

01

## Фаза Берри и уровни Ландау в эпитаксиальном графене в скрещенных магнитном и электрическом полях

© З.З. Алисултанов<sup>1,2,3</sup><sup>1</sup> Институт физики им. И.М. Амирханова ДНЦ РАН, Махачкала<sup>2</sup> Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва<sup>3</sup> Дагестанский государственный университет, Махачкала

E-mail: zaur0102@gmail.com

*Поступило в Редакцию 27 мая 2015 г.*

В рамках простой аналитической модели исследованы фаза Берри и уровни Ландау в эпитаксиальном графене в скрещенных магнитном и электрическом полях. Показано, что фаза Берри электронов эпитаксиального графена вблизи точки Дирака равна  $\pi$ . Этот результат подтверждается несколькими экспериментальными данными. Уровни Ландау в эпитаксиальном графене могут перестраиваться с помощью продольного электрического поля.

Одним из уникальных свойств графена является необычное поведение в квантующем магнитном поле [1]. Действительно, уровни Ландау (УЛ) в графене неэквидистантны, а расстояние между первыми УЛ составляет более 400 К в магнитном поле 1 Т. Это приводит к необычному квантовому эффекту Холла, который можно наблюдать даже при комнатных температурах [2,3]. С другой стороны, в отличие от нерелятивистских материалов, УЛ в графене можно перестраивать с помощью продольного магнитного поля [4–5], что связано с тем, что циклотронная масса электронов в графене является функцией от энергии. Это приводит к зависимым от электрического поля магнитотранспортным явлениям, например, эффекту Нернста-Эттингсгаузена [6].

Здесь мы будем исследовать УЛ в эпитаксиальном графене в скрещенных магнитном и электрическом полях. Эпитаксиальный графен (ЭГ) исследуется в простой модели Давыдова. Эта модель оказалась очень плодотворной для качественных исследований [7–9]. Суть модели заключается в том, что ЭГ представляется в виде адсорбированных на поверхности металла или полупроводника ато-

мов углерода, выстроенных в гексагональную структуру. При этом уширение и смещение квазиуровня атома углерода учитываются в рамках моделей Андерсона–Ньюнса (для металлической подложки) и Халдейна–Андерсона (для полупроводниковой подложки) (подробно об этих моделях см. в [10]), а электронные перескоки между соседними атомами включаются в теорию с помощью уравнения Дайсона. В итоге получается следующее выражение для функции Грина электронов ЭГ (подробности см. в [11]):

$$G_q^{-1}(\varepsilon) = G_0^{-1}(\varepsilon) - tf(\mathbf{q}), \quad (1)$$

где  $f(\mathbf{q}) = 2 \exp(iq_x a/2) \cos(q_y a \sqrt{3}/2) + \exp(-iq_x a)$ , а  $a \approx 1.42 \text{ \AA}$ ,

$$G^0(\varepsilon) = \left( \varepsilon - \varepsilon_c - \Lambda(\varepsilon) - i\Gamma_c(\varepsilon) \right)^{-1} \quad (2)$$

есть функция Грина одного атома углерода,  $\varepsilon_c$ ,  $\Lambda(\varepsilon)$  и  $\Gamma_c(\varepsilon)$  есть энергия, функция смещения и полуширина квазиуровня атома углерода соответственно. Таким образом, волновое уравнение для электронов ЭГ записывается в виде

$$\begin{pmatrix} \Lambda(E) & tf(k) \\ tf^*(k) & \Lambda(E) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}, \quad (3)$$

из которого получаем уравнение для энергетического спектра

$$\varepsilon_q = \Lambda(\varepsilon_q) \pm \sqrt{|tf(q)|^2}. \quad (4)$$

Вблизи точки Дирака  $\mathbf{Q} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$  имеем:  $tf(\mathbf{p}) = v_b v_F (-ip_x - p_y)$ , где  $\mathbf{p} = \hbar(\mathbf{q} - \mathbf{Q})$ , а  $v_F = 3ta/2\hbar$  есть скорость Ферми электронов графена ( $v_F \approx 1 \cdot 10^8 \text{ cm/s}$ ). Здесь мы будем рассматривать случай полупроводниковой подложки, вследствие чего для функций  $\Lambda(\varepsilon)$  и  $\Gamma_c(\varepsilon)$  будут использоваться следующие выражения (см. [11]):

$$\Gamma_c(\varepsilon) = \frac{mS_1|V|^2}{\hbar^2} \Theta(|\varepsilon| - \Delta), \quad (5)$$

$$\Lambda(\varepsilon) = \frac{mS_1|V|^2}{\pi\hbar^2} \ln \left| \frac{\Delta - \varepsilon}{\Delta + \varepsilon} \right|. \quad (6)$$

Все обозначения такие же, как в [11].

Строго говоря, модель Давыдова не может быть применена при наличии квантующего магнитного поля. Это связано с тем, что в этом случае квантуется не только спектр адсорбата (в нашем случае это ЭГ), но и спектр подложки. Это значит, что меняется вся процедура расчета ширины и сдвига квазиуровня адатома. Однако случай графена является особенным и позволяет использовать модель Давыдова практически без изменений. Это обусловлено тем, что расстояние между уровнями Ландау в графене на несколько порядков больше, чем то же для нерелятивистских электронов. Поэтому в первом приближении мы можем считать, что спектр подложки остается непрерывным.

Для исследования УЛ мы будем, следуя Лифшицу и Каганову и недавним нашим работам [5–6], использовать квазиклассический подход, основанный на использовании обобщенного условия квантования Лифшица–Онсагера [12,13], которое для двумерной системы (мы считаем, что электронный газ находится в плоскости XY, а магнитное поле направлено вдоль оси Z) можно записать в виде

$$A(\varepsilon^*) = \frac{2\pi\hbar eH}{c} (n + \gamma), \quad (7)$$

где  $A(\varepsilon^*)$  — площадь сечения поверхности  $\varepsilon^*(\mathbf{p}) \equiv \varepsilon(\mathbf{p}) - v_0\mathbf{p} = \varepsilon$ ,  $v_0 = c[\mathbf{E}\mathbf{H}]/H^2$  — средняя скорость дрейфа электрона перпендикулярно плоскости, в которой лежат  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  (векторы электрического и магнитного полей соответственно),  $\gamma_\sigma = \chi + 1/2(m(\mu)/m)\sigma$  с  $\sigma = \pm 1$ ,  $m(\varepsilon) = (2\pi)^{-1}dA/d\varepsilon$  — циклотронная масса,  $\chi$  — постоянная, которая в случае квадратичного спектра равна  $1/2$  (в случае графена  $\chi = 0$ ),  $m$  — масса электрона,  $\mu$  — химический потенциал. Величина  $\chi$  определяется как  $\chi = 1/2 - \gamma/2\pi$ , где  $\gamma$  — т.н. фаза Берри [14]. В настоящей работе мы пренебрегаем зеемановским расщеплением уровней, т.е. считаем, что  $m(\mu)/m = 0$ . Кроме того, имеем  $\mathbf{E} \perp \mathbf{H}$ , а  $v_0 = cEe_y/H$ , где  $\mathbf{e}_y$  — единичный вектор вдоль оси Y. Тогда  $\varepsilon^*(\mathbf{p}) \equiv \varepsilon(\mathbf{p}) - v_0p_y$ .

Из (4) видно, что в общем случае для энергетического спектра нельзя получить явное выражение. Поэтому мы ограничимся энергиями  $\varepsilon < \Delta$ , для которых можно функцию  $\Lambda(\varepsilon)$  разложить вблизи точки Дирака  $\lambda(\varepsilon) \approx -2|V|^2mS_1\varepsilon/\pi\hbar^2\Delta$ . Тогда для энергетического спектра ЭГ получаем

$$\varepsilon_p = \pm v_F(1 + 2|V|^2mS_1/\pi\Delta\hbar^2)^{-1}|p| = \pm \tilde{v}_F|p|. \quad (8)$$

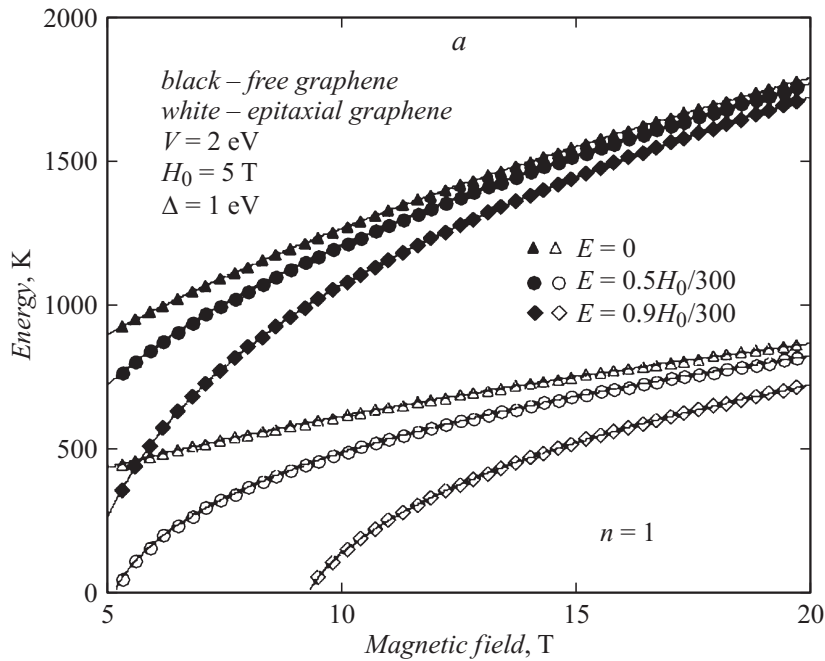
Можно показать, что фаза Берри ЭГ в модели Давыдова равна  $\pi$ . Действительно, гамильтониан двукратно вырожденной электронной системы имеет вид  $H = \mathbf{R}(p)\sigma$ ,  $\mathbf{R}$  — параметр, зависящий от импульса,  $\sigma$  есть матрицы Паули. Фаза Берри такой системы определяется как  $\gamma = \Omega/2$ ,  $\Omega$  — телесный угол, соответствующий замкнутому контуру в пространстве параметра  $\mathbf{R}$ . Для двумерной системы замкнутому контуру в пространстве импульсов соответствует угол  $\varphi = 2\pi$ . В случае линейного спектра  $\mathbf{R} \sim \mathbf{p}$ . С другой стороны  $\mathbf{p} \sim e^{i\varphi}$ , а значит и  $\mathbf{R} \sim e^{i\varphi}$ . Т.е. телесный угол в пространстве параметра  $\mathbf{R}$  также равен  $2\pi$ . Отсюда получаем, что в случае двумерных дираковских электронов  $\gamma = \pi$ . Очевидно, в случае ЭГ  $\mathbf{R} \sim (1 + 2|V|^2 \frac{mS_1}{\pi\hbar^2} \frac{1}{\Delta})^{-1} \mathbf{p}$ , т.е. угловая зависимость остается такой же, как и в случае свободного графена. Отсюда получаем, что для ЭГ фаза Берри равна  $\pi$ . Экспериментально фаза Берри ЭГ на С грани SiC исследовалась в [15,16]. В этих работах сообщается, что образцы ЭГ обладают фазой Берри, равной  $\pi$ . Фаза Берри в ЭГ на Si грани SiC исследована в [17]. В этой работе также показано, что  $\gamma = \pi$ . Таким образом, используемая модель полностью согласуется с экспериментом вблизи точки Дирака.

Очевидно, что фаза Берри не изменится при приложении продольного электрического поля. Действительно, фаза Берри набегает при адиабатическом изменении параметров гамильтониана, при котором они пробегает по замкнутой траектории в пространстве параметров. При этом важно, что эта фаза не зависит от деталей временной эволюции параметров. Приложение продольного электрического поля приводит лишь к тому, что изоэнергетической траекторией теперь будет не окружность, а эллипс.

При наличии одного только магнитного поля поверхностью постоянной энергии является окружность радиусом  $\varepsilon/\tilde{v}_F$ . Нетрудно показать, что в скрещенных полях кривая  $\varepsilon^* = \text{const}$  есть эллипс с параметрами:  $a = \varepsilon/\sqrt{\tilde{v}_F^2 - v_0^2}$ ,  $b = \varepsilon\tilde{v}_F/(\tilde{v}_F^2 - v_0^2)$ . Тогда  $A(\varepsilon) = \pi ab = \pi\varepsilon^2\tilde{v}_F/(\tilde{v}_F^2 - v_0^2)^{3/2}$ . Для УЛ в ЭГ имеем

$$\varepsilon_n = \text{sgn}(n)(1 - \beta^2)^{3/4} \sqrt{2}\hbar\tilde{v}_F l_H^{-1} \sqrt{|n|}, \quad (9)$$

где  $\beta = v_0/\tilde{v}_F$ . На самом деле, электрон в скрещенных полях дрейфует вдоль оси перпендикулярной плоскости, в которой лежат вектора  $\mathbf{E}$  и



Зависимость энергии уровней Ландау ( $n = 1$  (a) и  $n = 5$  (b)) от магнитного поля для свободного и ЭГ при различных значениях продольного электрического поля.

Н. Это означает, что в спектре должна быть непрерывная часть, равная, очевидно,  $v_0 p_y$  [6–8], т. е.

$$\varepsilon_{n,p_y} = \text{sgn}(n)(1 - \beta)^{3/4} \sqrt{2} \hbar \bar{v}_F l_H^{-1} \sqrt{|n|} + v_0 p_y. \quad (10)$$

На рис. 1 показаны зависимости энергии УЛ от номера состояния и от магнитного поля при различных значениях электрического поля. Во-первых, из этого рисунка видно, что наличие подложки приводит к уменьшению энергии УЛ. Это связано с уменьшением скорости Ферми. Во-вторых, с помощью продольного электрического поля можно значительно перестраивать УЛ как в свободном, так и в ЭГ.

И наконец, приведем выражение для осциллирующей ( $\Omega_{osc}$ ) и неосциллирующей ( $\Omega_1$ ) частей термодинамического потенциала 2D

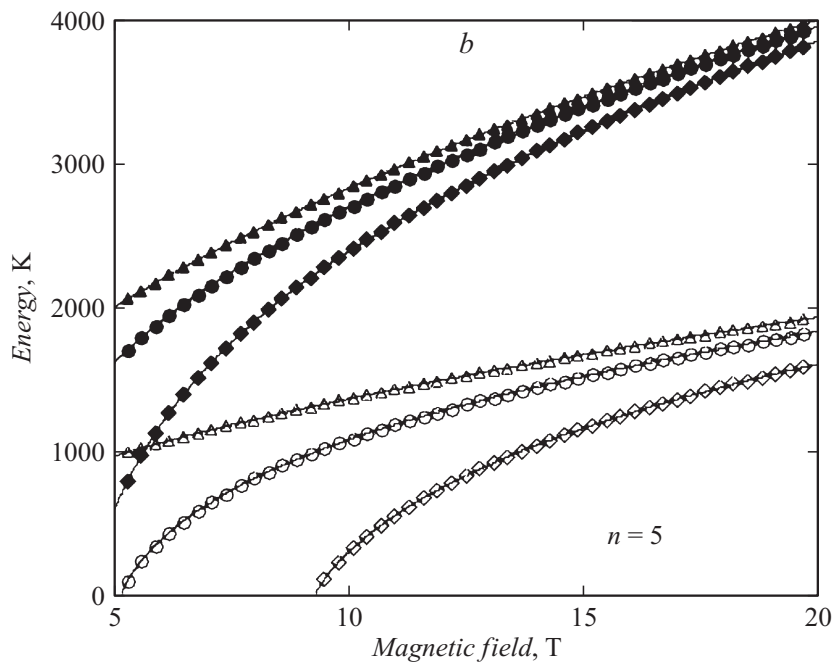


Рисунок (продолжение).

электронного газа с произвольным законом дисперсии в скрещенных магнитном и электрическом полях

$$\Omega_{osc} \approx \frac{k_B T L_y \omega_c}{2\pi^2 \nu_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} \frac{\sin \frac{kA}{\hbar \omega_c m} - \sin \frac{k(A - 2\pi m e E L_x)}{\hbar \omega_c m}}{\sinh \frac{2\pi^2 k k_B T}{\hbar \omega_c}}, \quad (11)$$

$$\Omega_1 = \frac{k_B T L_y}{2\pi^2 \hbar^2 e E} \int_0^{\infty} \ln \frac{1 + \exp \frac{\mu - \varepsilon - e E L_x}{k_B T}}{1 + \exp \frac{\mu - \varepsilon}{k_B T}} A(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (12)$$

где  $\omega_c = eH/mc$ ,  $T$  — температура,  $k_B$  — постоянная Больцмана. При получении этого выражения использовалось условие  $\mu \gg k_B T$ . Эти выражения получены в работах [5,6]. С помощью них можно исследовать

осцилляции термодинамических величин в ЭГ в скрещенных полях. При отсутствии электрического поля приходим к выражениям [5]

$$\Omega_{osc}(E=0) = \frac{m(\mu, E=0)\omega_c k_B T S}{\pi \hbar} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \frac{\cos\left(k \frac{A(\mu, E=0)c}{\hbar e H}\right)}{\sinh k \frac{2\pi^2 k_B T}{\hbar \omega_c}},$$

$$\Omega_1(E=0) = -\frac{S}{2\pi^2 \hbar^2} \int_0^{\infty} \frac{A(\varepsilon) d\varepsilon}{\exp \frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} + 1}.$$

С помощью (11), (12) можно исследовать осцилляции термодинамических величин в ЭГ. Это мы планируем сделать в последующих работах.

Таким образом, в настоящей работе в рамках простой модели исследованы задачи о фазе Берри и УЛ в ЭГ в скрещенных магнитном и электрическом полях. Возможность перестраивать УЛ с помощью продольного электрического поля связана с неквадратичностью спектра электронов графена и имеет как фундаментальное, так и большое прикладное значение.

Работа поддержана грантом РФФИ № 15-02-03311а, грантом президента РФ МК-4471.2015.2, РФФИ МКН-15-19-10049, а также проектом № 3.1262.2014 Министерства образования и науки РФ в сфере научной деятельности. Автор искренне благодарен фонду Дмитрия Зимины „Династия“ за финансовую поддержку.

## Список литературы

- [1] *Katsnelson M.I.* Graphene: Carbon in Two Dimensions. New York: Cambridge University Press, 2012. 366 p.
- [2] *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V.* et al. // Nature. 2005. V. 438. P. 197.
- [3] *Gusynin V.P., Sharapov S.G.* // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. P. 146801.
- [4] *Lukose V., Shankar R., Baskaran G.* // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98. P. 116802.
- [5] *Alisultanov Z.Z.* // JETP Lett. 2014. V. 99 (4). P. 232.
- [6] *Alisultanov Z.Z.* // Phys. Lett. A 2014. V. 378 (30–31). P. 2329.
- [7] *Davydov S.Yu.* // Semiconductors. 2011. V. 45. P. 629.
- [8] *Alisultanov Z.Z.* // JETP Lett. 2013. V. 98 (2). P. 111.
- [9] *Alisultanov Z.Z.* // Physica E. 2015. V. 69. P. 89–95.

- 
- [10] *Давыдов С.Ю.* Теория адсорбции: метод модельных гамильтонианов СПб.: Изд-во СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, 2013. 235 с. [twirpx.com/file/1596114/](http://twirpx.com/file/1596114/)
- [11] *Алисултанов З.З., Мейланов Р.П.* // ФТП. 2014. Т. 48 (7). С. 951–962.
- [12] *Лифушиц И.М., Косевич А.М.* // ЖЭТФ. 1955. Т. 29. С. 730.
- [13] *Onsager L.* // Phil. Mag. 1952. V. 43. P. 1006.
- [14] *Berry M.V.* // Proc. R. Soc. Lond. A. 1984. V. 392. P. 45.
- [15] *Sadowski M.L., Martinez G., Potemski M.* et. al // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97 (26).
- [16] *Berger C., Song Zh., Li X.* et al. // Science. 2006. V. 312 (5777). P. 1191.
- [17] *Walt A de Heer* et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2010. V. 43. P. 374007.