

# Переход металл-диэлектрик и другие электронные свойства двухслойного АВ-графена на ферромагнитной подложке

И. Е. Гобелко<sup>+</sup>, А. В. Рожков<sup>\*1)</sup>, Д. Н. Дресвянкин<sup>×</sup>

<sup>+</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) (МФТИ),  
141701 Долгопрудный, Россия

<sup>\*</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия

<sup>×</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 сентября 2023 г.

После переработки 5 октября 2023 г.

Принята к публикации 6 октября 2023 г.

Используя простую теоретическую модель, мы исследуем двухслойный АВ-графен на диэлектрической ферромагнитной подложке. Кроме обменного зеемановского поля, создаваемого подложкой, модель позволяет учитывать внешнее эффективное электрическое поле, направленное по нормали к плоскости графенового образца (такое поле возникает из-за контакта с подложкой, а также его создают, прикладывая напряжение на затворные электроды). Мы продемонстрируем, что при нулевом электрическом поле АВ-графен находится в металлическом состоянии. При повышении поля происходит переход в диэлектрическую фазу. Мы вычисляем спектр электронных состояний, диэлектрическую щель и другие свойства фаз по обе стороны перехода металл-диэлектрик. Наши результаты согласуются с численными расчетами по методу функционала плотности. Наши расчеты могут быть востребованы в спинтронике.

DOI: 10.31857/S1234567823210103, EDN: szvcbn

**1. Введение.** Графен и материалы на его основе являются перспективными системами для использования в спинтронике [1–3]. Основной объект изучения в данной работе – двухслойный графен с берналловской упаковкой (также называемый АВ-графеном) [4–6], уложенный на ферромагнитную подложку. Привлекательность подобных гетероструктур связана с возможностью создавать значительное обменное зеемановское поле, влияя таким образом на спиновые свойства электронной жидкости графенового образца.

Экспериментальные и теоретические исследования в этом направлении активно ведутся в последние годы. Например, в экспериментальной статье [7] авторы сообщают, что диэлектрические магнитные подложки из EuS способны обеспечивать в образце однослойного графена сильное обменное поле в десятки, и даже сотни тесла. (Хотя магнитная индукция постоянных полей, создаваемых в лабораторных условиях, не превосходит несколько десятков тесла, с сильными обменными полями ситуация проще.) Авторам удалось наблюдать расщепление электронных зон графенового образца, переход электронной жидкости в ферромагнитное состо-

яние с квантовым спин-поляризованным транспортом, а также спиновый эффект Холла. В теоретических работах [8, 9] рассматриваются похожие системы: двухслойный графен помещается на диэлектрические магнитные подложки из разных материалов. В каждом случае рассчитывается электронный спектр с помощью компьютерного моделирования на основе метода функционала плотности.

Безусловно, численные расчеты играют важную роль в исследованиях материалов. Однако многие свойства углеродных систем можно описывать в рамках простых одноэлектронных моделей, допускающих аналитические или полуаналитические решения. В данной работе именно такой подход мы применим к исследованию двухслойного АВ-графена на ферромагнитной диэлектрической подложке, помещенного во внешнее электрическое поле. Наш модельный гамильтониан обобщает гамильтониан, ранее предложенный в работе [10]. Аналитически найдя одноэлектронные спектры АВ-графена, мы изучим магнитные и транспортные свойства образца. В частности, мы теоретически покажем, что при различных соотношениях между обменным зеемановским и нормальным электрическим полем двухслойный графен может находиться как в диэлектрическом состоянии, так и в металлическом. Следова-

<sup>1)</sup>e-mail: arozhkov@gmail.com

тельно, меняя напряжение на затворном электроде, можно контролировать спиновый и зарядовый транспорт в двухслойном графене. Такая возможность может быть востребованной для приложений в спинтронике.

Наша работа организована следующим образом. В части 2 мы формулируем модель и изучаем ее простейшие свойства. Переход металл-диэлектрик рассматривается в части 3, а в части 4 мы сравниваем результаты наших расчетов с численными данными. Мы обсуждаем полученные результаты и представляем выводы в части 5.

**2. Модель.** Двухслойный АВ-графен представляет из себя два листа однослойного графена, разделенных расстоянием  $d = 0.36$  нм. Слои смещены друг относительно друга на длину химической связи углерод-углерод  $a_0 = 0.142$  нм, см. рис. 1. В такой решетке в каждой элементарной ячейке находятся четыре атома углерода, каждый из которых представляет одну из четырех подрешеток, по две от каждого из слоев (для нижнего слоя – это подрешетки A1 и B1, для верхнего слоя – A2 и B2).

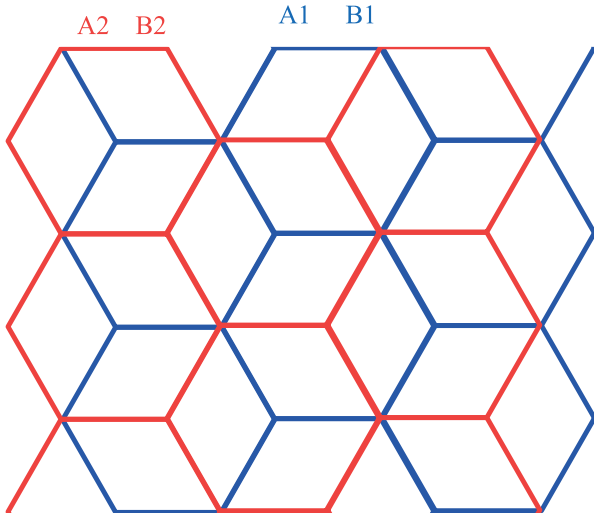


Рис. 1. (Цветной онлайн) Решетка двухслойного АВ-графена, вид сверху. Синим изображен нижний слой, красным – верхний. Четыре подрешетки обозначены A1, B1, A2, B2

Для описания электрона с квазиимпульсом  $\mathbf{q}$  на такой решетке необходимо ввести четыре компонента волновой функции  $\Psi_{\mathbf{q}}^{A1}$ ,  $\Psi_{\mathbf{q}}^{B1}$ ,  $\Psi_{\mathbf{q}}^{A2}$  и  $\Psi_{\mathbf{q}}^{B2}$ . Их удобно организовать в биспинор  $\Psi_{\mathbf{q}}$  следующим образом:

$$\Psi_{\mathbf{q}} = (\Psi_{\mathbf{q}}^{A1}, \Psi_{\mathbf{q}}^{B1}, \Psi_{\mathbf{q}}^{A2}, \Psi_{\mathbf{q}}^{B2})^T. \quad (1)$$

Тогда уравнение Шредингера можно записать так:

$$H_{\mathbf{q}}\Psi_{\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{q}}\Psi_{\mathbf{q}}, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_{\mathbf{q}}$  – собственная энергия, а матрица  $H_{\mathbf{q}}$ , задаваемая равенством

$$H_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 0 & -tf_{\mathbf{q}} & 0 & 0 \\ -tf_{\mathbf{q}}^* & 0 & -t_0 & 0 \\ 0 & -t_0 & 0 & -tf_{\mathbf{q}} \\ 0 & 0 & -tf_{\mathbf{q}}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

играет роль гамильтониана для состояний с квазиимпульсом  $\mathbf{q}$ . В этом определении мы использовали следующие обозначения:  $t = 2.57$  эВ – амплитуда перескока между атомами в одном слое,  $t_0 = 0.36$  эВ – амплитуда перескока между слоями, функция  $f_{\mathbf{q}}$  равна  $f_{\mathbf{q}} = 1 + 2 \exp\left(\frac{3ia_0q_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}a_0q_y}{2}\right)$ , где квазиимпульс  $\mathbf{q}$  отсчитывается от центра зоны Бриллюэна. Значения  $\varepsilon_{\mathbf{q}}$  даются хорошо известной формулой:

$$\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(1,\dots,4)} = \pm \frac{t_0}{2} \pm \sqrt{t^2|f_{\mathbf{q}}|^2 + \frac{t_0^2}{4}}. \quad (4)$$

Вблизи точек Дирака  $K_D = \left(0, \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}\right)$  и  $K'_D = \left(0, -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}\right)$  энергетические зоны (4) выглядят так, как показано на рис. 2. Без внешнего воздействия АВ-графен находится в полуметаллическом состоянии: две нижние зоны полностью заполнены электронами, две верхние полностью пусты, энергия Ферми равна нулю  $\varepsilon_F = 0$ , а в точке Дирака происходит касание пустой и заполненной зоны.

Теперь учтем влияние магнитной подложки. Будем предполагать, что обменное зеемановское поле, индуцированное подложкой, действует на два слоя по-разному. А именно, уточним систему уравнений (2) следующим образом:

$$(H_{\mathbf{q}} + V_{\sigma})\Psi_{\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{q}}\Psi_{\mathbf{q}}, \quad (5)$$

где матрица  $V_{\sigma}$  имеет вид:

$$V_{\sigma} = \text{diag}(\sigma h, \sigma h, \tilde{\sigma} \tilde{h}, \tilde{\sigma} \tilde{h}). \quad (6)$$

В этом выражении  $h$  и  $\tilde{h}$  – обменные зеемановские энергии в нижнем и верхнем слоях соответственно. Ниже будем всегда предполагать, что  $0 \leq \tilde{h} \leq h$ , т.е. обменное поле в слое, непосредственно контактирующем с подложкой, всегда сильнее, чем поле в слое, с подложкой не соприкасающемся. (Мы будем указывать величины обменных полей как в эВ, так

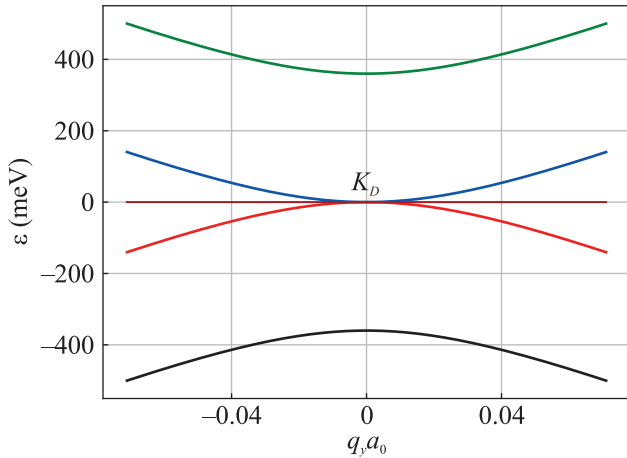


Рис. 2. (Цветной онлайн) Дисперсия АВ-графена (срез  $q_x = 0$ ,  $q_y$  меняется в узком диапазоне вблизи точки Дирака  $K_D$ , точка Дирака соответствует  $q_x = q_y = 0$ ). Горизонтальной линией обозначен уровень Ферми  $\varepsilon_F = 0$

и в тесла; переход между этими единицами задается магнетоном Бора  $\mu_B = 5.79 \cdot 10^{-5}$  эВ/Тл). Символ  $\sigma$  обозначает проекцию спина электрона на вектор намагниченности подложки ( $\sigma$  принимает значения  $\pm 1$ ).

Для системы (5) восемь ее собственных энергий (по четыре на одну проекцию спина) можно записать единым равенством:

$$\varepsilon_{\mathbf{q}\sigma}^{(1,\dots,8)} = \frac{\sigma(h + \tilde{h})}{2} + \chi \left[ \frac{(h - \tilde{h})^2}{4} + |f_{\mathbf{q}}|^2 t^2 + \frac{t_0^2}{2} + \right. \quad (7)$$

$$\left. + \kappa \sqrt{(h - \tilde{h})^2 |f_{\mathbf{q}}|^2 t^2 + |f_{\mathbf{q}}|^2 t^2 t_0^2 + \frac{t_0^4}{4}} \right]^{1/2}.$$

Здесь мы ввели, в дополнение к  $\sigma = \pm 1$ , еще два бинарных индекса:  $\chi = \pm 1$  и  $\kappa = \pm 1$ . В физически оправданном пределе  $h \ll t_0 \ll t$  энергия электронных состояний с  $\chi = +1$  ( $\chi = -1$ ) положительна (отрицательна), за возможным исключением малых окрестностей точек Дирака.

Условимся, что двум зонам, лежащим ближе всего к уровню Ферми, будут присвоены номера 4 и 5. Договоримся также, что собственным энергиям  $\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(4)}$  для зоны 4 ( $\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(5)}$  для зоны 5) соответствует выбор значений параметров  $\sigma = +1$ ,  $\chi = -1$ ,  $\kappa = -1$  ( $\sigma = -1$ ,  $\chi = +1$ ,  $\kappa = -1$ ) в ур. (7). Ниже нам также понадобятся зоны 3 ( $\sigma = -1$ ,  $\chi = -1$ ,  $\kappa = -1$ ) и 6 ( $\sigma = +1$ ,  $\chi = +1$ ,  $\kappa = -1$ ).

Оставшиеся зоны 1, 2, 7 и 8 соответствуют  $\kappa = +1$ . Легко проверить, что  $\min_{\mathbf{q}} |\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}}^{(1,2,7,8)}| \sim t_0$ . Из-за столь значительного расстояния до уровня Ферми такие зоны нами рассматриваться не будут.

Уравнение (7) позволяет установить, что

$$\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(4)} = -\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(5)}, \quad \varepsilon_{\mathbf{q}}^{(3)} = -\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(6)}. \quad (8)$$

Отсюда следует, что уровень Ферми АВ-графена равен нулю,  $\varepsilon_F = 0$ . Легко проверить, что зоны 3 и 6 не доходят до  $\varepsilon_F$ , в то время как зоны 4 и 5 перекрываются возле точек Дирака, см. рис. 3. Это перекрытие приводит к перетеканию носителей из одной зоны в другую, что сопровождается образованием электронного и дырочного листов поверхности Ферми. Иными словами, при ненулевом обменном поле  $\hbar$  двухслойный АВ-графен переходит в металлическое состояние даже без легирования.

Поверхность Ферми, возникшую в результате перетекания носителей из зоны 4 в зону 5, следует искать, решая уравнение  $\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(4)} = \varepsilon_{\mathbf{q}}^{(5)} = 0$ . Это условие задает в пространстве квазиимпульсов двухсвязную поверхность Ферми  $\mathbf{q}_F$ . В силу симметрии (8), электронный и дырочный листы поверхности Ферми совпадают друг с другом, т.е. наблюдается нестинг.

Пусть  $\delta$  – площадь области, ограничиваемой  $\mathbf{q}_F$ . Так как эта площадь мала, то каждая компонента связности хорошо аппроксимируется окружностью малого радиуса  $q_F$ . Центр одной такой окружности совпадает с точкой Дирака  $K_D$ , центр второй окружности – с точкой Дирака  $K'_D$ . Малость импульса Ферми  $q_F$  позволяет воспользоваться следующим приближением  $|f_{\mathbf{q}_F}| \approx 3a_0 q_F / 2$ . Сначала рассмотрим ситуацию, когда  $\hbar = 0$ . В этом пределе получаем:

$$q_F \approx \frac{2h}{3a_0 t}. \quad (9)$$

Однако даже небольшие  $\tilde{h}$  делают эту формулу неверной. Действительно, несложно показать, что в режиме  $h \gg \tilde{h} \gg \frac{h^3}{t_0^3}$  выражение для радиуса поверхности Ферми будет принимать вид:

$$q_F \approx \frac{2}{3a_0 t} \sqrt{t_0 \sqrt{h\tilde{h}}}. \quad (10)$$

Сравнивая эту формулу для  $q_F$  с ур. (9), мы обнаруживаем, что даже маленькое  $\tilde{h}$  сильно меняет радиус Ферми.

Образовавшаяся поверхность Ферми является полуметаллической в том смысле, что из четырех типов носителей (электроны с двумя спиновыми поляризациями и дырки с двумя спиновыми поляризациями) только два типа (электроны со спином  $\sigma = -1$  и дырки со спином  $\sigma = +1$ ) достигают уровня Ферми.

Перераспределение носителей между зонами приводит к спиновой поляризации графенового образца. Так как формирующие поверхность Ферми зоны 4 и 5 характеризуются противоположными значениями  $\sigma$ , следовательно, перетекание носителей из одной

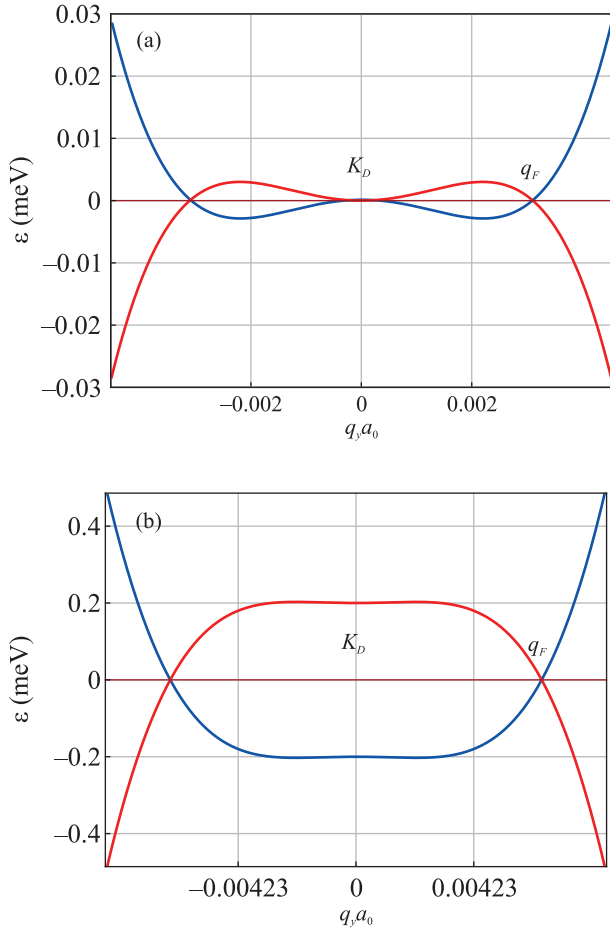


Рис. 3. (Цветной онлайн) Дисперсия АВ-графена на магнитной подложке (срез  $q_x = 0$ ,  $q_y$  меняется в узком диапазоне вблизи точки Дирака  $K_D$ , точка Дирака соответствует  $q_x = q_y = 0$ ). Графики построены при  $h = 11.6$  мэВ (200 Тл). Энергия Ферми соответствует  $\varepsilon_F = 0$ . Отмечен радиус Ферми  $q_F$ . Панель (а) представляет данные для  $\tilde{h} = 0$ . Непосредственно в точке Дирака сохраняется точка Ферми с касанием зон. Графики на панели (b) построены при  $\tilde{h} = 0.2$  мэВ. Видно, что даже малое значение  $\tilde{h}$  резко увеличивает радиус Ферми  $q_F$ , а также глубину ферми-моря. Масштабы осей на панели (а) отличаются от масштабов на панели (b)

зоны в другую сопровождается перевертанием спинов перетекших носителей. Количество перетекших носителей (на одну элементарную ячейку) равно  $\delta/S_{BZ}$ , где  $\delta = 2\pi q_F^2$ , а  $S_{BZ} = 8\pi^2/(3\sqrt{3}a_0^2)$  – площадь зоны Бриллюэна для графена. Поскольку каждый перетекший электрон вносит два кванта  $\hbar/2$  в полный спин системы, то, рассматривая приближение  $\tilde{h} = 0$ , для удельной спиновой поляризации находим:

$$m = \frac{\hbar h^2}{\sqrt{3}\pi t^2}. \quad (11)$$

В случае же, когда  $h \gg \tilde{h} \gg \frac{h^3}{t_0^3}$ , имеем:

$$m = \frac{\hbar t_0 \sqrt{h\tilde{h}}}{\sqrt{3}\pi t^2}, \quad (12)$$

где была использована формула (10). Мы видим, что конечное  $\tilde{h}$  приводит к резкому усилению намагниченности.

Обобщим нашу модель далее, учтя неэквивалентность слоев, вызванную контактом с подложкой и воздействием внешнего электростатического поля. Будем считать, что подложка создает конечную разность потенциальных энергий  $\phi_0$  между слоями. Кроме этого, предположим, что затворные электроды могут создавать электрическое поле  $E$  вдоль нормали к плоскости образца. Чтобы учесть эти воздействия, модифицируем матрицу  $V_\sigma$  в выражении (5):

$$V_\sigma = \text{diag} \left( \sigma h + \frac{\phi}{2}, \sigma h + \frac{\phi}{2}, \sigma \tilde{h} - \frac{\phi}{2}, \sigma \tilde{h} - \frac{\phi}{2} \right), \quad (13)$$

где

$$\phi = \phi_0 - eEd = -eE^*d. \quad (14)$$

В последнем равенстве мы ввели эффективное поле  $E^* = E - \phi_0/(ed)$ , учитывающее совокупное влияние подложки и электрического поля  $E$  на электроны системы. Предложенная модель обобщает работу [10].

При конечных  $h$ ,  $\tilde{h}$  и  $\phi$  зонная структура описывается следующей формулой:

$$\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(1,\dots,8)} = \frac{\sigma(h + \tilde{h})}{2} + \quad (15)$$

$$+ \chi \left[ \frac{(\phi + \sigma(h - \tilde{h}))^2}{4} + |f_{\mathbf{q}}|^2 t^2 + \frac{t_0^2}{2} + \right.$$

$$\left. + \kappa \sqrt{(\phi + \sigma(h - \tilde{h}))^2 |f_{\mathbf{q}}|^2 t^2 + |f_{\mathbf{q}}|^2 t^2 t_0^2 + \frac{t_0^4}{4}} \right]^{1/2}.$$

Это равенство, обобщающее ур. (7), будет использовано ниже для изучения влияния внешних полей на свойства системы.

**3. Переход металл-диэлектрик.** Хорошо известно, что нормальное электрическое поле переводит АВ-графен в диэлектрическое состояние. С другой стороны, мы видели, что в пределе  $\phi = 0$  двухслойный АВ-графен на ферромагнитной подложке является металлом. В связи с этим возникает вопрос о нахождении минимального значения  $\phi$ , при котором в спектре исследуемой системы открывается щель. Достаточно простой анализ показывает, что система является металлом, когда зоны 4 и 5

$$\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(4,5)} = \pm \frac{h + \tilde{h}}{2} \mp \left[ \frac{(\phi \pm (h - \tilde{h}))^2}{4} + |f_{\mathbf{q}}|^2 t^2 + \frac{t_0^2}{2} - \sqrt{(\phi \pm (h - \tilde{h}))^2 |f_{\mathbf{q}}|^2 t^2 + |f_{\mathbf{q}}|^2 t^2 t_0^2 + \frac{t_0^4}{4}} \right]^{1/2} \quad (16)$$

перекрываются по энергии. В противном случае двухслойный графен – диэлектрик. Таким образом, переход металл-диэлектрик происходит при таком значении  $\phi$ , при котором максимум зоны 4

$$\varepsilon_{\max}^{(4)} = \frac{h + \tilde{h}}{2} - \frac{t_0(h - \tilde{h} + \phi)}{2\sqrt{(h - \tilde{h} + \phi)^2 + t_0^2}} \quad (17)$$

лежит на одном уровне с минимумом зоны 5

$$\varepsilon_{\min}^{(5)} = -\frac{h + \tilde{h}}{2} + \frac{t_0|h - \tilde{h} - \phi|}{2\sqrt{(h - \tilde{h} - \phi)^2 + t_0^2}} \quad (18)$$

Приравняв  $\varepsilon_{\max}^{(4)}$  и  $\varepsilon_{\min}^{(5)}$ , несложно продемонстрировать, что исследуемая система является диэлектриком (полупроводником), когда  $\phi > \phi_c$ , при этом в режиме  $h, \phi \ll t_0$  критическое значение  $\phi_c$  дается формулой

$$\phi_c \approx h + \tilde{h} + \frac{2h^3}{t_0^2} + \frac{2\tilde{h}^3}{t_0^2} \quad (19)$$

Анализируя ур. (19), можно заключить, что при характерных обменных полях величиной в сотни тесла кубические поправки к величине  $\phi_c$  дают пренебрежимо малый вклад.

Из уравнений (17) и (18) выводим величину диэлектрической щели  $\Delta = \varepsilon_{\min}^{(5)} - \varepsilon_{\max}^{(4)}$ :

$$\Delta = -h - \tilde{h} + \frac{t_0(\phi - h + \tilde{h})}{2\sqrt{(\phi - h + \tilde{h})^2 + t_0^2}} + \frac{t_0(\phi + h - \tilde{h})}{2\sqrt{(\phi + h - \tilde{h})^2 + t_0^2}}, \quad (20)$$

см. рис. 4а. В пределе очень больших полей  $\phi \gg t_0$  мы получаем из ур. (20), что  $\Delta \approx t_0 - h - \tilde{h}$ . Эту асимптотику хорошо видно на рис. 5, где представлены зависимости  $\Delta = \Delta(\phi)$  для различных величин зеемановского поля  $h$  и  $\tilde{h} = 0$ . Стоит, однако, помнить, что создать на эксперименте столь значительные диэлектрические щели будет весьма затруднительно из-за возможного электрического пробоя гетероструктуры.

Отметим также, что спиновая поляризация диэлектрической фазы всегда нулевая,  $m = 0$ : из-за отсутствия поверхности Ферми перераспределение носителей между зонами с противоположными значениями  $\sigma$  не происходит, и количество электронов со

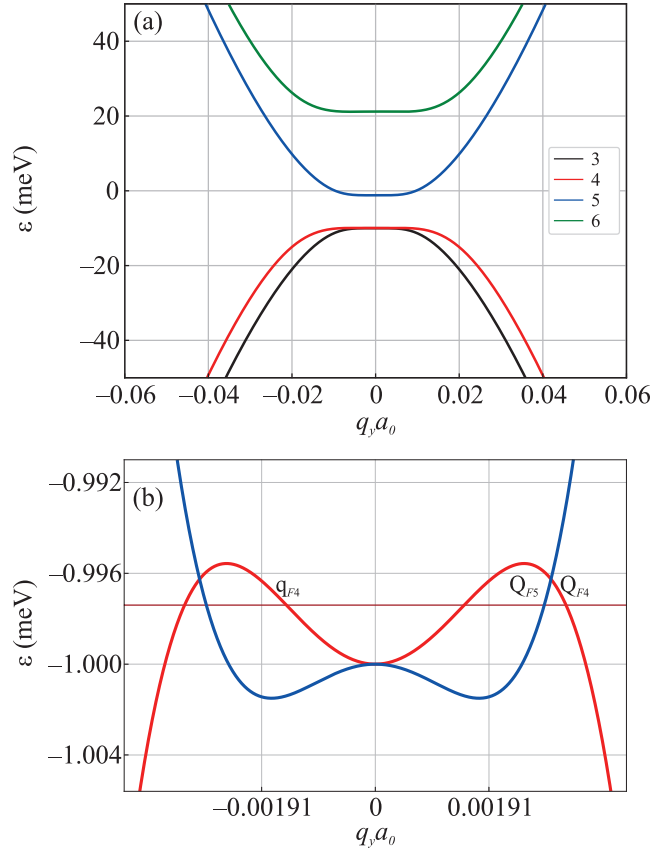


Рис. 4. (Цветной онлайн) Дисперсия АВ-графена на магнитной подложке во внешнем электрическом поле вблизи точки Дирака  $K_D$  (срез  $q_x = 0$ ,  $q_y$  меняется в узком диапазоне вблизи точки Дирака  $K_D$ , точка Дирака соответствует  $q_x = q_y = 0$ ). Графики построены при  $\tilde{h} = 0$ ,  $h = 11.2$  мэВ (190 Тл), так что  $\phi_c = 11.22$  мэВ. (а) – Диэлектрическая фаза,  $\phi = 20$  мэВ. В спектре явно видна щель, отделяющая валентные зоны 3 и 4 от зоны проводимости 5. (б) – Металлическая фаза,  $\phi = 2$  мэВ. Зона 4 (зона 5) показана красной (синей) линией. Зоны 3 и 6 выходят за рамки представленного окна. Уровень Ферми отмечен горизонтальной прямой. Точки пересечения зон с уровнем Ферми соответствуют поверхности Ферми. Импульсы Ферми отмечены как  $Q_{F4}$ ,  $Q_{F5}$  и  $q_{F4}$ . Масштабы осей на панели (а) отличаются от масштабов на панели (б)

спином по полю  $h$  строго равно количеству электронов со спином против поля.

Теперь обсудим область  $\phi < \phi_c$ , в которой наша система является металлом. Типичный металлический спектр показан на рис. 4б. Ранее, в части 2, мы обсуждали характеристики металлического состояния для случая, когда в системе отсутствует эффективное поле  $E^*$ . В конечных  $h$  и  $\phi$  симметрия (8) более не верна, поэтому мы уже не можем зафиксировать уровень Ферми  $\varepsilon_F = 0$ . Необходимо рассматри-

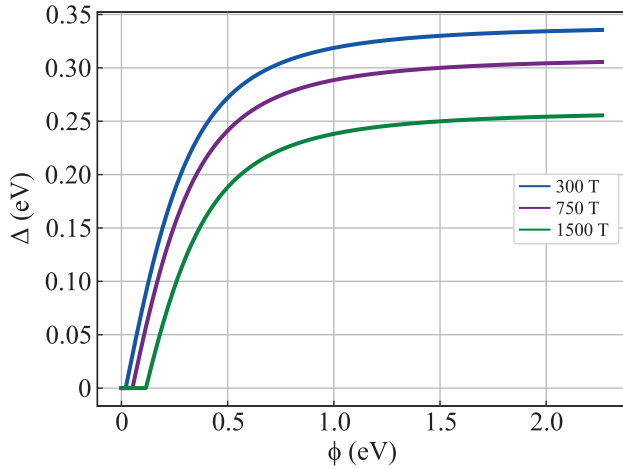


Рис. 5. (Цветной онлайн) Щель  $\Delta = \Delta(\phi)$  при различных значениях обменного поля  $h$  и  $\tilde{h} = 0$ . В металлической фазе ( $\phi < \phi_c$ ) щель равна нулю. Из графиков видно, что критическое значение  $\phi_c$  растет с ростом  $h$ , что согласуется с ур. (19)

вать многокомпонентную поверхность Ферми, определяемую стандартным условием:  $\varepsilon_{\mathbf{q}}^{(4)} = \varepsilon_{\mathbf{q}}^{(5)} = \varepsilon_{\mathbf{F}}$ . Для зоны 4 при положительном  $\phi$  данные уравнения задают две концентрические окружности с центром в точке  $K_D$ . Обозначим радиусы этих окружностей  $Q_{F4}$  и  $Q_{F4}'$ ,  $Q_{F4}' < Q_{F4}$ . То же самое происходит и вокруг точки  $K_D'$ . Зона 5 дает еще по одной окружности на точку Дирака. Их радиус обозначим  $Q_{F5}$ . Заметим, что при  $\phi = 0$ , радиусы  $Q_{F5}$  и  $Q_{F4}$  совпадают друг с другом и с  $q_F$ , определенным ур. (9), а радиус  $Q_{F4}'$  обращается в нуль. Возникшая поверхность Ферми должна удовлетворять следующему условию:

$$Q_{F4}^2 - Q_{F4}'^2 = Q_{F5}^2. \quad (21)$$

Иными словами, число состояний, занятых электронами в зоне 4, равно числу состояний, свободных от электронов в зоне 5. В пределе  $\tilde{h} = 0$  и  $\phi \ll h \ll t_0$  данную задачу можно решить аналитически:

$$\varepsilon_{\mathbf{F}} \approx -\frac{\phi}{2} + \frac{4h^2\phi}{3t_0^2}. \quad (22)$$

Когда  $\phi \rightarrow 0$ , выведенная формула показывает, что  $\varepsilon_{\mathbf{F}}$  обращается в нуль, как и должно быть в случае без эффективного поля, см. часть 2. Также заметим, что во втором слагаемом присутствует величина  $h^2/t_0^2 \ll 1$ . В типичной физической ситуации это отношение мало. Например, при  $h = 200$  Тл второе слагаемое является на три значащих порядка меньше, чем первое.

**4. Сравнение с компьютерным моделированием.** Чтобы продемонстрировать возможности на-

шего подхода, мы сравним наши аналитические расчеты с результатами, полученными численно [9] в рамках метода функционала плотности. Следуя работе [9], мы определили “расщепление” валентной зоны  $\lambda^{VB}$  и “расщепление” зоны проводимости  $\lambda^{CB}$  следующим образом:

$$\begin{aligned} \lambda^{VB} &= \left[ \varepsilon_{\mathbf{q}}^{(4)} - \varepsilon_{\mathbf{q}}^{(3)} \right]_{\mathbf{q}=0} = \\ &= h + \tilde{h} - \frac{|\phi + h - \tilde{h}|}{2} + \frac{|\phi - h + \tilde{h}|}{2}, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \lambda^{CB} &= \left[ \varepsilon_{\mathbf{q}}^{(6)} - \varepsilon_{\mathbf{q}}^{(5)} \right]_{\mathbf{q}=0} = \\ &= h + \tilde{h} + \frac{|\phi + h - \tilde{h}|}{2} - \frac{|\phi - h + \tilde{h}|}{2}. \end{aligned} \quad (24)$$

Эти два параметра характеризуют “тонкую” структуру спектра и легко вычисляются в рамках нашей модели.

“Расщепления”  $\lambda^{VB}$  и  $\lambda^{CB}$  интересны нам тем, что рис. 4b статьи [9] показывает, как эти величины (а также и щель  $\Delta$ ) зависят от внешнего электрического поля  $E_{\text{ext}}$ , создаваемого затворными электродами. Мы тоже можем построить  $\lambda^{VB}$ ,  $\lambda^{CB}$  и  $\Delta$  в зависимости от  $E_{\text{ext}}$ . Для этого необходимо учесть, что поле  $E_{\text{ext}}$ , порожденное внешним источником (затворными электродами), ослабляется в межслоевом пространстве АВ-графена из-за перераспределения электронной плотности между слоями. С этой целью мы ввели диэлектрическую проницаемость двухслойного АВ-графена  $\epsilon$  и записали связь между  $\phi$  и  $E_{\text{ext}}$  следующим образом:

$$\phi = \phi_0 - eE_{\text{ext}}d/\epsilon, \quad (25)$$

что соответствует подстановке  $E = E_{\text{ext}}/\epsilon$  в ур. (14). Данные на верхней панели рис. 4 в работе [11] указывают на то, что  $\epsilon \sim 3.4$ . Похожие теоретические оценки можно найти и в работе [12].

Чтобы установить оптимальные значения параметров нашей модели, мы проанализировали рис. 3 и 4 в [9]. На рисунке 3 обращает на себя внимание то обстоятельство, что глубоко в диэлектрической фазе электронные зоны, чьи волновые функции преимущественно локализованные на верхнем слое, практически вырождены. Такое явление возможно в пределе очень слабого обменного поля  $\tilde{h}$  в верхнем слое. Поэтому мы выберем  $\tilde{h} = 0$ . Это позволяет нам воспроизводить приближенное вырождение соответствующих зон в диэлектрической фазе, см. наш рис. 4a.

Мы также видим на рис. 4b в [9], что расщепления  $\lambda^{VB}$  и  $\lambda^{CB}$  в диэлектрической фазе выходят на “полку” примерно при 8 мЭВ. Проанализировав ур. (24)

и (23), несложно убедиться, что это соответствует  $h = 4$  мэВ при  $\tilde{h} = 0$ . Выбор  $\epsilon\phi_0/(ed) = -0.38$  мэВ обеспечивает правильное положение металлической фазы на оси  $E_{\text{ext}}$ . И наконец,  $\epsilon = 4$  выбирается так, чтобы наклон графика функции  $\Delta = \Delta(E_{\text{ext}})$  был таким же, как и на рис. 4б в [9].

Соответствующие графики представлены на рис. 6. Построенные нами кривые хорошо согласуются как по характерным масштабам, так и по качественному поведению с графиками на рис. 4б в [9]. Иными словами, подбор всего лишь четырех подгоночных величин с прозрачным физическим смыслом позволяет воспроизводить зависимости, полученные в результате “тяжелого” численного расчета.

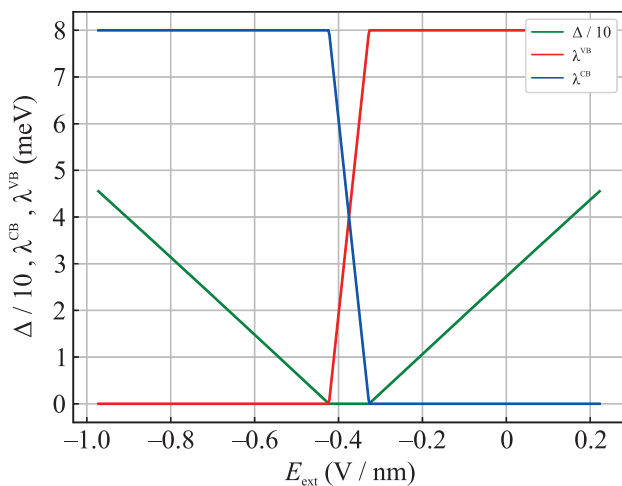


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимость величины  $\Delta/10$  (зеленая линия), а также величин спинового расщепления зоны проводимости (синяя линия) и валентной зоны (красная линия), от приложенного внешнего электрического поля  $E_{\text{ext}}$ . Графики построены для  $\tilde{h} = 0$ ,  $h = 4$  мэВ,  $\epsilon\phi_0/(ed) = -0.38$  В/нм и  $\epsilon = 4$ . Заметим, что ненулевое  $\phi_0$  сдвигает металлическую фазу в область  $E \sim \epsilon\phi_0/(ed)$ . Представленные графики согласуются с рис. 4б в работе [9]

**5. Обсуждение и заключение.** Наверное, самая интересная особенность рассматриваемой гетероструктуры – это возможность управлять ее проводящими свойствами с помощью затворного напряжения. Возникновение запрещенной зоны при наложении на образец АВ-графена перпендикулярного электрического поля – это известный теоретический результат, описанный в работах [13, 14], подтвержденный на эксперименте [11, 15–17]. Он обобщен нами на случай магнитной подложки. Мы увидели, что магнетизм подложки неожиданным образом модифицирует зонную структуру АВ-графена. И действительно, вместо точек Ферми с параболическим касанием зон, разрушающихся при возникновении произвольно малой асимметрии между слоями  $\phi$ , конечное  $h$  индуцирует спин-поляризованный металл при малых  $\phi$  и диэлектрик – при больших. Наша простая модель позволяет рассчитать точку перехода металл-диэлектрик, а также исследовать свойства фаз по обе стороны перехода.

Расчеты показывают, что образец АВ-графена имеет конечную намагниченность  $m$  в проводящей фазе. При увеличении  $\phi$  система входит в диэлектрическое состояние с нулевым  $m$ . Иными словами, появляется возможность управления магнитным свойством гетероструктуры с помощью немагнитного воздействия.

При нулевом  $\phi$  исследуемая система демонстрирует нестинг – совпадение электронного и дырочного листов поверхности Ферми. Эта особенность зонного строения подразумевает, что при достаточно низких температурах электронная жидкость будет неустойчива по отношению к спонтанному несверхпроводящему упорядочению [18]. Поскольку отклонение от  $\phi = 0$  разрушает нестинг, изменяя затворный потенциал, можно контролировать упорядочение.

Также проводящая фаза обладает полуметаллическими свойствами: спины состояний на электронном (дырочном) листе поверхности Ферми идеально поляризованы против поля  $h$  (по полю  $h$ ). Эту особенность зонной структуры можно использовать в экспериментах по спиновому транспорту.

Щель в диэлектрической фазе может быть весьма значительной: согласно нашей оценке  $\Delta \sim t_0 - h - \tilde{h}$ , она способна достигать величин в несколько сотен мэВ. Однако большие значения щели могут потребовать больших значений приложенного электрического поля, что увеличивает риск электрического пробоя всей системы.

Щель в диэлектрической фазе может быть весьма значительной: согласно нашей оценке  $\Delta \sim t_0 - h - \tilde{h}$ , она способна достигать величин в несколько сотен мэВ. Однако большие значения щели могут потребовать больших значений приложенного электрического поля, что увеличивает риск электрического пробоя всей системы.

Также, в пределе большой щели, когда  $h \ll \phi \lesssim t_0$ , выраженность именно магнитных явлений может теряться на фоне чисто электростатических. Представляется, что режим  $\phi \sim h$  более интересен, так как он близок к переходу металл-диэлектрик. В такой ситуации нужно помнить о следующем. Для того, чтобы обсуждаемая физика стала легкодоступной для наблюдения и/или практического применения, требуются подложки, способные создавать значительные  $h$ , сравнимые или даже превосходящие энергию, соответствующую комнатной температуре  $T_r = 300$  К = 26 мэВ. В противном случае использование криогенных технологий становится неизбежностью.

В заключении хотелось бы напомнить основные тезисы нашей работы. Мы аналитически исследо-

вали двухслойный АВ-графена на диэлектрической ферромагнитной подложке. Гамильтониан рассматриваемой модели включает обменное зеемановское и электростатическое поле, а также учитывает асимметрию слоев, вызванную контактом с подложкой. В низком эффективном поле АВ-графен – металл, для которого мы нашли поверхность Ферми. Она полуметаллическая, и может демонстрировать нестинг. Сам образец обладает конечной спиновой поляризацией. При превышении критического значения электрического поля в спектре графена открывается щель. В возникшем диэлектрическом состоянии полная спиновая поляризация обращается в нуль. Наши расчеты согласуются с результатами компьютерного моделирования по методу функционала плотности. Возможность управления щелью в сочетании с нетривиальными магнитными свойствами делает обсуждаемую гетероструктуру интересной для приложений в спинтронике.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 22-22-00464, <https://rscf.ru/project/22-22-00464/>.

1. W. Han, R. K. Kawakami, M. Gmitra, and J. Fabian, *Nature Nanotechnology*, **9**, 794 (2014).
2. S. Roche, J. Åkerman, B. Beschoten et al. (Collaboration), *2D Mater.* **2**, 030202 (2015).
3. S. S. Gregersen, S. R. Power, and A.-P. Jauho, *Phys. Rev. B* **95**, 121406(R) (2017).
4. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsova, *Science* **306**, 5696 (2004).
5. I. S. Sokolov, D. V. Averyanov, O. E. Parfenov, I. A. Karateev, A. N. Taldenkov, A. M. Tokmachev, and V. G. Storchak, *Mater. Horiz.* **7**, 1372 (2020).
6. A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, *Phys. Rep.* **648**, 1 (2016).
7. P. Wei, S. Lee, F. Lemaitre, L. Pinel, D. Cutaia, W. Cha, F. Katmis, Y. Zhu, D. Heiman, J. Hone, J. S. Moodera, and C.-T. Chen, *Nat. Mater.* **15**, 711 (2016).
8. K. Zollner, M. Gmitra, T. Frank, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **94**, 155441 (2016).
9. K. Zollner, M. Gmitra, and J. Fabian, *New J. Phys.* **20**, 073007 (2016).
10. P. Michetti, P. Recher, and G. Iannaccone, *Nano Lett.* **10**, 4463 (2010).
11. A. B. Kuzmenko, I. Crassee, D. van der Marel, P. Blake, and K. S. Novoselov, *Phys. Rev. B* **80**, 165406 (2009).
12. H. Min, B. Sahu, S. K. Banerjee, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. B* **75**, 155115 (2007).
13. E. McCann, *Phys. Rev. B* **74**, 161403(R) (2006).
14. E. McCann and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 086805 (2006).
15. E. A. Henriksen and J. P. Eisenstein, *Phys. Rev. B* **82**, 041412(R) (2010).
16. A. B. Kuzmenko, E. van Heumen, D. van der Marel, P. Lerch, P. Blake, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Phys. Rev. B* **79**, 115441 (2009).
17. E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov, N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A. K. Geim, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007).
18. Д. Н. Дресвянкин, А. В. Рожков, А. О. Сбойчаков, *Письма в ЖЭТФ* **114**(12), 824 (2021).