами матрица $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ определяется диаграммой, изображенной на рисунке 1(б), и аналитически дается интегралами (20). Эти интегралы логарифмически расходятся при $\Lambda/\Delta \rightarrow \infty$. Оставляя только расходящиеся слагаемые, мы определяем перенормировку параметров модели. Полученные результаты можно уточнить, если написать уравнения ренормгруппы на $Z, v_F^*, \Delta^*, \phi^*$ и ψ^* по параметру $l = \ln(\Lambda/E)$. Это будет сделано нами отдельно. Однако имеющиеся в литературе данные позволяют сделать определенные выводы о том, как качественно изменятся полученные нами здесь результаты. Так, решения уравнений ренормгруппы на Z и v_F^* для однослойного графена показывают, что Z стремится к конечному значению $Z_\infty > 0$ при $l \rightarrow \infty$ [13, 14]. Это связано с тем, что перенормированная константа связи $\alpha^* = e^2/(\epsilon v_F^*)$ уменьшается с ростом l . При этом v_F^* расходится [13, 14, 16] (стремится к скорости света, если учесть запаздывание во взаимодействии электронов [19]) при $l \rightarrow \infty$. Таким образом, мы можем ожидать более сильной перенормировки v_F^* и в нашем случае. Мы также можем ожидать, что и Δ^* будет перенормироваться сильнее. Действительно, согласно формуле (39) $\Delta^*/\Delta \rightarrow \infty$, если $Z \rightarrow Z_\infty > 0$ при $\ln(\Lambda/\Delta) \rightarrow \infty$. Это согласуется с расчетами перенормировки щели в графене на подложке из нитрида бора, сделанными в работе [20]. Затравочная щель там образуется из-за муара, возникающего вследствие несовпадения периодов решетки графена и нитрида бора.

В данной работе мы ограничились вычислением действительной части собственно-энергетической функции. Ее мнимая часть также представляет интерес, поскольку она определяет время жизни квазичастиц. Вычисление мнимой части $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ будет сделано нами отдельно. Отметим здесь только, что мнимая часть $\hat{\Sigma}(\omega, \mathbf{p})$ определяется в том числе мнимой частью поляризационного оператора $\hat{\Pi}(\omega, \mathbf{p})$ [15, 21]. При этом на малых ω и \mathbf{p} использование приближения однослойного графена для $\text{Im } \hat{\Pi}(\omega, \mathbf{p})$ будет некорректно, и необходимо будет вычислять поляризационный оператор точно, согласно формуле (19).

Полученные здесь результаты справедливы для сверхструктур с $r \neq 3n$. Как показано, например,

в работах [2–4], структура матрицы межслоевых перескоков \hat{T}_{12} качественно различна для сверхструктур с $r \neq 3n$ и с $r = 3n$. Так, при $r \neq 3n$ матрица \hat{T}_{12} дается выражением (10). В случае же $r = 3n$ будем иметь

$$\hat{T}_{12} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta e^{i\phi} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (41)$$

Одноэлектронный спектр в этом случае будет безщелевой [2–4]. Он будет характеризоваться двумя электронными и двумя дырочными зонами, при этом одна электронная и одна дырочная зоны касаются друг друга в точках Дирака. Благодаря параболической дисперсии этих зон вблизи точек Дирака, плотность состояний на уровне Ферми будет конечной. В этом случае можно ожидать, что электрон-электронное взаимодействие будет открывать щель на уровне Ферми. Влияние электрон-электронного взаимодействия на свойства жидкости Ферми сверхструктур с $r = 3n$ будет рассмотрено нами в отдельной работе.

В заключении скажем, что в данной работе мы рассмотрели вопрос о том, как дальнедействующее кулоновское отталкивание влияет на свойства жидкости Ферми подкрученного двухслойного графена при больших углах подкрутки. Рассматривались только сверхструктуры, для которых характерно наличие щели в спектре в одноэлектронном приближении. Мы показали, что электрон-электронное взаимодействие перенормирует скорость Ферми, а также параметры гамильтониана, описывающие гибридизацию электронов, движущихся в различных слоях двухслойного графена. Мы показали, что взаимодействие не приводит к спонтанному возникновению щели в спектре, однако количественно увеличивает ее значение по отношению к величине, определяемой из одночастичного гамильтониана.

Список литературы

- [1] Electronic properties of graphene-based bilayer systems / AV Rozhkov, AO Sboychakov, AL Rakhmanov, Franco Nori // *Phys. Rep.* — 2016. — Vol. 648. — P. 1–104.
- [2] Mele E. J. Commensuration and interlayer coherence in twisted bilayer graphene // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Apr. — Vol. 81. — P. 161405. —
- [3] Shallcross S., Sharma S., Pankratov O. A. Quantum interference at the twist boundary in graphene // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Aug. — Vol. 101. — P. 056803. —
- [4] Single-electron gap in the spectrum of twisted bilayer graphene / A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, Franco Nori // *Phys. Rev. B.* — 2017. — Jan. — Vol. 95. — P. 045119. —
- [5] Bistritzer R., MacDonald A. H. Moiré bands in twisted double-layer graphene // *Proceedings of the National Academy of Sciences.* — 2011. — Vol. 108, no. 30. — P. 12233. —
- [6] Lopes dos Santos J. M. B., Peres N. M. R., Castro Neto A. H. Continuum model of the twisted graphene bilayer // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Oct. — Vol. 86. — P. 155449. —
- [7] Trambly de Laissardière G., Mayou D., Magaud L. Localization of Dirac electrons in rotated graphene bilayers // *Nano Letters.* — 2010. — Vol. 10, no. 3. — P. 804–808. —
- [8] Electronic spectrum of twisted bilayer graphene / A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, Franco Nori // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Aug. — Vol. 92. — P. 075402. —
- [9] Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices / Yuan Cao, Valla Fatemi, Ahmet Demir et al. // *Nature.* — 2018. — Vol. 556, no. 7699. — P. 80.
- [10] Superconductors, orbital magnets and correlated states in magic-angle bilayer graphene / Xiaobo Lu, Petr Stepanov, Wei Yang et al. // *Nature.* — 2019. — Vol. 574, no. 7780. — P. 653–657.
- [11] Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices / Yuan Cao, Valla Fatemi, Shiang Fang et al. // *Nature.* — 2018. — Vol. 556, no. 7699. — P. 43.
- [12] Many-body effects in twisted bilayer graphene at low twist angles / A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, Franco Nori // *Phys. Rev. B.* — 2019. — Jul. — Vol. 100. — P. 045111.
- [13] Electron-electron interactions in graphene: Current status and perspectives / Valeri N. Kotov, Bruno Uchoa, Vitor M. Pereira et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2012. — Jul. — Vol. 84. — P. 1067–1125. —
- [14] González J., Guinea F., Vozmediano M. A. H. Marginal-Fermi-liquid behavior from two-dimensional Coulomb interaction // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Jan. — Vol. 59. — P. R2474–R2477. —
- [15] Das Sarma S., Hwang E. H., Tse W.-K. Many-body interaction effects in doped and undoped graphene: Fermi liquid versus non-Fermi liquid // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Mar. — Vol. 75. — P. 121406. —

- [16] Son D. T. Quantum critical point in graphene approached in the limit of infinitely strong Coulomb interaction // [Phys. Rev. B](#). — 2007. — Jun. — Vol. 75. — P. 235423. —
- [17] Peskin M. E. An introduction to quantum field theory. — CRC press, 2018.
- [18] Observation of the intrinsic bandgap behaviour in as-grown epitaxial twisted graphene / Jeongho Park, William C. Mitchel, Said Elhamri et al. // [Nat Commun](#). — 2015. — Jan. — Vol. 6, no. 5677. — P. 5677. —
- [19] González J., Guinea F., Vozmediano M. Non-Fermi liquid behavior of electrons in the half-filled honeycomb lattice (a renormalization group approach) // [Nuclear Physics B](#). — 1994. — Vol. 424, no. 3. — P. 595–618. —
- [20] Song J. C. W., Shytov A. V., Levitov L. S. Electron interactions and gap opening in graphene superlattices // [Phys. Rev. Lett.](#) — 2013. — Dec. — Vol. 111. — P. 266801. —
- [21] González J., Guinea F., Vozmediano M. A. H. Unconventional quasiparticle lifetime in graphite // [Phys. Rev. Lett.](#) — 1996. — Oct. — Vol. 77. — P. 3589–3592. —
-

ELECTRON-ELECTRON INTERACTION IN TWISTED BILAYER GRAPHENE AT LARGE TWIST ANGLES: RENORMALIZATION OF FERMI LIQUID PARAMETERS

Sboychakov A.O.^{1*} and Rozhkov A.V.¹

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

* sboycha@mail.ru

Abstract

We study the impact of the electron-electron interaction on the properties of the Fermi-liquid of twisted bilayer graphene. We consider the structures having small enough sizes of the supercell, which corresponds to the large twist angles. In this case, single-particle spectrum has a gap at the Fermi level due to the hybridization of electrons moving in different layers. Electron-electron interaction renormalizes the parameters of the single-particle Hamiltonian. We calculate the quasiparticle residue as well as the renormalized Fermi velocity and the gap as functions of the bare gap. We show, in particular, that that the renormalized gap can be approximately two times larger than the bare one.

Key words: graphene, electronic structure, electron-electron interaction
