

Численное моделирование графена в магнитном поле в рамках эффективной теории поля

В. В. Брагута^{+,*}, С. Н. Валгушев^{+,×}, О. В. Павловский^{+,°}, М. И. Поликарпов^{+,×}, М. В. Улыбышев^{+,°}

⁺Институт теоретической и экспериментальной физики, 117218 Москва, Россия

^{*}Институт физики высоких энергий, 142281 Протвино, Россия

[×]Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

[°]МГУ им. Ломоносова, 119899 Москва, Россия

Поступила в редакцию 18 февраля 2013 г.

После переработки 16 марта 2013 г.

Представлены результаты моделирования графена, полученные методом Монте-Карло, во внешнем магнитном поле, перпендикулярном плоскости графена. Расчеты выполнены в рамках эффективной квантовой теории поля с некомпактным $3+1$ -мерным абелевым калибровочным полем и $2+1$ -мерными фермионами Когута–Сасскинда. Обнаружено, что внешнее магнитное поле смещает точку фазового перехода полуметалл–изолятор в сторону больших значений диэлектрической проницаемости подложки. Построена фазовая диаграмма перехода полуметалл–изолятор в плоскости диэлектрическая проницаемость подложки–магнитное поле.

DOI: 10.7868/S0370274X13090038

В настоящее время усилия множества экспериментальных и теоретических групп в области физики твердого тела направлены на изучение свойств графена (см., например, обзоры [1–3]). Теоретическое изучение графена основано на гамильтониане, который в приближении сильной связи учитывает только передвижение электронов между ближайшими узлами кристаллической решетки. Если пренебречь кулоновским взаимодействием между электронами, то можно показать, что в достаточно широком диапазоне температур свойства графена могут быть описаны в рамках эффективной $2+1$ -мерной квантовой теории поля, содержащей два аромата безмассовых фермионов [4]. Скорость Ферми для этих квазичастиц составляет величину $v_F \sim c/300$.

Учет взаимодействия между квазичастицами значительно усложняет задачу исследования свойств графена. Квазичастицы в графене взаимодействуют по закону Кулона с эффективной константой $\alpha_{\text{эф}} \sim \alpha_{em}/v_F \sim 300/137 \sim 2$.

В большинстве экспериментов образец графена находится на подложке с диэлектрической проницаемостью ϵ . Это приводит к тому, что эффективная константа взаимодействия квазичастиц определяется выражением $\alpha_{\text{эф}} \sim 2\alpha_{em}/[v_F(\epsilon + 1)]$. Применение подложек с разными значениями диэлектрической проницаемости ϵ приводит к изменению силы взаимодействия между квазичастицами, что позволяет

изучать графен в режиме как сильной, так и слабой связи.

Эффекты взаимодействия квазичастиц в области слабой связи ($\alpha_{\text{эф}} \ll 1$) не представляют особых проблем для теоретического изучения графена и могут быть учтены по теории возмущений. В области сильной связи ($\alpha_{\text{эф}} \sim 1$) не существует надежных теоретических методов изучения подобных систем. Ввиду этого приходится применять методы исследования, основанные на компьютерном моделировании.

В работах [5–7] показано, что при уменьшении диэлектрической проницаемости графен переходит из состояния полуметалла в состояние изолятора. Фазовый переход происходит при значениях диэлектрической проницаемости $\epsilon_c \sim 4$.

Основной задачей настоящей работы является исследование вопроса о влиянии магнитного поля, перпендикулярного листу графена, на фазовый переход полуметалл–изолятор. Для этого методом Монте-Карло вычисляется статистическая сумма для электронов в графене [1–4]:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi\mathcal{D}A_0 \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^4x (\partial_i A_0)^2 - \int d^3x \bar{\psi}_f \left[\Gamma_0(\partial_0 - igA_0) - \sum_{i=1,2} \Gamma_i \partial_i \right] \psi_f \right\}, \quad (1)$$

где A_0 – нулевая компонента вектора-потенциала электромагнитного поля, Γ_μ – евклидовы гамма-матрицы, ψ_f ($f = 1, 2$) – два “аромата” дираковских фермионов, отвечающие двум спиновым компонентам электронных возбуждений в графене, а эффективная константа связи $g^2 = 2\alpha_{em}/[v_F(\epsilon + 1)]$ (в системе $\hbar = c = 1$). Нулевая компонента вектор-потенциала A_0 удовлетворяет периодическим граничным условиям по пространству и по времени: $A_0(t = 0) = A_0(t = 1/T)$, где T – температура. В отсутствие магнитного поля фермионные поля удовлетворяют периодическим граничным условиям по пространству и антипериодическим граничным условиям по времени: $\psi_f(t = 0) = -\psi_f(t = 1/T)$. При включении магнитного поля граничные условия в пространстве на фермионные поля необходимо модифицировать [8]. Стоит отметить, что в статистическую сумму (1) не входит векторная часть потенциала A_i , т.к. ее включение дает поправку, подавленную малой скоростью Ферми v_F .

Моделирование однослойного графена в магнитном поле проводится с помощью метода, который был использован в работе [7]. Для дискретизации фермионной части действия в (1) мы используем фермионы Когута–Сасскинда [9, 10]. Один сорт таких фермионов в $2 + 1$ -измерениях соответствует двум сортам обычных дираковских фермионов [9–11], что делает их особенно подходящими для моделирования квантовой теории поля графена. Действие для фермионов Когута–Сасскинда, взаимодействующих с абелевым решеточным калибровочным полем, имеет вид

$$S_\Psi[\bar{\Psi}_x, \Psi_x, \theta_{x,\mu}] = \sum_{x,y} \bar{\Psi}_x D_{x,y}[\theta_{x,\mu}] \Psi_y = \frac{1}{2} \sum_x \delta_{x^3,0} \left(\sum_{\mu=0,1,2} \bar{\Psi}_x \alpha_{x,\mu} e^{i\theta_{x,\mu}} \Psi_{x+\hat{\mu}} - \sum_{\mu=0,1,2} \bar{\Psi}_x \alpha_{x,\mu} e^{-i\theta_{x,\mu}} \Psi_{x-\hat{\mu}} + m \bar{\Psi}_x \Psi_x \right), \quad (2)$$

где решеточные координаты x принимают целые значения $x^\mu = 0, \dots, L_\mu - 1$, x^3 ограничена условием $x^3 = 0$ (предполагается, что лист графена находится в плоскости $x^3 = 0$), $\bar{\Psi}_x$ – однокомпонентное грасманово поле, $\alpha_{x,\mu} = (-1)^{x^0 + \dots + x^{\mu-1}}$, $\theta_{x,\mu}$ – переменные на линках, которые являются решеточным аналогом векторного потенциала $A_\mu(x)$, $D_{x,y}$ – дираковский оператор фермионов Когута–Сасскинда.

Для дискретизации действия электромагнитного поля в (1) используется некомпактное действие для калибровочных полей:

$$S_g[\theta_{x,\mu}] = \frac{\beta}{2} \sum_x \sum_{i=1}^3 (\theta_{x,0} - \theta_{x+\hat{i},0})^2, \quad (3)$$

где суммирование по x производится по всей решетке. Константа β определена следующим образом:

$$\beta \equiv \frac{1}{g^2} = \frac{v_F}{4\pi e^2} \frac{\epsilon + 1}{2}, \quad (4)$$

где фактор $(\epsilon + 1)/2$ учитывает экранирование электростатических взаимодействий подложкой.

Включение ненулевого однородного магнитного поля H , перпендикулярного листу графена, проводится стандартным способом – модификацией линковых переменных $\theta_{x,i}$, $i = 1, 2$, соответствующих векторному потенциалу $A_i = H(x_2\delta_{i1} - x_1\delta_{i2})/2$. При этом в силу периодических граничных условий поток магнитного поля Φ через всю решетку квантуется:

$$\Phi = \frac{2\pi}{e} n, \quad (5)$$

где n – целое число. Квантование потока приводит к квантованию магнитного поля на решетке.

Поскольку фермионное действие (2) билинейно по фермионным полям, по ним можно проинтегрировать:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int \mathcal{D}\bar{\Psi}_x \mathcal{D}\Psi_x \mathcal{D}\theta_{x,0} \times \\ &\times \exp(-S_g[\theta_{x,0}] - S_\Psi[\bar{\Psi}_x, \Psi_x, \theta_{x,0}]) = \\ &= \int \mathcal{D}\theta_{x,0} \det(D[\theta_{x,0}]) \exp(-S_g[\theta_{x,0}]). \end{aligned} \quad (6)$$

Таким образом, мы приходим к эффективному действию

$$S_{\text{eff}}[\theta_{x,0}] = S_g[\theta_{x,0}] - \ln \det(D[\theta_{x,0}]), \quad (7)$$

которое включает в себя детерминант $\det(D[\theta_{x,\mu}])$ дираковского оператора $D_{x,y}[\theta_{x,\mu}]$, введенного в (2).

Для моделирования используется стандартный метод гибридного Монте-Карло, генерирующий конфигурации полей $\theta_{x,0}$ со статистическим весом $\exp(-S_{\text{eff}}[\theta_{x,0}])$ [9, 10].

Для изучения фазового перехода полуметалл–изолятор удобно использовать параметр порядка – киральный фермионный конденсат $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$. В фазе полуметалла киральный конденсат $\langle \bar{\psi} \psi \rangle = 0$, а в фазе изолятора $\langle \bar{\psi} \psi \rangle \neq 0$. Таким образом, измеряя конденсат, можно определить, в какой фазе находится система.

В терминах фермионов Когута–Сасскинда конденсат $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$ выражается следующим образом:

$$\langle \bar{\psi} \psi \rangle = \frac{1}{8 L_0 L_1 L_2} \sum_{x,t} \langle \bar{\Psi}_x \Psi_x \rangle. \quad (8)$$

После того как выполнено интегрирование по фермионам, киральный конденсат (8) может быть выражен как среднее определенных комбинаций фермионного пропагатора $D_{x,y}^{-1}[\theta_{x,\mu}]$, вычисляемых с весом (6).

Для каждого набора величин (ϵ, m, H) мы сгенерировали по 400 статистически независимых полевых конфигураций на решетке 20^4 , на которых потом проводилось вычисление кирального конденсата. При этом диэлектрическая проницаемость подложки выбиралась в диапазоне $\epsilon \in (1.75, 12.75)$, магнитное поле соответствовало интервалу от 1 до 7 квантов магнитного потока¹⁾, что отвечает $H \in (0, 3.5)$ кТл, массы фермионов выбирались из значений $m = 0.005, 0.01, 0.02, 0.03$. Для экстраполяции данных к пределу $m \rightarrow 0$ мы фитировали массовую зависимость конденсата квадратичным полиномом для всех значений ϵ при фиксированных H .

Результаты расчета кирального фермионного конденсата $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$ для различных значений ϵ и H в

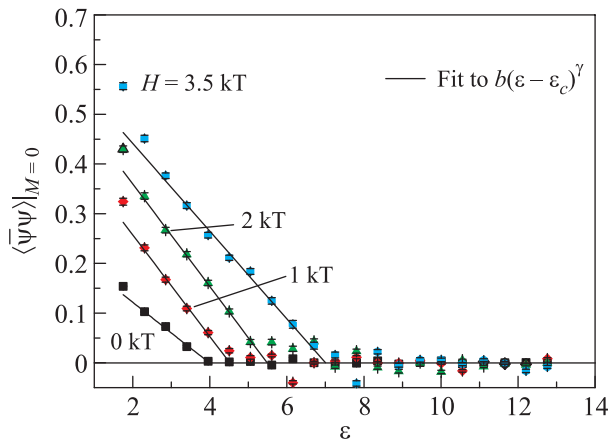


Рис. 1. Фермионный конденсат $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$ как функция диэлектрической проницаемости подложки при различных значениях H в пределе $m \rightarrow 0$. Сплошной линией представлено фитирование данных функцией $\langle \bar{\psi} \psi \rangle = b(\epsilon_c - \epsilon)^\gamma$ для различных значений H

пределе $m \rightarrow 0$ представлены на рис. 1. Видно, что с увеличением значения магнитного поля растет зна-

чение ϵ_c , при котором происходит фазовый переход полуметалл–изолятор.

Для того чтобы получить зависимость ϵ_c от величины внешнего магнитного поля H , данные, представленные на рис. 1, фитировались функцией $\langle \bar{\psi} \psi \rangle = b(\epsilon_c - \epsilon)^\gamma$ для $\epsilon < \epsilon_c$. Найденная таким образом зависимость $\epsilon_c(H)$ определяет фазовую диаграмму графена в плоскости (ϵH) , которая представлена на рис. 2.

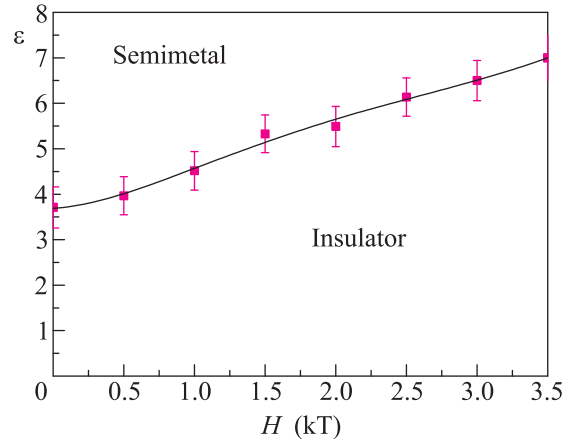


Рис. 2. Фазовая диаграмма графена в плоскости (ϵH)

В магнитном поле увеличивается плотность состояний собственных функций оператора Дирака $D_{x,y}[\theta_{x,\mu}]$. Это приводит к увеличению значения конденсата $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$ и смещению фазового перехода в сторону больших значений диэлектрической проницаемости. Чем больше значение конденсата, тем сильнее нужно экранировать заряды квазичастиц для его разрушения. Аналогичное явление имеет место в КХД [12].

Авторы обязаны Е. Луцевской и Т. Лахде, которые обратили наше внимание на эффективную теорию поля графена. Авторы благодарны также Михаилу Зубкову за интересные и полезные обсуждения. Расчеты выполнялись на кластере ИТЭФ “Стакан”, МВ 100К в Московском объединенном суперкомпьютерном центре и в Суперкомпьютерном центре Московского государственного университета.

¹⁾ Отметим, что на использованных нами решетках квант магнитного потока соответствует магнитному полю $H_0 = 500$ Тл. Такое большое значение кванта магнитного поля связано с тем, что $H_0 \sim 1/L^2$, где L – размер моделируемого образца графена. Имеющиеся на настоящий момент вычислительные мощности недостаточны для рассмотрения больших образцов графена. В будущем планируется увеличить размер исследуемого образца графена.

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., Science **306**, 666 (2004).
2. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
3. A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nature Materials **6**, 183 (2007).
4. G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449 (1984).

5. J. E. Drut and T. A. Lähde, Phys. Rev. Lett. **102**, 026802 (2009); Phys. Rev. B **79**, 165425 (2009); Phys. Rev. B **79**, 241405 (2009); PoS Lattice **2011**, 074 (2011); J. E. Drut, T. A. Lähde, and E. Tölg, PoS Lattice **2010**, 006 (2010).
6. S. Hands and C. Strouthos, Phys. Rev. B **78**, 165423 (2008); W. Armour, S. Hands, and C. Strouthos, Phys. Rev. B **81**, 125105 (2010); Phys. Rev. B **84**, 075123 (2011).
7. P. V. Buividovich, E. V. Luschevskaya, O. V. Pavlovsky et al., Phys. Rev. B **86**, 045107 (2012); P. V. Buividovich and M. I. Polikarpov, Phys. Rev. B **86**, 245117 (2012).
8. M. H. Al-Hashimi and U.-J. Wiese, Annals Phys. **324**, 343 (2009).
9. I. Montvay and G. Muenster, *Quantum Fields on a Lattice*, Cambridge University Press, 1994.
10. T. DeGrand and C. DeTar, *Lattice Methods for Quantum Chromodynamics*, World Scientific, 2006.
11. C. Burden and A. N. Burkitt, Eur. Phys. Lett. **3**, 545 (1987).
12. P. V. Buividovich, M. N. Chernodub, E. V. Luschevskaya, and M. I. Polikarpov, Phys. Lett. B **682**, 484 (2010).