Письма в ЖЭТФ, том 107, вып. 10, с. 684 – 688

Точки Дирака, спиноны и спиновая жидкость в "повернутом" двухслойном графене

В. Ю. Ирхин[1], *Ю. Н. Скрябин*

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения РАН, 620108 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 10 апреля 2018 г.

Двухслойный графен с повернутыми слоями – отличный пример сильнокоррелированной системы, демонстрирующей почти плоскую электронную полосу, переход Мотта и, вероятно, спиновое жидкое состояние. Помимо одноэлектронной картины, проведен анализ точек Дирака в терминах спинонной поверхности Ферми в пределе сильных корреляций. Рассматривается применение теории калибровочного поля для описания деконфайнментной фазы спиновой жидкости. Обсуждаются топологические квантовые переходы, в том числе от малой к большой поверхности Ферми в присутствии особенностей Ван Хова.

DOI: 10.7868/S0370274X18100120

1. Введение. Гетероструктуры на основе двумерных (с атомной толщиной) материалов привлекают большое внимание ученых благодаря их способности проявлять новые электронные свойства. Недавно коррелированная плоская зона наблюдалась в системе графенового бислоя [1]. Эта зона является результатом модуляции сверхрешетки в муаровой структуре двух графеновых листов, повернутых под углом, близким к теоретически предсказанному "магическому углу". Температурная зависимость амплитуды осцилляций Шубникова–де Гааза продемонстрировала большие электронные эффективные массы и малые скорости Ферми.

Уникальные свойства "повернутого" (*twisted*) двухслойного графена (*twisted bilayer grapheme* – TwBLG) открывают новую основу для многочастичных квантовых фаз. Доступность и возможность настройки плоских зон за счет изменения угла поворота могут обеспечить путь к ряду экзотических коррелированных систем, включая необычные сверхпроводники и квантовые спиновые жидкости. В частности, для концентрации носителей около половины плотности сверхрешетки $n = \pm n_s/2$ (что соответствует полузаполненной эффективной модели Хаббарда), сильно коррелированная система с плоской зоной является изоляторной фазой моттовского типа, возникающей из-за локализации электрона в муаровой сверхрешетке. Переход металл–диэлектрик при температуре около 4 K подтверждается измерением транспортных свойств (проводимости) [1]. Такое поведение качественно отличается от ранее описанного изоляторного поведения в нулевом поле, которое возникает при целом кратном $\pm n_s$.

В типичном изоляторе Мотта основное состояние обычно имеет антиферромагнитный спиновый порядок, что не наблюдается в нашей системе. Таким образом, мы имеем парамагнитное основное моттовское состояние, которое можно описать в рамках современных теоретических концепций. Это синглетное основное состояние можно рассматривать как спиновую жидкость. С этой точки зрения, система TwBLG похожа на медь-оксидные системы с квадратной решеткой, но ситуация еще более благоприятна: подавление антиферромагнитного упорядочения из-за фрустраций на треугольной решетке, безусловно, оправдано, в отличие от купратов, где должна быть введена конкуренция далеких электронных интегралов перескока в $t{-}J$ модели [2].

В настоящей работе обсуждаются возможные теоретико-полевые подходы к описанию системы TwBLG с упором на топологические аспекты.

2. Муаровая решетка и точки Дирака. Рассмотрим сначала точки Дирака в TwBLG в одноэлектронном изображении (пренебрегая корреляциями). Два близких графеновых слоя дают сверхрешетку муара, которая модифицирует электроннную дисперсию в графене и открывает щели как в исходной дираковской точке, так и во вторичной (индуцированной муаром) дираковской точке в валентной зоне [1, 3, 4].

В нулевом приближении низкоэнергетическую зонную структуру TwBLG можно рассматривать как два набора дираковских конусов однослойного гра-

[1]e-mail: valentin.irkhin@imp.uran.ru

фена (каждый из которых четырехкратно вырожден из-за долин и спина), повернутых вокруг точки Γ на некий угол. Разность между двумя волновыми векторами в точке K (или K') порождает минизону Бриллюэна (*mini Brillouin zone* – MBZ) – маленький шестиугольник, который является обратным к муаровой сверхрешетке [1]. Дираковские конусы вблизи одной и той же долины смешиваются через межслойную гибридизацию, тогда как взаимодействия между удаленными конусами подавляются, так что индекс долины сам является хорошим квантовым числом.

Дираковские конусы характеризуются перенормированной скоростью Ферми v_{F}. При $v_{\mathrm{F}} \to 0$ существуют три дополнительные точки Дирака с индексами вращения (*winding number*) -1, противоположными основной точке Дирака (с индексом $+1$). При $v_F = 0$, когда все четыре точки Дирака сливаются, индекс вращения составляет -2, т.к. общий индекс вращения не может измениться [5]. Точно при первом магическом угле точка Дирака в каждом углу MBZ (K_s и K_s') становится параболической зоной, касающейся с индексом -2, что аналогично ситуации в двухслойном графене с упаковкой Бернала (за исключением того, что оба угла имеют одинаковый индекс вращения) [1].

При пересечении энергии Ван Хова с легированием топология поверхности Ферми изменяется [6]. Индекс вращения падает от -1 или $+1$ (в зависимости от зоны проводимости) до 0, т.к. точку симметрии MBZ $\bar{\Gamma}$, где нет кривизны Берри, окружают более высокие контуры энергии. Таким образом, мы имеем топологический переход в присутствии особенностей Ван Хова.

3. Переход Мотта в TwBLG. Согласно экспериментальным данным [1], при $|n| > n_s/2$ частоты осцилляций Шубникова–де Гааза в TwBLG соответствуют прямым линиям, которые экстраполируются на нуль при плотностях половинного заполнения. Авторы [1] предполагают, что это может означать малые карманы поверхности Ферми, возникающие от заряженных квазичастиц вблизи фазы изолятора типа Мотта, а половинное вырождение карманов может быть связано с разделением спина и заряда в моттовском изоляторе, аналогично ситуации в купратах [2]. Другими словами, мы имеем парциальный переход Мотта в подсистеме локализованных спиновых состояний (формирование хаббардовских подзон, нарушающих картину ферми-жидкости). Заметим, что в этом контексте модель узкой зоны Хаббарда ($t{-}J$ модель) может быть представлена в виде эффективной двухзонной s-d обменой модели [7].

Таким образом, мы имеем ситуацию сильной корреляции. В [1] делается вывод, что теоретическая трактовка проблемы TwBLG может быть выполнена в рамках двухзонной модели Хаббарда (включающей степени свободы долин) на фрустрированной треугольной решетке. В этом случае мы должны использовать базис SU(4) [8]. Однако в нулевом приближении эти две долины можно рассматривать как независимые.

Для рассмотрения перехода металл–диэлектрик (перехода Мотта–Хаббарда) обычно используют представление электронного оператора уничтожения как произведение заряженного бозона b_i и нейтрального фермиона со спином (спинона) $f_{i\sigma}$, так что в роторном представлении (см. [9, 10])

$$c_{i\sigma} = b_i f_{i\sigma}. \tag{1}$$

С увеличением хаббардовского U система бесспиновых бозонов при нечетном заполнении зоны переходит в сверхтекучий моттовский изолятор. В приближении среднего поля спиноны являются свободными (невзаимодействующими), несмотря на сильные корреляции в электронной системе. Если бозон b_i конденсируется, т.е. ($\langle b\rangle \neq 0$), мы получаем фазу ферми-жидкости физических электронов: при замене b на его c-числовое среднее $\langle b\rangle$ фермионы f_σ приобретают те же квантовые числа, что и исходные электроны, так что их ферми-поверхность описывает обычный металл. Если бозон является щелевым и, следовательно, несконденсирован, образуется спин-жидкостной изолятор Мотта, в котором выживает поверхность Ферми нейтральных фермионных возбуждений (спинонов). Изолятор Мотта для бозонов также является диэлектрическим состоянием для электронов с щелью для всех заряженных возбуждений, и происходит непрерывный переход к изолятору с "призрачной" (*ghost*) поверхностью Ферми спинонов. Таким образом, мы имеем ситуацию деконфайнмента, где зарядовые и спиновые степени свободы разделены, причем важную роль может играть калибровочное поле. При отходе от половинного заполнения операторы бозевских частиц-голонов должны вводиться с использованием других представлений вспомогательных частиц (см. [2]).

Ситуация плоской зоны с большой эффективной массой схожа с ситуацией в системах с тяжелыми фермионами (Кондо), где f-электронные состояния становятся делокализованными и участвуют в поверхности Ферми даже в отсутствие "прямой" гибридизации [11, 12].

4. Точки Дирака и спиноны в сильно коррелированном случае. Переход Мотта на сотовой решетке, соответствующей графену (ситуация на двухслойной треугольной решетке аналогична) исследована в работах [13, 14]. В этом случае коррелированное металлическое состояние представляет собой полуметалл, содержащий бесщелевые электронные возбуждения только в изолированных фермиевских точках Ферми в зоне Бриллюэна. Эти точки суть поверхность Ферми электронов.

Состояния вблизи этих точек Ферми имеют дираковский спектр, и проблема может быть проанализирована в рамках соответствующего релятивистского формализма. Низкоэнергетическое действие для нейтральных дираковских спинонов Ψ в изоляторной фазе имеет структуру

$$S = \int d^3x \sum_{\mu} \sum_{\sigma=1}^{N} \bar{\Psi}_\sigma (\partial_\mu - i a_\mu) \gamma_\mu \Psi_\sigma, \qquad (2)$$

где интегрирование выполняется в 2 + 1 измерениях, γ_μ – матрицы Дирака, $\bar{\Psi}_\sigma \equiv \Psi_\sigma^\dagger \gamma_0$, а a_μ – возникающее (*emergent*) калибровочное поле, связанное со спинон-бозонным разложением электронного оператора (1). Отметим, что дираковский спектр возбуждения может формироваться даже если затравочная электронная дисперсия не приводит к такому спектру (например, для квадратной решетки и решетки Кагоме) [10].

В зависимости от деталей решетки a_μ может быть калибровочным полем тип U(1) или SU(2). Для большого количества "цветов" N (определяемого числом точек Дирака в зоне Бриллюэна) действие S_D описывает конформную теорию поля (CFT). Таким образом, мы имеем масштабно-инвариантное квантовое состояние с сильным взаимодействием и степенным спектром для всех возбуждений, причем хорошо определенные квазичастицы отсутствуют. Это состояние обозначается как алгебраическая спиновая жидкость (см. [2, 10]).

Подчеркнем, что одним из способов получения деконфайнментной фазы является включение бесщелевых возбуждений, несущих калибровочные заряды. Эти возбуждения могут экранировать калибровочное взаимодействие, делая его менее конфайнментным [2].

В отличие от истинных деконфайнментных фаз, где невзаимодействующие квазичастицы становятся свободными при низких энергиях, здесь деконфайнмент означает только то, что бесщелевые заряженные частицы остаются бесщелевыми, но не вполне свободны. Соответствующие бесщелевые спиновые жидкости получаются из фазы экзотической жидкости sfL (*staggered flux liquid*) и однородной RVB-фазы (*uniform resonating valence bond* – uRVB). При легировании состояние uRVB приводит к состоянию странного металла с большой поверхностью Ферми, так что картина изолированных спинонных дираковских точек оказывается несколько измененной [2].

Фермижидкостная (ФЖ) фаза включает бозонную конденсацию, которая восстанавливает квазичастичную картину. Поэтому низкоэнергетические возбуждения в ФЖ фазе описываются электронноподобными квазичастицами, и эта фаза соответствует ФЖ фазе электронов.

Динамика для калибровочного поля $U(1)$ возникает из-за экранирования бозонами и фермионами, причем и те, и другие несут калибровочный заряд. В случае малого легирования можно учитывать только экранирование фермионами. После интегрирования по Ψ в (2) эффективная статсумма для калибровочного поля $U(1)$ имеет вид [15]

$$\mathcal{Z} = \int D a_\mu \exp\Big(-\frac{1}{2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} a_\mu(q) \Pi_{\mu\nu} a_\nu(-q) \Big),$$
$$\Pi_{\mu\nu} = \frac{N}{8} \sqrt{q^2} \Big(\delta_{\mu\nu} - \frac{q_\mu q_\nu}{q^2} \Big). \qquad (3)$$

Поляризуемость Π делает калибровочную связь $a_\mu j^\mu$ (j^μ – ток) маргинальным возмущением в фиксированной точке свободных фермионов.

Рассмотрим электронную функцию Грина. В первом порядке в $1/N$ было Получено

$$G(x) = \langle b^\dagger(x) b(0) \rangle_0 \langle f(x) f^\dagger(0) \exp(i \int_0^x dx \cdot a) \rangle, \quad (4)$$

где $\int_0^x dx$ – интеграл по прямому пути возврата и $\langle ... \rangle$ означает интеграл по калибровочным флуктуациям [2]. Тогда имеем

$$G(x) \propto (x^2)^{-(2-\alpha)/2} \qquad (5)$$

с показателем $\alpha \sim 1/N$, являющимся аномальной размерностью; для антиферромагнетика с квадратной решеткой $\alpha = 32/(3\pi^2 N)$. Эти результаты описывают частичный конфайнмент спинонов и бозонов, связанных калибровочным полем. Проводимость определяется вкладами как фермионов, так и бозонов, которые нельзя рассматривать как независимые квазичастицы [2, 16].

5. Топология переходов Лифшица. Электронные состояния в сильно коррелированной системе не обязательно должны иметь чисто квазичастичную природу. Они могут быть описаны как полюсами, так и ветвями разрезов функции Грина (ср. (5)). Если подавление квазичастичного вычета Z является сильным, полюс функции Грина может даже преобразоваться в нуль, $G(E) \propto E + \varepsilon(\mathbf{k})$, что означает образование энергетической щели и имеет место, например, для перехода Мотта [17]. Нарушение стандартной картины ферми-жидкости можно описать в терминах образования поверхности Латтинджера, являющейся поверхностью нулей электронной функции Грина [18].

Переходы Лифшица (в частности, рассмотренные в разделе 2) можно трактовать как квантовые фазовые переходы с изменением топологии поверхности Ферми (ПФ), но без нарушения симметрии. Топология ПФ характеризуется не только ее формой. Сама ПФ – сингулярность в функции Грина, которая топологически защищена: это вихревая линия в пространстве частот-импульсов [17, 19]. Формально в изоляторной моттовской фазе поверхности Ферми не существует. Однако топология ПФ сохраняется, если учесть латтинджеровский вклад. Тогда теорема Латтинджера (сохранение объема, заключенного под ПФ, независимо от силы взаимодействия) остается в силе [12, 17]. Следует отметить, что поверхность Ферми, соединенная из поверхностей полюсов и нулей, представляет собой единый объект, который не может иметь дыр и краев [17]. Аналогичная картина имеет место в купратах, где точки Ферми растягиваются в дуги, образуя большую замкнутую поверхность Ферми [2].

Что касается неферми-жидкостного поведения, то плоскую зону можно рассматривать так же, как фермионный конденсат Ходеля–Шагиняна, обусловленный электрон-электронным взаимодействием [20], где все состояния имеют нулевую энергию.

Переход Лифшица для двухслойного графена управляется сохранением топологического заряда N_2. Слияние двух конических точек с $N_2 = 1$ приводит к образованию дираковского узла с квадратичной дисперсией и топологическим зарядом $N_2 = 2$. Взаимодействие между слоями может приводить к нескольким возможным сценариям геометрии фермионного спектра в двухслойном графене. В частности, точка Дирака с $N_2 = 2$ может разбиваться на четыре конические точки Дирака с $N_2 = \pm 1$ (треугольное деформирование (*warping*)). Полный топологический заряд сохраняется, так что $N_2 = 1+1+1-1 = 2$ [17].

Таким образом, топологическое рассмотрение может обеспечить интерполяцию от одноэлектронных точек Дирака к дираковским фермионам (спинонам) в точках Ферми в сильно коррелированной модели Хаббарда ($t-J$ модели).

6. Сверхпроводимость. Многие черты TwBLG аналогичны купратным материалам с высокими значениями T_c, где сверхпроводимость возникает при легировании в непосредственной близости к состоянию моттовского изолятора после прохождения небольшой антиферромагнитной области. Здесь переход может происходить через сложные состояния, в том числе несоизмеримый зарядовый и магнитный порядок, страйпы и магнитное фазовое расслоение. Предполагается, что легирование фрустрирует антиферромагнитный порядок основного состояния, так что система протягивается через переход, при котором неелевский порядок теряется и возникает состояние спиновой жидкости [2]. Таким образом, переход в сверхпроводящее состояние происходит непрерывно через квантовую критическую точку, причем при конечных температурах в квантовом критическом режиме образуется состояние псевдощели. Критическая точка может иметь деконфайнментную природу. В то же время в TwBLG ситуация кажется еще более ясной, поскольку на треугольной решетке антиферромагнетизм полностью подавляется фрустрациями.

Введение обменных взаимодействий в узкозонной системе позволяет рассматривать экзотические топологические фазы и сверхпроводимость [2]. В частности, d-волновая сверхпроводящая фаза содержит конденсат как бозонов, так и фермионных пар.

Сверхпроводящие свойства в ситуации деконфайнмента могут меняться. Обычные и сильно коррелированные сверхпроводники (являющиеся топологически упорядоченными состояниями) можно отличить по кванту потока, равному $hc/(2e)$ в первом случае (фермионное спаривание) и hc/e в последнем случае (бозе-конденсация в спин-щелевом состоянии) [2].

Недавно в работе [8] было найдено значение $hc/(4e)$. Ее авторы предложили топологически защищенные бесщелевые краевые состояния и полувихри, несущие половину обычного кванта сверхпроводящего потока (сверхпроводник с эффективным зарядом $4e$). Сверхпроводимость в плоской зоне также обсуждалась в работе [21].

7. Заключение. Согласно оценкам в [1], в системе TwBLG имеется ситуация сильной связи или промежуточной связи, когда хаббардовское U больше или порядка эффективной электронной ширины зоны. Выше мы рассмотрели предел сильной корреляции в терминах спин-бозонного деконфайнмента. В то же время возникновение спинонов и состояние фракционализованной ферми-жидкости (FL*) с неферми-жидкостными характеристиками может иметь место и в случае промежуточной связи, описываемом спин-фермионной моделью с подавленным магнитным упорядочением [22, 7]. Переход от малой к большой поверхности Ферми может быть связан с изменением статистики спинонов [22].

С увеличением легирования уровень Ферми пересекает сингулярность Ван Хова в почти плоской зоне [6] и мы переходим в новое сильно коррелированное состояние. Аналогичная ситуация в купратах (пиннинг – залипание уровня Ферми на сингулярности Ван Хова – и образование плоской зоны в двумерной $t{-}t'$ модели Хаббарда) рассматривалась в работе [23]. Соответствующая теоретическая трактовка TwBLG требует дальнейших исследований.

Исследование проводилось в рамках государственного задания Федерального агенства научных организаий России (тема "Поток" # АААА-А18-118020190112-8 и тема "Квант" # АААА-А18-118020190095-4) и частично поддержано грантом Российского фонад фундаментальных исследований (проект # 16-02-00995).

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, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, Nature **556**, 80 (2018); arXiv:1802.00553.
2. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006).
3. Y. Cao, J. Y. Luo, V. Fatemi, S. Fang, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, Phys. Rev. Lett. **117**, 116804 (2016).
4. M. Yankowitz, J. Jung, E. Laksono, N. Leconte, B. L. Chittari, K. Watanabe, T. Taniguchi, Sh. Adam, D. Graf, and C. R. Dean, arXiv:1707.09054.
5. M. Goerbig and G. Montambaux, *Dirac Fermions in Condensed Matter and beyond*, Ed. by B. Duplantier, V. Rivasseau, J. N. Fuchs, Dirac Matter. Progress in Mathematical Physics, Birkhauser, Basel (2017), v. 71, p. 25; arXiv:1410.4098.
6. Y. Kim, P. Herlinger, P. Moon, M. Koshino, T. Taniguchi, K. Watanabe, and J. H. Smet, Nano Lett. **16b**, 5053 (2016).
7. В. Ю. Ирхин, Ю. Н. Скрябин, Письма в ЖЭТФ **106**, 161 (2017).
8. C. Xu and L. Balents, arXiv:1803.08057.
9. T. Senthil, Phys. Rev. B **78**, 035103 (2008).
10. S. Sachdev, *Exotic phases and quantum phase transitions: model systems and experiments. Rapporteur talk at the 24th Solvay Conference on Physics*, Brussels, Oct. 2008; arXiv:0901.4103.
11. В. Ю. Ирхин, УФН **187**, 801 (2017) [V. Yu. Irkhin, Phys. Usp. **60**, 74 (2017)].
12. T. Senthil, M. Vojta, and S. Sachdev, Phys. Rev. B **69**, 035111 (2004).
13. S.-S. Lee and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **95**, 036403 (2005).
14. S. Jafari, Eur. Phys. J. B **68**, 537 (2009).
15. D. H. Kim and P. A. Lee, Ann. Phys. **272**, 130 (1999).
16. L. B. Ioffe and A. I. Larkin, Phys. Rev. B **39**, 8988 (1989).
17. Г. Е. Воловик, УФН **188**, 95 (2018).
18. K.-Y. Yang, T. M. Rice, and F.-C. Zhang, Phys. Rev. B **73**, 174501 (2006).
19. G. E. Volovik, Lect. Notes Phys. **718**, 31 (2007); arXiv:cond-mat 0601372.
20. В. А. Ходель, В. Р. Шагинян, Письма в ЖЭТФ **51**, 448 (1990).
21. Г. Е. Воловик, Письма ЖЭТФ **107**, 537 (2018).
22. S. Sachdev, M. A. Metlitski, and M. Punk, J. Phys.: Condens. Matter **24**, 294205 (2012).
23. V. Yu. Irkhin, A. A. Katanin, and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. Lett. **89**, 076401 (2002).