Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 10, с. 693 – 699

Фазовое расслоение в состоянии с волной спиновой плотности в подкрученном двухслойном графене при магическом угле подкрутки

А. О. Сбойчаков[+1)], *А. В. Рожков*[+*], *К. И. Кугель*[+], *А. Л. Рахманов*[+]

[+]*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия*

[*]*Сколковский институт науки и технологии, Сколковский центр инноваций, 143026 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 21 октября 2020 г.
После переработки 21 октября 2020 г.
Принята к публикации 22 октября 2020 г.

В работе теоретически исследуется подкрученный двухслойный графен при так называемом магическом угле подкрутки $\theta \sim 1^\circ$. Без учета взаимодействия рассматриваемая система характеризуется наличием четырех почти вырожденных плоских зон вблизи уровня Ферми. Электрон-электронное взаимодействие снимает данное вырождение и стабилизирует некий параметр порядка в системе. Мы предполагаем, что возникающий параметр порядка является волной спиновой плотности. В работе исследуется эволюция состояния с волной спиновой плотности при допировании. Мы показываем, что в области концентраций, в которой существует рассматриваемый параметр порядка, однородное состояние системы может быть неустойчиво по отношению к фазовому расслоению. А именно, зависимость химпотенциала от допирования немонотонна, что согласуется с недавними экспериментами. Фазы в неоднородном состоянии характеризуются четным числом ($\nu = 0, \pm 2, \pm 4$) электронов, приходящихся на одну сверхячейку. Это позволяет объяснить некоторые особенности поведения проводимости системы с допированием.

DOI: 10.31857/S1234567820220115

Введение. Явление электронного фазового расслоения присуще множеству соединений. К таковым прежде всего относятся системы с сильными электронными корреляциями, в которых потенциальная энергия взаимодействия превосходит кинетическую энергию электронов [1]. Примером таких систем можно назвать манганиты [2], кобальтиты [3], купраты [4]. Во всех вышеперечисленных соединениях электронное фазовое расслоение наблюдается экспериментально. Недавно нами было показано, что электронное фазовое расслоение может реализовываться в системах с нестингом поверхности Ферми [5, 6] – свойством, при котором некоторые части поверхности Ферми совпадают друг с другом при параллельном переносе одной из них на вектор нестинга $\mathbf{Q}_0$. Экспериментальным подтверждением данного тезиса можно назвать наблюдение неоднородных состояний в пниктидах железа [7] и органических металлах [8] – соединениях, обладающих нестингом поверхности Ферми. Еще одним примером системы с нестингом поверхности Ферми является двухслойный AA графен [9] – двумерный материал, состоящий из двух идентичных слоев графена. В работах [10, 11] нами было показано, что основным состоянием двухслойного AA графена должна быть волна спиновой плотности (ВСП). Допирование материала может приводить к расслоению на фазы [11]: соизмеримую, характеризующуюся вектором нестинга $\mathbf{Q}_0 = 0$, и несоизмеримую ($\mathbf{Q}_0 \neq 0$) волны спиновой плотности.

Другим примером материала, состоящего из двух слоев графена, является подкрученный двухслойный графен [9]. В последнее время данный материал привлекает широкое внимание исследователей в связи с открытием в нем моттовских диэлектрических состояний [12, 13] и сверхпроводимости [13, 14]. В подкрученном двухслойном графене один слой графена повернут относительно другого на некоторый угол подкрутки θ. Это приводит в возникновению муарового узора и сверхструктуры в системе, при этом число атомов в сверхячейке N может быть достаточно велико ($N \sim 10^4$ при $\theta \sim 1^\circ$). Свойства электронного спектра подкрученного двухслойного графена вблизи уровня Ферми существенно зависят от величины θ. Так, при так называемом магическом угле подкрутки $\theta \sim 1^\circ$, электронный спектр вблизи уровня Ферми состоит из четырех почти вырожденных плоских зон [9]. Система с плоскими зонами чрезвычайно

[1)]e-mail: sboycha@mail.ru

восприимчива к взаимодействию [15, 16]. Последнее делает ферми-жидкость подкрученного двухслойного графена неустойчивой и приводит к возникновению некоторого параметра порядка в системе. Следуя работе [17], мы будем полагать, что состоянием с параметром порядка является волна спиновой плотности. Это предположение является обоснованным в связи с тем, что электроны вблизи уровня Ферми в подкрученном двухслойном графене при малых углах подкрутки локализованы в областях с AA упаковкой [9]. В данной работе мы сосредоточимся на исследовании устойчивости однородного состояния в подкрученном двухслойном графене при допировании. Мы покажем, что электронная сжимаемость системы отрицательна в некоторых интервалах допирования, что указывает на неустойчивость однородного состояния. Такое поведение системы с допированием согласуется с недавними экспериментами [18, 19]. При этом фазы в неоднородном состоянии характеризуются четным числом ($\nu = 0$, ± 2, ± 4) электронов, приходящихся на одну сверхячейку. Это позволяет объяснить тот факт, что минимумы проводимости, которые могли бы возникнуть при уровнях допирования, соответствующих нечетному числу ($\nu = \pm 1$, ± 3) электронов в расчете на одну сверхячейку, отсутствуют в одних образцах [12] (возникает фазовое расслоение) и наблюдаются в других [13] (фазовое расслоение подавлено дальнодействующим кулоновским взаимодействием).

Геометрия подкрученного графена. Для удобства читателей мы кратко опишем основные геометрические особенности рассматриваемой системы (более подробное изложение можно найти в обзоре [9]). Монослой графена имеет гексагональную кристаллическую структуру, состоящую из двух треугольных подрешеток A и B. Координаты атомов в слое 1 равны $\mathbf{r}_\mathbf{n}^{1A} = \mathbf{r}_\mathbf{n}^1 \equiv n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$ и $\mathbf{r}_\mathbf{n}^{1B} = \mathbf{r}_\mathbf{n}^1 + \boldsymbol{\delta}$, где $\mathbf{n} = (n, m)$ (n и m – натуральные числа), $\mathbf{a}_{1,2} = a(\sqrt{3}, \mp 1)/2$ – векторы решетки ($a = 2.46$ Å), а $\boldsymbol{\delta} = a(1/\sqrt{3}, 0)$. Атомы в слое 2 расположены в точках $\mathbf{r}_\mathbf{n}^{2B} = \mathbf{r}_\mathbf{n}^2 \equiv d\mathbf{e}_z + n\mathbf{a}'_1 + m\mathbf{a}'_2$ и $\mathbf{r}_\mathbf{n}^{2A} = \mathbf{r}_\mathbf{n}^2 - \boldsymbol{\delta}'$, где векторы $\mathbf{a}'_{1,2}$ и $\boldsymbol{\delta}'$ получаются из векторов $\mathbf{a}_{1,2}$ и $\boldsymbol{\delta}$ поворотом на угол θ. Единичный вектор вдоль оси z есть $\mathbf{e}_z$. Расстояние между слоями $d = 3.35$ Å. Предельный случай $\theta = 0$ соответствует AB упаковке (фаза Бернала). Сверхструктура в подкрученном двухслойном графене возникает при углах $\cos\theta = (3m_0^2 + 3m_0 r + r^2/2)/(3m_0^2 + 3m_0 r + r^2)$, где m_0 и r – положительные взаимно простые числа. Число элементарных ячеек каждого слоя графена в сверхячейке равно $N_{\text{sc}} = (3m_0^2 + 3m_0 r + r^2)/g$, где $g = 1$, если $r \neq 3n$ или $g = 3$ в противном случае. Векторы обратной решетки слоя 1 (слоя 2) обозначим как $\mathbf{b}_{1,2}$ ($\mathbf{b}'_{1,2}$). Для слоя 1 имеем $\mathbf{b}_{1,2} = 2\pi(1/\sqrt{3}, \mp 1)/a$, тогда как $\mathbf{b}'_{1,2}$ получаются из векторов $\mathbf{b}_{1,2}$ поворотом на угол θ. Пусть $\boldsymbol{\mathcal{G}}_{1,2}$ – векторы обратной сверхрешетки. Можно показать, что справедливы следующие равенства: $\mathbf{b}'_1 = \mathbf{b}_1 + r(\boldsymbol{\mathcal{G}}_1 + \boldsymbol{\mathcal{G}}_2)$ и $\mathbf{b}'_2 = \mathbf{b}_2 - r\boldsymbol{\mathcal{G}}_1$, если $r \neq 3n$ или $\mathbf{b}'_1 = \mathbf{b}_1 + r(\boldsymbol{\mathcal{G}}_1 + 2\boldsymbol{\mathcal{G}}_2)/3$ и $\mathbf{b}'_2 = \mathbf{b}_2 - r(2\boldsymbol{\mathcal{G}}_1 + \boldsymbol{\mathcal{G}}_2)/3$ в противном случае. Зона Бриллюэна сверхрешетки имеет гексагональную форму. Два неэквивалентных угла зоны Бриллюэна (точки Дирака сверхрешетки), $\mathbf{K}_1$ и $\mathbf{K}_2$, могут быть выражены через вектора $\boldsymbol{\mathcal{G}}_{1,2}$ равенствами $\mathbf{K}_1 = (\boldsymbol{\mathcal{G}}_1 + 2\boldsymbol{\mathcal{G}}_2)/3$ и $\mathbf{K}_2 = (2\boldsymbol{\mathcal{G}}_1 + \boldsymbol{\mathcal{G}}_2)/3$. Определим также точку $\mathbf{M}$, как $\mathbf{M} = (\boldsymbol{\mathcal{G}}_1 + \boldsymbol{\mathcal{G}}_2)/2$.

Модельный гамильтониан. Мы используем следующий модельный гамильтониан подкрученного двухслойного графена:

$$H = \sum_{\substack{\mathbf{nm}ij\\ sr\sigma}} t(\mathbf{r}_\mathbf{n}^{is};\mathbf{r}_\mathbf{m}^{jr}) d^\dagger_{\mathbf{n}is\sigma} d_{\mathbf{m}jr\sigma} + \frac{U}{2}\sum_{\mathbf{n}is\sigma} n_{\mathbf{n}is\sigma} n_{\mathbf{n}is\bar{\sigma}} + \\ + \frac{1}{2}{\sum_{\substack{\mathbf{nm}ij\\ sr\sigma\sigma'}}}' V(\mathbf{r}_\mathbf{n}^{is} - \mathbf{r}_\mathbf{m}^{jr}) n_{\mathbf{n}is\sigma} n_{\mathbf{m}jr\sigma'}. \tag{1}$$

В этом выражении $d^\dagger_{\mathbf{n}is\sigma}$ и $d_{\mathbf{n}is\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона с проекцией спина σ в ячейке $\mathbf{n}$ слоя $i\,(=1,2)$ и подрешетки $s\,(=\mathcal{A},\mathcal{B})$, а $\bar{\sigma} = -\sigma$. Оператор $n_{\mathbf{n}is\sigma} = d^\dagger_{\mathbf{n}is\sigma} d_{\mathbf{n}is\sigma}$. Первое слагаемое в формуле (1) есть одночастичный гамильтониан системы в приближении сильной связи, где $t(\mathbf{r}_\mathbf{n}^{is};\mathbf{r}_\mathbf{m}^{jr})$ – амплитуда перескока электрона с узла $\mathbf{r}_\mathbf{m}^{jr}$ на узел $\mathbf{r}_\mathbf{n}^{is}$. Внутри одного слоя мы учитываем только перескоки между ближайшими соседями с амплитудой $t = -2.57$ эВ. Функция $t(\mathbf{r}_\mathbf{n}^{1s};\mathbf{r}_\mathbf{m}^{2r})$, описывающая перескоки между слоями, моделируется так, как это описано в работе [17] (отметим, впрочем, что выбор других параметризаций [20] качественно не влияет на полученный результат). Максимальная величина межслоевого перескока выбрана равной $t_0 = 0.4$ эВ.

Второе слагаемое в уравнении (1) описывает одноцентровое (хаббардовское) взаимодействие электронов с противоположными спинами, тогда как третье слагаемое описывает кулоновское взаимодействие электронов на разных узлах решетки (штрих у суммы означает, что элементы с $\mathbf{r}_\mathbf{n}^{is} = \mathbf{r}_\mathbf{m}^{jr}$ должны быть отброшены).

Одноэлектронный спектр при магическом угле подкрутки. В одноэлектронном приближении энергетический спектр подкрученного графена определяется путем численной диагонализации первого слагаемого в уравнении (1). Для любой сверхструктуры (m_0, r) электронный спектр двухслойки состоит из $4N_{\rm sc}$ зон $E^{(S)}_{\mathbf{k}}$, где квазиимпульс $\mathbf{k}$ лежит в зоне Бриллюэна сверхрешетки, а $1 \leq S \leq 4N_{\rm sc}$. При заданном $\mathbf{k}$ энергии $E^{(S)}_{\mathbf{k}}$ располагаются в порядке возрастания. Наибольший интерес представляют четыре зоны, лежащие в середине спектра, поскольку именно они находятся вблизи уровня Ферми в недопированном образце (т.е. при половинном заполнении).

Характер низкоэнергетического спектра существенно зависит от угла подкрутки θ. Когда угол подкрутки не мал, низкоэнергетический спектр состоит из двух дважды вырожденных дираковских конусов, расположенных вблизи точек Дирака сверхрешетки $\mathbf{K}_1$ и $\mathbf{K}_2$. Эти конусы Дирака пересекаются при энергиях выше и ниже энергии вершины конуса, что приводит к возникновению низкоэнергетических особенностей ван Хова (эти особенности сохраняются и при малых углах). Межслоевая гибридизация перенормирует скорость Ферми дираковских конусов, делая ее меньше скорости Ферми для однослойного графена [9, 21]. При не слишком малых θ перенормированная скорость Ферми уменьшается с уменьшением θ. Хотя эта перенормировка может быть существенной, недопированный образец остается полуметаллом. Однако, при так называемом магическом угле подкрутки $\theta = \theta_c$ система обретает Ферми поверхность даже при половинном заполнении. В этом случае низкоэнергетический спектр состоит из четырех довольно плоских зон, которые отделены щелями от низко- и высокоэнергетических зон. Ширина плоских зон W имеет минимум при $\theta = \theta_c$.

Величина магического угла θ_c зависит от вида параметризации межслоевых перескоков. Для выбранной параметризации имеем $\theta_c \cong 1.08^\circ$ [сверхструктура (m_0, r) = (30, 1)]. Такое значение θ_c соответствует эксперименту [12, 13]. При этом ширина плоских зон равна $W = 1.9$ мэВ. Энергетический спектр, рассчитанный для данной сверхструктуры, показан на рис. 1.

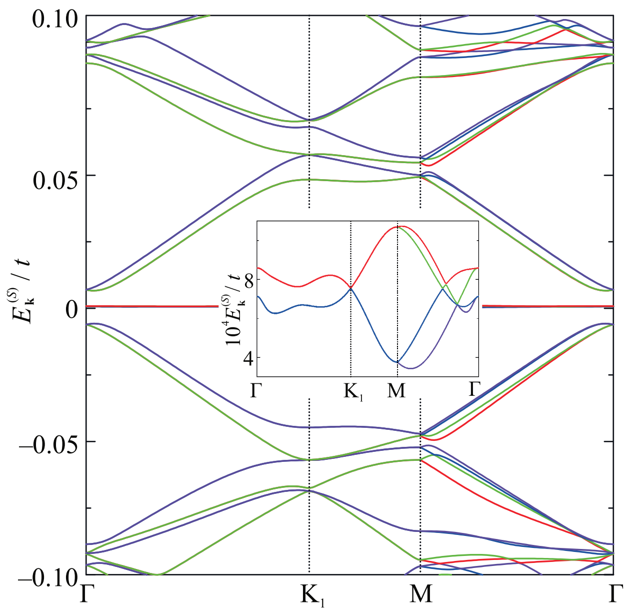


Рис. 1. (Цветной онлайн) Энергетический спектр подкрученного двухслойного графена при магическом угле подкрутки $\theta_c \cong 1.08^\circ$ [сверхструктура (m_0, r) = = (30, 1)]. Вблизи нуля энергии имеются четыре плоские зоны, отделенные энергетическими щелями от более низких и более высоких зон. Вставка показывает дисперсии плоских зон в увеличенном масштабе

Структура параметра порядка. Как уже отмечалось, система, имеющая плоские зоны на уровне Ферми, весьма восприимчива к взаимодействиям [15, 16]. Взаимодействия описываются вторым и третьим слагаемыми в гамильтониане (1). Их учет приводит к спонтанному нарушению симметрии и порождает некоторый параметр порядка. Здесь мы предполагаем, что этот параметр порядка представляет собой волну спиновой плотности. Такой выбор не является произвольным. Как было показано во многих работах (см., например, работы [9, 21, 22]), при малых углах подкрутки электроны на уровне Ферми занимают области сверхячейки с AA упаковкой. В то же время, как было показано нами в работах [10, 11], основное состояние двухслойного AA графена должно быть антиферромагнитным. По этой причине мы считаем, что ВСП должна быть хорошим кандидатом на роль основного состояния в подкрученном двухслойном графене.

Рассматриваемый параметр порядка является многокомпонентным. Во-первых, он содержит члены, пропорциональные локальным спинам:

$$\Delta_{\mathbf{n}is} = U\langle d^\dagger_{\mathbf{n}is\uparrow} d_{\mathbf{n}is\downarrow}\rangle. \qquad (2)$$

Эти компоненты контролируются одноцентровым кулоновским отталкиванием. При расчетах мы полагаем $U = 2t$. Это значение несколько меньше критического значения для перехода однослойного графена в антиферромагнитное состояние в приближении среднего поля [23], $U_c = 2.23t$. Таким образом, мы полагаем, что выбранное хаббардовское взаимодействие является довольно сильным, но не настолько, чтобы открыть щель в однослойном графене [9].

Мы также включаем параметр порядка, описывающий взаимодействие электронов на соседних узлах внутри слоя. Каждый атом графена в одной подрешетке имеет трех ближайших соседей, принадлежащих другой подрешетке. По этой причине мы рассматриваем три типа внутрислойных параметров порядка между ближайшими соседями: параметры $A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma}$ ($\ell = 1, 2, 3$) соответствуют трем различным связям, соединяющим ближайшие узлы внутри слоя. Эти параметры порядка определяются следующим образом:

$$A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma} = V_{\mathrm{nn}}\langle d^{\dagger}_{\mathbf{n}+\mathbf{n}_\ell iA\sigma} d_{\mathbf{n}iB\bar{\sigma}}\rangle, \qquad (3)$$

где $\mathbf{n}_1 = (0, 0)$, $\mathbf{n}_2 = (1, 0)$, $\mathbf{n}_3 = (0, 1)$, а $V_{\mathrm{nn}} = V(|\boldsymbol{\delta}|)$ – кулоновское взаимодействие электронов, находящихся на соседних узлах внутри слоя. В соответствии с оценкой, сделанной в работе [24], мы полагаем $V_{\mathrm{nn}}/U = 0.59$.

Наконец, мы учитываем также параметр порядка, описывающий взаимодействие электронов между слоями. Он определяется как:

$$B^{rs}_{\mathbf{m};\mathbf{n}\sigma} = V(\mathbf{r}^{1r}_{\mathbf{m}} - \mathbf{r}^{2s}_{\mathbf{n}})\langle d^{\dagger}_{\mathbf{m}1r\sigma} d_{\mathbf{n}2s\bar{\sigma}}\rangle. \qquad (4)$$

Мы учитываем только такие $B^{rs}_{\mathbf{m};\mathbf{n}\sigma}$, для которых узлы $\mathbf{r}^{1s}_{\mathbf{m}}$ и $\mathbf{r}^{2r}_{\mathbf{n}}$ располагаются достаточно близко друг к другу. Если амплитуда перескока между узлами $\mathbf{r}^{1s}_{\mathbf{m}}$ и $\mathbf{r}^{2r}_{\mathbf{n}}$ пренебрежимо мала, то параметр порядка $B^{rs}_{\mathbf{m};\mathbf{n}\sigma}$ полагается равным нулю. Предполагая, что на малых расстояниях экранировка незначительна, мы моделируем функцию $V(\mathbf{r})$ в уравнении (4) как $V(\mathbf{r}) \propto 1/|\mathbf{r}|$ с $V(d) = V_{\mathrm{nn}}|\boldsymbol{\delta}|/d = 0.25U$.

Мы полагаем, что все параметры порядка обладают периодичностью сверхрешетки. Мы численно решаем систему уравнений на $\Delta_{\mathbf{n}is}$, $A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma}$ и $B^{rs}_{\mathbf{m};\mathbf{n}\sigma}$ в приближении среднего поля при различных уровнях допирования n в интервале от -4 до $+4$ лишних электрона на сверхячейку. Детали итерационной схемы можно найти в работе [20].

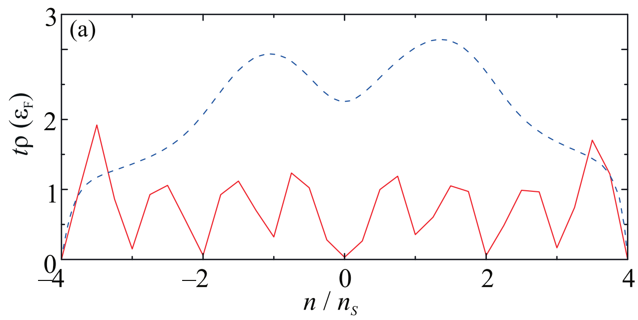
Результаты. Спектральные свойства. Проводимость. Расчет показывает, что все три типа параметров порядка достигают своих максимальных значений в недопированном образце (один электрон на узел). При допировании параметры порядка $\Delta_{\mathbf{n}is}$, $A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma}$ и $B^{rs}_{\mathbf{m};\mathbf{n}\sigma}$ монотонно уменьшаются вне зависимости от типа допирования (дырочного или электронного) и обращаются в нуль при допировании $n/n_s = \pm 4$, где концентрация n_s соответствует одному электрону на сверхячейку. Значения параметров порядка неоднородны в пространстве. Наибольшие значения $\Delta_{\mathbf{n}is}$, $A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma}$ и $B^{rs}_{\mathbf{m};\mathbf{n}\sigma}$ принимают в области сверхячейки, соответствующей AA упаковке. Это хорошо согласуется с тем фактом, что волновые функции электронов вблизи уровня Ферми также локализованы в AA области сверхячейки. Максимальные значения параметров порядка при половинном заполнении равны $\Delta_{\mathbf{n}is} = 27$ мэВ, $A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma} = 3.5$ мэВ и $B^{rs}_{\mathbf{m};\mathbf{n}\sigma} = 0.2$ мэВ.

После того, как параметры порядка найдены, нетрудно рассчитать энергетический спектр. Волна спиновой плотности снимает вырождение электронных зон по спину. С учетом спина в одноэлектронном приближении мы имеем 8 почти вырожденных плоских зон вблизи уровня Ферми. Параметр порядка снимает (частично) данное вырождение, и он делает это по-разному в зависимости от уровня допирования. При половинном заполнении, $\nu \equiv n/n_s = 0$, 8 зон разделяются на два квартета, уровень Ферми находится между квартетами. При $\nu = \pm 2$ каждый квартет разделяется на два дублета, уровень Ферми лежит между двумя верхними (нижними) дублетами при электронном (дырочном) допировании. Когда мы имеем один электрон или дырку на сверхячейку, $\nu = \pm 1$, каждый квартет расщепляется на синглет и триплет, а уровень Ферми находится между синглетом и триплетом. В случае $\nu = \pm 3$ оказывается, что квартет расщепляется на два синглета и дублет, а уровень Ферми лежит между двумя синглетами, верхними в случае электронного или нижними в случае дырочного допирования. Нетрудно понять, что указанные конфигурации зон действительно должны понижать полную энергию системы по сравнению с невырожденным (нет взаимодействия) случаем. Следует отметить, что указанные выше расщепления зон в действительности наблюдаются нами не во всей зоне Бриллюэна. Вблизи $\mathbf{\Gamma}$ точки ситуация оказывается более сложной (подробности можно найти в работе [20]), однако это не принципиально для настоящего изложения.

Зная спектр $E^{(S)}_{\mathbf{k}}$, нетрудно рассчитать плотность состояний на уровне Ферми при разных уровнях допирования. Мы сделали это при конечной (но малой) температуре T, воспользовавшись стандартной формулой:

$$\rho(\varepsilon_F) = \sum_S \int \frac{d^2\mathbf{k}}{v_{BZ}} \frac{1}{4T\cosh\left[(\varepsilon_F - E^{(S)}_{\mathbf{k}})/2T\right]^2}, \qquad (5)$$

где v_{BZ} – площадь зоны Бриллюэна однослойного графена. Результат показан на рис. 2a. На том же рисунке, для сравнения, показана плотность состояний на уровне Ферми, рассчитанная для невзаимодействующей системы. Без учета взаимодействия плотность состояний имеет два максимума, связанных с упоминавшимися выше особенностями ван Хова, а также минимумы при $\nu = 0, \pm 4$. Взаимодействие существенным образом модифицирует зависимость ρ от n. Теперь плотность состояний имеет минимумы при всех целочисленных значениях ν. Такое поведение естественно с учетом расщепления групп зон при



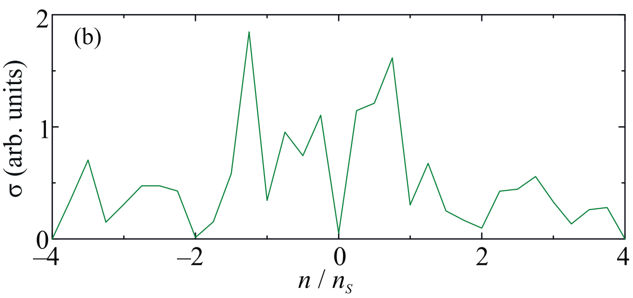


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Плотность состояний на уровне Ферми как функция допирования. Сплошная (красная) кривая соответствует взаимодействующей системе, тогда как пунктирная (синяя) кривая построена без учета взаимодействия. (b) – Зависимость проводимости системы от допирования. Расчет сделан при температуре $T/t = 1.5 \cdot 10^{-5}$

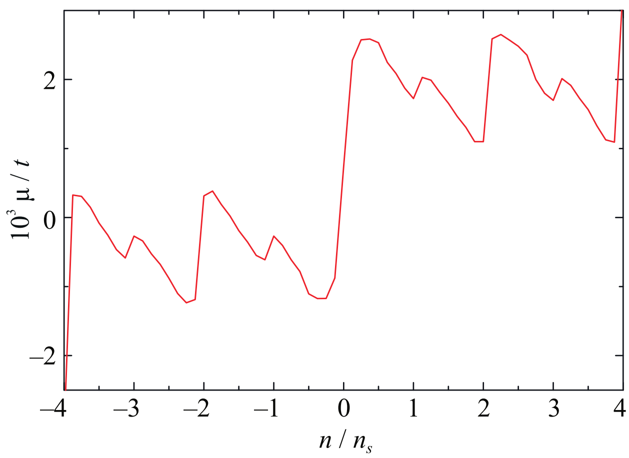


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость химпотенциала от допирования. Области с $\partial\mu(n)/\partial n < 0$ сигнализируют о неустойчивости однородного состояния. Расчет выполнен при температуре $T/t = 1.5 \cdot 10^{-5}$

различных уровнях допирования, которое было описано выше. Расчет проводимости в τ-приближении, сделанный в работе [17], показал, что проводимость σ как функция допирования n имеет схожее поведение (мы приводим результат этого расчета на рис. 2b). Такой ход зависимости $\sigma(n)$ качественно согласуется с экспериментально наблюдаемым [13]. В то же время эксперименты, описанные в работе [12] показали, что проводимость имеет минимумы лишь при $\nu = 0, \pm 2, \pm 4$ (отметим, впрочем, что для некоторых образцов авторы работы [12] наблюдали также минимумы проводимости при $\nu = \pm 3$, см. дополнительные материалы к работе [12]). Таким образом, мы видим, что последовательность минимумов проводимости системы зависит от образца. В настоящей работе мы объясняем такое поведение тенденцией к фазовому расслоению, которая, как мы покажем, характерна для взаимодействующей системы.

Результаты. Фазовое расслоение. Для исследования устойчивости однородного состояния системы мы проанализируем зависимость от допирования ее химического потенциала. Расчет, выполненный при малой температуре $T/t = 1.5 \cdot 10^{-5}$, показан на рис. 3.

Мы видим, что вблизи целочисленных значений допирования химпотенциал является растущей функцией n. Однако при промежуточных допированиях имеются области, в которых химпотенциал убывает, $\partial\mu(n)/\partial n < 0$, что сигнализирует о неустойчивости однородного состояния по отношению к электронному фазовому расслоению, поскольку сжимаемость электронной системы становится отрицательной. Схожее поведение химпотенциала с допированием недавно наблюдалось в экспериментах [18, 19]. Для того, чтобы понять, на какие именно фазы расслаивается система и в каких областях реализуется фазовое расслоение надо проанализировать свободную энергию системы. Если зависимость $\mu(n)$ известна, то свободная энергия однородного состояния в расчете на одну сверхячейку может быть вычислена по формуле:

$$f(n) = \frac{1}{n_s} \int\limits_{-4n_s}^{n} \mu(n')\, dn' - f_0, \qquad (6)$$

где константа f_0 выбрана нами так, чтобы выполнялось равенство $f(0) = 0$.

Кривая зависимости $f(n)$ представлена на рис. 4. При каждой концентрации n необходимо сравнить свободную энергию $f(n)$ с энергией неоднородного состояния $f_{PS}(n)$. Последнюю можно получить следующим образом. В неоднородном состоянии система с полной концентрацией электронов n расслаивается на фазу с концентрацией электронов $n_1 (< n)$ и объемной долей p и фазу с концентрацией электронов $n_2 (> n)$ и объемной долей $1 - p$. Величина $p = (n - n_1)/(n_2 - n_1)$, а свободная энергия неод-

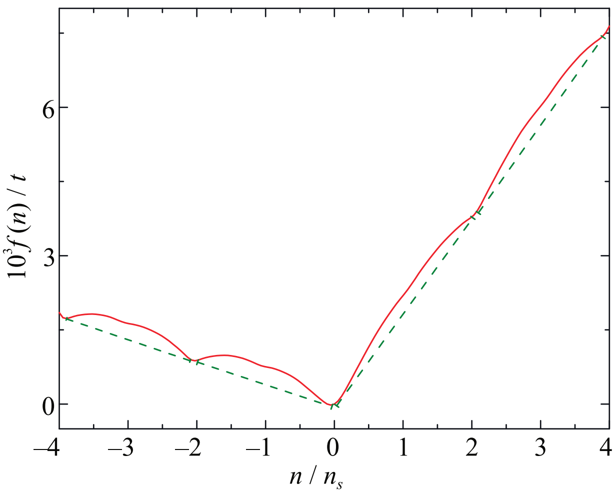


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость свободной энергии системы (в расчете на одну сверхячейку) от допирования. Сплошная (красная) кривая соответствует свободной энергии однородного состояния. Энергии неоднородных состояний, полученные построением Максвелла, показаны пунктирными (зелеными) прямыми линиями. Расчет выполнен при температуре $T/t = 1.5 \cdot 10^{-5}$

нородного состояния линейно зависит от n и равна $f_{PS}(n) = pf(n_1) + (1-p)f(n_2)$. Термодинамически равновесные концентрации электронов n_1 и n_2 определяются с помощью построения Максвелла [25]. Анализ зависимости $f(n)$ показывает, что имеются четыре области концентраций $n_1 < n < n_2$, в которых реализуется фазовое расслоение. Это области ($n_1 \approx -4n_s$, $n_2 \approx -2n_s$), ($n_1 \approx -2n_s$, $n_2 \approx 0$), ($n_1 \approx 0$, $n_2 \approx 2n_s$) и ($n_1 \approx 2n_s$, $n_2 \approx 4n_s$).

Таким образом, мы видим, что в описанной выше картине однородные фазы с концентрациями вблизи $\nu = \pm 1$ и $\nu = \pm 3$ не реализуются. Отметим также, что фазы в неоднородных состояниях являются (почти) диэлектрическими, и такой простой подход не позволяет объяснить поведение проводимости системы с допированием, наблюдаемое в эксперименте. Следует, однако, иметь в виду, что поскольку фазы в неоднородном состоянии обладают различной концентрацией электронов, то необходимо учитывать дальнодействующее кулоновское отталкивание электронов в неоднородном состоянии, возникающее из-за нарушения локальной электронейтральности. Этот фактор не учитывался при анализе, описанном выше. Как известно, дальнодействующее кулоновское отталкивание сужает область фазового расслоения, и может делать его не выгодным ни при каких концентрациях носителей [26, 27]. В этом случае система всегда однородна, а минимумы проводимости и плотности состояний на поверхности Ферми существуют при всех целочисленных ν, что наблюдается в эксперименте в работе [13]. Величина дальнодействующего кулоновского отталкивания может меняться от образца к образцу, поскольку она зависит от подложки, на которой находится образец, а также и от качества образца. Когда дальнодействующее кулоновское отталкивание не слишком велико, однородное состояние является более выгодным вблизи четных значений ν, однако фазовое расслоение по прежнему “скрывает” области вблизи $\nu = \pm 1$ и $\nu = \pm 3$. В этом случае мы должны видеть минимумы проводимости лишь при $\nu = 0, \pm 2, \pm 4$, что соответствует эксперименту [12]. Наконец, дальнодействующее кулоновское отталкивание может полностью запрещать фазовое расслоение лишь для некоторых из четырех интервалов $n_1 < n < n_2$. Тогда в зависимости проводимости от допирования могут появляться дополнительные минимумы при некоторых нечетных ν. Такие минимумы действительно наблюдались для ряда образцов в работе [12].

Еще одним фактором, влияющим на изменчивость поведения проводимости для различных образцов, является угол подкрутки. Действительно, отклонение угла подкрутки образца θ от магического значения θ_c (в любую сторону) увеличивает ширину плоских зон W. Увеличение W уменьшает величину ВСП параметра порядка. Поэтому связанные с ВСП эффекты, такие как отрицательная кривизна свободной энергии, становятся менее выраженными. Это, в свою очередь, увеличивает роль дальнодействующего кулоновского отталкивания.

Заключение. Таким образом, в данной работе мы исследовали свойства состояния с волной спиновой плотности в подкрученном двухслойном графене с магическим углом подкрутки. Исследуя поведение химического потенциала и свободной энергии с допированием, мы продемонстрировали, что однородное состояние системы может быть неустойчиво по отношению к фазовому расслоению на фазы с разными концентрациями носителей. Рассчитанная зависимость химпотенциала от уровня допирования имеет вид, схожий с наблюдаемым в экспериментах. Существуют четыре области допирования, в которых может реализовываться неоднородное состояние. Дальнодействующее кулоновское отталкивание сужает область существования неоднородного состояния. Поскольку величина этого отталкивания, а также свойства образца, такие как угол подкрутки, зависят от условий эксперимента и качества образца, то полученные результаты могут объяснить расхождение в поведении проводимости различных образцов с допированием, которое наблюдается в экспериментах.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты # 19-02-00421 и 19-52-50015).

Авторы выражают благодарность Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

---

1. E. Dagotto, Science **309**, 257 (2005).
2. E. Dagotto, T. Hotta, and A. Moreo, Phys. Rep. **344**, 1 (2001).
3. S. Yamaguchi, Y. Okimoto, H. Taniguchi, and Y. Tokura, Phys. Rev. B **53**, R2926 (1996).
4. K. I. Kugel, A. L. Rakhmanov, A. O. Sboychakov, F. V. Kusmartsev, N. Poccia, and A. Bianconi, Supercond. Sci. Technol. **22**, 014007 (2009).
5. A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, and F. Nori, Phys. Rev. B **87**, 075128 (2013).
6. А. Л. Рахманов, К. И. Кугель, М. Ю. Каган, А. В. Рожков, А. О. Сбойчаков, Письма в ЖЭТФ **105**, 768 (2017).
7. J. T. Park, D. S. Inosov, Ch. Niedermayer et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **102**, 117006 (2009).
8. A. Narayanan, A. Kiswandhi, D. Graf, J. Brooks, and P. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **112**, 146402 (2014).
9. A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rep. **648**, 1 (2016).
10. A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. **109**, 206801 (2012).
11. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **88**, 045409 (2013).
12. Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, Nature **556**, 80 (2018).
13. X. Lu, P. Stepanov, W. Yang, M. Xie, M. A. Aamir, I. Das, C. Urgell, K. Watanabe, T. Taniguchi, G. Zhang, A. Bachtold, A. H. MacDonald, and D. K. Efetov, Nature **574**, 653 (2019).
14. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, Nature **556**, 43 (2018).
15. T. T. Heikkila, N. B. Kopnin, and G. E. Volovik, Письма в ЖЭТФ **94**, 252 (2011).
16. G. E. Volovik, Письма в ЖЭТФ **107**, 517 (2018).
17. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **100**, 045111 (2019).
18. S. L. Tomarken, Y. Cao, A. Demir, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Jarillo-Herrero, and R. C. Ashoori, Phys. Rev. Lett. **123**, 046601 (2019).
19. U. Zondiner, A. Rozen, D. Rodan-Legrain, Y. Cao, R. Queiroz, T. Taniguchi, K. Watanabe, Y. Oreg, F. von Oppen, A. Stern, E. Berg, P. Jarillo-Herrero, and S. Ilani, Nature **582**, 203 (2020).
20. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, and A. L. Rakhmanov, Phys. Rev. B **102**, 155142 (2020).
21. J. M. B. Lopes dos Santos, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. B **86**, 155449 (2012).
22. P. San-Jose, J. González, and F. Guinea, Phys. Rev. Lett. **108**, 216802 (2012).
23. S. Sorella and E. Tosatti, EPL (Europhysics Letters) **19**, 699 (1992).
24. T. O. Wehling, E. Şaşıoğlu, C. Friedrich, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, and S. Blügel, Phys. Rev. Lett **106**, 236805 (2011).
25. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика. Часть 1*, Физматлит, М. (1995).
26. J. Lorenzana, C. Castellani, and C. Di Castro, Phys. Rev. B **64**, 235127 (2001).
27. A. O. Sboychakov, K. I. Kugel, and A. L. Rakhmanov, Phys. Rev. B **76**, 195113 (2007).