

ПО ИТОГАМ ПРОЕКТОВ
РОССИЙСКОГО ФОНДА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Проект РФФИ # 10-02-00131

Магнитоэкситоны в графене

В. Е. Бисти¹⁾

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 4 июня 2013 г.

Рассмотрены особенности магнитоэкситонов в двумерных хиральных структурах – однослойном и двуслойном графене. Теория магнитоэкситонов – электронных возбуждений, соответствующих переходам между уровнями Ландау, – представлена для случая сильного магнитного поля. Для различных целочисленных факторов заполнения исследовалось влияние на энергию магнитоэкситонов кулоновского взаимодействия, особенностей зонной структуры и внешних полей.

DOI: 10.7868/S0370274X13130122

Развитие технологии в последние десятилетия позволило изготавливать такие по-настоящему двумерные структуры, как однослойный и двуслойный графен, с высоким качеством и достаточного размера. Открывшиеся возможности вызвали волну интереса к экспериментальному и теоретическому изучению графеновых структур, а также способствовали оживлению интереса к изучению графита, бесцелевых полупроводников и полуметаллов. Особенность таких объектов состоит в том, что структура их электронных зон является бесцелевой и обладает хиральностью [1]. Так, однослойный графен имеет спектр дираковского типа с линейной дисперсией и хиральность, характеризующуюся берри-фазой π . Двуслойный графен сочетает параболический закон дисперсии квазичастиц вблизи точки нулевой энергии с хиральностью, характеризующейся берри-фазой 2π . Эта картина получена для идеальных структур в приближении сильной связи для электронов при учете только переходов между ближайшими соседями. Электронный спектр при этом симметричен относительно нулевой энергии. Асимметрия системы (неэквивалентность слоев за счет влияния подложки или внешних электрических полей) приводит к появлению щели в двуслойном графене. Учет переходов между следующими соседями приводит к асимметрии электронного спектра [2]. Так, в чистом двуслойном графене асимметрию электрон-

ного спектра демонстрирует ряд экспериментальных данных по циклотронному резонансу [3–7].

Информацию об энергетическом спектре электронов в графеновых структурах можно получить при изучении переходов между уровнями Ландау в перпендикулярном магнитном поле. Для этого используются магнитооптические (неупругое рассеяние и микроволновое поглощение) и магнитотранспортные (квантовый эффект Холла) методы. Уровни Ландау для Дираковского спектра были получены в [8–10]. Для двуслойного графена они рассматривались в работах [11–13] для гамильтониана, полученного в приближении ближайших соседей. В обоих случаях характерным является наличие уровня Ландау нулевой энергии. Для двуслойного графена уровень нулевой энергии двукратно вырожден, что обусловлено различными орбитальными состояниями. При учете спинового и долинного вырождения уровень нулевой энергии в монослое вырожден четырехкратно, в бислое – восьмикратно. Для бислоя с неэквивалентными слоями (например, за счет перпендикулярного электрического поля или влияния подложки) имеются четыре близко расположенных двукратно вырожденных по спину уровня вблизи нулевой энергии. Долинное и орбитальное вырождения снимаются, но электронно-дырочная симметрия остается.

На уровни Ландау с энергией, близкой к нулю, оказывает сильное влияние электрон-электронное взаимодействие. Это является важной проблемой для экспериментального изучения циклотронного ре-

¹⁾e-mail: bisti@issp.ac.ru

зонанса в однослойном [14, 15], двуслойном [3, 16] и многослойном [17–21, 7] графене, демонстрирующем свойства моно- и бислоев. В двуслойном графене сдвиг энергии циклотронного резонанса в зависимости от фактора заполнения изучался в [16], а нарушение симметрии уровней Ландау демонстрировалось в [22].

При изучении циклотронного резонанса важным вопросом является влияние кулоновского взаимодействия на энергию магнитоэкситонов. Магнитоэкситоны это коллективные возбуждения в двумерной электронной системе во внешнем перпендикулярном магнитном поле, возникающие в системе при переходе электрона с одного уровня Ландау на другой при учете взаимодействия между электронами и характеризующиеся определенными значениями энергии и импульса. Для двумерных систем эти возбуждения исследовались еще в работах [23–26]. Однако особенности энергетического спектра графеновых структур потребовали развития теории магнитоэкситонов с учетом хиральности.

Возбуждения зарядовой плотности (магнитоэкситоны с нулевым спином) при малых импульсах рассматривались в приближении Хартри–Фока для однослойного [27, 28] и двуслойного [29–31] графена. В работах [32–34] электромагнитный отклик в графене рассчитывался численно в RPA-приближении для широкого интервала импульсов. Возбуждения с переворотом спина и спиновые волны в графене изучались в [35]. В работах [36, 37] были рассмотрены переходы внутри уровней Ландау. Многочастичные поправки, полученные методом перенормировки с учетом электронно-дырочной асимметрии, и попытки объяснить резкий переход от квадратичной к линейной дисперсии в спектре уровней Ландау представлены в [38–40]. В [41] при анализе магнитоэкситонных мод в двуслойном графене для целочисленного заполнения $\pm 3, 2, 0, 1$ показано, что смешивание уровней Ландау в области, где кулоновская энергия сравнима с циклотронной энергией, делает классификацию магнитоэкситонных мод при конечных волновых векторах с помощью квантового числа углового момента проблематичной, а закон дисперсии становится очень сложным. В работах [27–29] показано, что учет кулоновского взаимодействия сохраняет электронно-дырочную симметрию для возбуждений. В работах [30, 31] рассмотрены переходы между уровнями Ландау в двуслойном графене в сильном перпендикулярном магнитном поле при факторе заполнения $\nu = 0$. При этом электронно-дырочная асимметрия и кулоновское взаимодействие были учтены одновременно. Особое внимание уде-

лялось разнице в энергиях циклотронных переходов для двух долин при различных условиях.

В работе [42] и миниобзоре [43] рассмотрены магнитотранспортные свойства: исследована оптическая проводимость однослойного и двуслойного графена в квантующих магнитных полях; аналитически оценены динамические продольная и холловская проводимости; пики проводимости объяснены в терминах электронных переходов.

В первой части данного обзора представлены одночастичный гамильтониан и уровни Ландау для однослойного и двуслойного графена. Подробно рассмотрен случай двуслойного графена при учете электронно-дырочной асимметрии и разницы в энергиях электронов из разных слоев за счет внешнего потенциала.

Во второй части рассмотрены магнитоэкситоны в однослойном и двуслойном графене с учетом электрон-электронного кулоновского взаимодействия. Подробно исследовано отличие рассматриваемых систем от случая обычного (не хирального) двумерного электронного газа. Рассмотрены случаи разных факторов заполнения. Особое внимание уделено случаю нейтральных графенов при различных условиях.

Гамильтониан и уровни Ландау.

Однослойный графен. Однослойный графен состоит из атомов углерода, образующих гексагональную решетку, позиции атомов в которой неэквивалентны. Элементарная ячейка графена состоит из двух атомов (A, B). Эти атомы образуют две треугольные подрешетки. Зонная структура графена представлена гамильтонианом дираковского типа вблизи двух неэквивалентных точек зоны Бриллюэна, K и K' , действующим в пространстве волновых функций $\Psi = (\psi_A, \psi_B)$ в долине K и $\Psi = (\psi_B, \psi_A)$ в долине K' :

$$H = \xi v \begin{pmatrix} 0 & \pi^+ \\ \pi & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $\pi = \hbar k_x + i\hbar k_y$, $\pi^+ = \hbar k_x - i\hbar k_y$, \mathbf{k} – волновой вектор, отсчитанный от центра долины, ξ – долинный индекс ($\xi = 1$ в долине K и -1 в долине K'), $v = \frac{\sqrt{3}}{2\hbar} a \gamma_0$, γ_0 – константа связи A-B внутри слоя, a – постоянная решетки.

Этот гамильтониан получен в модели сильной связи. Он учитывает только линейные члены в приближении ближайших соседей.

В перпендикулярном магнитном поле B энергия уровней Ландау $E_{n\xi}$ ($n = 0, \pm N$, $N = 1, 2, \dots$) и соответствующие двухкомпонентные волновые функции Ψ_{nk} находятся из гамильтониана H (1), выра-

женного через операторы рождения и уничтожения $a^+ = l_B \pi^+ / \sqrt{2}$ и $a = l_B \pi / \sqrt{2}$, где $l_B = \sqrt{\hbar / eB}$ – магнитная длина, e – заряд электрона. В качестве базиса используются волновые функции обычных двумерных электронов в магнитном поле, $\phi_{Nk} = e^{iky} \phi_{Nk}(x)$, где k – параметр, описывающий вырождение уровней Ландау в калибровке Ландау, $\mathbf{A} = (0, Bx)$. Итак,

$$E_0(\xi) = 0, \quad (2)$$

$$E_{\pm N}(\xi) = \pm \frac{\hbar v}{l_B} \sqrt{N},$$

$$\Psi_{0k} = (\phi_{0k}, 0),$$

$$\Psi_{nk\xi} = (a_{n\xi} \phi_{Nk}, b_{n\xi} \phi_{N-1,k}), \quad (3)$$

$$a_{\pm N, \xi} = 1/\sqrt{2}, b_{\pm N, \xi} = \pm 1/\sqrt{2}.$$

Для однослойного графена эффекты тригональной симметрии и учет следующих соседей приводят к квадратичным членам в гамильтониане. Они оказывают слабое влияние. Их можно учесть по теории возмущений обычным способом.

Двуслойный графен. Двуслойный графен представляет собой два графеновых слоя (1 и 2), каждый из которых состоит из двух гексагональных решеток с неэквивалентными местами (A1, B1) и (A2, B2) соответственно, упорядоченных по Берналу (A2–B1 друг над другом). В модели сильной связи энергетические состояния электронов димера (A1–B2) вблизи нуля энергии описываются двухкомпонентным гамильтонианом [11, 12, 2], действующим в пространстве волновых функций $\Psi = (\psi_{A1}, \psi_{B2})$ в долине K и $\Psi = (\psi_{B2}, \psi_{A1})$ в долине K' . Асимметрия между энергиями в слоях U возникает вследствие приложенного напряжения. Переходы между следующими соседями и разница $\tilde{\Delta}$ в энергиях димеров (A1–B2) и пар (A2–B1) также могут учитываться. Имеем

$$H = H_0 + H_1 + H_2, \quad (4)$$

$$H_0 = -\frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^+)^2 \\ \pi^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$H_1 = \frac{\xi U}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2m} \frac{\xi U}{\gamma_1} \begin{pmatrix} \pi^+ \pi & 0 \\ 0 & -\pi \pi^+ \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$H_2 = \frac{1}{2m} \left(\frac{2\gamma_4}{\gamma_0} - \frac{\tilde{\Delta}}{\gamma_1} \right) \begin{pmatrix} \pi^+ \pi & 0 \\ 0 & \pi \pi^+ \end{pmatrix} + \frac{\tilde{\Delta}}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где $\pi = \hbar k_x + i\hbar k_y$, $\pi^+ = \hbar k_x - i\hbar k_y$, \mathbf{k} – волновой вектор, отсчитанный от центра долины, ξ – долиный индекс ($\xi = 1$ в долине K и -1 в долине K'),

γ_0 – константа связи А–В внутри слоя, γ_1 – константа связи между слоями А2–В1, $m = \gamma_1/2v^2$ – эффективная масса для двуслойного графена, $v = \frac{\sqrt{3}}{2\hbar} a \gamma_0$, a – постоянная решетки. Константа γ_4 описывает переходы между следующими соседями (A1–A2 и B1–B2), $\gamma_1 = 0.1\gamma_0$, $\gamma_4 = 0.05\gamma_0$ (см. [5, 6]). Гамильтониан H_0 – основной гамильтониан, дающий параболическую дисперсию с эффективной массой m для хиральных квазичастиц с берри-фазой 2π . Гамильтониан H_1 описывает слоевую асимметрию, приводящую к щели в спектре $\sim U$. Гамильтониан H_2 возникает вследствие переходов между следующими соседями и разницы между энергиями положений пар. Первый его член приводит к электронно-дырочной асимметрии. Второй член за счет $\tilde{\Delta}$ приводит к сдвигу спектра как целого и может быть опущен. Типичный закон дисперсии изображен на рис. 1.

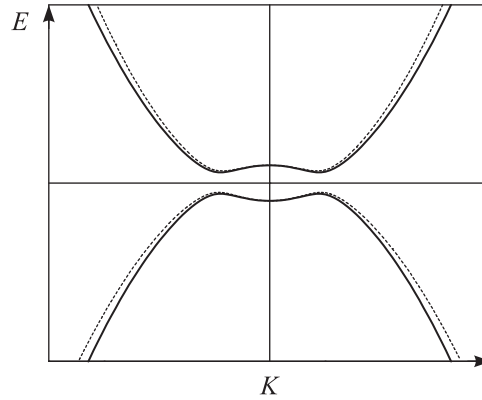


Рис.1. Закон дисперсии для двуслойного графена при учете слоевой (сплошная линия) и слоевой + электронно-дырочной (пунктир) асимметрии

Двухкомпонентный гамильтониан применим в области энергий электронов ε в диапазоне $|\varepsilon| < \frac{1}{4}\gamma_1$. Слабая асимметрия соответствует $U/\gamma_1 \ll 1$, $\tilde{\Delta}/\gamma_1 \ll 1$, $\gamma_4/\gamma_0 \ll 1$.

В перпендикулярном магнитном поле B энергия уровней Ландау $E_{n\xi}$ ($n = 0, 1, \pm N$, $N = 2, 3, \dots$) и соответствующие двухкомпонентные волновые функции Ψ_{nk} находятся из гамильтониана (4), выраженного через операторы рождения и уничтожения, $a^+ = l_B \pi^+ / \sqrt{2}$ и $a = l_B \pi / \sqrt{2}$. [12]. Циклотронная энергия равна $\omega_c = eB/m$. В качестве базиса используются волновые функции обычных двумерных электронов в магнитном поле, $\phi_{Nk} = e^{iky} \phi_{Nk}(x)$, где

k – параметр, описывающий вырождение уровней Ландау в калибровке Ландау. Итак,

$$E_0(\xi) = \frac{1}{2}\xi U, \quad E_1(\xi) = \frac{1}{2}\xi U - \xi\delta + \left(\frac{2\gamma_4}{\gamma_0} - \frac{\tilde{\Delta}}{2\gamma_1}\right)\hbar\omega_c, \quad (8)$$

$$E_{\pm N}(\xi) = \pm\hbar\omega_c\sqrt{N(N-1)} - \frac{1}{2}\xi\delta + \left(\frac{\gamma_4}{\gamma_0} - \frac{\tilde{\Delta}}{2\gamma_1}\right)\hbar\omega_c(2N-1), \quad (9)$$

где $\delta = U\hbar\omega_c/\gamma_1$,

$$\Psi_{0k} = (\phi_{0k}, 0), \quad \Psi_{1k} = (\phi_{1k}, 0),$$

$$\Psi_{nk\xi} = (a_{n\xi}\phi_{Nk}, b_{n\xi}\phi_{N-2,k}), \quad (10)$$

$$a_{n\xi} = 1/\sqrt{1+D_{n\xi}}, \quad b_{n\xi} = D_{n\xi}/\sqrt{1+D_{n\xi}},$$

$$D_{n\xi} = \frac{E_{n\xi} - \xi U/2 + \xi N\delta - \left(\frac{\gamma_4}{\gamma_0} - \frac{\tilde{\Delta}}{2\gamma_1}\right)\hbar\omega_c(2N-1)}{\hbar\omega_c\sqrt{N(N-1)}}. \quad (11)$$

В нулевом приближении $a_{\pm N,\xi} = 1/\sqrt{2}$, $b_{\pm N,\xi} = \pm 1/\sqrt{2}$.

Асимметрия снимает долинное и орбитальное вырождение уровня нулевой энергии для уровней с $N \geq 2$.

Заметим, что область применимости приведенных выражений $\hbar\omega_c\sqrt{N(N-1)} < \gamma_1/4$. Для $\gamma_1 = 0.39$ эВ это соответствует $B < 50$ Т для $N = 2$. В более сильных полях для нахождения уровней Ландау необходимо использовать четырехкомпонентный гамильтониан [13, 44].

В пренебрежении зеемановским расщеплением все уровни двукратно вырождены по спину. Несмотря на то что в графите электронный g -фактор не мал ($g = 2$), $\varepsilon_Z/\hbar\omega_c \sim 0.05$ вследствие малой эффективной массы двуслойного графена ($m \approx 0.054$) [12].

Учет тригональной симметрии вследствие $\gamma_3 = \gamma_{A1-B2} \ll \gamma_1$ изменяет спектр двуслойного графена вблизи нуля. В беспечелевом случае вместо двух соприкасающихся парабол появляется четыре конуса [2]. Подробно влияние этого фактора исследовано методом топологического анализа в [45]. Там же представлен квазиклассический численный расчет уровней Ландау. В работе [46] указано, что вследствие кулоновского взаимодействия происходит спонтанное нарушение симметрии и вместо соприкасающихся парабол возникают два конуса. В работе [47] продемонстрировано, что в сильных магнитных полях влияние тригональной симметрии можно учесть с помощью специально развитой теории возмущений. При этом число уровней Ландау вблизи нулевой энергии не меняется. Возникают только небольшие поправки.

Все это дает основания в дальнейшем при рассмотрении магнитоэкситонов не учитывать тригональную симметрию.

На рис. 2 для сравнения приведены законы дисперсии и уровни Ландау для обычного двумерного

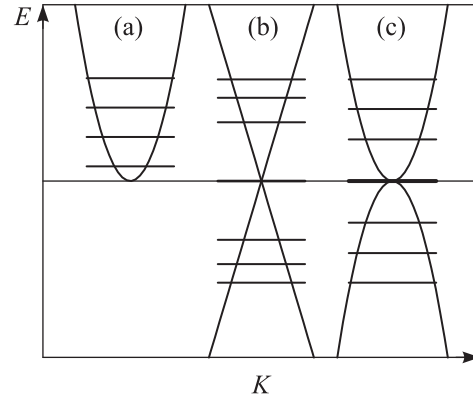


Рис. 2. Закон дисперсии и уровни Ландау для обычного двумерного электронного газа (а), однослойного (б) и двуслойного (с) графена

электронного газа (рис. 2а), однослойного (рис. 2б) и двуслойного (рис. 2с) графена.

Для обычных частиц $E_N \sim N + 1/2$,
для однослойного графена $E_N \sim \pm\sqrt{N}$,
для двуслойного графена $E_N \sim \pm\sqrt{N(N-1)}$.

Кулоновское взаимодействие и магнитоэкситоны. Энергия магнитоэкситонов (возбуждений, возникающих при переходе с одного уровня Ландау на следующий) в двумерных системах впервые была получена в [23, 24] в приближении сильного магнитного поля для полностью заполненного нулевого уровня Ландау (фактор заполнения 2), а также для спиновых волн (возбуждений с переворотом спина без изменения уровня Ландау) для фактора заполнения 1. В последующих работах [25, 26] представлена более развернутая теория и определены энергии возбуждений для других целочисленных факторов заполнения (четных для магнитоэкситонов и нечетных для спиновых волн). Согласно теореме Кона [48] энергия циклотронного резонанса трансляционно инвариантной электронной системы с квадратичным законом дисперсии не зависит от кулоновского взаимодействия. Поэтому возбуждения с изменением орбитального числа электронной системы на единицу (магнитоплазмоны) при нулевом импульсе $q = 0$ имеют энергию, равную энергии циклотронного резонанса невзаимодействующей электронной системы. Влияние электрон-электронного взаимодействия проявляется только в законе дисперсии. Аналогичное утверждение имеет место для спиновых эк-

ситонов (возбуждений с изменением спина на единицу без изменения орбитального квантового числа) в электронной системе, инвариантной относительно группы вращений в спиновом пространстве (теорема Лармора). Энергия спиновых экситонов с импульсом $q = 0$ равна зеемановской энергии. Оба эти утверждения являются точными, т.е. справедливы при любом соотношении между кулоновской и циклотронной энергиями и при любом факторе заполнения.

Однако для хиральных систем – однослойного графена с линейным законом дисперсии и двуслойного графена – теорема Кона неприменима и электрон-электронное взаимодействие должно оказывать заметное влияние на энергию циклотронных возбуждений даже при нулевых импульсах. Действительно, эксперименты по изучению магнитооптических переходов показывают значительный разброс в дираковской скорости: от $1.03 \cdot 10^6$ до $1.18 \cdot 10^6$ м/с. Его можно объяснить перенормировкой вследствие электрон-электронного взаимодействия.

Гамильтониан системы электронов в графеновых структурах с кулоновским взаимодействием в перпендикулярном магнитном поле имеет вид

$$\hat{H} = \sum E_{n\xi} a_{\lambda\xi\sigma}^+ a_{\lambda\xi\sigma} + H_{\text{int}}, \quad (12)$$

где $a_{\lambda\xi\sigma}^+$ и $a_{\lambda\xi\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения; $\lambda = (n, k)$, $n = 0, 1, \pm N$ – номер уровня Ландау; k – параметр вырождения; ξ и σ – долинные и спиновые индексы

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum V_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_4\xi\sigma}^+ a_{\lambda_3\xi'\sigma'}^+ a_{\lambda_2\xi'\sigma'} a_{\lambda_1\xi\sigma}. \quad (13)$$

Кулоновское взаимодействие не меняет спиновые и долинные индексы; $k_1 + k_2 = k_3 + k_4$.

Матричные элементы кулоновского взаимодействия определяются с использованием двухкомпонентных волновых функций (7), (10), (11) для однослойного и двуслойного графена:

$$V_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} = V(q) e^{iq_x(k_1 - k_2 - q_y)} \tilde{J}_{n_4, n_1}(q) \tilde{J}_{n_3, n_2}(-q). \quad (14)$$

Для однослойного графена

$$\tilde{J}_{m, n}(q) = a_n^* a_m J_{|m||n|}(\mathbf{q}) + b_n^* b_m J_{|m|-1, |n|-1}(\mathbf{q}). \quad (15)$$

Для двуслойного графена

$$\tilde{J}_{m, n}(q) = a_n^* a_m J_{|m||n|}(\mathbf{q}) + b_n^* b_m J_{|m|-2, |n|-2}(\mathbf{q}), \quad (16)$$

$$J_{m, n}(\mathbf{q}) = \left(\frac{n!}{m!} \right)^{1/2} e^{-q^2/4} \left(\frac{q_y + iq_x}{\sqrt{2}} \right)^{m-n} L_n^{m-n} \left(\frac{q^2}{2} \right), \quad (17)$$

$V(q) = \frac{2\pi}{\varepsilon q}$, $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$, $k_4 = k_1 + q_y$, $k_3 = k_2 - q_y$; $J_{m, n}(\mathbf{q}) = J_{n, m}^*(-\mathbf{q})$ ($m > n$); L_n^{m-n} – полиномы Лагерра.

Суммирование ведется по n_1, n_2, n_3, n_4 , k_1, k_2 , двум спинам, двум долинам и волновому вектору $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$.

Если рассматривать только возбуждения зарядовой плотности, то долинные и спиновые индексы (ξ, σ) не меняются.

Соответствующие операторы для возбуждений с уровня n на уровень n' с импульсом K имеют вид

$$Q_{n, n'; \xi\sigma}^+(K) = \sum_k a_{\lambda'\xi\sigma}^+ a_{\lambda\xi\sigma}, \quad (18)$$

где $\lambda = (n, k)$, $\lambda' = (n', k + K)$, характерная кулоновская энергия $E_c = e^2/\varepsilon l_B$. Импульс возбуждения предполагается малым: $Kl_B \ll 1$.

Задача о магнитоэкситонных возбуждениях в графенах рассматривалась в [27, 28, 35, 39] для однослойного графена и в [29–31, 38–40] для двуслойного. При этом использовался метод, аналогичный предложенному в [25] для двумерного газа с квадратичным законом дисперсии. Применялось приближение Хартри–Фока для возбуждений (time-dependent Hartree–Fock), справедливое при $E_c/\Delta E_{nn'}(\xi) \ll 1$, где $\Delta E_{nn'}(\xi)$ энергия перехода в отсутствие взаимодействия:

$$\Delta E_{nn'}(\xi) = E_{n'}(\xi) - E_n(\xi). \quad (19)$$

Для однослойного графена $\Delta E_{10}/E_c = 2.77$ [27] и не зависит от величины магнитного поля вследствие линейной дисперсии. Для бислойного графена $E_c = 10\sqrt{B}$, $\hbar\omega_c = 2.2B$ (см. [11]) и $\hbar\omega_c/E_c = 0.22B^{1/2}$ для $\epsilon = 5$. Для перехода $E_{12} \simeq \sqrt{2}\hbar\omega_c$, и для $B = 40$ Т отношение $E_{12}/E_c \simeq 2$.

Энергия возбуждения $\tilde{E}_{n, n'; \xi\sigma}$ состоит из энергии перехода без взаимодействия и кулоновской поправки:

$$\tilde{E}_{n, n'; \xi\sigma} = \Delta E_{nn'}(\xi) + E_{nn'; \xi\sigma}^c. \quad (20)$$

Кулоновская часть $E_{nn'}^c$ состоит из трех членов: “экситонной” части $E_{nn'}^{ex}$, возникающей вследствие прямого взаимодействия электрона на уровне n' и дырки на уровне n , обменных поправок энергии $\Sigma_{n\xi\sigma}$ и $\Sigma_{n'\xi\sigma}$ к одноэлектронным уровням Ландау и “деполяризационного” сдвига, получающегося в приближении случайных фаз (RPA). RPA-часть пропорциональна K и существенна для дисперсии [28]. Представляющее интерес в данной работе междолинное расщепление не зависит от K . Поэтому RPA-член можно опустить. Это позволяет рассматривать возбуждения с различными (ξ, σ) независимо:

$$E_{n, n'; \xi\sigma}^c = E_{n, n'}^{ex} + \Sigma_{n'\xi\sigma} - \Sigma_{n\xi\sigma}. \quad (21)$$

Основная сложность при вычислении энергии магнитоэкситонов заключается в определении обменных поправок. Спектры однослойного и двуслойного графена формально описываются модельным гамильтонианом, не ограниченным сверху и снизу (см. (1), (4)). Существует проблема расходимости обменной собственной энергии Σ_n при суммировании по всем заполненным уровням Ландау.

Для вычисления этого вклада для монослоя графена в работе [28] вводилось обрезание по энергии. Было показано, что возникающая расходимость – логарифмическая по числу уровней Ландау и реально область обрезания по энергии ограничивается областью применимости модельного гамильтониана дираковского типа, дающего линейную дисперсию. В [27] применялся полуэмпирический подход: электрон-электронная поправка для одного типа переходов бралась из данных эксперимента, после чего для других типов переходов можно было вычислить разницу в энергии по сравнению с калибровочным переходом. При этом с необходимостью предполагалось, что весь эффект перенормировки скорости в графене обусловлен только электрон-электронным взаимодействием. Для двуслойного графена область параболической дисперсии меньше, чем допустимое значение энергии обрезания, и необходимо рассматривать четырехзонный гамильтониан [38–40].

В работах [29–31] представлены некоторые возможности увидеть кулоновские поправки без вычисления полной величины обменной энергии в разности энергий переходов для чистого двуслойного графена. Рассмотрены межуровневые электронные переходы с верхнего заполненного (полностью или частично) уровня Ландау на следующий свободный (полностью или частично) уровень с энергией перехода порядка ω_c (правила отбора для таких переходов $\Delta N = 1$). Фактор заполнения ν здесь равен нулю, уровень Ферми также равен нулю. Этот случай отвечает отсутствию свободных носителей и равному количеству электронов и дырок. Переходы с малыми энергиями между уровнями 0 и 1 двуслойного графена не могут быть рассмотрены с помощью данного метода, так как $E_c \sim |\Delta E_{01}(\xi)|$.

Нулевому заполнению могут отвечать разные основные состояния и различные циклотронные переходы. Далее подробно рассмотрены соответствующие возможные случаи.

Асимметричный бислой без e - h -асимметрии. Этот случай описывается гамильтонианом $H_0 + H_1$. При $U > 0$ равенство $\nu = 0$ означает фактор заполнения $\nu = 4$ для электронов в одной долине и $\nu = 4$ для дырок в другой долине. Для долины

с $\xi = 1$ полностью заполнены уровни с $n = -2$ и возможны переходы $(-2, 1)$ (рис. 3). Для долины

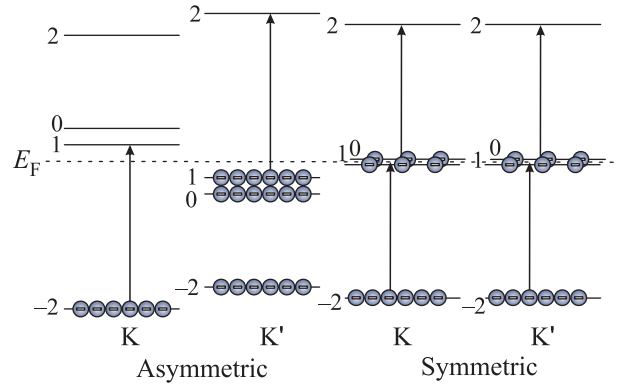


Рис. 3. Одноэлектронные уровни Ландау и циклотронные переходы для симметричного (справа) и асимметричного (слева) случаев

с $\xi = -1$ полностью заполнены уровни 0 и 1 и возможны переходы $(1, 2)$. Невзаимодействующая часть одинакова для обоих переходов:

$$\Delta E_{-2,1}(1) = \Delta E_{1,2}(-1) = \omega_c \sqrt{2} + \frac{1}{2}|U - \delta|. \quad (22)$$

Электронно-дырочная симметрия одночастичного гамильтониана приводит к симметрии переходов $(-2, 1)$ и $(1, 2)$ (см. рис. 3). Переход $(-2, 1)$ в электронном представлении есть $(1, 2)$ в дырочном представлении. При учете спина имеются 4 перехода с равными энергиями. Поскольку все рассматриваемые виды асимметрии и электрон-электронное взаимодействие рассматриваются как малые поправки, для вычисления поправок, связанных с взаимодействием, можно использовать волновые функции для симметричного случая.

Для $\nu = 0$ (обозначение $0I$)

$$\begin{aligned} E_{\text{ex},0I}^{(1,2)} &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} V(q) \tilde{J}_{22}(\mathbf{q}) \tilde{J}_{1,1}(-\mathbf{q}) = \\ &= \frac{1}{2(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} V(q) [J_{22}(q) + J_{00}(q)] J_{11}(q), \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} (\Sigma_2 - \Sigma_1)_{0I} &= \int d\mathbf{q} \frac{V(q)}{2(2\pi)^2} [|J_{11}(\mathbf{q})|^2 + |J_{10}(\mathbf{q})|^2] - \\ &- \int d\mathbf{q} \frac{V(q)}{2(2\pi)^2} \left[\frac{1}{2}|J_{21}(\mathbf{q})|^2 + \frac{1}{2}|J_{20}(\mathbf{q})|^2 \right] + \\ &+ \int d\mathbf{q} \frac{V(q)}{2(2\pi)^2} \sum_{N=2} |J_{2,N}(\mathbf{q}) J_{0,N-2}^*(\mathbf{q})|. \end{aligned} \quad (24)$$

Это значение не равно нулю, поскольку теорема Кона неприменима (см., например, [49, 29].

В результате можно утверждать, что для возбуждений из различных долин расщепление вследствие слоевой асимметрии отсутствует, хотя для уровней Ландау оно имеется.

Такие же переходы будут иметь место для спинового ферромагнитного состояния, при учете спинового расщепления: для спина σ_1 уровни 0 и 1 заполнены, а для спина σ_2 – полностью пусты в обеих долинах. Имеются два возбуждения $Q_{1,2;\xi\sigma_1}^+$ и два возбуждения $Q_{-2,1;\xi\sigma_2}^+$ с одинаковой энергией.

Асимметричный бислой при учете электронно-дырочной асимметрии. Этот случай описывается гамильтонианом $H_0 + H_1 + H_2$. Теперь при суммарном факторе заполнения $\nu = 0$ заполнение уровней Ландау зависит от магнитного поля. Если магнитное поле не слишком велико и

$$\left(\frac{\gamma_4}{\gamma_0} - \frac{\tilde{\Delta}}{2\gamma_1}\right) \hbar\omega_c - \delta < \frac{U}{2}, \quad (25)$$

то в долине с $\xi = -1$ уровни 0 и 1 заполнены, а в долине с $\xi = 1$ – пусты (рис. 4). В данном случае

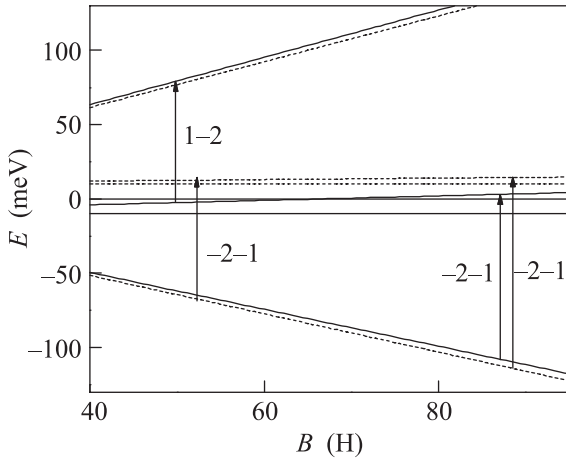


Рис. 4. Одноэлектронные уровни Ландау и циклотронные переходы при учете слоевой и электронно-дырочной асимметрии (сплошная линия – для долины K , пунктир – для долины K')

имеются электронные и дырочные переходы (1, 2) с верхнего заполненного на следующий пустой уровень, как и для предыдущего случая (см. рис. 4, слева). Невзаимодействующие части представлены следующими выражениями:

$$\Delta E_{1,2}(-1) = \hbar\omega_c \left(\sqrt{2} + \frac{\gamma_4}{\gamma_0} - \frac{\tilde{\Delta}}{2\gamma_1} \right) + \frac{1}{2}(U - \delta), \quad (26)$$

$$\Delta E_{-2,1}(1) = \hbar\omega_c \left(\sqrt{2} - \frac{\gamma_4}{\gamma_0} + \frac{\tilde{\Delta}}{2\gamma_1} \right) + \frac{1}{2}(U - \delta). \quad (27)$$

Кулоновские части одинаковы, как же обсуждалось выше. Разница в энергиях для переходов из разных долин обусловлена электронно-дырочной асимметрией:

$$\Delta E_{1,2}(-1) - \Delta E_{-2,1}(1) = \left(\frac{2\gamma_4}{\gamma_0} - \frac{\tilde{\Delta}}{\gamma_1} \right) \hbar\omega_c. \quad (28)$$

Если магнитное поле достаточно велико и

$$\left(\frac{\gamma_4}{\gamma_0} - \frac{\tilde{\Delta}}{2\gamma_1} \right) \hbar\omega_c - \delta > \frac{U}{2}, \quad (29)$$

то в обеих долинах уровни 1 пусты, но уровень 0 заполнен для долины K и пуст для долины K' (см. рис. 4, справа). В результате имеются только переходы дырочного типа $(-2, 1)$. Невзаимодействующие части имеют вид

$$\Delta E_{-2,1}(1) = \hbar\omega_c \left(\sqrt{2} - \frac{\gamma_4}{\gamma_0} + \frac{\tilde{\Delta}}{2\gamma_1} \right) + \frac{1}{2}(U - \delta), \quad (30)$$

$$\Delta E_{-2,1}(-1) = \hbar\omega_c \left(\sqrt{2} - \frac{\gamma_4}{\gamma_0} + \frac{\tilde{\Delta}}{2\gamma_1} \right) - \frac{1}{2}(U - \delta). \quad (31)$$

Вследствие различного заполнения уровней Ландау в долинах влияние кулоновского взаимодействия различно в собственно-энергетической части:

$$\frac{1}{2}\Sigma_{20} - \Sigma_{10} = \int d\mathbf{q} \frac{V(\mathbf{q})}{(2\pi)^2} \left[|J_{10}(\mathbf{q})|^2 - \frac{1}{2}|J_{20}(\mathbf{q})|^2 \right], \quad (32)$$

$$\Sigma_{10} - \frac{1}{2}\Sigma_{20} = \frac{7}{16}E_c\sqrt{\frac{\pi}{2}}, \quad (33)$$

$$\tilde{E}_{-2,1}(1) - \tilde{E}_{-2,1}(-1) = (U - \delta) + \frac{7}{16}E_c\sqrt{\frac{\pi}{2}}. \quad (34)$$

Расщепление между переходами из разных долин обусловлено кулоновским взаимодействием и слоевой асимметрией.

Полносимметричный случай. В этом случае, описываемом гамильтонианом H_0 (5) и обозначенном как h , мы имеем по два наполовину заполненных уровня нулевой энергии в обеих долинах: 0 ($\nu_0 = 1/2$) и 1 ($\nu_1 = 1/2$). Это означает $\nu = 2$ для электронов в каждой долине и $\nu = 2$ для дырок в каждой долине. Для каждой долины имеются два перехода: (1, 2) с наполовину заполненного на пустой уровень и $(-2, 1)$ с заполненного на наполовину пустой. Эти переходы связаны кулоновским взаимодействием \tilde{V} . Используя приближение Хартри-Фока для нецелочисленных факторов заполнения [50, 51], можно найти две моды $Q_{s,a}^+$ с энергиями $E_{s,a}$:

$$Q_{s,a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_{1,2,\xi,\sigma}^+ \pm Q_{-2,1,\xi,\sigma}^+),$$

$$E_{s,a} = \omega_c \sqrt{2} + E_c^h \pm \frac{1}{2} \tilde{V}. \quad (35)$$

Эти моды могут быть названы симметричной и антисимметричной:

$$E_c^h = \frac{1}{2} E_{\text{ex},0I}^{(1,2)} + (\Sigma_2 - \Sigma_1)_h; \quad (\Sigma_2 - \Sigma_1)_h \neq \frac{1}{2} (\Sigma_2 - \Sigma_1)_{0I}, \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \tilde{V} &= V_{-2,1}^{1,2} = \\ &= V_{1,2}^{-2,1} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} V(q) \tilde{J}_{12}(\mathbf{q}) \tilde{J}_{-2,1}(-\mathbf{q}) = \\ &= \frac{1}{2(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} V(q) |J_{12}|^2(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} E_c \cdot \frac{7}{16}, \quad (37) \end{aligned}$$

где $\tilde{V} = 2.5\sqrt{B}$ и для $B = 40$ Т составляет $\tilde{V} \simeq 15$ мэВ.

Такое расщепление для комбинированных электронно-дырочных переходов с участием наполовину заполненных уровней не специфично для двуслойного графена. В однослойном графене с долиной асимметрией [27] факторы заполнения равны $\nu = 2$ для электронов в одной долине и $\nu = 2$ для дырок в другой долине. В случае с симметричными долинами имеется наполовину заполненный уровень нулевой энергии в обеих долинах ($\nu = 1$ как для электронов, так и для дырок). Для монослоя графена с наполовину заполненным уровнем нулевой энергии имеются переходы $(0, 1)$ для электронов и $(-1, 0)$ для дырок. Соответствующая величина расщепления для комбинированных мод, $\tilde{V}_{mg} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} E_c$, определяется с использованием волновых функций из [27]. Наблюдать расщепление $\tilde{V}_{mg} \simeq 2.5\sqrt{B}$ для монослоя можно при меньших значениях магнитных полей.

Симметричный бислой с электронно-дырочной асимметрией. Для двуслойного графена, описываемого гамильтонианом $H_0 + H_2$, с симметричными слоями и, следовательно, симметричными долинами, но с электронно-дырочной асимметрией имеются наполовину заполненные 0 ($\nu_0 = 1/2$) и пустые 1 ($\nu_1 = 0$) уровни Ландау в обеих долинах. Для каждой долины существуют только переходы $(-2, 1)$ дырочного типа. Кулоновские поправки одинаковы в обеих долинах. Расщепления нет.

При рассмотрении циклотронных переходов в чистом двуслойном графене в [30, 31] учитывались электронно-дырочная асимметрия, слабая слоевая асимметрия и влияние кулоновского взаимодействия. Было показано, что энергии циклотронных переходов в двух долинах могут быть расщеплены как вследствие электронно-дырочной асимметрии, так и вследствие кулоновского взаимодействия. При

меньших магнитных полях расщепление обусловлено электронно-дырочной асимметрией. С ростом магнитного поля расщепление возникает из-за кулоновского взаимодействия. Для симметричного случая с половинным заполнением уровней нулевой энергии расщепление за счет кулоновской энергии возможно как для двуслойного, так и для однослойного графена. В экспериментальной работе [7] исследовались графеновые бислои в многослойном эпитаксиальном графене. Расщепление между переходами электронного и дырочного типа было найдено в относительно узком диапазоне B . Его возможное объяснение (влияние электронно-дырочной асимметрии) дает правильные значения величины расщепления. Однако узость исследуемого диапазона не позволяет сделать однозначных выводов. В работе [40] при определении энергии циклотронного резонанса в четырехзонной модели учитывалась слабая $e-h$ -асимметрия. Полученные результаты, касающиеся невзаимодействующей части, совпадают с рассмотренными в пределах точности двухзонной модели. Методы учета многочастичных поправок для целочисленных факторов заполнения тоже совпадают. Однако прямое сравнение провести невозможно, поскольку в [40] рассмотрены другие факторы заполнения.

Закключение. Итак, рассмотрение циклотронного резонанса в однослойном и двуслойном графене с учетом электрон-электронного кулоновского взаимодействия требует расчета энергии магнитоэкситонов. Имеется существенное отличие рассматриваемых систем от случая обычного (не хирального) двумерного электронного газа. Кулоновское взаимодействие проявляется не только в дисперсии, но и в энергии резонансов (не работает теорема Кона). Возникают сложности при расчете обменной энергии вследствие неограниченности спектра энергии как сверху, так и снизу. Эффекты взаимодействия проявляются даже в случае чистого графена в отсутствие свободных носителей. В этом случае имеется сильная зависимость от основного состояния системы, определяемого различными условиями. Существенно наличие в электронном спектре двух долин. Различие в энергиях магнитоэкситонных возбуждений может приводить к расщеплению линий циклотронного резонанса.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект # 10-02-00131).

1. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
2. M. Mucha-Kruczynski, E. McCann, and V. I. Falko, Semicond. Sci. Technol. **25**, 033001 (2010).

3. E. A. Henriksen, Z. Jiang, L.-C. Tung et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 087403 (2008).
4. Z. O. Li, E. A. Henriksen, Z. Jiang et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 037403 (2009).
5. L. M. Zhang, Z. Q. Li, D. N. Basov et al., Phys. Rev. **B78**, 235408 (2008).
6. A. B. Kuzmenko, E. van Heumen, D. van der Marel et al., Phys. Rev. **B79**, 115441 (2009).
7. M. Orlita, C. Faugeras, J. Borisiuk et al., Phys. Rev. B **83**, 125302 (2011).
8. J. McClure, Phys. Rev. **104**, 666 (1956).
9. F. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).
10. Y. Zheng and T. Ando, Phys. Rev. B **65**, 245420 (2002).
11. E. McCann, Phys. Rev. B **74**, 161403 (2006).
12. E. McCann and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. Lett. **96**, 086805 (2006).
13. J. Milton Pereira, Jr., F. M. Peeters, and P. Vasilopoulos, Phys. Rev. **B76**, 115419 (2007).
14. Z. Jiang, E. A. Henriksen, L.-C. Tung et al., Phys. Rev. Lett. **98**, 197403 (2007).
15. R. S. Deacon, K.-C. Chuang, R. J. Nicholas et al., Geim. Phys. Rev. B **76**, 081406 (2007).
16. E. A. Henriksen, P. Cadden-Zimansky, Z. Jiang et al., Phys. Rev. Lett. **104**, 067404 (2010).
17. M. Koshino and T. Ando, Phys. Rev. **B77**, 115313 (2008).
18. M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski et al., Phys. Rev. Lett. **97**, 266405 (2006).
19. P. Plochocka, C. Faugeras, M. Orlita et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 087401 (2008).
20. M. Orlita, C. Faugeras, G. Martinez et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 136403 (2008).
21. M. Orlita, C. Faugeras, P. Plochocka et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 267601 (2008).
22. Y. Zhao, P. Cadden-Zimansky, Z. Jiang, and P. Kim, Phys. Rev. Lett. **104**, 066801 (2010).
23. Ю. А. Бычков, С. В. Иорданский, Г. М. Элиашберг, Письма в ЖЭТФ **33**, 152 (1981).
24. И. В. Лернер, Ю. Е. Лозовик, ЖЭТФ **78**, 1167 (1980).
25. C. Kallin and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **30**, 5655 (1984).
26. A. H. MacDonald, J. Phys. C: Solid State Phys. **18**, 1003 (1985).
27. Yu. A. Bychkov and G. Martinez, Phys. Rev. B **77**, 125417 (2008).
28. A. Iyengar, J. Wang, H. A. Fertig, and L. Brey, Phys. Rev. **75**, 125430 (2007).
29. V. E. Bisti and N. N. Kirova, JETP Lett. **90**, 120 (2009).
30. V. E. Bisti and N. N. Kirova, Phys. Rev. B **84**, 155434 (2011).
31. V. E. Bisti and N. N. Kirova, Physica B **407**, 1923 (2012).
32. T. Misumi and K. Shizuya, Phys. Rev. B **77**, 195423 (2008).
33. M. Mueller and S. Sachdev, Phys. Rev. B **78**, 115419 (2008).
34. R. Roldan, J.-N. Fuchs, and M. O. Goerbig, Phys. Rev. B **80**, 085408 (2009).
35. R. Roldan, J.-N. Fuchs, and M. O. Goerbig, Phys. Rev. **B82**, 205418 (2010).
36. Y. Barlas, R. Cote, K. Nomura, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **101**, 097601 (2008).
37. C. Toke and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **83**, 115455 (2011).
38. K. Shizuya, Phys. Rev. B **79**, 165402 (2009).
39. K. Shizuya, Phys. Rev. B **81**, 075407 (2010).
40. K. Shizuya, Phys. Rev. B **84**, 075409 (2011).
41. J. Sari and C. Toke, Phys. Rev. B **87**, 085432 (2013).
42. L. A. Falkovsky, Phys. Rev. B **84**, 115414 (2011).
43. L. A. Falkovsky, Письма в ЖЭТФ **97**, 496 (2013).
44. Y. H. Lai, J. H. Ho, C. P. Chang, and M. F. Lin, Phys. Rev. B **77**, 085426 (2008).
45. R. de Gail, M. O. Goerbig, and G. Montambaux, Phys. Rev. B **86**, 045407 (2012).
46. A. S. Mayorov, D. C. Elias, M. Mucha-Kruczynski et al., Science **333**, 860 (2011).
47. Л. А. Фальковский, Письма в ЖЭТФ **94**, 783 (2010).
48. W. Kohn, Phys. Rev. **123**, 1242 (1961).
49. D. S. L. Abergel and V. Fal'ko, Phys. Rev. B **75**, 155430 (2007).
50. V. E. Bisti, JETP Lett. **69**, 584, (1999).
51. Yu. A. Bychkov and G. Martinez, Phys. Rev. B **66**, 193312 (2002).