Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 12, с. 824 – 832

Магнитно-электронная неустойчивость графена на ферромагнитной подложке

Д. Н. Дресвянкин[+], *А. В. Рожков*[*1)], *А. О. Сбойчаков*[*]

[+]*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) (МФТИ), 141701 Долгопрудный, Россия*

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

Поступила в редакцию 11 ноября 2021 г.
После переработки 11 ноября 2021 г.
Принята к публикации 11 ноября 2021 г.

В данной работе теоретически исследуется графен на ферромагнитной подложке. Нами показано, что при низких температурах такая система обладает неустойчивым электронным состоянием. А именно, при определенных условиях идеальная однородная ферромагнитная поляризация нарушается спонтанно возникающим подкосом. Появление подкоса в подложке приведет к открытию диэлектрической щели в одноэлектронном спектре графена. В статье проводится расчет этой щели, а также обсуждаются условия наблюдения неустойчивости на эксперименте.

DOI: 10.31857/S1234567821240071

1. Введение. Графен – двумерная углеродная структура с гексагональной решеткой. Огромный интерес к этому материалу вызван необычными физическими свойствами, например, крайне высокой подвижностью электронов, а также возможностью контролировать концентрацию носителей заряда за счет затворного напряжения. Эта углеродная структура считается многообещающим объектом для приложений в области спинтроники [1, 2]. В связи с этим в последние годы было проведено огромное количество исследований магнитных свойств графена. Были также предложены концепции устройств, работающих на принципах спинтроники, основным структурным элементом которых являлся графен [3, 4].

Одним из перспективных способов управления спиновыми свойствами графена является помещение графенового образца на магнитную подложку. Например, в экспериментальной работе [5] авторы сообщают о создании гетероструктуры, состоящей из графена на ферромагнитном субстрате EuS. В такой ситуации, из-за магнитного эффекта близости, электронные зоны графена утрачивают спиновое вырождение, что сопровождается возникновением ферромагнитной поляризации электронной жидкости. Авторы данной работы предполагают, что в гетероструктуре подобного типа эффективное зеемановское обменное поле для электронов в графене может быть доведено до сотен тесла. Исследования подобных систем проводились и численными методами [6, 7]. Многообразие научных тем, поднятых в этих и близких [3, 8–11] работах, свидетельствует о том, что графен, находящийся в контакте с ферромагнитной подложкой (а также родственные системы), рассматриваются сообществом как интересный и перспективный объект научного внимания.

В данной работе мы будем теоретически изучать низкотемпературную неустойчивость электронной жидкости графена, находящегося на ферромагнитной подложке. Сама по себе тема электронных неустойчивостей графена и систем на его основе имеет долгую исследовательскую историю. В частности, возникновение упорядоченных электронных состояний в графене в параллельном магнитном поле было рассмотрено в работе [12]. Большой объем литературы был посвящен изучению спонтанного упорядочения в однослойном графене под действием сильного межэлектронного кулоновского отталкивания [13–20]. Неустойчивости двуслойных систем (как с AB упаковкой, так и с AA упаковкой) также активно обсуждались [21–30].

В отличие от упомянутых неустойчивостей, механизм утраты стабильности, рассматриваемый нами в данной работе, не является чисто электронным. Он предполагает своего рода кооперацию между электронной и магнитной подсистемами. А именно, мы покажем, что возникновение подкашивающей деформации идеального ферромагнитного упорядочения в подложке приводит к понижению энер-

1)e-mail: arozhkov@gmail.com

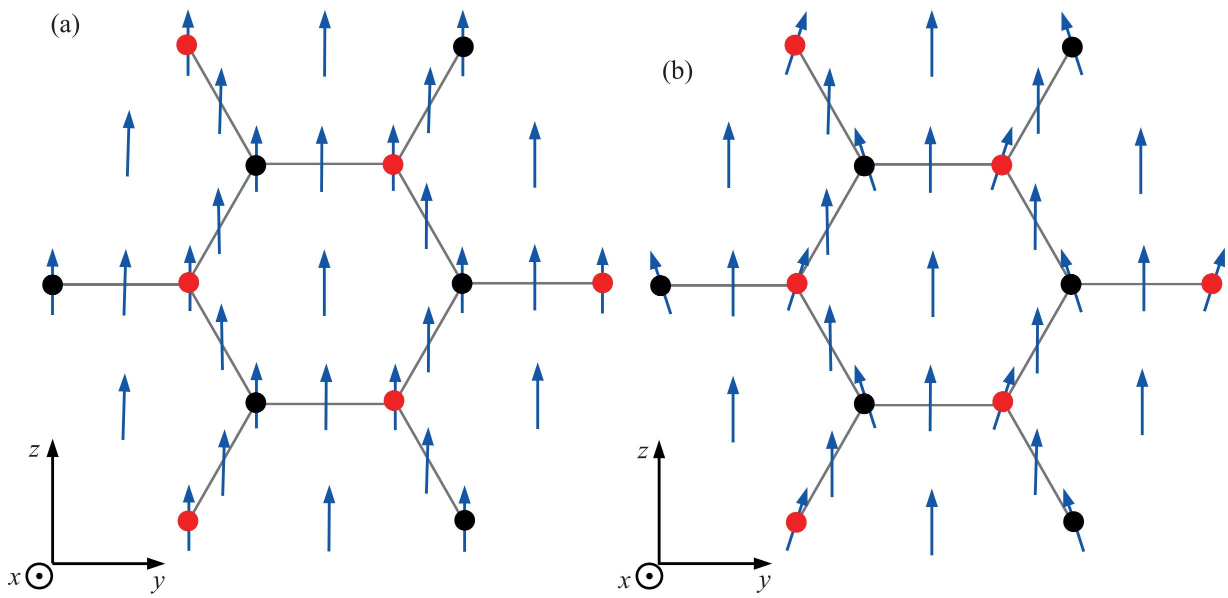

Рис. 1. (Цветной онлайн) Графен на ферромагнитной подложке. Ориентация осей показана в левом нижнем углу. Начало координат совпадает с центром правильного шестиугольника. Черные и красные точки обозначают атомы углерода, образующие гексагональную решетку. Красные (черные) точки соответствуют подрешетке A (подрешетке B). Черные отрезки, соединяющие атомы, обозначают химические связи углерод-углерод. Под графеном находится ферромагнитная подложка. Синие стрелки изображают локальную намагниченность на поверхности ферромагнетика. Панель (a) соответствует случаю идеальной намагниченности, см. ур. (9). Панель (b) представляет состояние с подкосом. Подкос – это периодически меняющаяся в пространстве компонента M_y полной намагниченности $\mathbf{M}$, см. ур. (23) и (24). Под атомами, принадлежащими разным подрешеткам, подкос имеет противоположный знак, в соответствии с условием (24)

гии электронов в графене. Данное понижение всегда будет компенсировать возрастание магнитной энергии подложки, связанное с появлением подкоса, при условии, что подкос достаточно слаб. Это указывает на неустойчивость состояния с идеальным ферромагнитным порядком. Как сама неустойчивость, так и возникающее упорядоченное состояние, являются предметом рассмотрения данной статьи.

2. Геометрия решетки графена. Для описания геометрии графеновой решетки мы выберем систему координат так, чтобы оси Oy и Oz лежали бы в плоскости графена, а ось Ox была бы перпендикулярна подложке и направлена от ее поверхности, см. рис. 1a. Такой выбор осей отличается от "канонического", предполагающего, что графен располагается в плоскости Oxy. Однако наш способ упростит работу со спиновой подсистемой, поскольку он позволит нам совместить "традиционную" ось спинового квантования Oz с направлением намагниченности субстрата.

Решетка графена описывается элементарными векторами трансляции

$$\mathbf{a}_{1,2} = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0 \left(\sqrt{3}\hat{e}_y \pm \hat{e}_z\right), \qquad (1)$$

где a_0 есть расстояние между соседними атомами углерода в графене, а $\hat{e}_{x,y,z}$ – единичные вектора в направлении соответствующих осей. Решетка графена может быть разбита на две одинаковые подрешетки, подрешетку A и подрешетку B. Координаты атомов на подрешетках A и B задаются векторами

$$\mathbf{R}_{A,B} = \mathbf{a}_1 n_1 + \mathbf{a}_2 n_2 \mp a_0 \hat{e}_y, \quad n_{1,2} \in \mathbb{Z}. \qquad (2)$$

На рисунке 1 узлы, соответствующие разным подрешеткам, изображены разным цветом.

Зона Бриллюэна в графене имеет форму правильного шестиугольника, а вектора обратной решетки даются выражениями:

$$\mathbf{b}_{1,2} = \frac{2\pi}{3a_0}(\hat{e}_y \pm \sqrt{3}\hat{e}_z). \qquad (3)$$

3. Гамильтониан графена на ферромагнитной подложке. В этом разделе мы сформулируем теоретическую модель графена на ферромагнитной подложке. Мы будем использовать приближение сильной связи, а межэлектронным взаимодействием пренебрежем. В отсутствие субстрата гамильтониан графена можно представить следующим образом:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{q}} \hat{\Phi}^\dagger_{\mathbf{q}} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}} \hat{\Phi}_{\mathbf{q}}, \tag{4}$$

где $\hat{\Phi}_{\mathbf{q}}$ – биспинорный оператор, соответствующий состояниям с квазиимпульсом $\mathbf{q}$. Он определяется следующим образом:

$$\hat{\Phi}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} \hat{d}_{\mathbf{q}A\uparrow} \\ \hat{d}_{\mathbf{q}B\uparrow} \\ \hat{d}_{\mathbf{q}A\downarrow} \\ \hat{d}_{\mathbf{q}B\downarrow} \end{pmatrix}. \tag{5}$$

В этом выражении $\hat{d}_{\mathbf{q}\alpha\sigma}$ – оператор уничтожения электрона с квазиимпульсом $\mathbf{q}$, находящимся на подрешетке $\alpha = A,\ B$ и имеющем спин $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Матрица $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}}$ имеет вид:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 0 & -tf_{\mathbf{q}} & 0 & 0 \\ -tf^*_{\mathbf{q}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -tf_{\mathbf{q}} \\ 0 & 0 & -tf^*_{\mathbf{q}} & 0 \end{pmatrix}, \tag{6}$$

где t – интеграл перескока. Он имеет значение порядка $2.5 - 3$ эВ, а функция $f_{\mathbf{q}}$ дается выражением:

$$f_{\mathbf{q}} = \left[1 + 2\exp\left(\frac{3ia_0q_y}{2}\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}a_0q_z}{2}\right)\right] \times \\ \times \exp\left(-ia_0q_y\right). \tag{7}$$

В отсутствие магнитного поля или магнитной подложки матрица (6) явным образом распадается на два идентичных диагональных блока. Каждый диагональный блок соответствует определенной проекции электронного спина. Из-за такой структуры гамильтониана собственные энергии, дающиеся хорошо известным выражением:

$$\varepsilon^{\pm}_{\mathbf{q}} = \pm t|f_{\mathbf{q}}|, \tag{8}$$

оказываются вырождены по спиновому индексу.

Далее мы будем рассматривать графен, который лежит на ферромагнитной подложке. Будем считать, что намагниченность $\mathbf{M}$ в ферромагнетике направлена вдоль оси Oz:

$$\mathbf{M} = M(0,0,1), \quad M > 0. \tag{9}$$

Из-за обменного взаимодействия между графеном и субстратом в зонной структуре графена пропадет вырождение электронных состояний по спину. Опишем этот эффект, введя зеемановский член в гамильтониан. Для намагниченности, даваемой формулой (9), данный член имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{\mathrm{Z}} = h\sum_{\mathbf{R}\alpha} \hat{S}^z_{\mathbf{R}\alpha}. \tag{10}$$

В данной формуле h – энергия зеемановского расщепления, а оператор спина

$$\hat{S}^z_{\mathbf{R}\alpha} = \hat{d}^\dagger_{\mathbf{R}\alpha\uparrow}\hat{d}_{\mathbf{R}\alpha\uparrow} - \hat{d}^\dagger_{\mathbf{R}\alpha\downarrow}\hat{d}_{\mathbf{R}\alpha\downarrow}, \tag{11}$$

где $\hat{d}_{\mathbf{R}\alpha\sigma}$ – оператор уничтожения электрона в элементарной ячейке с координатой $\mathbf{R}$ в подрешетке α, с проекцией спина σ (Фурье образ оператора $\hat{d}_{\mathbf{q}\alpha\sigma}$). Свяжем зеемановское расщепление в графене с намагниченностью в субстрате с помощью феноменологического коэффициента пропорциональности τ следующим образом:

$$h = \tau M. \tag{12}$$

Принимая во внимание формулу (10), перепишем $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}}$ с учетом зеемановского взаимодействия в следующем виде:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} h & -tf_{\mathbf{q}} & 0 & 0 \\ -tf^*_{\mathbf{q}} & h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h & -tf_{\mathbf{q}} \\ 0 & 0 & -tf^*_{\mathbf{q}} & -h \end{pmatrix}. \tag{13}$$

После диагонализации нашей матрицы получим зонную структуру электронов графена, находящегося на ферромагнитной подложке:

$$\varepsilon^{(1,2,3,4)}_{\mathbf{q}} = \pm h \pm t|f_{\mathbf{q}}|. \tag{14}$$

Это выражение демонстрирует, что в присутствии магнитной подложки зонная структура графена состоит из четырех невырожденных зон. Из четырех зон две выходят на уровень Ферми, образуя (почти) круговые поверхности Ферми вокруг каждой из двух неэквивалентных точек Дирака зоны Бриллюэна графена. Итоговая дисперсия вблизи одной из точек Дирака изображена на рис. 2.

Стоит обратить внимание на то, что поверхность Ферми возникла в системе без внешнего допирования. Иными словами, зеемановское поле привело к самодопированию: часть электронов сменила проекцию спина на противоположную, что привело к образованию дырочных носителей в обедненной зоне и электронных носителей в обогащенной зоне. Из-за такого спин-зависимого механизма возникновения получившиеся поверхности Ферми не являются вырожденными по спину, как в обычном металле. Возникшее состояние можно охарактеризовать как спин-долинный полуметалл (*spin-valley half-metal*), введенный в работах [31–34].

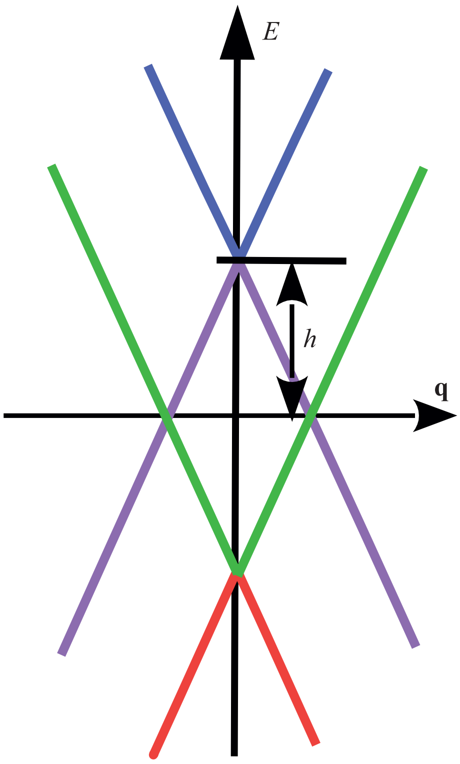

Рис. 2. (Цветной онлайн) Схематическое изображение низкоэнергетической электронной структуры графена на подложке с идеальной ферромагнитной упорядоченностью, см. ур. (14). Горизонтальная ось изображает двумерное импульсное пространство. По вертикальной оси отложена энергия. Начало координат соответствует точке Дирака (дисперсия электронов одинакова вблизи обеих точек Дирака). Для электронных состояний со спином $\sigma = \uparrow$ ($\sigma = \downarrow$) вершина конуса Дирака сдвигается на величину h (на величину $-h$). Зона, изображенная синей линией (красной линией), полностью пуста (полностью заполнена). Лиловая линия (зеленая линия) соответствует зоне, выходящей на уровень Ферми, и формирующей дырочную (электронную) поверхность Ферми. Электронная и дырочная поверхности Ферми совпадают, демонстрируя идеальный нестинг с нулевым вектором нестинга

Другим важным свойством полученной электронной структуры является нестинг поверхности Ферми. А именно, дырочная поверхность Ферми (она образована одночастичными состояниями со спином $\sigma = \uparrow$) совпадает с электронной поверхностью Ферми (ее формируют состояния, для которых $\sigma = \downarrow$). Хорошо известно, что поверхности Ферми с нестингом утрачивают стабильность при учете коллективных эффектов. Именно на этом и основан исследуемый механизм магнитно-электронной неустойчивости.

Для дальнейших расчетов нам понадобится электронная энергия графена на ферромагнитной подложке. Эта энергия складывается из энергии $\mathcal{E}_1$ полностью заполненной зоны, энергии $\mathcal{E}_2$ частично заполненной зоны и энергии $\mathcal{E}_3$ частично пустой зоны (см. рис. 2):

$$E_1 = \mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 + \mathcal{E}_3, \tag{15}$$

где $\mathcal{E}_{1,2,3}$, в свою очередь, будут иметь вид:

$$\mathcal{E}_1 = \sum_{\mathbf{q}} (-h - t|f_{\mathbf{q}}|), \tag{16}$$

$$\mathcal{E}_2 = \sum_{\mathbf{q}} (-h + t|f_{\mathbf{q}}|)\theta(h - t|f_{\mathbf{q}}|), \tag{17}$$

$$\mathcal{E}_3 = \sum_{\mathbf{q}} (h - t|f_{\mathbf{q}}|)\theta(-h + t|f_{\mathbf{q}}|), \tag{18}$$

где $\theta(x)$ – функция Хевисайда. Учитывая, что плотность состояний вблизи точек Дирака выражается как

$$\nu(\varepsilon) = \frac{\mathcal{S}|\varepsilon|}{\pi v_{\mathrm{F}}^2}, \tag{19}$$

где $\mathcal{S}$ – площадь графена, несложно вычислить значения энергий отдельных зон:

$$\mathcal{E}_1 = -\frac{\mathcal{S}}{\pi v_{\mathrm{F}}^2}\left(\frac{W^3}{3} + h\frac{W^2}{2}\right),$$
$$\mathcal{E}_2 = -\frac{\mathcal{S}h^3}{6\pi v_{\mathrm{F}}^2},$$
$$\mathcal{E}_3 = -\frac{\mathcal{S}}{\pi v_{\mathrm{F}}^2}\left(\frac{W^3}{3} - h\frac{W^2}{2} + \frac{h^3}{6}\right). \tag{20}$$

В этих выражениях величина W представляет энергию, ниже которой плотность состояний приближенно описывается линейной функцией, описываемой ур. (19). Этот масштаб может быть примерно оценен как

$$W \sim 0.8t. \tag{21}$$

Учет состояний с более высокой энергией при рассмотрении неустойчивости поверхности Ферми даст крайне малый вклад, которым можно пренебречь. Итоговое выражение для E_1 принимает вид:

$$E_1 = -\frac{\mathcal{S}}{\pi v_{\mathrm{F}}^2}\left(\frac{2W^3}{3} + \frac{h^3}{3}\right). \tag{22}$$

Как видно из этой формулы, однородное зеемановское поле h вносит поправку $O(h^3)$ в электронную энергию графена.

4. Электронный спектр графена при наличии подкоса ферромагнитного порядка. Теперь рассмотрим ситуацию, когда в субстрате у идеального ферромагнитного порядка, описываемого выражением (9), появляется малый подкос по оси Oy:

$$\mathbf{M} = M\left(0,\, m,\, 1 + O(m^2)\right), \tag{23}$$

где величина $m = m(\mathbf{r}) = m(x, y, z)$, $|m| \ll 1$, характеризует отклонение вектора намагниченности от оси Oz, а трехмерный радиус-вектор $\mathbf{r} = x\hat{e}_x + y\hat{e}_y + z\hat{e}_z$, у которого $x < 0$, задает положение точки в трехмерной подложке (напомним, что поверхность подложки, на которой лежит образец графена, соответствует условию $x = 0$).

Среди всех возможных видов подкоса мы будем рассматривать весьма специальную форму подкашивающей деформации m. Для нас важно, чтобы значение m на поверхности ферромагнетика под атомами углерода, принадлежащими подрешетке A, было бы равно некоей конечной величине $m_\perp$, а под атомами, принадлежащими подрешетке B, величина подкоса равнялась бы $-m_\perp$. Это соотношение можно компактно выразить следующим образом:

$$m(0, \mathbf{R}_A) = -m(0, \mathbf{R}_B) = m_\perp. \tag{24}$$

Именно такая структура подкоса m приведет к возникновению диэлектрической щели в спектре одноэлектронных возбуждений графена, а также к резкому (неаналитическому) понижению электронной энергии графена. Соответствующие расчеты будут приведены в этом разделе. Схематически состояние с подкосом изображено на рис. 1b.

Что касается конкретной функции, удовлетворяющей условию (24), то, если мы будем приближенно рассматривать подложку как сплошную среду, пренебрегая ее кристаллической структурой, можно написать:

$$m(0, \mathbf{R}) = -\frac{2}{3\sqrt{3}} m_\perp \sum_{\mathbf{K}} \sin(\mathbf{K}\mathbf{R}), \tag{25}$$

где переменная $\mathbf{R}$ рассматривается как непрерывная (не дискретная) величина в $\mathbb{R}^2$, а вектор $\mathbf{K}$ принимает значения

$$\mathbf{K} = \mathbf{b}_1, \quad \mathbf{K} = \mathbf{b}_2, \quad \mathbf{K} = -\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2. \tag{26}$$

Конечно же, функция (25) не является единственным выбором, совместимым с требованием (24). Более того, несложно убедиться, что функций, совместимых с условием (24), бесконечно много. Преимущество суммы (25) в том, что она содержит минимальное число (шесть) плоских волн, при этом все пространственные частоты $|\mathbf{K}| = 4\pi/(3a_0)$ имеют минимально возможное значение, совместимое с ур. (24).

Учтем влияние подкоса на электронные свойства графена. С этой целью введем зеемановское поле, направленное по оси Oy на подрешетке A и против оси Oy на подрешетке B. В такой ситуации зеемановский член (10) требует модификации: определим для каждой из подрешеток свой зеемановский член. Обозначим их $\hat{H}_{\mathrm{Z}A}$ и $\hat{H}_{\mathrm{Z}B}$:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\mathrm{Z}A} &= h \sum_{\mathbf{R}} \hat{S}^z_{\mathbf{R}A} + h_\perp \sum_{\mathbf{R}} \hat{S}^y_{\mathbf{R}A}, \\ \hat{H}_{\mathrm{Z}B} &= h \sum_{\mathbf{R}} \hat{S}^z_{\mathbf{R}B} - h_\perp \sum_{\mathbf{R}} \hat{S}^y_{\mathbf{R}B}. \end{aligned} \tag{27}$$

Здесь

$$h_\perp = \tau M m_\perp, \tag{28}$$

что является прямолинейным обобщением ур. (12) на случай намагниченности, отклоняющейся от идеального ферромагнитного порядка. Как мы видим, второе слагаемое входит в формулы для $\hat{H}_{\mathrm{Z}A}$ и $\hat{H}_{\mathrm{Z}B}$ с разным знаком, в соответствии с условием (24).

Учитывая, что:

$$\hat{S}^y_{\mathbf{R}\alpha} = i\left(\hat{d}^\dagger_{\mathbf{R}\alpha\downarrow}\hat{d}_{\mathbf{R}\alpha\uparrow} - \hat{d}^\dagger_{\mathbf{R}\alpha\uparrow}\hat{d}_{\mathbf{R}\alpha\downarrow}\right), \tag{29}$$

запишем эрмитову матрицу $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}}$ для ситуации с подкосом

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} h & -tf_{\mathbf{q}} & -ih_\perp & 0 \\ -tf^*_{\mathbf{q}} & h & 0 & ih_\perp \\ ih_\perp & 0 & -h & -tf_{\mathbf{q}} \\ 0 & -ih_\perp & -tf^*_{\mathbf{q}} & -h \end{pmatrix}. \tag{30}$$

Собственные значения этой матрицы имеют вид:

$$\varepsilon^{(1,2,3,4)}_{\mathbf{q}} = \pm\sqrt{h_\perp^2 + (h \pm t|f_{\mathbf{q}}|)^2}. \tag{31}$$

Зонная структура вблизи одной из точек Дирака в случае дисперсионной зависимости (31) изображена на рис. 3. Мы видим, что поверхность Ферми исчезла, а в одноэлектронном спектре образовалась щель, как мы и предсказывали в начале данного раздела.

Далее вычислим полную электронную энергию графена E_2 в этом случае. Действовать будем по аналогии с выводом ур. (15). Энергии заполненных зон будут выражаться из следующих формул:

$$\mathcal{E}_{1,2} = -\frac{\mathcal{S}}{\pi v_{\mathrm{F}}^2} \int_0^W d\varepsilon\, \varepsilon \sqrt{h_\perp^2 + (h \pm \varepsilon)^2}. \tag{32}$$

После интегрирования и сложения энергий указанных зон, получим выражение для электронной энергии графена в случае подкоса в подложке. Эта энергия выражается как

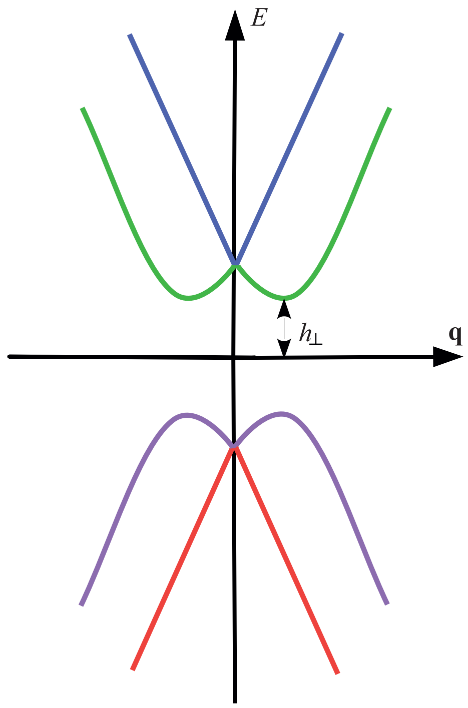

Рис. 3. (Цветной онлайн) Схематическое изображение низкоэнергетической электронной структуры графена на подложке с наличием подкоса у намагниченности, см. ур. (31). Горизонтальная ось изображает двумерное импульсное пространство. По вертикальной оси отложена энергия. Заполненные зоны (красная и лиловая линии) содержат в себе смешанные электронные состояния, возникшие в результате гибридизации электронных и дырочных состояний. Лиловая зона отстоит от уровня с нулевой энергией на величину $-h_\perp$. Пустые зоны изображены зеленой и синей линиями соответственно. В спектре видна щель величиной $2h_\perp$

$$E_2 = -\frac{\mathcal{S}}{\pi v_{\mathrm{F}}^2}\left[\frac{2W^3}{3} + Wh_\perp^2 - \frac{2}{3}\left(h_\perp^2 + h^2\right)^{\frac{3}{2}} + \right.$$
$$\left. + h^2\sqrt{h_\perp^2 + h^2} + hh_\perp^2 \ln\left(\frac{2h}{h_\perp}\right)\right]. \qquad (33)$$

Данная формула показывает, что подкос не только открывает щель, но и приводит к возникновению неаналитического вклада в электронную энергию, который представляется последним слагаемым в формуле (33). Именно эта неаналитичность, как мы увидим ниже, будет приводить к потере устойчивости неподкошенного состояния.

5. Энергия ферромагнетика в случае с подкосом на подрешетках. Далее мы должны вычислить возрастание магнитной энергии субстрата за счет возникновения подкашивающей деформации идеальной ферромагнитной намагниченности. Для этого воспользуемся молекулярной теорией Вайса. В рамках данной теории энергия магнитного состояния равна:

$$E_m = -\frac{J}{2}\sum_{i\boldsymbol{\delta}} \mathbf{M}_{\mathbf{r}_i}\mathbf{M}_{\mathbf{r}_i+\boldsymbol{\delta}}\,. \qquad (34)$$

В этом выражении символ $\mathbf{r}_i$ обозначает положение i-го атома в трехмерной решетке ферромагнетика, вектора $\boldsymbol{\delta}$ соединяют данный атом с его ближайшими соседями, J – интеграл обменного взаимодействия, а $\mathbf{M}_{\mathbf{r}_i}$ – намагниченность в узле i. Мы предполагаем, что вектора $\mathbf{M}_{\mathbf{r}_i}$ имеют одинаковую длину: $|\mathbf{M}_{\mathbf{r}_i}| = M$ для всех i.

Для модели такого типа мы можем вывести следующее выражение для температуры Кюри

$$T_{\mathrm{C}} = \frac{JM^2Z}{3}, \qquad (35)$$

где Z – число ближайших соседей у одного атома. Это выражение может быть получено с помощью метода среднего поля, примененного к энергии (34). Равенство (35) позволяет оценить J, используя экспериментальные данные о температуре Кюри, низкотемпературной намагниченности подложки M и Z.

Далее, используя сначала тождественное преобразование формулы (34), а затем, переходя от суммирования по решетке к интегрированию по объему субстрата, получим в континуальном пределе:

$$E_m = -\frac{1}{2}JZM^2\mathcal{N} + \frac{J}{4}\sum_{i\boldsymbol{\delta}}\left(\mathbf{M}_{\mathbf{r}_i} - \mathbf{M}_{\mathbf{r}_i+\boldsymbol{\delta}}\right)^2 \cong$$
$$\cong -3J\mathcal{N}M^2 + \frac{JM^2}{2a_0}\int_V (\nabla m)^2 dV, \qquad (36)$$

где $\mathcal{N}$ обозначает количество узлов в магнитной подложке. Далее мы будем предполагать, что материал субстрата имеет кубическую решетку. Поэтому в ур. (36) мы положили $Z = 6$. Также мы считали для простоты, что элементарная длина кристаллической решетки подложки равна a_0 (обобщение на произвольную элементарную длину тривиально). Кроме этого, был использована подстановка (23) для вектора намагниченности.

Анализируя выражение (36), легко прийти к выводу, что при нулевом подкосе энергия ферромагнетика на простой кубической решетке будет равна:

$$E_\parallel = -3J\mathcal{N}M^2\,. \qquad (37)$$

Слагаемое, пропорциональное $\int dV(\nabla m)^2$ в формуле (36), отвечает за возрастание энергии, связанное с подкосом.

Нам необходимо найти функцию $m(\mathbf{r})$ такую, что она удовлетворяет условию (25) на поверхности, и при этом доставляет минимум функционалу энергии (36). Поступая стандартным образом, мы варьируем m под знаком интеграла. Проделав эту математическую операцию, получим уравнение Лапласа для величины m:

$$\nabla^2 m = 0\,. \tag{38}$$

Решая это дифференциальное уравнение с граничными условиями, выводим следующее выражение для m в подложке ($x < 0$):

$$m(\mathbf{r}) = -\frac{2}{3\sqrt{3}} m_\perp \exp\left(\xi^{-1} x\right) \sum_{\mathbf{K}} \sin\left(\mathbf{KR}\right), \tag{39}$$

где

$$\xi^{-1} = |\mathbf{K}| = \frac{4\pi}{3a_0}. \tag{40}$$

Как мы видим, подкос максимально силен непосредственно у поверхности, соприкасающейся с графеном ($x = 0$), и быстро спадает при удалении вглубь подложки.

Подставляя найденную функцию $m(\mathbf{r})$ в формулу (36) и производя интегрирование, получим поправку к энергии, которая возникает в результате подкоса намагниченности подложки:

$$\delta E_m = \frac{4\pi}{27} \frac{J m_\perp^2 M^2 \mathcal{S}}{a_0^2} = \frac{4\pi}{27} \frac{J h_\perp^2 \mathcal{S}}{a_0^2 \tau^2}\,. \tag{41}$$

Как мы видим, магнитная энергия, связанная с подкосом, квадратична по $m_\perp$ и не содержит неаналитических членов.

6. Расчет щели в случае наличия подкоса. Далее мы посмотрим, какая из структур намагниченности обладает меньшей полной энергией: структура с подкосом или без подкоса. Разница в энергии системы “подложка плюс графен” в состояниях с подкосом и без него, очевидно, равна $\delta E = E_2 - E_1 + \delta E_m$, где E_1 и E_2 даются формулами (22) и (33), соответственно. Минимизируя δE по $h_\perp$, получим уравнение:

$$\frac{\partial \delta E}{\partial h_\perp} = 2\mathcal{S} h_\perp \left\{ \frac{4\pi}{27} \frac{J}{a_0^2 \tau^2} - \right.$$
$$\left. - \frac{1}{\pi v_{\mathrm{F}}^2} \left[W - h + h \ln\left(\frac{2h}{h_\perp}\right) \right] \right\} = 0. \tag{42}$$

Оно имеет два решения: $h_\perp = 0$ (нет подкоса) и $h_\perp = h_\perp^* \neq 0$ (есть подкос). Можно показать, что минимуму энергии всегда соответствует решение с подкосом $h_\perp = h_\perp^* \neq 0$. При этом щель в спектре будет равна:

$$\Delta = 2h_\perp^* = 4h \exp\left(\frac{W}{h} - \frac{4\pi^2 v_{\mathrm{F}}^2 J}{27 a_0^2 \tau^2 h}\right). \tag{43}$$

Подставляя сюда выражение для скорости Ферми $v_{\mathrm{F}} = \frac{3}{2} a_0 t$, получим окончательный результат:

$$\Delta = 4\tau M \exp\left(\frac{W}{\tau M} - \frac{\pi^2 t^2 J}{3\tau^3 M}\right). \tag{44}$$

Кроме этого, в некоторых случаях удобно использовать и другую форму выражения для Δ:

$$\Delta = 4h \exp\left(\frac{W}{h} - \frac{\pi^2 t^2 T_{\mathrm{C}}}{6h^3}\right). \tag{45}$$

Для гетероструктуры, описанной в экспериментальной статье [5] (графен на подложке из ферромагнитного EuS, $T_{\mathrm{C}} = 16$ К), авторы предполагали, что зеемановское расщепление, индуцированное субстратом в графене, может достигать сотен тесла, что соответствует $h \gtrsim 6$ мэВ. При таких параметрах величина щели оказывается чрезвычайно малой и несущественной. Это главным образом связано с тем, что амплитуда перескока в графене $t \approx 3$ эВ намного превосходит h. Более развернутое обсуждение возможности экспериментального обнаружения магнитно-электронной неустойчивости будет проведено в следующем разделе.

7. Обсуждение и выводы. В данной работе мы теоретически показали, что основное состояние графена, находящегося на ферромагнитной подложке, неустойчиво по отношению к спонтанному возникновению подкашивающей деформации намагниченности. В результате развития неустойчивости комбинированной магнитно-электронной природы происходит фазовый переход. Он сопровождается исчезновением идеальной однородной ферромагнитной намагниченности подложки вблизи поверхности контакта с графеном, а также появлением диэлектрической щели в одноэлектронном спектре графена. Для этой щели нами были выведены формулы (43), (44) и (45).

В случае гетероструктуры, описанной в работе [5], эта щель пренебрежимо мала. Однако не стоит упускать из внимания ряд обстоятельств, которые могут позволить нашей неустойчивости проявить себя более явным образом. Во-первых, наша модель не включала эффекты электрон-электронного взаимодействия в графене. Учет взаимодействия, безусловно, будет влиять на конечный ответ: известно, что кулоновское взаимодействие приближает графен к порогу магнитной неустойчивости. Во-вторых, приведенные теоретические рассуждения распространяются на любую другую гетероструктуру, в которой графен замещен на какой-то иной двумерный дираковский материал. Если у дираковского материала на ферромагнитной подложке параметр t будет меньше, чем у графена, щель сразу увеличится. Аналогичную роль играет понижение скорости Ферми [действительно, как следует из ур. (43) и (44), именно большие значения амплитуды перескока t или скорости Ферми $v_{\mathrm{F}} = 3ta_0/2$, входящие в показатель экспоненциальной функции как t^2 и v_{F}^2, приводят к подавлению Δ]. В качестве примера интересного для нас материала можно указать двумерный подкрученный графен. Подкрученный графен является дираковским материалом, скорость Ферми которого зависит от угла подкрутки. В образце с малой скоростью Ферми можно ожидать усиления магнитно-электронной неустойчивости. Кроме того, открытие новых двумерных дираковских материалов, которые будут обладать значительно меньшим интегралом перескока, способствовало бы экспериментальной верификации наших выводов.

В дополнение к этому, возможна оптимизация системы за счет подбора материала подложки. Как видно из формулы (44), уменьшение обменного интеграла J в веществе субстрата приводит к увеличению щели, ведь высокие значения обменного интеграла препятствуют искажению идеального ферромагнитного порядка в веществе подложки. Из той же формулы также можно увидеть, что, чем сильнее магнитный эффект близости между субстратом и графеном (чем выше τ), тем больше значение диэлектрической щели. Это вполне естественно, ведь чем лучше графен "чувствует" намагниченность подложки, тем сильнее будет проявлять себя неустойчивость в рассматриваемой системе.

Давайте попробуем оценить желательные параметры гетероструктуры, гарантирующие уверенное экспериментальное наблюдение неустойчивости. Для этого потребуем, чтобы в формуле (45) показатель экспоненты был близок к нулю:

$$\frac{0.8t}{h} \sim \frac{\pi^2 t^2 T_{\mathrm{C}}}{6h^3}. \tag{46}$$

Для ферромагнитной подложки с $T_{\mathrm{C}} = 1\,\mathrm{K}$ это условие будет выполнено при $h \approx 20$ мэВ, что соответствует зеемановскому полю $B_Z = h/\mu_B \approx 300$ Тл. Если же $T_{\mathrm{C}} = 16\,\mathrm{K}$, как, например, у EuS, то $h \approx$ ≈ 80 мэВ или $B_{\mathrm{Z}} \approx 1300$ Тл. По мнению авторов работы [5], подложка из EuS способна индуцировать обменные поля в графене, достигающие сотен тесла. Возможно ли усилить эти поля до тысяч тесла, покажут дальнейшие экспериментальные исследования.

Подводя итоги, мы можем сказать, что из предлагаемой нами теоретической модели следует, что вследствие магнитного эффекта близости в спектре одноэлектронных возбуждений графена на магнитной подложке происходит снятие вырождения по спиновой проекции. При этом часть электронов меняет ориентацию спинов на противоположную, что приводит к образованию дырочных носителей в обедненной зоне и появлению электронных носителей в обогащенной зоне. Дырочная и электронная поверхности Ферми будут совпадать, т.е. возникнет нестинг поверхности Ферми, и, как следствие, утратится устойчивость исходного многочастичного состояния. В итоге, в приповерхностном слое подложки будет спонтанно нарушаться идеальная однородная ферромагнитная поляризация, и намагниченность приобретет пространственно-модулированную подкашивающую деформацию. После перехода системы в устойчивое состояние в спектре графена будет возникать диэлектрическая щель, выражение для которой было найдено нами.

---

1. W. Han, R. K. Kawakami, M. Gmitra, and J. Fabian, Nature Nanotechn. **9**, 794 (2014).
2. S. Roche, J. Åkerman, B. Beschoten et al. (Collaboration), 2D Mater. **2**, 030202 (2015).
3. C. Cardoso, D. Soriano, N. A. García-Martínez, and J. Fernández-Rossier, Phys. Rev. Lett. **121**, 067701 (2018).
4. S. S. Gregersen, S. R. Power, and A.-P. Jauho, Phys. Rev. B **95**, 121406(R) (2017).
5. P. Wei, S. Lee, F. Lemaitre, L. Pinel, D. Cutaia, W. Cha, F. Katmis, Y. Zhu, D. Heiman, J. Hone, J. S. Moodera, and C.-T. Chen, Nature Materials **15**, 711 (2016).
6. K. Zollner, M. Gmitra, T. Frank, and J. Fabian, Phys. Rev. B **94**, 155441 (2016).
7. H. X. Yang, A. Halla, D. Terrade, X. Waintal, S. Roche, and M. Chshiev, Phys. Rev. Lett. **110**, 046603 (2013).
8. I. S. Sokolov, D. V. Averyanov, O. E. Parfenov, I. A. Karateev, A. N. Taldenkov, A. M. Tokmachev, and V. G. Storchak, Mater. Horiz. **7**, 1372 (2020).
9. D. V. Averyanov, I. S. Sokolov, A. M. Tokmachev, O. E. Parfenov, I. A. Karateev, A. N. Taldenkov, and V. G. Storchack, ACS Appl. Mater. Interfaces **10**, 20767 (2018).
10. J. B. S. Mendes, O. Alves Santos, L. M. Meireles, R. G. Lacerda, L. H. Vilela-Leao, F. L. A. Machado, R. L. Rodríguez-Suarez, A. Azevedo, and S. M. Rezende, Phys. Rev. Lett. **115**, 226601 (2015).
11. J. C. Leutenantsmeyer, A. A. Kaverzin, M. Wojtaszek, and B. J. van Wees, 2D Mater. **4**, 014001 (2016).
12. I. L. Aleiner, D. E. Kharzeev, and A. M. Tsvelik, Phys. Rev. B **76**, 195415 (2007).
13. J. E. Drut and T. A. Lähde, Phys. Rev. Lett. **102**, 026802 (2009).

14. J. Sabio, F. Sols, and F. Guinea, Phys. Rev. B **82**, 121413 (2010).
15. D. V. Khveshchenko, Phys. Rev. Lett. **87**, 246802 (2001).
16. D. Khveshchenko, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 075303 (2009).
17. V. Gamayun, E. V. Gorbar, and V. P. Gusynin, Phys. Rev. B **81**, 075429 (2010).
18. W. Armour, S. Hands, and C. Strouthos, Phys. Rev. B **81**, 125105 (2010).
19. S. Sorella and E. Tosatti, Europhys Lett. **19**, 699 (1992).
20. J. Sabio, F. Sols, and F. Guinea, Phys. Rev. B **81**, 045428 (2009).
21. A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. **109**, 206801 (2012).
22. A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, and F. Nori, Phys. Rev. B **87**, 121401 (2013).
23. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **88**, 045409 (2013).
24. R. S. Akzyanov, A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **90**, 155415 (2014).
25. A. Rozhkov, A. Sboychakov, A. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rep. **648**, 1 (2016).
26. R. Nandkishore and L. Levitov, Phys. Rev. Lett. **104**, 156803 (2010).
27. R. Nandkishore and L. Levitov, Phys. Rev. B **82**, 115124 (2010).
28. M. Kharitonov, Phys. Rev. B **86**, 195435 (2012).
29. L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **87**, 115411 (2013).
30. Y. Lemonik, I. Aleiner, and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **85**, 245451 (2012).
31. А. В. Рожков, А. О. Сбойчаков, Д. А. Хохлов, А. Л. Рахманов, К. И. Кугель, Письма в ЖЭТФ **112**, 764 (2020).
32. A. L. Rakhmanov, A. O. Sboychakov, K. I. Kugel, A. V. Rozhkov, and F. Nori, Phys. Rev. B **98**, 155141 (2018).
33. A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, A. O. Sboychakov, K. I. Kugel, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. **119**, 107601 (2017).
34. D. A. Khokhlov, A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, and A. O. Sboychakov, Phys. Rev. B **101**, 235141 (2020).