

Теория возмущений для гамильтониана, линейного по квазиимпульсу

Л. А. Фальковский

Институт теоретической физики им. Ландау РАН, 119334 Москва, Россия

Институт физики высоких давлений им. Верещагина РАН, 142190 Троицк, Россия

Поступила в редакцию 1 сентября 2011 г.

Предложена теория возмущений, позволяющая учитывать малые члены в многозонном гамильтониане, которые приводят к существенным изменениям типа тригонального искажения ферми-поверхности. Теория похожа на “крестовую технику”. Она сводится к вычислению собственно-энергетических поправок к матричной гриновской функции. Конкретное приложение относится к графиту и графеновому бислою.

Графит и висмут – два полуметалла, на которых легче всего наблюдать типичные для всех металлов явления: магнитооптические [1–9] и магнитотранспортные [10–14]. В последнее время в связи с графеновым бумом к ним вновь возник интерес. Характерной особенностью этих металлов является малый размер ферми-поверхности по крайней мере в двух направлениях зоны Бриллюэна. Поэтому эффективный гамильтониан можно разлагать по соответствующим степеням квазиимпульса \mathbf{k} . При этом сам гамильтониан является матрицей размерности 2×2 для графена и 4×4 для бислоя и графита (по числу атомов в элементарной ячейке). Учет спина удваивает ранг этой матрицы.

Теория электронного энергетического спектра графеноподобных материалов идет от Слончевского, Вейса и МакКлюра [15]. Она содержит несколько констант, представляющих собой интегралы перекрытия. Эта теория хорошо проверена в различных экспериментах [16]. В отсутствие магнитного поля гамильтониан можно диагонализировать, однако в магнитном поле точно это сделать не удается. Предложено несколько различных способов приближенного [8, 17–20], численного [21–25] и квазиклассического [26] квантования. Главная причина трудностей происходит от так называемого тригонального искажения ферми-поверхности (trigonal warping), навязанного тригональной симметрией точки в случае графена или линии в зоне Бриллюэна графита, в окрестности которых располагаются носители – электроны или дырки.

В данной статье излагается теория возмущений, которая позволяет получать довольно простые явные выражения для спектра носителей в магнитном поле. Мы начнем со спектра в отсутствие магнитного поля, выясним причину и характер тригонального искаже-

ния, а затем опишем предлагаемую теорию возмущений.

Для окрестности линии KH зоны Бриллюэна графита будем использовать гамильтониан Слончевского–Вейса в форме [23, 24]

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \tilde{\gamma}_5 & vk_+ & \tilde{\gamma}_1 & \tilde{\gamma}_4 vk_- / \gamma_0 \\ vk_- & \tilde{\gamma}_2 & \tilde{\gamma}_4 vk_- / \gamma_0 & \tilde{\gamma}_3 vk_+ / \gamma_0 \\ \tilde{\gamma}_1 & \tilde{\gamma}_4 vk_+ / \gamma_0 & \tilde{\gamma}_5 & vk_- \\ \tilde{\gamma}_4 vk_+ / \gamma_0 & \tilde{\gamma}_3 vk_- / \gamma_0 & vk_+ & \tilde{\gamma}_2 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

где $k_{\pm} = \mp ik_x - k_y$ – проекции квазиимпульса, а v – параметр скорости в направлении графитовых слоев, $\tilde{\gamma}_j$ – функции проекции k_z в направлении главной оси:

$$\tilde{\gamma}_2 = 2\gamma_2 \cos(2k_z d_0), \tilde{\gamma}_5 = 2\gamma_5 \cos(2k_z d_0) + \Delta, \\ \tilde{\gamma}_i = 2\gamma_i \cos(k_z d_0) \quad (i = 1, 3, 4),$$

$d_0 = 3.35 \text{ \AA}$ – расстояние между слоями в графите. Параметр скорости $v = 1.5a_0\gamma_0 = 10^6 \text{ м/с}$ связан с перекрытием $\gamma_0 \approx 3 \text{ эВ}$ волновых функций ближайших соседей, находящихся в одном слое на расстоянии $a_0 = 1.415 \text{ \AA}$. В бислое в направлении главной оси имеется только один сосед. Поэтому $\tilde{\gamma}_i = \gamma_i$ для $i = 1, 3, 4$, а третья координационная сфера отсутствует, $\tilde{\gamma}_i = 0$ для $i = 2, 5$.

При любом значении квазиимпульса имеется четыре собственных значения энергии. Будем нумеровать их снизу индексом $s = 1, 2, 3, 4$ (см. рис. 1). Для $k_x = k_y = 0$, т. е. на самой линии KH , имеется двукратное вырождение $\varepsilon_2 = \varepsilon_3$, что является следствием симметрии. Мы используем в (1) несколько

Параметры гамильтониана (1), их значения в исходной модели Слончевского–Вейса и числовые значения, полученные в различных экспериментальных работах (в мэВ) [16]

(1)	γ_0	γ_1	γ_2	γ_3	γ_4	γ_5	Δ	ϵ_F
	3050	360	-10.2	270	-150	-1.5	16	-4.1
S^a [15]	γ_0	γ_1	$2\gamma_2$	γ_3	$-\gamma_4$	$2\gamma_5$	$\Delta + 2(\gamma_2 - \gamma_5)$	$2\gamma_2 + \epsilon_F$
M^b [4]	3160	390	-20	276	44	38	8	-24
D^c [3]	3120	380	-21	315	120	-3	-2	-

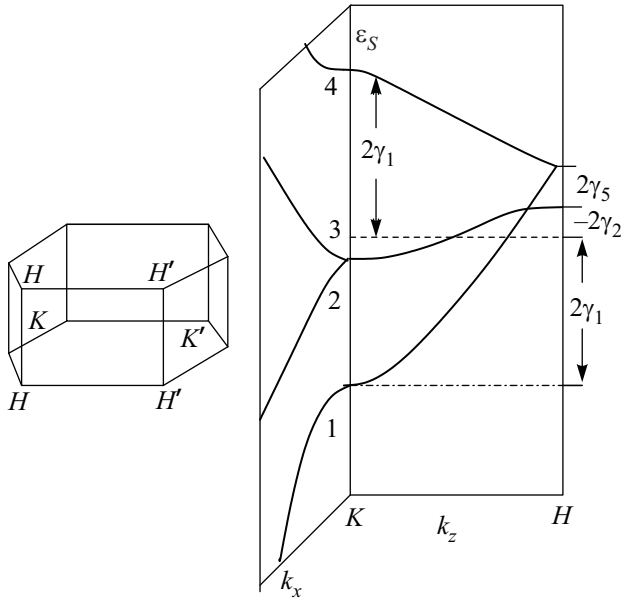


Рис. 1. Зона Бриллюэна и электронный спектр графита

иное представление, чем в работе [15]. Связь соответствующих констант приведена в таблице.

Секулярное уравнение для гамильтониана (1) содержит член третьей степени по энергетической переменной ϵ . В общем случае мы его приводить не будем (и на домашнем компьютере спектр легко находится).

За исключением окрестности точки H , где $k_z d_0 = \pi/2$ и $\tilde{\gamma}_1 = 0$, благодаря относительно большой величине параметра γ_1 расстояние между зонами ϵ_2 и ϵ_3 , которые пересекают ферми-уровень, гораздо меньше, чем от этих зон до ϵ_1 и ϵ_4 . В этой области дисперсия двух близких зон описывается уравнением

$$(vk)^4 [1 - (\tilde{\gamma}_4/\gamma_0)^2] + (vk\tilde{\gamma}_1\tilde{\gamma}_3/\gamma_0)^2 - 2(vk)^3 (\tilde{\gamma}_1\tilde{\gamma}_3/\gamma_0) \sin(3\alpha) = \tilde{\gamma}_1^2 (\epsilon - \tilde{\gamma}_2)^2, \quad (2)$$

где α – азимутальный угол двумерного вектора \mathbf{k} с компонентами k_x, k_y , k – его величина. Отсюда видно, что при $\gamma_3 = 0$ изоэнергетическая поверхность изотропна в плоскости \mathbf{k} . Однако члены с γ_3 благодаря меньшей степени k при них играют по сравнению

с первым членом более существенную роль при малых k . Изоэнергетическая поверхность при параметрах, приведенных в таблице, приобретает вид, показанный на рис. 2. Дисперсия двух близких зон как

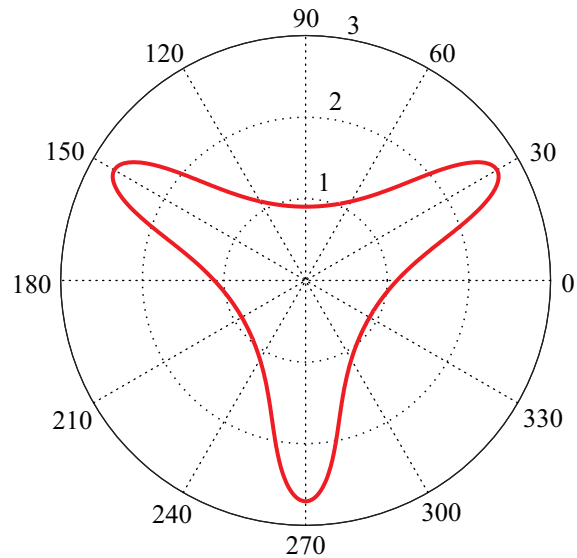


Рис. 2. Сечение ферми-поверхности графита (квазиимпульс k в единицах 10^6 см^{-1}) плоскостью $k_z = 0$

функция величины k при $k_z = 0$ для двух значений полярного угла дана на рис. 3. Уровень Ферми показан штрих-пунктиром. Видно, что размер ферми-поверхности для $\alpha = -\pi/6$ и $\alpha = +\pi/6$ различается в три раза. Во втором случае нижняя зона приобретает минимум при $k \neq 0$. Отсюда ясно, что тригональное искажение γ_3 окажется очень существенным и в слабых магнитных полях для малых значений энергии $\epsilon - \tilde{\gamma}_2$.

В магнитном поле B , параллельном главной оси, проекции квазиимпульса $k_{x,y}$ являются операторами с перестановочным соотношением $\{\hat{k}_+, \hat{k}_-\} = -2e\hbar B/c$. Удобно ввести операторы рождения и уничтожения (a^+, a):

$$\hat{k}_+ = \sqrt{2|e\hbar B/c a}, \quad \hat{k}_- = \sqrt{2|e\hbar B/c a^+}.$$

Будем искать собственные решения нашего матричного уравнения в виде

$$\psi_{sn}^\alpha(x) = \begin{cases} C_{sn}^1 \varphi_{n-1}(x), \\ C_{sn}^2 \varphi_n(x), \\ C_{sn}^3 \varphi_{n-1}(x), \\ C_{sn}^4 \varphi_{n-2}(x), \end{cases} \quad (3)$$

где $\varphi_n(x)$ – ортогональные функции Эрмита с собственным числом Ландау $n \geq 0$. При заданном n состояния нумеруются зонным индексом $s = 1, 2, 3, 4$. Мы пользуемся обозначением $|sn\rangle$ для состояний, по-прежнему отсчитывая s снизу. Для краткости мы будем опускать стандартные экспоненты, появляющиеся в калибровке Ландау, и учитывать вырождение по соответствующей компоненте квазиимпульса лишь в конечных результатах.

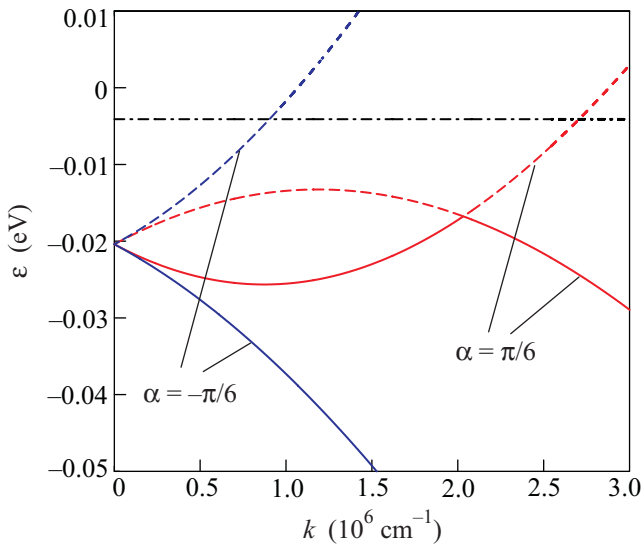


Рис. 3. Зависимости энергии двух близких зон от величины квазиимпульса k для двух значений полярного угла на плоскости $k_z = 0$

Очевидно, что если опустить члены с γ_3 , то каждая строка гамильтониана (1) оказывается пропорциональной определенной функции Эрмита, которую, таким образом, можно сократить. Итак, в отсутствие тригонального искажения приходим к задаче на собственные вектора \mathbf{C}_{sn} и собственные значения:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\gamma}_5 - \varepsilon & \omega_c \sqrt{n} & \tilde{\gamma}_1 & \omega_4 \sqrt{n-1} \\ \omega_c \sqrt{n} & \tilde{\gamma}_2 - \varepsilon & \omega_4 \sqrt{n} & 0 \\ \tilde{\gamma}_1 & \omega_4 \sqrt{n} & \tilde{\gamma}_5 - \varepsilon & \omega_c \sqrt{n-1} \\ \omega_4 \sqrt{n-1} & 0 & \omega_c \sqrt{n-1} & \tilde{\gamma}_2 - \varepsilon \end{pmatrix} \times \begin{cases} C_{sn}^1 \\ C_{sn}^2 \\ C_{sn}^3 \\ C_{sn}^4 \end{cases} = 0, \quad (4)$$

где $\omega_c = v\sqrt{2|e|\hbar B/c}$ и $\omega_4 = \tilde{\gamma}_4 \omega_c / \gamma_0$.

При $n = 0$ собственный вектор имеет только одну ненулевую компоненту, $\mathbf{C}_0 = (0, 1, 0, 0)$, и значение энергии

$$\varepsilon_1(n=0) = \tilde{\gamma}_2, \quad (5)$$

зависящее от k_z и пересекающее уровень Ферми так, что электроны появляются в окрестности точки K (вплоть до уровня Ферми), а дырки – в окрестности точки H , см. рис. 4.

При $n = 1$, как видно из уравнений (4), надо положить четвертую компоненту равной нулю, $C_{s1}^4 = 0$, и из первых трех уравнений определить три уровня. Среди них средний уровень $|21\rangle$ очень близок к $|10\rangle$ и в области k_z , где выполнено условие $\gamma_1 / \cos z \gg \gamma_2$ и где находятся электроны, имеет энергию

$$\varepsilon_2(n=1) = \tilde{\gamma}_2 - 2 \frac{\omega_c^2 \tilde{\gamma}_4}{\tilde{\gamma}_1 \gamma_0}. \quad (6)$$

Для $n \geq 2$ имеется четыре собственных значения при любом k_z . Энергия двух близких уровней с $s = 2, 3$ в области $\gamma_1 / \cos z \gg \gamma_2$, где находятся электроны, равна

$$\varepsilon_{2,3}(n) = \tilde{\gamma}_2 - \frac{\omega_c^2 \tilde{\gamma}_4}{\tilde{\gamma}_1 \gamma_0} (2n-1) \mp \frac{\omega_c^2}{\tilde{\gamma}_1} \sqrt{n(n-1)}. \quad (7)$$

Наиболее простой способ найти поправки к уровням из-за тригонального искажения – воспользоваться аналогом “крестовой техники”, известной по задаче о влиянии дефектов на электронный спектр [27]. Он заключается в отыскании поправки к функции Грина посредством итераций:

$$\mathbf{G}_{m+1}(x, x') = \int dx'' \mathbf{G}_0(x, x'') \mathbf{V}(x'') \mathbf{G}_m(x'', x'), \quad (8)$$

где $\mathbf{G}_0(x, x'')$ – функция нулевого приближения, $\mathbf{G}_m(x'', x')$ – очередная итерация, а возмущение $\mathbf{V}(x)$ имеет в гамильтониане (1) только два матричных элемента, $V^{42} = \omega_c \tilde{\gamma}_3 a^+ / \gamma_0$ и $V^{24} = V^{42*}$.

Функция Грина матричного уравнения выражается через его собственные функции:

$$G_0^{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x') = \sum_{sn} \frac{\psi_{sn}^\alpha(x) \psi_{sn}^{*\beta}(x')}{\varepsilon - \varepsilon_{sn}}, \quad (9)$$

а свертка в (8) проводится по матричным индексам возмущения.

Во втором приближении получаем поправку $\int dx_1 dx_2 G_0^{\alpha 4}(x, x_1) V^{42}(x_1) G_0^{22}(x_1, x_2) V^{24}(x_2) G_0^{4\beta}(x_2, x')$ и еще такое же слагаемое с перестановкой индексов $2 \leftrightarrow 4$. Матричные элементы возмущения V легко

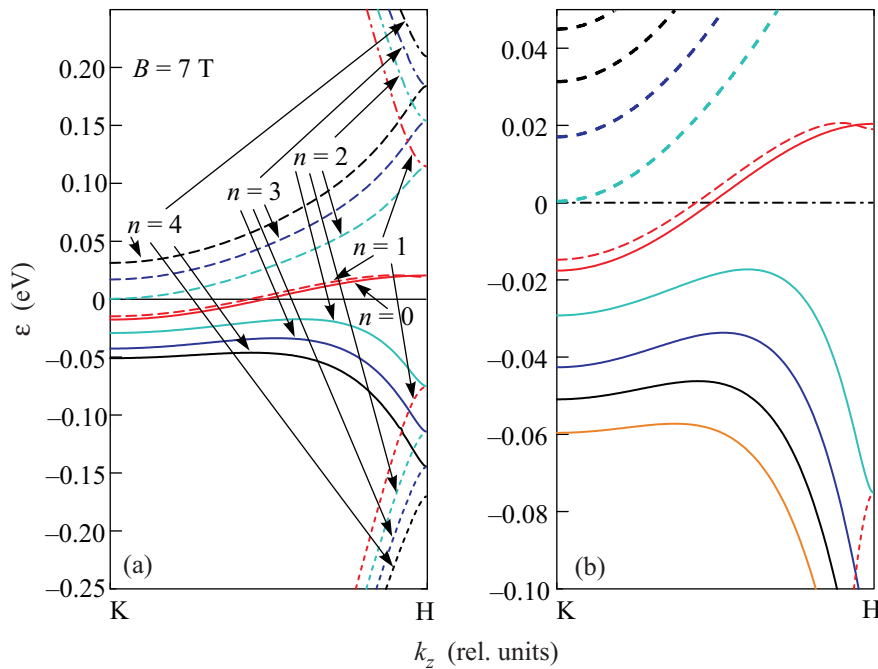


Рис. 4. (Цветной online) Уровни Ландау ε_{sn} для n от 0 до 4 в зонах $s = 1, 2, 3, 4$ (точки, сплошные, штриховые и штрих-пунктирные кривые соответственно) в зависимости от проекции импульса k_z вдоль линии KH зоны Бриллюэна ($K = 0$, $H = \pi/2d_0$) для магнитного поля $B = 7$ Т (а); зонные параметры приведены в таблице. Крупный план для зон $s = 2, 3$ (б)

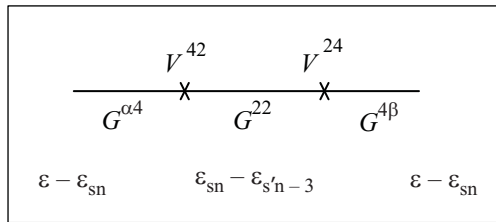


Рис. 5. Диаграмма второго порядка теории возмущений. Указаны знаменатели гриновских функций

вычисляются с помощью функций (9), (3). Для диаграммы, изображенной на рис. 5, мы находим

$$\left(\frac{\omega_c \tilde{\gamma}_3}{\gamma_0}\right)^2 \sum_{s'sn} \frac{(n-2) |C_{sn}^4 C_{s',n-3}^2|^2 \psi_{sn}^\alpha(x) \psi_{s'n}^{*\beta}(x')}{(\varepsilon - \varepsilon_{sn})(\varepsilon - \varepsilon_{s',n-3})(\varepsilon - \varepsilon_{sn})}. \quad (10)$$

Эта поправка велика вблизи полюсов функции Грина. Поэтому для ε , близкого к ε_{sn} , мы можем подставить ε_{sn} вместо ε во втором множителе знаменателя. Таким образом, гриновская функция в целом (вместе с поправкой) имеет структуру

$$\frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{sn}} + \frac{\delta}{(\varepsilon - \varepsilon_{sn})^2},$$

что с точностью до членов второго порядка по δ можно переписать как

$$\frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{sn} - \delta}.$$

Получившееся выражение (10) позволяет записать поправку к собственному значению:

$$\delta\varepsilon_s(n) = \left(\frac{\omega_c \tilde{\gamma}_3}{\gamma_0}\right)^2 \sum_{s'} \left[\frac{(n-2) |C_{sn}^4 C_{s',n-3}^2|^2}{\varepsilon_s(n) - \varepsilon_{s'}(n-3)} + \frac{(n+1) |C_{sn}^2 C_{s',n+3}^4|^2}{\varepsilon_s(n) - \varepsilon_{s'}(n+3)} \right], \quad (11)$$

где члены с $n-3 < 0$ должны быть опущены.

В действительности приведенный вывод является иллюстрацией суммирования геометрической прогрессии, составленной из наиболее опасных диаграмм во всех порядках теории возмущений для электронной собственной энергии. Формула (11) содержит параметр данной теории возмущений. Заметим, что расстояние между невозмущенными уровнями можно оценить, например, с помощью (7). В результате находим этот безразмерный параметр:

$$(\tilde{\gamma}_3 \tilde{\gamma}_1 / \gamma_0 \omega_c)^2,$$

который оказывается меньше единицы в полях $B \gg \gg 1$ Т.

Выпишем еще уровень $|10\rangle$ вместе с поправкой:

$$\varepsilon_1(n=0) = \tilde{\gamma}_2 + \left(\frac{\omega_c \tilde{\gamma}_3}{\gamma_0}\right)^2 \sum_{s'} \frac{|C_{s'3}^4|^2}{\tilde{\gamma}_2 - \varepsilon_{s'}(3)}. \quad (12)$$

Зависимость уровней от магнитного поля приведена на рис. 6. Сравнение показывает, что наши вы-

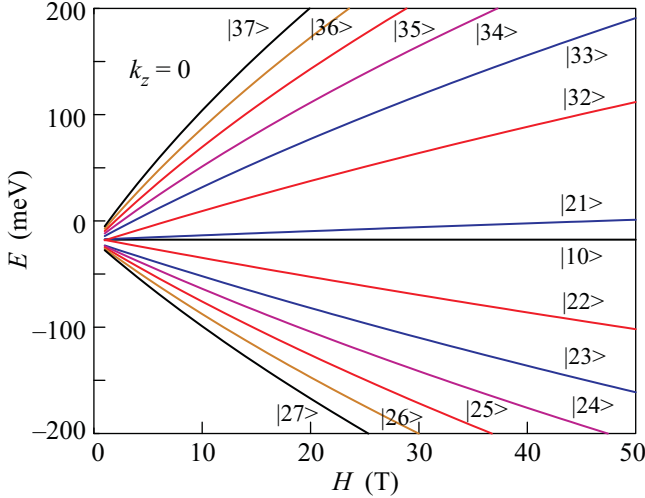


Рис. 6. Уровни в двух ближайших к энергии Ферми зонах графита при $k_z = 0$ в магнитном поле (обозначение $|sn\rangle$: n – индекс Ландау, s – номер уровня, отсчитываемый снизу, при данном n)

ражения для уровней, (11) и (12), дают те же результаты, что и численный метод обрезания матрицы бесконечного ранга [22].

Заметим, что полученные выражения применимы и к графеновому бислою. Надо лишь положить $\gamma_2 = \gamma_5 = 0$ и $\tilde{\gamma}_i = \gamma_i$ для $i = 1, 3, 4$.

В заключение отметим, что в работе предложена теория возмущений, позволяющая находить поправки к электронным уровням за счет малых членов в матричном многозонном гамильтониане, в частности возникающие из-за так называемых тригональных искажений в графите и графеновом бислое. Оказалось, что тригональное искажение можно рассматривать с помощью данной теории возмущений в полях, гораздо больших 1 Т.

Автор признателен А. Кузменко и J. Levallois за полезные дискуссии и за предоставленную возможность ознакомления с их экспериментальными результатами до опубликования. Работа поддержана РФФИ (грант # 10-02-00193-а), грантом SCOPES IZ73Z0_128026 of the Swiss NSF и программой FP7-PEOPLE-2009 (Proposal # 246937). Автор благодарен также Институту Макса Планка сложных систем в Дрездене за гостеприимство, проявленное весной 2011 года.

1. H. Suematsu and S.-i. Tanuma, J. Phys. Soc. Japan **33**, 1619 (1972).
2. W. W. Toy, M. S. Dresselhaus, and G. Dresselhaus, Phys. Rev. B **15**, 4077 (1977).
3. R. E. Doezema, W. R. Datars, H. Schaber, and A. Van Schyndel, Phys. Rev. B **19**, 4224 (1979).
4. E. Mendez, A. Misu, and M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. B **21**, 827 (1980).
5. Z. Q. Li, S.-W. Tsai, W. J. Padilla et al., Phys. Rev. B **74**, 195404 (2006).
6. M. Orlita, C. Faugeras, G. Martinez et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 136403 (2008).
7. M. Orlita, C. Faugeras, J. M. Schneider et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 166401 (2009).
8. M. Orlita and M. Potemski, Semicond. Sci. Technol. **25**, 063001 (2010).
9. I. Crassee, J. Levallois, A. L. Walter et al., Nature Physics **7**, 48 (2011).
10. Y. Kopelevich, J. H. S. Torres, R. R. da Silva et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 156402 (2003).
11. I. A. Luk'yanchuk and Y. Kopelevich, Phys. Rev. Lett. **97**, 256801 (2006).
12. Z. Jiang, Y. Zhang, H. L. Stormer, and P. Kim, Phys. Rev. Lett. **99**, 106802 (2007).
13. J. M. Schneider, M. Orlita, M. Potemski, and D. K. Maude, Phys. Rev. Lett. **102**, 166403 (2009).
14. A. N. Ramanayaka and R. G. Mani, Phys. Rev. B **82**, 165327 (2010).
15. J. W. McClure, Phys. Rev. **108**, 612 (1957); J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, Phys. Rev. **109**, 272 (1958).
16. N. B. Brandt, S. M. Chudinov, and Ya. G. Ponomarev, *Semimetals I. Graphite and its compounds*, Elsevier, Amsterdam, 1988.
17. L. A. Falkovsky, Phys. Rev. B **82**, 073103 (2010).
18. G. Li and E. Y. Andrei, Nature Phys. **3**, 623 (2007).
19. K.-C. Chuang, A. M. R. Baker, and R. J. Nicholas, Phys. Rev. B **80**, 161410(R) (2009).
20. L. M. Zhang, Z. Q. Li, D. N. Basov et al., Phys. Rev. B **78**, 235408 (2008).
21. H. Ushio, T. Uda, and Y. Uemura, J. Phys. Soc. Japan, **33**, 1551 (1972).
22. K. Nakao, J. Phys. Soc. Japan **40**, 761 (1976).
23. B. Partoens and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **74**, 075404 (2006).
24. A. Grüneis, C. Attaccalite, L. Wirtz et al., Phys. Rev. B **78**, 205425 (2008).
25. A. B. Kuzmenko, I. Crassee, D. van der Marel et al., Phys. Rev. B **80**, 165406 (2009).
26. G. Dresselhaus, Phys. Rev. B **10**, 3602 (1974).
27. A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski, *Methods of quantum field theory in statistical physics*, Dover Publications, N.Y.