Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 10, с. 708 – 715 © 2022 г. 25 ноября

Распределение заряда и волна спиновой плотности в подкрученном двухслойном графене при магическом угле подкрутки

А. О. Сбойчаков[1], *А. В. Рожков*, *А. Л. Рахманов*

Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 12 октября 2022 г.
После переработки 12 октября 2022 г.
Принята к публикации 13 октября 2022 г.

Исследована волна спиновой плотности на фоне неоднородного распределения заряда как возможное основное состояние подкрученного двухслойного графена при магическом угле подкрутки. Если взаимодействие электронов не учитывается, то низкоэнергетический спектр материала состоит из четырех (или 8, если учитывать спин) почти плоских, почти вырожденных зон. Взаимодействие снимает вырождение, образуя параметр порядка, который обычно считают волной спиновой плотности с некой заранее выбранной спиновой конфигурацией. В данной работе мы самосогласованно рассчитываем спиновую конфигурацию параметра порядка, а также учитываем неоднородное распределение плотности заряда внутри сверхъячейки. Оказывается, что волна спиновой плотности устойчива в диапазоне допирования от -4 до $+4$ дополнительных электронов на сверхъячейку. Спиновая текстура меняется от коллинеарной при нулевом допировании до почти копланарной при конечном допировании. При допировании параметр порядка приобретает нематическую симметрию. Показано, что в энергетических единицах локальная спиновая намагниченность намного больше, чем вариация плотности заряда, если допирование не превышает трех дополнительных электронов или дырок на сверхъячейку.

DOI: 10.31857/S1234567822220104, EDN: lyypfe

После открытия диэлектрических моттовских состояний [1, 2] и сверхпроводимости [2, 3] в подкрученном двухслойном графене (tBLG) этот материал интенсивно изучается. В tBLG один слой графена повернут относительно другого на угол θ. В результате в системе появляется сверхструктура при определенных соразмерных θ [4]. Низкоэнергетические электронные свойства существенно зависят от θ. При так называемом первом магическом угле $\theta_c \cong 1^\circ$ энергетический спектр вблизи уровня Ферми состоит из четырех (восьми, если включен спин) почти плоских зон. Наличие плоских зон делает систему очень восприимчивой к межэлектронным взаимодействиям. Взаимодействия приводят к спонтанному нарушению определенных симметрий. Природа несверхпроводящих многочастичных состояний в tBLG еще окончательно не выяснена. Были предложены различные типы основных состояний tBLG [5–15]. Волна спиновой плотности (ВСП) входит в их число [7, 8, 10, 11].

В наших предыдущих работах [10, 11] мы предположили, что планарная ВСП является основным состоянием системы в диапазоне допирования $-4 < x < 4$ электронов на сверхъячейку. Этот выбор не был произвольным. Известно, что в tBLG при малом угле подкрутки электроны на уровне Ферми расположены в областях с AA упаковкой [4, 16]. Основное состояние двухслойного AA графена должно быть антиферромагнитным [17, 18]. Наше моделирование качественно хорошо воспроизвело экспериментально наблюдаемую зависимость проводимости tBLG от допирования. Мы также показали [11], что допирование системы приводит к образованию нематического состояния, которое наблюдается в STM экспериментах [19–22].

В данной работе мы расширяем разнообразие возможных параметров порядка, рассматривая некопланарную ВСП на фоне неоднородного распределения заряда. Спиновая текстура меняется с коллинеарной на почти копланарную при допировании. Показано, что симметрия ВСП уменьшается при допировании. Это приводит к образованию нематического состояния. В то же время на симметрию распределения плотности заряда допирование практически не влияет. Нематическое состояние может проявляться в несимметричном пространственном распределении локальной плотности состояний, которое наблюдалось экспериментально [19–22]. Оказывается, что в энергетических единицах локальная намагниченность намного сильнее, чем вариа-

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

ция плотности заряда, если допирование не превышает трех дополнительных электронов или дырок на сверхъячейку.

Модельный гамильтониан. Сверхструктура в tBLG возникает, когда θ удовлетворяет условию

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

где m_0 и r положительные взаимно простые числа [4]. Ячейка сверхрешетки имеет форму правильного ромба. Когда $r = 1$, эта ячейка совпадает с ячейкой муара. В нашем исследовании мы рассматриваем только такие сверхструктуры. Когда угол подкрутки мал, сверхъячейку можно рассматривать как состоящую из областей со AA, AB и BA упаковками [4, 23].

Мы используем следующий гамильтониан:

$$H = \sum_{\substack{\mathbf{nm}ij\\ \alpha\beta\sigma}} t(\mathbf{r}_\mathbf{n}^{i\alpha};\mathbf{r}_\mathbf{m}^{j\beta}) d^\dagger_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} d_{\mathbf{m}j\beta\sigma} + U\sum_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} n_{\mathbf{n}i\alpha\uparrow} n_{\mathbf{n}i\alpha\downarrow} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{\substack{\mathbf{nm}ij\\ \alpha\beta\sigma\sigma'}}{}' V(\mathbf{r}_\mathbf{n}^{i\alpha} - \mathbf{r}_\mathbf{m}^{j\beta}) n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} n_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}. \quad (2)$$

Здесь $d^\dagger_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}$ ($d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) электрона со спином σ $(=\uparrow,\downarrow)$ в элементарной ячейке $\mathbf{n}$ в слое i $(=1,2)$ в подрешетке α $(=\mathcal{A},\mathcal{B})$, а $n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} = d^\dagger_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}$. Первый член в (2) является одночастичным гамильтонианом сильной связи, где $t(\mathbf{r}_\mathbf{n}^{i\alpha};\mathbf{r}_\mathbf{m}^{j\alpha})$ – амплитуды перескока электрона с узла в позиции $\mathbf{r}_\mathbf{m}^{j\beta}$ на узел $\mathbf{r}_\mathbf{n}^{i\alpha}$. Второй член в уравнении (2) описывает локальное (хаббардовское) взаимодействие электронов, в то время как последний член соответствует межузловому кулоновскому взаимодействию (члены с $\mathbf{r}_\mathbf{n}^{i\alpha} = \mathbf{r}_\mathbf{m}^{j\beta}$ следует исключить).

Внутри слоев мы учитываем только перескоки между ближайшими соседями с амплитудой $t = -2.57$ эВ. Межслоевые перескоки описываются формулой Слатера–Костера для p_z электронов

$$t(\mathbf{r};\mathbf{r}') = \frac{[(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{e}_z]^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2} V_\sigma(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad (3)$$

где $\mathbf{e}_z$ – единичный вектор, перпендикулярный слоям,

$$V_\sigma(\mathbf{r}) = t_0 e^{-(|\mathbf{r}|-d)/r_0} F_c(|\mathbf{r}|),\ F_c(r) = \frac{1}{1+e^{(r-r_c)/l_c}}. \quad (4)$$

Функция $F_c(r)$ вводится, чтобы занулить перескоки на расстояниях больше r_c. Мы берем $r_c = 4.92$ Å, $l_c = 0.2$ Å. Параметр t_0 определяет наибольшую амплитуду межслоевых перескоков. Мы выбрали $t_0 = 0.37$ эВ (это значение использовалось для описания двухслойного AB графена [4]). Параметр r_0 описывает, как быстро амплитуды перескоков затухают внутри области $r < r_c$. Мы положили $r_0 = 0.34$ Å.

При первом магическом угле $\theta = \theta_c$ низкоэнергетическая зонная структура состоит из четырех почти плоских, почти вырожденных зон, отделенных энергетическими щелями от более низких и более высоких дисперсионных зон. Ширина плоских зон W имеет минимум при $\theta = \theta_c$. Для параметров модели, используемых в работе, мы численно определяем, что $W = 1.8$ мэВ, щели между плоскими и дисперсионными зонами составляют приблизительно 2.5 мэВ, а $\theta_c = 1.08°$ (что близко к экспериментальному значению и соответствует структуре с $m_0 = 30$ и $r = 1$).

Волны спиновой и зарядовой плотности. Если в системе есть плоские зоны, пересекающие уровень Ферми, то взаимодействия становятся важными. Они нарушают симметрию одночастичного гамильтониана, приводя к возникновению параметра порядка. Рассмотрим сначала ВСП. Введем одноузельные параметры порядка

$$\Delta_{\mathbf{n}i\alpha} = U\langle d^\dagger_{\mathbf{n}i\alpha\uparrow} d_{\mathbf{n}i\alpha\downarrow}\rangle, \\ \Delta^z_{\mathbf{n}i\alpha} = U\left[\langle d^\dagger_{\mathbf{n}i\alpha\uparrow} d_{\mathbf{n}i\alpha\uparrow}\rangle - \langle d^\dagger_{\mathbf{n}i\alpha\downarrow} d_{\mathbf{n}i\alpha\downarrow}\rangle\right]/2. \quad (5)$$

Величина $\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}$ комплексна, а $\Delta^z_{\mathbf{n}i\alpha}$ действительна. Эти величины описывают намагниченность на узлах

$$\mathbf{S}_{\mathbf{n}i\alpha} = [\mathrm{Re}(\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}),\ \mathrm{Im}(\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}),\ \Delta^z_{\mathbf{n}i\alpha}]/U. \quad (6)$$

Параметры $\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}$ и $\Delta^z_{\mathbf{n}i\alpha}$ контролируются хаббардовским взаимодействием. Мы положили $U = 2t$. Это значение несколько меньше критической величины $U_c = 2.23t$, соответствующей переходу однослойного графена в антиферромагнитное состояние в приближении среднего поля [24]. В этом случае хаббардовское взаимодействие не мало, но оно недостаточно, чтобы открыть щель в однослойном графене.

В графене каждый атом в подрешетке имеет трех ближайших соседей, принадлежащих другой подрешетке. По этой причине мы рассматриваем три типа параметров порядка, связывающих электроны, локализованные на ближайших соседях в каждом слое, $A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma}$ и $A^{z(\ell)}_{\mathbf{n}i}$ $(\ell = 1, 2, 3)$, где величина ℓ соответствует трем различным связям, соединяющим ближайших соседей. Эти параметры порядка определяются следующим образом

$$A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma} = V_{\mathrm{nn}}\langle d^\dagger_{\mathbf{n}+\mathbf{n}_\ell i\mathcal{A}\sigma} d_{\mathbf{n}i\mathcal{B}\bar{\sigma}}\rangle, \quad (7) \\ A^{z(\ell)}_{\mathbf{n}i} = \frac{V_{\mathrm{nn}}}{2}\left(\langle d^\dagger_{\mathbf{n}+\mathbf{n}_\ell i\mathcal{A}\uparrow} d_{\mathbf{n}i\mathcal{B}\uparrow}\rangle - \langle d^\dagger_{\mathbf{n}+\mathbf{n}_\ell i\mathcal{A}\downarrow} d_{\mathbf{n}i\mathcal{B}\downarrow}\rangle\right),$$

где $\mathbf{n}_1 = (0, 0)$, $\mathbf{n}_2 = (1, 0)$, $\mathbf{n}_3 = (0, 1)$, $\bar{\sigma} = -\sigma$, а $V_{\mathrm{nn}} = V(|\boldsymbol{\delta}|)$ – энергия взаимодействия электронов на ближайших атомах внутри слоя ($\boldsymbol{\delta}$ – вектор, соединяющий атомы на подрешетках $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ в элементарной ячейке). Мы выбрали $V_{\rm nn}/U = 0.59$, в согласии с [25]. Параметры порядка (7) определяют спины на связях между ближайшими соседями внутри слоя

$$\mathbf{S}^{(\ell)}_{\mathbf{n}i} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'}\langle d^{\dagger}_{\mathbf{n}+\mathbf{n}_\ell i\mathcal{A}\sigma} d_{\mathbf{n}i\mathcal{B}\sigma'}\rangle + \text{c.c.} = \tag{8}$$

$$= \frac{1}{V_{\rm nn}}\left(\frac{1}{2}\,\text{Re}[A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\uparrow} + A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\downarrow}],\, \frac{1}{2}\,\text{Im}[A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\uparrow} - A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\downarrow}], A^{z(\ell)}_{\mathbf{n}i}\right),$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – матрицы Паули. В отличие от работы [11], спинам $\mathbf{S}_{\mathbf{n}i\alpha}$ и $\mathbf{S}^{(\ell)}_{\mathbf{n}i}$ разрешено иметь z компоненты. В работе [11] рассматривались параметры порядка, связывающие электроны в разных слоях. Расчеты показали, однако, что эти компоненты на порядок меньше, чем $A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma}$ (которые меньше, чем $\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}$). В настоящей работе мы пренебрегаем такими параметрами порядка.

Помимо ВСП, в данной работе учтены вклады типа волны зарядовой плотности. Мы принимаем во внимание, что заряды неравномерно распределены внутри сверхъячейки, и вводим величину

$$\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha} = \frac{U}{2}\left[\sum_{\sigma}\langle d^{\dagger}_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}\rangle - 1\right], \tag{9}$$

которую можно рассматривать как одноузельный потенциал, описывающий неоднородное распределение заряда. Этот параметр конечен даже при отсутствии какого-либо нарушения симметрии, поскольку узлы внутри сверхъячейки не идентичны. Поэтому, он не может рассматриваться как параметр порядка. Потенциал $\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha}$ нормирован так, что

$$\frac{2}{U\mathcal{N}_{sc}}\sum_{\mathbf{n}i\alpha}\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha} = x, \tag{10}$$

где $\mathcal{N}_{sc}$ – число сверхъячеек в системе, а x – число дополнительных электронов или дырок, приходящихся на одну сверхъячейку. Помимо $\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha}$, мы вводим также потенциалы вида

$$A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}i} = \frac{V_{\rm nn}}{2}\sum_{\sigma}\langle d^{\dagger}_{\mathbf{n}+\mathbf{n}_\ell i\mathcal{A}\sigma} d_{\mathbf{n}i\mathcal{B}\sigma}\rangle. \tag{11}$$

Мы полагаем, что все введенные распределения заряда и спина имеют периодичность сверхструктуры.

Итерационная процедура. Для вычисления параметров порядка и потенциалов мы используем метод среднего поля. Он основан на расцеплении членов четвертого порядка в уравнении (2):

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}n_{\mathbf{m}j\beta\sigma'} \to\, & n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}\langle n_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}\rangle + n_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}\langle n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}\rangle - \\ & - \langle n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}\rangle\langle n_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}\rangle - d^{\dagger}_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}d_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}\langle d^{\dagger}_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}\rangle - \\ & - d^{\dagger}_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}\langle d^{\dagger}_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}d_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}\rangle + \\ & + \langle d^{\dagger}_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}d_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}\rangle\langle d^{\dagger}_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}\rangle. \end{aligned} \tag{12}$$

В результате мы получаем гамильтониан среднего поля $H^{\rm MF}$. Численный алгоритм нахождения параметров порядка и потенциалов аналогичен используемому в работе [11]. Сначала мы запишем электронные операторы в импульсном представлении [26]

$$d_{\mathbf{pG}i\alpha\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}\sum_{\mathbf{n}}\exp\left[-i(\mathbf{p}+\mathbf{G})\mathbf{r}^i_{\mathbf{n}}\right]d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}, \tag{13}$$

где $\mathcal{N}$ – количество элементарных ячеек графена в одном слое образца, $\mathbf{r}^i_{\mathbf{n}}$ – положение $\mathbf{n}$-й элементарной ячейки i-го слоя, импульс $\mathbf{p}$ лежит в первой зоне Бриллюэна сверхрешетки, а $\mathbf{G}$ – обратные векторы сверхрешетки, лежащие в первой зоне Бриллюэна. Количество векторов $\mathbf{G}$ равно $N_{\rm sc} = \mathcal{N}/\mathcal{N}_{sc}$ для каждого слоя графена.

Гамильтониан среднего поля $\hat{H}_{\mathbf{p}}$ представляет собой матрицу $N_R \times N_R$, где $N_R = 8N_{\rm sc}$ (коэффициент 8 обусловлен индексами спина, слоя и подрешетки). Ранг этой матрицы слишком велик, чтобы выполнить численное интегрирование по квазиимпульсу $\mathbf{p}$ за реалистичное время. Действительно, для магического угла $\theta_c = 1.08°$, имеем $N_R = 22328$. По этой причине мы используем упрощения. Основной вклад в параметры порядка вносят низкоэнергетические состояния. Следовательно, вклады от других состояний можно учитывать приближенно. В пределе несвязанных ($t_0 = 0$) слоев графена и нулевых параметров порядка матрица $\hat{H}_{\mathbf{p}}$ является блочно-диагональной с 2×2 матрицами на ее диагонали

$$-t\begin{pmatrix} 0 & f^i_{\mathbf{p}+\mathbf{G}} \\ f^{i*}_{\mathbf{p}+\mathbf{G}} & 0 \end{pmatrix}, \tag{14}$$

где $f^i_{\mathbf{p}} = 1 + e^{-i\mathbf{p}\mathbf{a}^i_1} + e^{-i\mathbf{p}\mathbf{a}^i_2}$, $\mathbf{a}^i_{1,2}$ – векторы решетки i-го слоя. Собственные значения такой матрицы равны $\pm t|f^i_{\mathbf{p}+\mathbf{G}}|$. Амплитуды межслоевых перескоков и параметры порядка намного меньше, чем t. Поэтому, интересуясь поведением на низких энергиях, мы можем использовать усеченную матрицу $\hat{H}'_{\mathbf{p}}$, исключая строки и столбцы в $\hat{H}_{\mathbf{p}}$, содержащие элементы с $t|f^i_{\mathbf{G}+\mathbf{p}}| > E_R$, где E_R – энергия обрезания. Ранг усеченной матрицы равен $N'_R < N_R$. Собственные энергии $E^{(S)}_{\mathbf{p}}$ из $\hat{H}'_{\mathbf{p}}$, которые лежат близко к $\pm E_R$, вычисляются со значительными ошибками. Чтобы устранить эту проблему, мы учитываем только зоны с $|E^{(S)}_{\mathbf{0}}| < E_0$, где $E_0 < E_R$. Количество таких зон равно $N_0 < N'_R$. Мы используем $E_0 = 0.2t$, $E_R = 0.4t$ ($N_0 = 480$, $N'_R = 720$). Расчеты с меньшими и большими E_R и E_0 показывают, что результаты почти не зависят от этих величин.

Вклад в полную энергию от отброшенных состояний $E^{(S)}_{\mathbf{p}} < -E_0$ должен учитываться отдельно. Поскольку E_0 намного больше параметров порядка, это можно сделать пертурбативно. Ведущие поправки к полной энергии квадратичны по параметрам порядка $\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}$, $\Delta^z_{\mathbf{n}i\alpha}$, $A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma}$ и $A^{z(\ell)}_{\mathbf{n}i}$. Мы предполагаем, что коэффициенты пропорциональности одинаковы для всех этих параметров порядка и равны

$$-\frac{1}{V_c(E_0)}=-\frac{1}{2}\int_{E_0}^{3t}dE\,\frac{\rho_0(E)}{E}, \tag{15}$$

где $\rho_0(E)$ – плотность состояний в графене. Такая поправка может быть учтена путем следующей замены в гамильтониане среднего поля:

$$H^{\mathrm{MF}}\to H'^{\mathrm{MF}}-\sum_{\mathbf{n}i\alpha}\frac{|\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}|^2}{V_c(E_0)}-\sum_{\mathbf{n}i\alpha}\frac{|\Delta^z_{\mathbf{n}i\alpha}|^2}{V_c(E_0)}-$$
$$-\sum_{\mathbf{n}i\ell\sigma}\frac{|A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma}|^2}{V_c(E_0)}-\sum_{\mathbf{n}iz\ell\sigma}\frac{|A^{z(\ell)}_{\mathbf{n}i}|^2}{V_c(E_0)}, \tag{16}$$

где H'^{MF} – гамильтониан в усеченном базисе. Вклады в Δ^c и $A^{c(\ell)}$ от зон с $E^{(S)}_{\mathbf{p}}<-E_0$ почти не зависят от взаимодействий и упорядочения. В пределе несвязанных слоев и нулевых параметров порядка вклад в $\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha}$ от каждой исключенной зоны равен $U/(4N_{sc})$. В результате мы получаем условие самосогласования

$$\frac{2}{U}\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha}=\frac{1}{N_{sc}}\sum_S{}'\sum_{\mathbf{G}\mathbf{G}'\sigma}\int\frac{d^2\mathbf{p}}{v_{RBZ}}\Phi^{(S)*}_{\mathbf{p}\mathbf{G}i\alpha\sigma}\Phi^{(S)}_{\mathbf{p}\mathbf{G}'i\alpha\sigma}\times$$
$$\times\,e^{-i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\mathbf{r}^i_{\mathbf{n}}}\Theta\left(\mu-E^{(S)}_{\mathbf{p}}\right)-N_0/8N_{sc}, \tag{17}$$

где $\Phi^{(S)}_{\mathbf{p}\mathbf{G}i\alpha\sigma}$ – собственные функции $\hat{H}'_{\mathbf{p}}$, $\Theta(x)$ – функция Хевисайда, v_{RBZ} – площадь зоны Бриллюэна сверхъячейки, а μ – химический потенциал. Суммирование в уравнении (17) выполняется по N_0 зонам и усеченному базису, а уравнение для μ имеет вид

$$\sum_S{}'\int\frac{d^2\mathbf{p}}{v_{RBZ}}\Theta\left(\mu-E^{(S)}_{\mathbf{p}}\right)-\frac{N_0}{2}=x. \tag{18}$$

Вклад в $A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}i}$ от исключенных зон отличен от нуля (можно проверить, что он отличен от нуля и для однослойного графена). В пределе несвязанных слоев этот вклад не зависит от $\mathbf{n}$ и i. Таким образом, можно записать $A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}i}=\bar{A}+\delta A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}i}$, где $\bar{A}$ может быть оценено как

$$\bar{A}=\frac{V_{nn}}{2}\int\frac{d^2\mathbf{k}}{v_{BZ}}e^{-i\varphi^i_{\mathbf{k}}}\,\Theta\left(t|f^i_{\mathbf{k}}|-E_0\right), \tag{19}$$

где $\varphi^i_{\mathbf{k}}=\arg(f^i_{\mathbf{k}})$, а $\bar{A}$ не зависит от i. Для выбранных параметров модели, имеем $\bar{A}/V_{nn}=0.26$. Параметр $\bar{A}$ перенормирует амплитуду перескока между ближайшими соседями t. Мы предполагаем, что эта перенормировка уже поглощена значением $t=-2.57$ эВ и, следовательно, может быть проигнорирована. Что касается $\delta A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}i}$, мы добавляем квадратичный член к эффективному гамильтониану, аналогично тому как это сделано в уравнении (16).

Чтобы вычислить параметры порядка и потенциалы, мы минимизируем полную энергию $\mathcal{E}$ методом последовательных приближений. На каждой итерации мы вычисляем $E^{(S)}_{\mathbf{p}}$ и $\Phi^{(S)}_{\mathbf{p}\mathbf{G}i\alpha\sigma}$ матрицы $\hat{H}'_{\mathbf{p}}$ и градиенты $\partial\mathcal{E}/\partial\lambda=\langle\partial\mathcal{H}^{\mathrm{MF}}/\partial\lambda\rangle$, где $\lambda=\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}$, $\Delta^z_{\mathbf{n}i\alpha}$, $A^{(\ell)}_{\mathbf{n}i\sigma}$, $A^{z(\ell)}_{\mathbf{n}i}$ или $\delta A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}i}$. Эти градиенты используются для вычисления новых значений вышеупомянутых величин. Новое значение $\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha}$ находится с помощью уравнения (17) с μ из уравнения (18).

Результаты. Численный расчет показал, что ВСП существует при любом уровне допинга $|x|\le 4$. Однако пространственные распределения намагниченности качественно различны для разных x. Начнем с $x=0$. Рисунки 1a–d изображают пространственные распределения $\mathcal{D}_{\mathbf{n}i\alpha}=U|\mathbf{S}_{\mathbf{n}i\alpha}|$ и $\mathcal{A}^{(\ell)}_{\mathbf{n}i}=V_{\mathrm{nn}}|\mathbf{S}^{(\ell)}_{\mathbf{n}i}|$ внутри сверхъячейки для $i=1$. Эти величины описывают абсолютные значения спина на узлах и спина на связях, соответственно. Параметры порядка отличны от нуля только в области AA. При нулевом допировании пространственные распределения параметров порядка довольно симметричны. Область ненулевого $\mathcal{D}_{\mathbf{n}1\alpha}$ имеет вид "закругленного" шестиугольника. Этот шестиугольник инвариантен при вращении на 60° вокруг центра области AA $\mathbf{R}_0=(\mathbf{R}_1+\mathbf{R}_2)/3$, где $\mathbf{R}_{1,2}$ – векторы сверхрешетки. Рисунки 1b–d показывают, что спиновая намагниченность на связях отлична от нуля в областях, имеющих форму гантели. Вращение на 180°, а также поворот на 120° вокруг $\mathbf{R}_0$ сохраняют $\mathcal{A}^{(\ell)}_{\mathbf{n}1}$.

Когда $x=0$ все спины, $\mathbf{S}_{\mathbf{n}i\alpha}$ и $\mathbf{S}^{(\ell)}_{\mathbf{n}i}$, коллинеарны. Для слоя 1 все локальные спины $\mathbf{S}_{\mathbf{n}1\mathcal{A}}$ подрешетки $\mathcal{A}$ направлены вдоль оси x, в то время как в подрешетке $\mathcal{B}$ они имеют противоположное направление. То же самое верно и для слоя 2. Следовательно, имеется коллинеарное АФМ упорядочение. Спины на связях $\mathbf{S}^{(\ell)}_{\mathbf{n}i}$ также образуют своего рода АФМ структуру: в одной части гантели $\mathbf{S}^{(\ell)}_{\mathbf{n}i}$ направлены вдоль оси x, в то время как в другой части гантели они имеют противоположное направление.

Распределения параметров порядка изменяются с допированием. На рисунке 1e – h показано пространственное распределение $\mathcal{D}_{\mathbf{n}1\alpha}$ и $\mathcal{A}^{(\ell)}_{\mathbf{n}1}$ при допировании $x=-2$. Видно, что теперь никакой гексагональной симметрии не существует. Профиль $\mathcal{D}_{\mathbf{n}1\alpha}$ растянут в определенном направлении, и симметрия при вращении на 120° для $\mathcal{A}^{(\ell)}_{\mathbf{n}1}$ исчезает. Однако все эти пара-

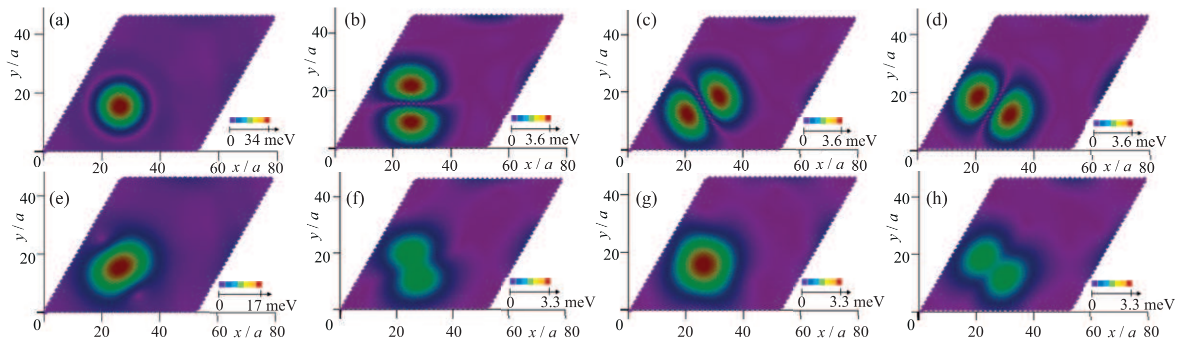

Рис. 1. (Цветной онлайн) Пространственные распределения параметров порядка $\mathcal{D}_{\mathbf{n}1\alpha}$ ((a), (e)) и $\mathcal{A}^{(\ell)}_{\mathbf{n}1}$ ((b) – (d) и (f) – (h)) (определение см. в тексте), вычисленные при $x = 0$ ((a) – (d)) и $x = -2$ ((e) – (h)). Допирование уменьшает симметрию параметров порядка с C_6 до C_2

метры порядка симметричны при вращении на 180°. В допированных системах спиновые текстуры больше не являются коллинеарными. Спины на узле оказываются копланарными. Мы считаем, что это не артефакт, поскольку численная процедура учитывала некопланарные текстуры. Спины на узле $\mathbf{S}_{\mathbf{n}i\alpha}$ лежат в плоскости xz (см. рис. 2), они образуют спиральную АФМ структуру. Спины на связях, $\mathbf{S}^{(\ell)}_{\mathbf{n}i}$, обра-

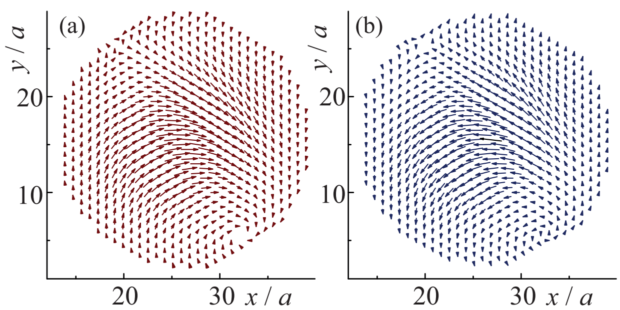

Рис. 2. (Цветной онлайн) Спины на узле $\mathbf{S}_{\mathbf{n}1\alpha}$ в подрешетке $\mathcal{A}$ (a) и $\mathcal{B}$ (b) при $x = -2$. Спины лежат в плоскости xz. Для наглядности спины повернуты из плоскости xz в плоскость xy. Показана только AA область сверхъячейки

зуют некопланарные структуры. Однако почти все эти спины лежат в плоскости xz, и лишь небольшая часть из них имеет y компоненты. Рисунки 3a–c показывают направления спинов $\mathbf{S}^{(\ell)}_{\mathbf{n}i}$, спроецированных на плоскость xy, в то время как рис. 3d–f показывают направления спинов, спроецированных на плоскость xz (с последующим вращением в плоскость xy). Мы видим, что почти все спины лежат в плоскости xz. Спины, нарушающие копланарность, лежат вдоль трех линий, проходящих через центр области AA. Эти линии видны на рис. 3a–c.

На рисунке 4 показаны пространственные распределения потенциала $\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha}$, рассчитанные при нулевом допировании (панели (a) – (d)) и при $x = -2$ (панели (e) – (h)). Распределения показаны для каждого слоя и подрешетки отдельно. При $x = 0$ наблюдается избыток электронов в области AA и недостаток электронов в AB (углы сверхъячейки) и BA (область с центром в $\mathbf{R}_{BA} = 2(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)/3$) областях сверхячейки. При $x = -2$ область, где наблюдается избыток электронов, расширяется; дополнительные электроны также появляются в AB (для $\Delta^c_{\mathbf{n}1\mathcal{B}}$ и $\Delta^c_{\mathbf{n}2\mathcal{A}}$) и BA (для $\Delta^c_{\mathbf{n}1\mathcal{A}}$ и $\Delta^c_{\mathbf{n}2\mathcal{B}}$) областях. При нулевом допировании распределения зарядов остаются инвариантными при вращении на 120° вокруг точки $\mathbf{R}_0$. Потенциалы $\Delta^c_{\mathbf{n}i\mathcal{A}}$ и $\Delta^c_{\mathbf{n}i\mathcal{B}}$ преобразуются друг в друга при вращении на 60° вокруг точки $\mathbf{R}_0$. То же самое верно и при $x = -2$. Таким образом, нематичность не проявляется через распределение заряда.

На рисунке 5 показаны пространственные распределения потенциалов $\delta A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}1}$, рассчитанные при $x = 0$ и $x = -2$. Профили $\delta A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}1}$ примерно одинаковы для $x = 0$ и -2, и только абсолютные значения $\delta A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}1}$ меняются. Пространственные распределения приблизительно симметричны при вращении на 180° вокруг $\mathbf{R}_0$. Потенциалы $\delta A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}1}$ преобразуются друг в друга и при вращении на 120° вокруг точки $\mathbf{R}_0$.

Таким образом, допирование уменьшает симметрию ВСП с C_6, которая является симметрией решетки, до C_2, указывая на появление нематического состояния [11]. Симметрия же связанных с зарядом величин практически не зависит от допирования. Параметры Δ^c и $A^{c(\ell)}$ представляют собой интегрированные величины, на которые влияют вклады высокоэнергетических состояний, нечувствительных к нарушению низкоэнергетической симметрии. В то же время электронное нематическое состояние может проявляться как уменьшение симметрии локальной плотности состояний, что может быть обна-

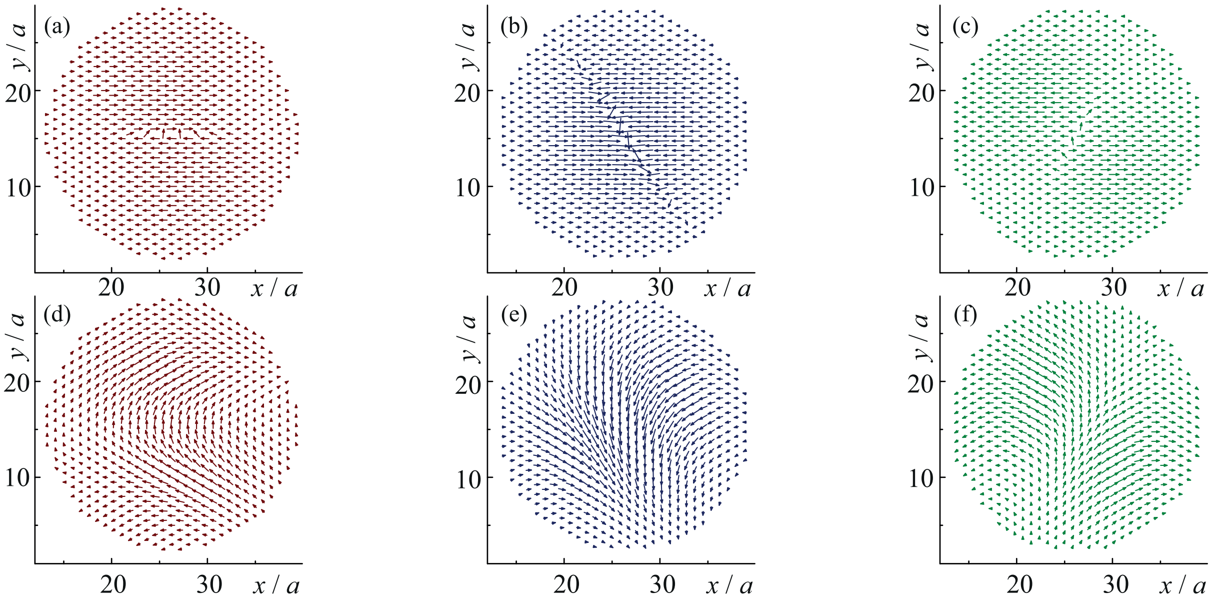

Рис. 3. (Цветной онлайн) Спины на связях, $\mathbf{S}^{(\ell)}_{\mathbf{n}1}$, рассчитанные при $x = -2$. Панели (a)–(c) показывают xy проекции спинов при различных значениях $\ell = 1, 2, 3$, в то время как панели (d)–(f) показывают xz проекции спинов (после поворота в плоскость xy). Показана только AA область сверхъячейки

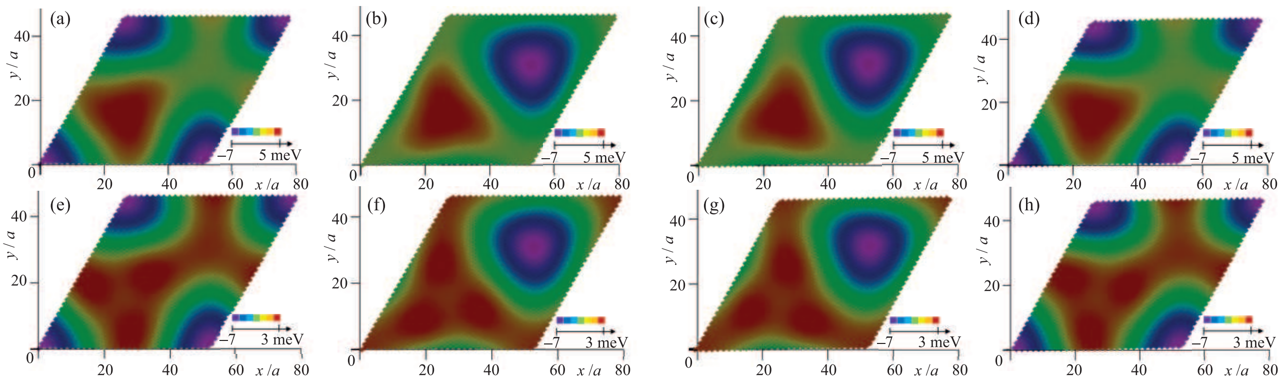

Рис. 4. (Цветной онлайн) Пространственные распределения одноузельных потенциалов $\Delta^c_{\mathbf{n}1\mathcal{A}}$ ((a), (e)), $\Delta^c_{\mathbf{n}1\mathcal{B}}$ ((b), (f)), $\Delta^c_{\mathbf{n}2\mathcal{A}}$ ((c), (g)) и $\Delta^c_{\mathbf{n}2\mathcal{B}}$ ((d), (h)), вычисленные при $x = 0$ ((a)–(d)) и при $x = -2$ ((e)–(h))

ружено в эксперименте STM. На рисунке 6 показано пространственное распределение локальной плотности состояний, рассчитанное вблизи половинного заполнения. Пространственный профиль растягивается, указывая на появление нематического состояния. Такая особенность наблюдалась в экспериментах [19–22].

Наконец, сравним значения вариаций плотности спина и заряда. При нулевом допировании максимальное значение параметра $\mathcal{D}_{\mathbf{n}i\alpha}$ равно примерно 34 мэВ. В то же время изменение плотности заряда на узлах $\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha}$ примерно в 6 раз меньше. Параметры порядка уменьшаются до нуля, когда допинг изменяется с $x = 0$ на $x = \pm 4$. В то же время значения Δ^c не сильно меняются с x. Однако даже при $x = \pm 2$ максимальное значение $\mathcal{D}_{\mathbf{n}i\alpha}$ примерно в 3 раза больше, чем значение $|\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha}|$, и только при $|x| \approx 3$ параметр $\mathcal{D}_{\mathbf{n}i\alpha}$ становится сопоставимым с $|\Delta^c_{\mathbf{n}i\alpha}|$.

Заключение. Методом среднего поля численно исследованы ВСП и распределение заряда в tBLG с магическим углом подкрутки в диапазоне допирования $x = \pm 4$ дополнительных электронов на сверхъячейку. Одноэлектронный спектр имеет 8 (с учетом спина) почти плоских, почти вырожденных зон. Электрон-электронное взаимодействие нарушает симметрию одночастичного состояния, образуя набор параметров порядка. Мы самосогласованно вычислили распределение заряда в сверхъячейке и

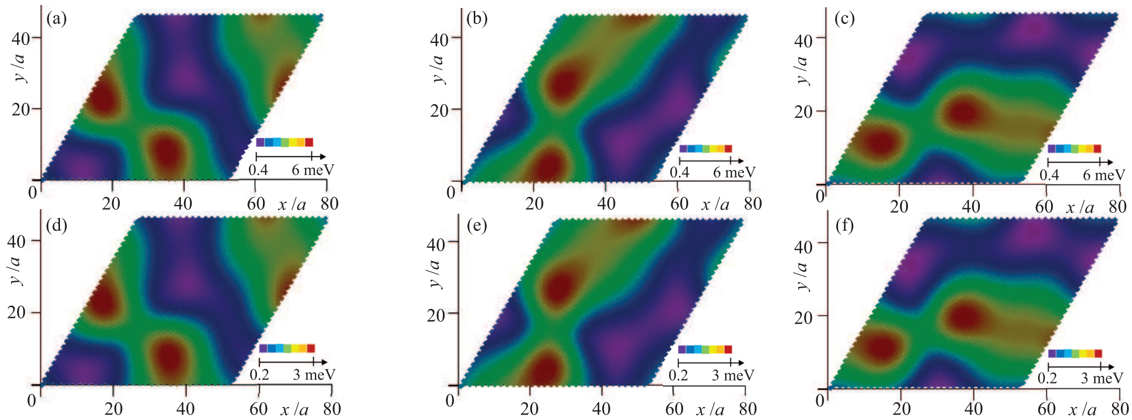

Рис. 5. (Цветной онлайн) Пространственные распределения потенциалов на связях $\delta A^{c(\ell)}_{\mathbf{n}1}$ для трех различных ℓ, рассчитанные при x=0 ((a) – (c)) и при $x = -2$ ((d) – (f))

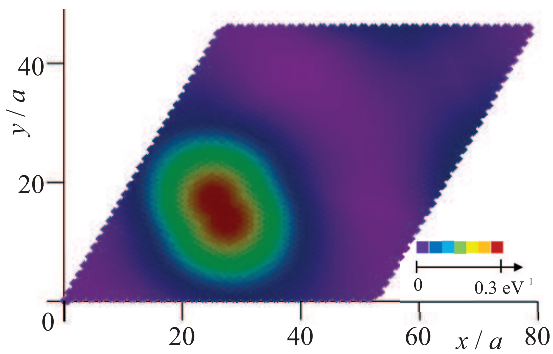

Рис. 6. (Цветной онлайн) Локальная плотность состояний, рассчитанная вблизи половинного заполнения ($x = -1,75$). Пространственный профиль растянут, указывая на появление электронного нематического состояния

спиновую структуру ВСП. Обнаружено, что ВСП стабильна во всем диапазоне допирования. Спиновая структура зависит от x, изменяясь от коллинеарной при $x = 0$ до почти копланарной при конечном допировании. Основное состояние допированной системы обладает нематической симметрией.

Мы благодарны Межведомственному суперкомпьютерному центру Российской академии наук (МСЦ РАН) за предоставленные вычислительные ресурсы. Анализ данных и аналитические расчеты были профинансированы Российским научным фондом (проект РНФ # 22-22-00464 https://rscf.ru/en/project/22-22-00464 /).

1. Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, Nature **556**, 80 (2018).
2. 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).
3. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, Nature **556**, 43 (2018).
4. A. Rozhkov, A. Sboychakov, A. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rep. **648**, 1 (2016).
5. B. Padhi, C. Setty, and P. W. Phillips, Nano Lett. **18**, 6175 (2018).
6. M. Ochi, M. Koshino, and K. Kuroki, Phys. Rev. B **98**, 081102 (2018).
7. C.-C. Liu, L.-D. Zhang, W.-Q. Chen, and F. Yang, Phys. Rev. Lett. **121**, 217001 (2018).
8. T. Huang, L. Zhang, and T. Ma, Sci. Bull. **64**, 310 (2019).
9. K. Seo, V. N. Kotov, and B. Uchoa, Phys. Rev. Lett. **122**, 246402 (2019).
10. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **100**, 045111 (2019).
11. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **102**, 155142 (2020).
12. S. Zhang, X. Lu, and J. Liu, Phys. Rev. Lett. **128**, 247402 (2022).
13. G. Wagner, Y. H. Kwan, N. Bultinck, S. H. Simon, and S. A. Parameswaran, Phys. Rev. Lett. **128**, 156401 (2022).
14. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, K. I. Kugel, and A. L. Rakhmanov, JETP Lett. **112**, 651 (2020).
15. I. Mandal, J. Yao, and E. J. Mueller, Phys. Rev. B **103**, 125127 (2021).
16. J. M. B. Lopes dos Santos, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. B **86**, 155449 (2012).
17. A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. **109**, 206801 (2012).

18. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **88**, 045409 (2013).
19. Y. Choi, J. Kemmer, Y. Peng, A. Thomson, H. Arora, R. Polski, Y. Zhang, H. Ren, J. Alicea, G. Refael, F. von Oppen, K. Watanabe, T. Taniguchi, and S. Nadj-Perge, Nat. Phys. **15**, 1174 (2019).
20. A. Kerelsky, L. J. McGilly, D. M. Kennes, L. Xian, M. Yankowitz, S. Chen, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Hone, C. Dean, A. Rubio, and A. N. Pasupathy, Nature **572**, 95 (2019).
21. Y. Xie, B. Lian, B. Jäck, X. Liu, C.-L. Chiu, K. Watanabe, T. Taniguchi, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, Nature **572**, 101 (2019).
22. D. Wong, K. P. Nuckolls, M. Ohet, B. Lian, Y. Xie, S. Jeon, K. Watanabe, T. Taniguchi, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, Nature **582**, 198 (2020).
23. G. Trambly de Laissardière, D. Mayou, and L. Magaud, Nano Lett. **10**, 804 (2010).
24. S. Sorella and E. Tosatti, Europhysics Letters **19**, 699 (1992).
25. T. O. Wehling, E. Şaşıoğglu, C. Friedrich, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, and S. Blügel, Phys. Rev. Lett. **106**, 236805 (2011).
26. S. Shallcross, S. Sharma, and O. Pankratov, Phys. Rev. B **87**, 245403 (2013).