

# О квантовых осцилляциях в перестраиваемом бислое графена

З. З. Алисултанов<sup>1)</sup>

Институт общей физики им. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

Институт физики им. Амирханова ДНЦ РАН, 367003 Махачкала, Россия

Дагестанский государственный университет, 367000 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 6 апреля 2016 г.

После переработки 1 июня 2016 г.

В настоящей работе исследуются квантовые магнитные осцилляции плотности состояний слабо-допированного бислое графена в присутствии напряжения на затворе. Показано, что в спектре осцилляций имеются дополнительные пики, когда химический потенциал расположен в области инвертированной (за счет напряжения на затворе) части энергетического спектра. Из-за инвертированной зонной структуры квантовые осцилляции существуют и в недопированном графене, когда химический потенциал находится внутри запрещенной щели. Дается четкая физическая интерпретация полученных результатов.

DOI: 10.7868/S0370274X16150091

**1. Введение.** Квантовые магнитные осцилляции являются одним из основных методов исследования электронного спектра металлов и полупроводников [1]. Эти осцилляции связаны с квантованием энергии носителей в магнитном поле (квантование Ландау). В случае, когда поверхность постоянной энергии представляет собой замкнутую орбиту в импульсном пространстве, квазиклассическое условие квантования (условие Лифшица–Онсагера) в общем виде можно записать как [2–5]

$$A(\varepsilon) = \frac{2\pi\hbar e H}{c} \left( n + \frac{1}{2} - \frac{\gamma_B(\varepsilon)}{2\pi} \right), \quad (1)$$

где  $A(\varepsilon)$  – площадь сечения поверхности  $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon$ ,  $\gamma_B(\varepsilon)$  – фаза Берри [6, 7], которая в общем случае зависит от энергии,  $m$  – масса электрона,  $n \in \mathbb{N}$ .

В металлах пересечение уровней Ландау с химическим потенциалом приводит к осцилляциям плотности состояний (рис. 1а), а следовательно, и всех термодинамических величин. Период этих осцилляций определяется из условия пересечения двух последовательных уровней Ландау с химическим потенциалом:  $\Delta(1/H) = 2\pi\hbar e/A(\mu)c$ . Недавние исследования квантовых осцилляций в диэлектриках [8–10] привели к значительному продвижению в понимании природы этого явления. Было показано [10], что квантовые осцилляции плотности состояний существуют в объеме (диэлектрической фазе) топологических диэлектриков, что противоречит существующим представлениям.

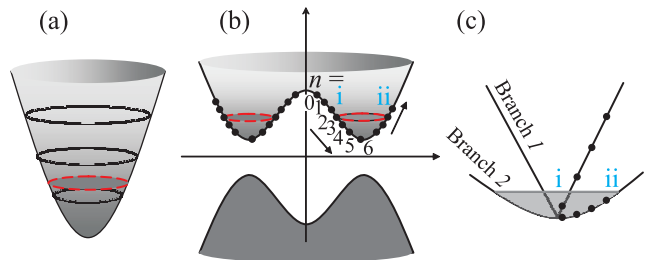


Рис. 1. (Цветной онлайн) Демонстрация пересечений уровней Ландау с химическим потенциалом в различных электронных системах. (а) – Металл с параболическим электронным спектром. (б) – Электронная система с инвертированной зонной структурой, в частности, бислое графена под напряжением на затворе. (с) – Электронная система с двумя ветвями в спектре вблизи химического потенциала. Красная пунктирная окружность обозначает химический потенциал (а, б)

В топологических диэлектриках, в отличие от обычных диэлектриков, пересечение уровней Ландау с химическим потенциалом достигается за счет инвертированной зонной структуры этих материалов (подробности см. в [10]). Последнее существенно влияет и на температурную зависимость этих осцилляций, которая оказалась сильно отличной от той, что дает теория Лифшица–Косевича [10].

В настоящей работе мы исследуем квантовые осцилляции плотности состояний в слабо-допированном бислое графена в присутствии электрического напряжения на затворе. Последнее

<sup>1)</sup>e-mail: zaur0102@gmail.com

деформирует энергетический спектр бислоя к т.н. форме “mexican hat” (рис. 1b). Такая форма спектра приводит к аномальным осцилляциям при слабом допировании. Именно, появляются дополнительные пики осцилляций, отсутствующие в металлах и других электронных системах с прямой зонной структурой, в том числе и бислое графена без напряжения на затворе. В конце мы демонстрируем, что предсказанные недавно квантовые осцилляции в топологических изоляторах возможны и в недопированном бислое графена при наличии напряжения на затворе. Последний, в отличие от топологических изоляторов, является чистым диэлектриком без каких-либо краевых металлических состояний.

Уровни Ландау и квантовые осцилляции в бислое графена исследовались в [11–13]. Во всех этих работах рассматриваются режимы, при которых химический потенциал больше потенциала на затворе. Таким образом, в этих работах не удалось обнаружить некоторые аномалии в спектре осцилляций. В настоящей работе мы рассматриваем случай, когда  $\mu < U$ . Из-за немоности спектра это условие еще не означает, что химический потенциал находится внутри щели. Это условие соответствует слабодопированному бислою. Здесь мы сообщаем о некоторых аномалиях, возникающих в таком режиме. Наконец, в настоящей работе мы исследуем абсолютно новый случай – квантовые осцилляции в недопированном бислое графена при наличии напряжения на затворе. Форма спектра в виде “mexican hat” приводит к тому, что квантовые осцилляции возможны и при отсутствии свободных носителей, т.е. в режиме диэлектрической фазы. Этот тип осцилляций обсуждался недавно для топологических изоляторов [10], и оно существенно дополняет имеющиеся представления о квантовых осцилляциях.

Прежде чем переходить к конкретным расчетам, приведем качественное описание эффекта. Этот эффект демонстрируется на рис. 1b. В отличие от металлов (рис. 1a) в случае бислоя графена в присутствии напряжения на затворе один и тот же уровень Ландау пересекается с химическим потенциалом дважды (точки  $i$  и  $ii$  на рис. 1b). Соответственно, каждый уровень Ландау даст по две осцилляции, что скажется на общем осцилляционном спектре. Найдем связь между значениями магнитного поля, при которых произвольный уровень Ландау пересекается с химическим потенциалом в точках  $i$  и  $ii$ . Поскольку в этом случае точки  $i$  и  $ii$  соответствуют одним и тем же значениям энергии и номеру уровня Ландау, но разным площадям  $A$ , то из (1) получаем

$$\frac{A_i}{H_i} - \frac{A_{ii}}{H_{ii}} = \frac{\hbar e}{c} (\gamma_{B_{ii}} - \gamma_{B_i}). \quad (2)$$

Последний вопрос можно поставить и по-другому. Пересечения химического потенциала уровнями Ландау в точках  $i$  и  $ii$  можно рассматривать отдельно. Тогда для соответствующих периодов осцилляций получим  $\Delta_i(1/H) = 2\pi\hbar e/A_i(\mu)c$  и  $\Delta_{ii}(1/H) = 2\pi\hbar e/A_{ii}(\mu)c$ .

Наконец отметим, что аналогичные дополнительные пики осцилляций появятся в электронной системе при наличии нескольких ветвей спектра вблизи химического потенциала (рис. 1c). Примером такой электронной системы может служить  $N$ -слойный графен ( $N > 2$ ) с берналловской упаковкой слоев. Но в этом случае соответствующие вклады представляют собой просто сумму независимых вкладов отдельных ветвей. В то же время, в системах со спектром типа, указанном на рис. 1b, дополнительные вклады возникают от одной ветви. Однако ситуация, изображенная на рис. 1c, также представляет определенный интерес. В этой связи следует отметить неправильный вывод работы [10], где, в частности, рассматривались квантовые осцилляции в 2D полуметалле. Согласно [10], результирующие квантовые осцилляции от двух разных (с различными массами носителей) ветвей спектра являются абсолютно периодическими (см. рис. 2c работы [10]). В то же время характер результирующих осцилляций, пропорциональных, очевидно, сумме  $\cos(A_1(\mu)c/\hbar eH) + \cos(A_2(\mu)c/\hbar eH)$ , сильно зависит от соотношения между  $A_1$  и  $A_2$ .

**Уровни Ландау в бислое графена.** Электронный спектр бислоя графена подробно исследовался в работах [14, 15]. В этих работах были рассмотрены случаи нарушения как межподрешеточной, так и межслойной (за счет напряжения на затворе) эквивалентностей. Гамильтониан бислоя графена во внешнем поперечном электрическом поле в приближении сильной связи записывается так [14–18]

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} U & f(\mathbf{k}) & 0 & t_{\perp} \\ f^*(\mathbf{k}) & U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -U & f(\mathbf{k}) \\ t_{\perp} & 0 & f^*\mathbf{k} & -U \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где  $f(\mathbf{k}) = \sum_j t e^{i\mathbf{k}\delta_j}$ , а  $\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3})$ ,  $\delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3})$ ,  $\delta_3 = \frac{a}{2}(-1, 0)$  есть векторы расстояний между ближайшими соседними атомами,  $a \approx 1.42 \text{ \AA}$  есть расстояние между ближайшими атомами углерода, величина  $U$  обусловлена переходом заряда с одного слоя на другой и отлична от нуля только при на-

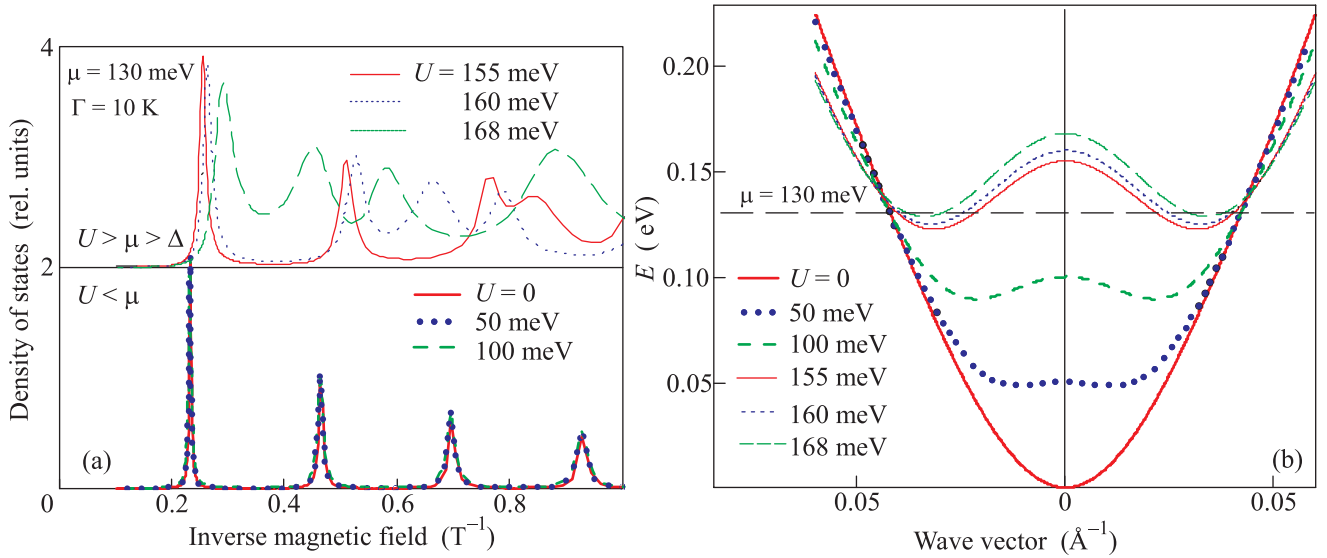


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Квантовые осцилляции плотности состояний. Для наглядности квантовые осцилляции при  $U > \mu > \Delta$  сдвинуты на две единицы вверх. (b) – Энергетический спектр бислоя графена при различных значениях  $U$ . Энергетические спектры приведены для демонстрации того, что число дополнительных пиков тем больше, чем ближе химический потенциал к  $\Delta$

личии напряжения на затворе,  $t_{\perp}$  есть энергия перескока между слоями. Вблизи точки Дирака с координатами  $\mathbf{K} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$  для энергетического спектра получаем:  $f(\mathbf{k}) = v_F(ip_x - p_y)$ , где  $\mathbf{p} = \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{K})$ ,  $v_F = 3ta/2\hbar$  – скорость Ферми для электронов графена. Далее ограничимся рассмотрением энергий  $\varepsilon < t_{\perp}$ . Для этих энергий гамильтониан (3) дает следующее выражение для спектра бислоя

$$E_p = \pm \sqrt{U^2 + v_F^2 p^2 + \frac{t_{\perp}^2}{2}} - \sqrt{(t_{\perp}^2 + 4U^2)v_F^2 p^2 + \frac{t_{\perp}^4}{4}}. \quad (4)$$

Форма зависимости энергии от импульса (4) показана на рис. 1b. Квазиклассическое квантование Ландау в бислое графена рассмотрено в работе [2]. Из-за неоднозначности спектра (4) для энергий  $E_p < U$  необходимо отдельно рассматривать два участка спектра: 1)  $0 < p < p_0$  и 2)  $p > p_0$ , где  $p_0 \neq 0$  определяется из условия  $\partial\varepsilon/\partial p|_{p=p_0} = 0$ , которое является также условием определения ширины запрещенной щели. Для  $p_0$  получаем  $v_F^2 p_0^2 = 2U^2(t_{\perp}^2 + 2U^2)/(t_{\perp}^2 + 4U^2)$ .

Из (4) получаем

$$P^2 = \frac{1}{v_F^2} \left( U^2 + \varepsilon^2 \pm \sqrt{(4U^2 + t_{\perp}^2)\varepsilon^2 - t_{\perp}^2 U^2} \right), \quad (5)$$

где знак “–” соответствует области  $0 < p < p_0$ , где энергия меняется от  $\varepsilon_{k_0} = \Delta$  ( $\Delta = t_{\perp}U/\sqrt{t_{\perp}^2 + 4U^2}$ )

до  $U$ , знак “+” соответствует области  $p > p_0$ , причем энергия меняется от  $\Delta$  до  $t_{\perp}$ . Таким образом, имеем

$$A_1(\varepsilon) = \frac{\pi}{v_F^2} \left( U^2 + \varepsilon^2 - \sqrt{(4U^2 + t_{\perp}^2)\varepsilon^2 - t_{\perp}^2 U^2} \right), \quad (6)$$

$$0 < p < p_0,$$

$$A_2(\varepsilon) = \frac{\pi}{v_F^2} \left( U^2 + \varepsilon^2 + \sqrt{(4U^2 + t_{\perp}^2)\varepsilon^2 - t_{\perp}^2 U^2} \right), \quad (7)$$

$$p > p_0.$$

Фаза Берри бислоя графена была подробно исследована в [2]. Согласно этой работе, для энергий  $E_p < U$  фаза Берри равна  $\pi$ . В то же время, для энергий  $E_p > U$  эта фаза является следующей функцией энергии

$$\gamma_B(\varepsilon) = \frac{\varepsilon U}{\sqrt{(4U^2 + t_{\perp}^2)\varepsilon^2 - t_{\perp}^2 U^2}}. \quad (8)$$

Итак, для интересующей нас области энергии  $E_p < U$  квазиклассические условия квантования имеют вид

$$A(\varepsilon) = \frac{2\pi\hbar e H}{c} n, \quad (9)$$

что дает следующее выражение для уровней Ландау

$$\varepsilon_n = \text{sign}(n) \times \sqrt{U^2 + \hbar^2 \omega_c^2 |n| + \frac{t_{\perp}^2}{2}} - \sqrt{(t_{\perp}^2 + 4U^2)\hbar^2 \omega_c^2 |n| + \frac{t_{\perp}^4}{4}}, \quad (10)$$

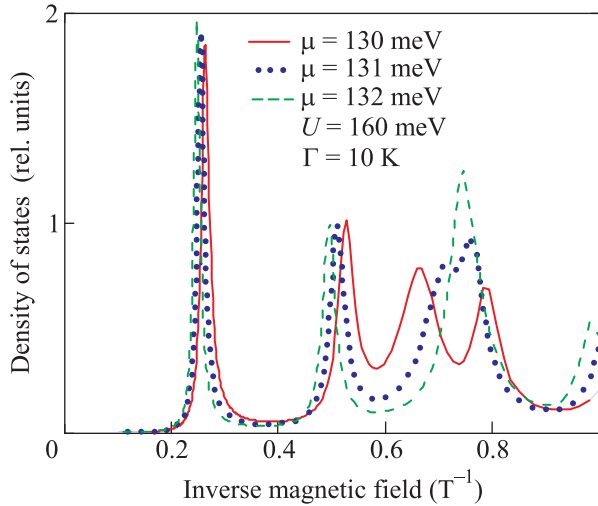


Рис. 3. (Цветной онлайн) Квантовые осцилляции плотности состояний при различных, но близких значениях химического потенциала  $U > \mu > \Delta$

где  $\omega_c = \sqrt{2}v_F\sqrt{eH/\hbar c}$ . Легко получить, что энергии  $\Delta$  соответствует уровень Ландау

$$n_0 = \frac{2U^2 t_{\perp}^2 + 2U^2}{\hbar^2\omega_c^2 t_{\perp}^2 + 4U^2}. \quad (11)$$

**Квантовые осцилляции.** Квантовые осцилляции термодинамических величин (намагниченности в эффекте де Гааза ван Альфена и проводимости в эффекте Шубникова де Гааза) обусловлены осцилляциями плотности состояний вблизи химического потенциала. Плотность состояний при конечной температуре определяется как

$$\rho_T(\mu) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\partial f(\varepsilon - \mu)}{\partial \mu} \rho(\varepsilon), \quad (12)$$

где  $f(\varepsilon - \mu)$  есть функция распределения Ферми-Дирака,  $\rho(\varepsilon)$  есть одночастичная плотность состояний при  $T = 0$

$$\rho(\varepsilon) = \pi^{-1} \text{Im} G(\varepsilon) = \pi^{-1} N_0 \sum_n \frac{\Gamma}{(\varepsilon - \varepsilon_n)^2 + \Gamma^2}, \quad (13)$$

где  $\Gamma$  есть ширина уровней Ландау, связанная с рассеянием на примесях,  $N_0 = eHS/\pi\hbar c$  есть степень вырождения уровней Ландау. На рис. 2а приведены осцилляции плотности состояний и электронные спектры бислоя при различных значениях напряжения на затворе и нулевой температуре. При  $\mu > U$  мы имеем осцилляции, аналогичные осцилляциям в обычных металлах. Период этих осцилляций практически не зависит от  $U$ . Однако при  $U > \mu$

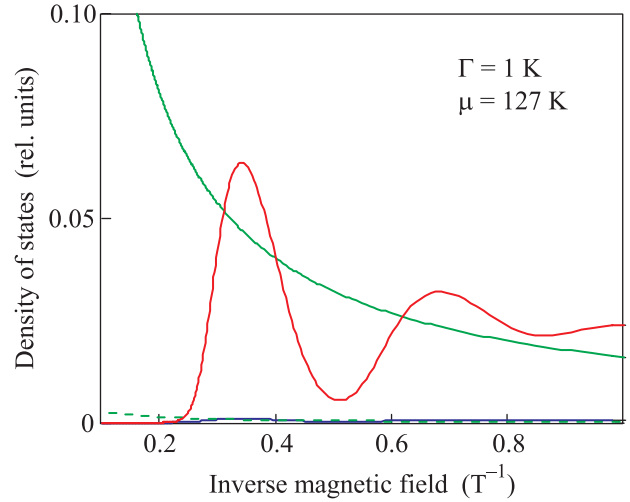


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость плотности состояний от обратного магнитного поля в бислое графена (красная и синяя сплошные линии) с  $\Delta = 130$  мэВ и обычном полупроводнике (сплошная и пунктирная зеленые линии) с запрещенной зоной 130 мэВ. Сплошная синяя линия соответствует бислою графена при  $T = 0$ , а сплошная красная линия – бислою графена при  $T = 10$  К. Пунктирная зеленая линия соответствует полупроводнику при  $T = 0$ , сплошная зеленая линия – полупроводнику при  $T = 10$  К. Как видно из рисунка, при отличной от нуля температуре в бислое имеются осцилляции плотности состояний, несмотря на то, что химический потенциал  $\mu = 127$  мэВ находится внутри запрещенной щели. Незначительные отклонения плотности состояний от нуля при  $T = 0$  связаны с конечной шириной  $\Gamma$  уровней Ландау

в спектре осцилляций начинают возникать дополнительные пики. Природа этих пиков была объяснена во введении. Число пиков тем больше, чем ближе химический потенциал к  $\Delta$  (рис. 2б). На рис. 3 приведены осцилляции плотности состояний при различных, но очень близких значениях химического потенциала. Как видно из рис. 3, осцилляции очень чувствительны к изменениям химического потенциала.

Далее интересно отметить следующее. В случае недопированного бислоя графена химический потенциал находится внутри запрещенной щели. В этом случае при ненулевой температуре также возможны квантовые осцилляции, о природе которых сообщается в работе [10]. В [10] такие осцилляции были рассмотрены в узкощелевом топологическом изоляторе, в котором, в отличие от бислоя графена, объемная диэлектрическая фаза будет замаскирована поверхностными металлическими состояниями. В этом смысле, для наблюдения квантовых осцилляций в диэлектриках бислоя графена под напряжением на затворе является более удобной системой, чем уз-

кошелевой топологический изолятор. Сказанное демонстрируется на рис. 4.

**Заключение.** Отметим, что представляет интерес рассмотрение более точной задачи, когда будут учитываться все значения энергии и обе ветви спектра бислоя. Кроме того, в более строгой теории должно учитываться зеемановское расщепление, которым мы здесь пренебрегли. Однако, очевидно, что учет этих факторов не будет затрагивать качественную сторону рассмотренных здесь эффектов.

Работа поддержана грантами: президента РФ МК-4471.2015.2, РФФИ # 15-02-03311а, РНФ МКН-15-19-10049, а также проектом # 3.1262.2014 Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности. Автор искренне благодарен фонду Дмитрия Зимина “Династия” за финансовую поддержку. Автор благодарен проф. L. Zhang за обсуждение работы.

1. D. Shoenberg, *Magnetic oscillations in metals*, Cambridge University Press (1984).
2. A. Yu. Ozerin and L. A. Falkovsky, Phys. Rev. B **85**, 205143 (2012).
3. З.З. Алисултанов, Письма в ЖЭТФ **99**(4), 258 (2014).
4. Z. Z. Alisultanov, Phys. Lett. A **378**(30–31), 2329 (2014).
5. З.З. Алисултанов, Письма в ЖЭТФ **99**(12), 813 (2014).
6. L. A. Falkovsky, ZhETF **49**, 609 (1965).
7. M. V. Berry, Proc. R. Soc. Lond. A **392**, 45 (1984).
8. B. S. Tan, Y.-T. Hsu, B. Zeng et al. (Collaboration), Science **349**, 287 (2015).
9. J. Knolle and N. R. Cooper, Phys. Rev. Lett. **115**, 146401 (2015).
10. L. Zhang, X.-Y. Song, and F. Wang, Phys. Rev. Lett. **116**, 046404 (2016).
11. J. M. Pereira, Jr., F. M. Peeters, and P. Vasilopoulos, Phys. Rev. B **76**, 115419 (2007).
12. L. M. Zhang, M. M. Fogler, and D. P. Arovas, Phys. Rev. B **84**, 075451 (2011).
13. F. Mireles and J. Schliemann, New J. Phys. **14**, 093026 (2012).
14. M. Mucha-Kruczynski, E. McCann, and V. I. Fal'ko, Semicond. Sci. Technol. **25**, 033001 (2010).
15. E. McCann and M. Koshino, Rep. Prog. Phys. **76**, 056503 (2013).
16. M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge University Press, N.Y. (2012), 366 p.
17. З.З. Алисултанов, ЖЭТФ **146**(2), 340 (2014).
18. З.З. Алисултанов, ЖЭТФ **149**(2), 393 (2016).