

Роль электрон-электронного отталкивания в задаче об эпитаксиальном графене на металле: простые оценки

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
 Санкт-Петербург, Россия
 Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
 информационных технологий, механики и оптики,
 Санкт-Петербург, Россия
 E-mail: Sergei_Davydov@mail.ru

(Поступила в Редакцию 12 января 2017 г.
 В окончательной редакции 5 февраля 2017 г.)

Для однослойного графена, находящегося на поверхности металлической подложки, в рамках расширенной теории Хартри–Фока рассмотрено влияние интра- и интератомного кулоновского отталкивания электронов (U и G соответственно) на его фазовую диаграмму. Приведено общее решение задачи, на основе которого проанализирован ряд частных случаев, допускающих аналитическое рассмотрение: свободный и эпитаксиальный графен без учета и с учетом энергии перехода электрона между соседними атомами графена. Рассмотрены три области фазовой диаграммы: волны спиновой и зарядовой плотностей (ВСП и ВЗП соответственно) и однородное по спину и заряду состояние полуметалла (ПМ). Основное внимание уделено недопированному графену. Показано, что учет взаимодействия с металлической подложкой расширяет область существования ПМ. Для всех рассмотренных случаев, однако, граница между состояниями ВСП и ВЗП описывается уравнением $U = zG$, где $z = 3$ — число ближайших соседей в графене. К уширению области ПМ-состояния приводит и допирование графена, причем эффект не зависит от знака свободных носителей, вносимых в эпитаксиальный графен подложкой. Согласно сделанным оценкам, в буферном слое возможно только ПМ-состояние металлического типа, тогда как в квазисвободном эпитаксиальном графене может быть реализовано ВЗП-состояние. Обсуждается влияние температуры на фазовую диаграмму эпитаксиального графена.

DOI: 10.21883/FTT.2017.08.44772.02

1. Введение

Роль межэлектронного взаимодействия в теории графена всегда вызывала большой интерес [1,2]. Из недавних публикаций в этой области отметим работы [3–8], где для описания электронного спектра свободного однослойного графена использовались два варианта модели Хаббарда: стандартный, в рамках которого учитывается только внутриатомная корреляция электронов U , и расширенный, где дополнительно включено межатомное взаимодействие электронов G . В этих работах обсуждается возможность переходов между стандартным состоянием дираковского полуметалла (ПМ), в котором каждому атому углерода соответствует один электрон с нулевым результирующим спиновым моментом, в состояния с неоднородным спиновым и зарядовым распределением электронов по подрешеткам. Рассматриваются антиферромагнитное распределение электронов, когда числа заполнения n_A и n_B подрешеток A и B одинаковы, а спиновые моменты противоположно направлены, и состояния с $n_A \neq n_B$ и нулевыми спиновыми моментами. В первом случае говорят о волне спиновой плотности (ВСП), во втором — о волне зарядовой плотности (ВЗП). В отличие от бесщелевого электронного спектра дираковского ПМ ВСП- и ВЗП-состояния в свободном графене обладают щелью (запрещенной зоной) и являются моттовскими изоляторами.

В настоящей работе обратимся к эпитаксиальному графену (ЭГ) на металлической подложке. Рассмотрим общую задачу о влиянии корреляций U и G на электронную структуру ЭГ. Для этого воспользуемся, во-первых, приближением, впервые введенным в [9] для описания адсорбированных слоев. Сущность этого приближения состоит в том, что мы строим гексагональную решетку ЭГ не из атомов углерода, учитывая затем взаимодействие этой решетки с подложкой, а сразу из адатомов углерода, что схематически показано на рис. 1 (см. подробнее [10,11]). Во-вторых, мы используем

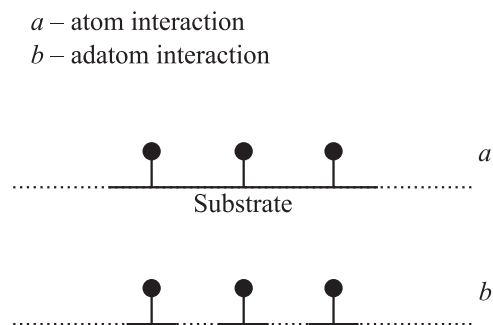


Рис. 1. Схема замены адсорбированной на подложке решетки атомов (a) на решетку адатомов (b).

некоторые подходы работы [12], в которой рассматривалась задача о неоднородном распределении заряда и намагнитченности в адсорбированном на металлической подложке слое и применялась модель с хаббардовской решеткой андерсоновских примесей [13–15]. Мы также рассмотрим ряд частных случаев, для которых в аналитическом виде получим критерии существования областей неоднородных распределений спина и заряда, и обсудим роль температуры.

2. Общее рассмотрение

Представим гамильтониан системы H в виде

$$H = H_{\text{sub}} + H_{\text{Gr}} + H_{\text{int}}. \quad (1)$$

Здесь гамильтониан, отвечающий субстрату, есть

$$H_{\text{sub}} = \sum_{\mathbf{q}, \sigma} \varepsilon_{\text{sub}}(\mathbf{q}) \hat{n}_{\mathbf{q}, \sigma}, \quad (2)$$

гамильтониан, описывающий графен, равен

$$\begin{aligned} H_{\text{Gr}} &= H_{\text{Gr}}^0 + H_{\text{Gr}}^{\text{int}}, \\ H_{\text{Gr}}^0 &= \varepsilon_0 \sum_i \hat{n}_i + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\ H_{\text{Gr}}^{\text{int}} &= -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \text{h.c.}) + G \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j \end{aligned} \quad (3)$$

и гамильтониан взаимодействия находящихся в узлах i изолированных атомов графена с субстратом имеет вид

$$H_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{q}, i, \sigma} V_{i\mathbf{q}} (c_{\mathbf{q}\sigma}^+ a_{i\sigma} + \text{h.c.}), \quad (4)$$

где $\hat{n}_{\mathbf{q}\sigma}$ — оператор числа заполнения состояния $|\mathbf{q}, \sigma\rangle$ с волновым вектором \mathbf{q} и проекцией спина $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$, $c_{\mathbf{q}\sigma}^+$ ($c_{\mathbf{q}\sigma}$) — соответствующий оператор рождения (уничтожения) электрона подложки, $\hat{n}_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ — оператор числа заполнения состояния i -го узла решетки графена $|i, \sigma\rangle$, $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$) — соответствующий оператор рождения (уничтожения) электрона графена, $n_i = \sum_{\sigma} \hat{n}_{i\sigma}$,

$\varepsilon_{\text{sub}}(\mathbf{q})$ — закон дисперсии электронов подложки, ε_0 — энергия состояния $|p_z\rangle$ изолированного атома углерода (точка Дирака), t — энергия перехода электрона между ближайшими соседями (БС) в графене, $V_{i\mathbf{q}}$ — матричный элемент взаимодействия, спаривающий состояния $|\mathbf{q}, \sigma\rangle$ и $|i\sigma\rangle$, который в дальнейшем принимается равным константе V [11–16], $\langle i, j \rangle$ обозначает суммирование по БС в графене, h.c. — эрмитово сопряженные слагаемые.

В приближении Хартри–Фока два последних слагаемых выражения (3) можно записать в виде

$$\begin{aligned} U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} &= U(n_{A\uparrow} \hat{n}_{A\downarrow} + n_{A\downarrow} \hat{n}_{A\uparrow} - n_{A\uparrow} n_{A\downarrow} \\ &+ n_{B\uparrow} \hat{n}_{B\downarrow} + n_{B\downarrow} \hat{n}_{B\uparrow} - n_{B\uparrow} n_{B\downarrow}), \end{aligned} \quad (5)$$

$$G \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j = zG(n_A \hat{n}_B + n_B \hat{n}_A - n_A n_B), \quad (6)$$

где $z = 3$ — число БС в гексагональной решетке, $n_{i\sigma} = \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle$, $n_i = \langle \hat{n}_i \rangle$, $\langle \dots \rangle$ — усреднение по основному

состоянию¹. Вводя энергии

$$\begin{aligned} \varepsilon_{A\uparrow, \downarrow} &= \varepsilon_0 + U n_{A\downarrow, \uparrow} + zG n_B, \\ \varepsilon_{B\uparrow, \downarrow} &= \varepsilon_0 + U n_{B\downarrow, \uparrow} + zG n_A, \end{aligned} \quad (7)$$

запишем гамильтониан H_{Gr} в приближении Хартри–Фока:

$$\begin{aligned} H_{\text{Gr}}^{\text{HF}} &= -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \text{h.c.}) + \sum_{\alpha, \sigma} \varepsilon_{\alpha, \sigma} \hat{n}_{\alpha, \sigma} \\ &- U \sum_{\alpha} n_{\alpha\uparrow} n_{\alpha\downarrow} - zG n_{A n_B}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\alpha = A, B$ — индекс подрешетки.

Как уже отмечалось выше, для нахождения функции Грина, соответствующей гамильтониану (1)–(3), воспользуемся адсорбционным приближением [9–12], а также результатами работы [17], где рассматривались эпитаксиальные графеноподобные слои бинарных соединений². Тогда с учетом (7) и (8) получим следующие выражения для диагональных функций Грина подрешеток A и B :

$$G_{AA(BB)}^{\sigma}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\Omega_{B(A)}^{\sigma} + i\Gamma(\omega)}{(\Omega_A^{\sigma} + i\Gamma(\omega))(\Omega_B^{\sigma} + i\Gamma(\omega)) - t^2 f^2(\mathbf{k})}, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &= \\ &= \sqrt{3 + 2 \cos(k_x a_0 \sqrt{3}) + 4 \cos(k_x a_0 \sqrt{3}/2) \cos(3k_y a_0/2)}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ — волновой вектор для движения электрона в плоскости листа графена, a_0 — расстояния между БС в графене, ω — энергетическая переменная,

$$\begin{aligned} \Omega_{A(B)}^{\sigma} &= \omega - \varepsilon_{\sigma}(\omega) \mp \Delta_{\sigma}(\omega), \quad \varepsilon_{\sigma}(\omega) = (\tilde{\varepsilon}_{A\sigma} + \tilde{\varepsilon}_{B\sigma})/2, \\ \Delta_{\sigma}(\omega) &= (\tilde{\varepsilon}_{A\sigma} - \tilde{\varepsilon}_{B\sigma})/2, \quad \tilde{\varepsilon}_{A(B)\sigma} = \varepsilon_{A(B)\sigma} + \Lambda(\omega), \\ \Gamma(\omega) &= \pi V^2 \rho_{\text{sub}}(\omega), \quad \Lambda(\omega) = V^2 P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{\text{sub}}(\omega') d\omega'}{\omega - \omega'}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\rho_{\text{sub}}(\omega)$ — плотность состояния подложки, и P — символ главного значения. Электронный спектр системы определяется из уравнения $\Omega_A^{\sigma} \Omega_B^{\sigma} = t^2 f^2$, что дает

$$\begin{aligned} E_{\pm}^{\sigma}(\omega, \mathbf{k}) &= \varepsilon_{\sigma}(\omega) \pm R_{\sigma}(\omega, \mathbf{k}), \\ R_{\sigma}(\omega, \mathbf{k}) &= \sqrt{\Delta_{\sigma}^2(\omega) + t^2 f^2(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (12)$$

¹ Следует отметить, что последний член в (3) отличается от выражения, использованного в [12]. Однако в приближении Хартри–Фока операторная структура гамильтонианов здесь и в [12] идентична, а различия сводятся лишь к сдвигу энергии ε_0 .

² Адсорбционный подход позволяет не учитывать косвенный обмен атомов углерода через состояния подложки, порождаемый взаимодействием (4).

Отметим, что знак „минус“ соответствует валентной π -зоне, знак „плюс“ — π^* -зоне проводимости. Плотности состояний в расчете на элементарную ячейку, отвечающие функциям Грина (9), равны

$$\rho_{AB}^\sigma(\omega) = \rho_A^\sigma(\omega) + \rho_B^\sigma(\omega),$$

$$\rho_{A(B)}^\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} G_{AA(BB)}^\sigma(\omega, \mathbf{k}), \quad (13)$$

где $\rho_{A(B)}^\sigma(\omega)$ — плотность состояний на узле подрешетки $A(B)$, $N = N_A = N_B$ — число атомов в подрешетках A и B , суммирование ведется по первой зоне Бриллюэна. Энергия системы есть

$$E = \sum_{\alpha, \sigma} \varepsilon_{\alpha\sigma} \hat{n}_{\alpha\sigma} - U \sum_{\alpha} n_{\alpha\uparrow} n_{\alpha\downarrow} - zG n_A n_B + \sum_{\alpha, \sigma} \int_{-\infty}^{\varepsilon_F - \varepsilon_{\alpha\sigma}} \Omega_{\sigma} \rho_{\alpha}^{\sigma}(\Omega_{\sigma}) d\Omega_{\sigma} + E_{\text{sub}}, \quad (14)$$

где ε_F — уровень Ферми, $\rho_{\alpha}^{\sigma}(\Omega_{\sigma})$ — плотность состояний для α -подрешетки (на атом), E_{sub} — вклад субстрата в энергию системы.

3. Свободный графен

Рассмотрим частные случаи, полезные для дальнейшего анализа. Начнем со свободного графена, описываемого гамильтонианом (8), в пределе сильной корреляции $U, G \gg t$. Полагая в нулевом приближении $t = 0$, получим для энергии $E_{\text{Gr}}^{\text{HE}}(n_{A\uparrow}, n_{A\downarrow} | n_{B\uparrow}, n_{B\downarrow}) \equiv \langle H_{\text{Gr}}^{\text{HE}} \rangle$ выражение

$$E_{\text{Gr}}^{\text{HE}}(n_{A\uparrow}, n_{A\downarrow} | n_{B\uparrow}, n_{B\downarrow}) = \varepsilon_0(n_A + n_B) + U(n_{A\uparrow}n_{A\downarrow} + n_{B\uparrow}n_{B\downarrow}) + zG n_A n_B. \quad (15)$$

Если на одну элементарную ячейку приходится два электрона, для случая антиферромагнитного спинового упорядочения, или при наличии ВСП, имеем $E_{\text{Gr}}^{\text{HE}}(1, 0 | 0, 1) \approx 2\varepsilon_0 + zG$. В том случае, когда на узлах подрешетки A находятся два электрона, а узлы подрешетки B пусты, имеет место ВЗП, характеризующая энергией $E_{\text{Gr}}^{\text{HE}}(1, 1 | 0, 0) \approx 2\varepsilon_0 + U$. Таким образом, при $zG < U$ имеем ВСП-состояние, при $zG > U$ — ВЗП-состояние. Это хорошо известный результат, не связанный непосредственно ни с приближением Хартри-Фока, ни с геометрией и размерностью решетки (при одинаковых значениях z) [18–22]. Более того, численные расчеты [18–22] показывают, что граница, разделяющая ВСП- и ВЗП-состояния, с хорошей точностью описывается уравнением $zG = U$. Далее на примере простых моделей, допускающих аналитическое рассмотрение, продемонстрируем справедливость этого вывода в том числе и для ЭГ.

Для дальнейшего анализа введем, как и в [12] (см. также [11]), следующие параметры:

$$2a = n_{A\uparrow} + n_{A\downarrow} + n_{B\uparrow} + n_{B\downarrow}, \quad 2b = n_{A\uparrow} - n_{A\downarrow} + n_{B\uparrow} - n_{B\downarrow}, \\ 2c = n_{A\uparrow} + n_{A\downarrow} - n_{B\uparrow} - n_{B\downarrow}, \quad 2d = n_{A\uparrow} - n_{A\downarrow} - n_{B\uparrow} + n_{B\downarrow}. \quad (16)$$

Величины $2b$, $2c$ и $2d$ являются параметрами порядка, описываемыми соответственно намагниченность, ВЗП- и ВСП-состояния двухатомной элементарной ячейки ЭГ, содержащей $2a$ электронов. Тогда

$$n_{A\uparrow, \downarrow} = (a \pm b + c \pm d)/2, \quad n_{B\uparrow, \downarrow} = (a \pm b - c \mp d)/2, \quad (17)$$

$$\varepsilon_{A\uparrow, \downarrow} = \varepsilon_0 + U(a \mp b + c \mp d)/2 + zG(a - c),$$

$$\varepsilon_{B\uparrow, \downarrow} = \varepsilon_0 + U(a \mp b + c \pm d)/2 + zG(a + c). \quad (18)$$

Положим в дальнейшем $\varepsilon^* \equiv \varepsilon_0 + a(U/2 + zG) = 0$. В новых обозначениях выражение (15) приобретает вид

$$E_{\text{Gr}}^{\text{HF}} = E_0 - (b^2 + d^2)U/2 + c^2(U/2 - zG), \quad (19)$$

где $E_0 = -(U/2) + zG$.

Будем по-прежнему рассматривать свободный графен, но учтем теперь межатомный обмен электронами, т.е. t -взаимодействие. Как показано в [17], в низкоэнергетическом приближении плотность состояний свободного графена на элементарную ячейку равна

$$\rho_{AB}^\sigma(\Omega_\sigma) = \begin{cases} \frac{2|\Omega_\sigma|}{\xi^2}, & \sqrt{\xi^2 + \Delta_\sigma^2} \geq |\Omega_\sigma| \geq |\Delta_\sigma|, \\ 0, & |\Omega_\sigma| < |\Delta_\sigma|, \quad |\Omega_\sigma| > \sqrt{\xi^2 + \Delta_\sigma^2}. \end{cases} \quad (20)$$

Здесь $\Omega_\sigma = \omega - \varepsilon_\sigma$, $\varepsilon_\sigma = (\varepsilon_{A\sigma} + \varepsilon_{B\sigma})/2$, $\Delta_\sigma = (\varepsilon_{A\sigma} - \varepsilon_{B\sigma})/2$, $\xi = \sqrt{2\pi\sqrt{3}}t$.

Легко показать, что при этом $\varepsilon^* = \varepsilon_F$, и получаем $a = 1$. Это так называемый симметричный случай [11,23], когда $n_{A,B} = 1 \pm c$ [11,12]. Положим $b = 0$, откуда $m_A = -m_B = d$, где $m_{A,B} = n_{A\uparrow, B\uparrow} - n_{A\downarrow, B\downarrow}$, что соответствует антиферромагнитному состоянию. Тогда возможны следующие ситуации: $\varepsilon_{A\uparrow} = \varepsilon_{B\downarrow} = -dU/2$, $\varepsilon_{A\downarrow} = \varepsilon_{B\uparrow} = dU/2$ при $c = 0$, $d \neq 0$ (ВСП); $\varepsilon_{A\uparrow} = \varepsilon_{A\downarrow} = c(U/2 - zG)$, $\varepsilon_{B\uparrow} = \varepsilon_{B\downarrow} = -c(U/2 - zG)$ при $c \neq 0$, $d = 0$ (ВЗП); $\varepsilon_{\alpha\sigma} = 0$ при $c = d = 0$ (ПМ). Поскольку $\varepsilon_\sigma = 0$ и $\Delta_{\uparrow, \downarrow} = U(c \mp d)/2 - czG$, соответствующие законы дисперсии имеют вид $E_{\pm}^\sigma(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{(dU/2)^2 + t^2 f^2(\mathbf{k})}$ (ВСП), $E_{\pm}^\sigma(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{c^2(U/2 - zG)^2 + t^2 f^2(\mathbf{k})}$ (ВЗП), $E_{\pm}^\sigma(\mathbf{k}) = \pm t|f(\mathbf{k})|$ (ПМ). Таким образом, бесщелевое дираковское ПМ-состояние качественно отличается от имеющих щели состояний ВСП и ВЗП, представляющих собой моттовский изолятор.

Энергия $\bar{E}(a = 1, b = 0, c, d) \equiv \bar{E}(c, d)$ рассматриваемой системы определяется выражением

$$\bar{E}(c, d) = -\frac{2}{3\xi^2} \sum_{\sigma} ((\xi^2 + \Delta_\sigma^2)^{3/2} - |\Delta_\sigma|^3) + \bar{E}_{\text{Gr}}^{\text{HF}}, \quad (21)$$

где $\bar{E}_{\text{Gr}}^{\text{HF}}$ дается формулой (19) при $b = 0$. Анализ показал (см. Приложение, пункт 1), что граница между состоя-

ниями ВСП и ВЗП описывается условием $zG = U$. При этом совпадают и соответствующие законы дисперсии.

4. Эпитаксиальный графен: частные случаи

4.1. Недопированный эпитаксиальный графен при $t = 0$. Учтем взаимодействие атомов графена с подложкой (4), но пренебрежем их взаимодействием между собой, положив $t = 0$. Этот случай является нулевым приближением режима сильной связи графена с субстратом [24]. В качестве подложки рассмотрим металл, считая $\rho_{\text{sub}}(\omega) = \rho_m = \text{const}$, так что в приближении бесконечно широкой зоны проводимости металла получаем полуширину квазиуровня атома углерода $\Gamma(\omega) = \Gamma_m = \text{const}$, а гибридационный сдвиг его квазиуровня $\Lambda(\omega) = 0$ [11,23]. Тогда приходим к системе четырех уравнений вида

$$\Gamma_m \cot(\pi n_{A\sigma(B\sigma)}) = \varepsilon_{A\sigma(B\sigma)} - \varepsilon_F, \quad (22)$$

где энергии $\varepsilon_{A\sigma(B\sigma)}$ определяются выражениями (7). Полагая $\varepsilon^* = \varepsilon_F$, т.е. $a = 1$ и $b = 0$, вместо (22) получим систему двух уравнений

$$\Gamma_m \tan[(\pi/2)(c + d)] = czG - (c - d)U/2,$$

$$\Gamma_m \tan[(\pi/2)(c - d)] = czG - (c + d)U/2. \quad (23)$$

Отсюда следует, что решение $c = 0, d \neq 0$, реализуется при выполнении неравенства $U > \pi\Gamma_m$, решение $c \neq 0, d = 0$ — при $2zG - U > \pi\Gamma_m$, решение $c = d \neq 0$ при $zG = U > \pi\Gamma_m$.

Для определения области устойчивости найденных решений требуется проанализировать энергию системы E' . Легко показать, что плотность состояний рассматриваемой системы дается выражением

$$\rho_{AB}^{\sigma}(\omega) = \frac{\Gamma_m}{\pi} \sum_{\alpha} \frac{1}{(\omega - \varepsilon_{\alpha\sigma})^2 + \Gamma_m^2}, \quad (24)$$

а энергия системы $E'(a = 1, b = 0, c, d) \equiv E'(c, d)$ может быть представлена в виде

$$E'(c, d) = \frac{\Gamma_m}{2\pi} \sum_{\alpha, \sigma} \ln \frac{\varepsilon_{\alpha\sigma}^2 + \Gamma_m^2}{W^2} + \bar{E}_{\text{Gr}}^{\text{HF}} + E_m, \quad (25)$$

где значения $\varepsilon_{\alpha\sigma}$ и $n_{\varepsilon\sigma}$ определяются формулами (7) и (15) соответственно, W — энергия обрезания, вводимая в соответствии с приближением бесконечно широкой зоны [11,12,15,23], E_m — энергия металлической подложки, которую мы в дальнейшем опускаем, считая ее невозмущенной наличием графена (последнее обстоятельство связано с заданием плотности состояний подложки в виде не зависящей от энергии константы: см. задачу 18.3 в [23]). Анализ полученных результатов (см. Приложение, пункт 2) приводит к фазовой диаграмме,

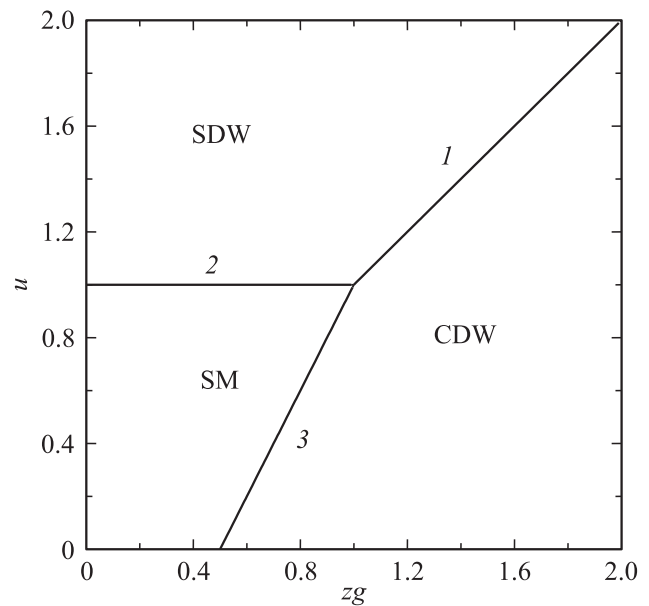


Рис. 2. Фазовая диаграмма ЭГ для случая $a = 1, b = 0$ (два электрона на элементарную ячейку с нулевой суммарной намагниченностью) при $t = 0$. $g = G/\pi\Gamma_m$ и $u = U/\pi\Gamma_m$ — приведенное межатомное и внутриатомное отталкивание электронов, SDW — ВСП-состояние ($c = 0, d \neq 0$), CDW — ВЗП-состояние ($c \neq 0, d = 0$), SM — ПМ-состояние ($c = 0, d = 0$). Прямая 1 отвечает уравнению $u = zg$, прямая 2 — уравнению $u = 1$, прямая 3 — $u = 2zg - 1$.

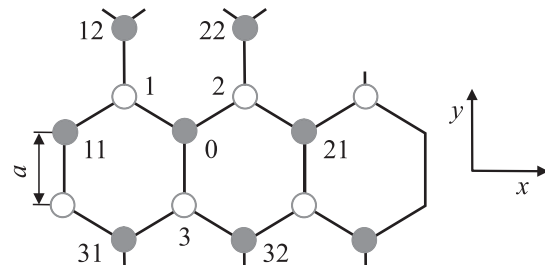


Рис. 3. Решетка адатомов графена с выделенным кластером 0–1–2–3–31–32. Темными кружками обозначены адатомы подрешетки A, светлыми — подрешетки B.

изображенной на рис. 2. Отметим, что граница между состояниями ВСП и ВЗП вновь описывается условием $zG = U$.

4.2. Недопированный эпитаксиальный графен при $t \neq 0$. Учтем теперь прямой обмен между атомами ЭГ, для чего рассмотрим кластер из шести адатомов 0–1–2–3–31–32, изображенных на рис. 3, заимствованном из работы [17]. Поскольку мы имеем дело с кластером, а не с бесконечной структурой, следует говорить не о ВЗП и ВСП, а о неоднородных зарядовой и спиновой плотностях (НЗП и НСП соответственно).

Результаты рассмотрения приведены в Приложении (пункт 3). Полагая, как и ранее, $a = 1, b = 0$, т.е.

$\epsilon_F = \epsilon^* = 0$, вместо (П10) получим

$$\begin{aligned} \pi(c - d) &= 2C_{\downarrow} \arctan(t_{\downarrow}/\Gamma_m), \\ \pi(c + d) &= 2C_{\uparrow} \arctan(t_{\uparrow}/\Gamma_m), \end{aligned} \quad (26)$$

где $\epsilon_{\pm\sigma} = \pm t_{\sigma}$, $t_{\sigma} = \pm\sqrt{\Delta_{\sigma}^2 + zt^2}$, $C_{\sigma} = |\Delta_{\sigma}|/t_{\sigma}$, $\Delta_{\uparrow,\downarrow} = U(c \mp d)/2 - czG$.

Решение $c \neq 0$, $d = 0$ (НЗП) имеет место при выполнении неравенства $2zG - U > \pi\Gamma_m\eta$, где $\eta = (t\sqrt{z}/\Gamma_m)(\arctan(t\sqrt{z}/\Gamma_m))^{-1} > 1$. Решение $c = 0$, $d \neq 0$ (НСП) возникает при условии $U > \pi\Gamma_m\eta$. Граница между НЗП- и НСП-состояниями, соответствующая условию $c = d \neq 0$, отвечает неравенству $U = zG > \pi\Gamma_m\eta_{\max}$, где $\eta_{\max} = (t_{\max}/\Gamma_m)(\arctan(t_{\max}/\Gamma_m))^{-1}$ и $t_{\max} = \sqrt{(zG)^2 + zt^2}$. Поскольку множитель $\eta > 1$, при включении обменного t -взаимодействия область однородного ПМ-состояния расширяется³ (см. неравенства после выражений (23)). Соответствующая фазовая диаграмма приведена на рис. 4: в случае $t = 2.8 \text{ eV}$ [22] и $\Gamma_m = 10 \text{ eV}$ (буферный слой, см. далее) $\eta_1 = 1.07$, тогда как при $\Gamma_m = 1 \text{ eV}$ (квасисвободный графен, см. далее) имеем $\eta_2 = 3.55$.

Полученные в этом подразделе результаты допускают еще одну трактовку. Пусть $\Gamma_m \rightarrow 0$, что означает переход к свободному графену с учетом t -взаимодействия, но не в зонном варианте (как в пункте 3), а в кластерной модели. Тогда для существования НСП необходимо выполнение неравенства $U > 2\sqrt{z}t \approx 3.5t$, для существования НЗП — неравенства $2zG - U > 2\sqrt{z}t$. Первую оценку интересно сравнить с суммированными в [3] результатами расчетов различных авторов. Так, например, область существования НСП-состояния в приближении Хартри-Фока дается неравенством $U > 2.2t$, а в квантовом методе Монте-Карло — неравенством $U > (4.5 \pm 0.5)t$. Таким образом, наша оценка $U > 3.5t$, полученная в рамках кластерной модели, вполне приемлема. Интересно отметить, что значение $U = 3.5t$ является критерием, разделяющим бесщелевую квантовую спиновую жидкость и квантовую спиновую жидкость, обладающую щелью [3,25]. Справедливости ради следует упомянуть и работы [5,26–28], где оценки соотношения между U и t отличаются от приведенных выше.

4.3. Допированный эпитаксиальный графен при $t = 0$. Учтем теперь возможность допирования ЭГ подложкой, для чего положим $\epsilon^* - \epsilon_F = \delta$ и $a = 1 + \nu$, $|\nu| < 1$. Если $\nu > 0$, то электроны переходят из подложки на лист графена, при $\nu < 0$ имеет место обратный процесс. Считая, как и ранее, $b = 0$, вместо

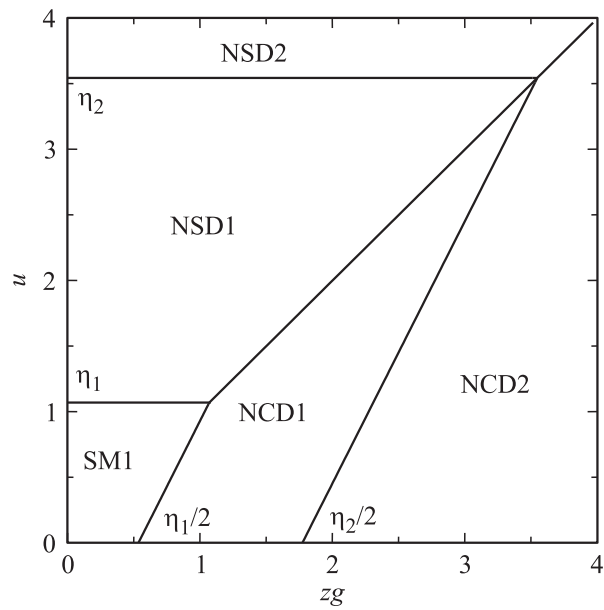


Рис. 4. Фазовая диаграмма для кластера из шести адатомов углерода (рис. 3) при $a = 1$, $b = 0$ (два электрона на два адатома в узлах 0 и 3 с нулевой суммарной намагниченностью), $t = 2.8 \text{ eV}$, $\Gamma_{m1} = 10 \text{ eV}$ (индекс 1) и $\Gamma_{m2} = 1 \text{ eV}$ (индекс 2). Множитель $\eta_i = (t\sqrt{z}/\Gamma_{mi})(\text{arctan}(t\sqrt{z}/\Gamma_{mi}))^{-1}$, где $i = 1$ и 2, определяет расширение области ПМ (SM) и соответствующее сужение областей НСП (NSD) и НЗП (NSD): $\eta_1 = 1.07$, $\eta_2 = 3.55$. Первому случаю соответствуют области NSD, NCD1, SM1, второму — NSD2, NCD2; область SM2, находящаяся между прямыми, исходящими из точек $u = \eta_2$ и $zG = \eta_2/2$, не обозначена, чтобы не перегружать рисунок. Границы областей описываются уравнениями $u = zG$, $u = \eta$ и $u = 2zG - \eta$ (см. примечания к рис. 2).

системы уравнений (22) имеем

$$\begin{aligned} -\Gamma_m \tan[\pi(\nu + c + d)/2] &= \delta + U(c - d)/2 - czG, \\ -\Gamma_m \tan[\pi(\nu + c - d)/2] &= \delta + U(c + d)/2 - czG. \end{aligned} \quad (27)$$

Полагая $|\nu| \ll 1$, получим $\nu = -2\delta \cos^2(\pi d/2)/\pi\Gamma_m$ для ВСП-состояния ($c = 0$, $d \neq 0$), $\nu = -2\delta \cos^2(\pi c/2)/\pi\Gamma_m$ для ВЗП-состояния ($c \neq 0$, $d = 0$) и $\nu = -2\delta/\pi\Gamma_m$ для ПМ-состояния ($c = d = 0$).

Легко сообразить, что в случае допированного ЭГ энергия системы дается формулой (25) с заменой $\epsilon_{\alpha\sigma}^2$ на $(\epsilon_{\alpha\sigma} - \epsilon_F)^2$. Анализ энергетических характеристик, представленный в пункте 4 Приложения, показывает, что граница между состояниями ВСП и ВЗП по-прежнему описывается условием $zG = U$. Как продемонстрировано там же, значения энергий ВСП, ВЗП и ПМ от знака параметра δ не зависят. Таким образом, имеется зависимость энергии системы от уровня легирования, но не от знака носителей. Следует отметить также, что в большинстве работ по данной тематике рассматривается недопированный случай. Как, однако, показано в [27,28], допирование может приводить к новым фазовым состояниям двумерной гексагональной структуры.

³ Мы по-прежнему называем это однородное по спину и заряду состояние полуметаллом. Однако ПМ-состояние ЭГ уже не является дираковским ПМ, как в свободном графене: во-первых, плотность состояний в точке Дирака не обращается в нуль и, во-вторых, в области малых энергий плотность состояний зависит от энергии нелинейно [24]. Аналогичным образом, ВСП- и ВЗП-состояния ЭГ не являются моттовскими изоляторами, так как энергетическая щель отсутствует.

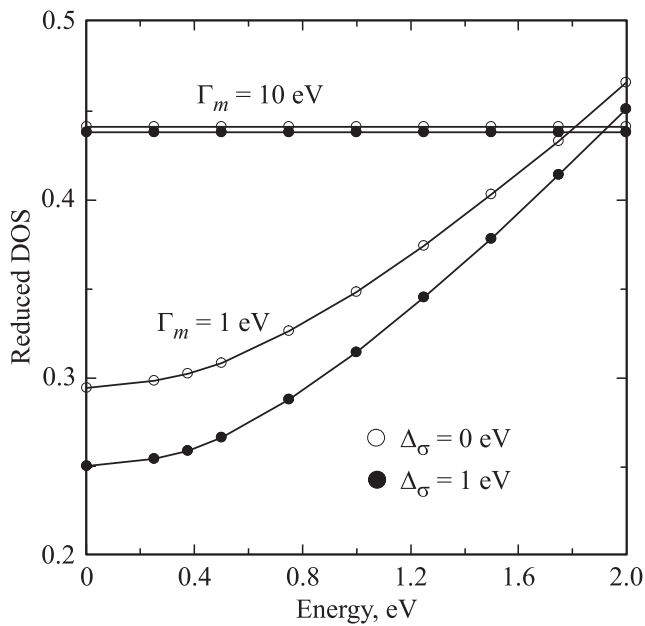


Рис. 5. Приведенная плотность состояний (DOS) $F_\sigma(\omega) \equiv \rho_{AB}^\sigma(\omega)\xi$ в зависимости от энергии ω для квазисвободного ЭГ ($\Gamma_m = 1$ eV) и буферного слоя ($\Gamma_m = 10$ eV) в отсутствие (светлые кружки) и при наличии (темные кружки) щели Δ_σ в электронном спектре при $a = 1$ и $\xi = 10$ eV. Ввиду четности функции $F_\sigma(\omega)$ изображена только ее правая часть.

5. Численные оценки и обсуждение полученных результатов

Перейдем к количественным оценкам параметров задачи и начнем с определения величины $\Gamma_m = \pi V^2 \rho_{\text{sub}}$. Если предположить, что p_z -состояния атомов углерода графена связаны с d -состояниями переходного металла, то $V = V_{pd\sigma} = \eta_{pd\sigma} (\hbar^2 r_d^3 / m_0 l^7)^{1/2}$, где \hbar — приведенная постоянная Планка, m_0 — масса свободного электрона, r_d — радиус d -состояния, l — длина адсорбционной связи, $\eta_{pd\sigma} = 2.95$ [29] (об оценке матричных элементов V см. подробнее [16]). Положим $l_{\text{min}} = r_c + r_m$, где $r_c = 0.77$ Å — атомный радиус углерода, r_m — атомный радиус металла. Поскольку для переходных металлов $r_d \sim 0.7\text{--}1.4$ Å [30] и $r_m \sim 1.3\text{--}1.6$ Å [29], получаем $V_{\text{max}} \sim 1\text{--}2$ eV. Далее в соответствии с моделью Фриделя (см., например, [31]) положим для переходных металлов $\rho_{\text{sub}} = N_d / W_d$, где W_d — ширина зоны проводимости, $N_d = 10$. Так как для d -металлов $W_d \sim 3\text{--}11$ eV [31], получаем $\rho_{\text{sub}} \sim 3\text{--}1$ eV⁻¹. Тогда максимальное значение $\Gamma_m \sim 10$ eV. Эта оценка соответствует буферному углеродному слою, сильно связанному с подложкой. Для квазисвободного графена, полагая $l \sim 3$ Å, имеем $V_{\text{max}} \sim 0.3\text{--}0.8$ eV и $\Gamma_m \sim 1\text{--}2$ eV. Принимая $t = 2.8$ eV [22], получим $\xi = 9.2$ eV.

Общее выражение для плотности состояний $\rho_{AB}^\sigma(\omega)$ определяется формулой (П14) (см. Приложение, пункт 5). На рис. 5 представлены зависимости при-

веденной плотности состояний $F_\sigma(\omega) \equiv \rho_{AB}^\sigma(\omega)\xi$ для $\xi = 10$ eV, $\Gamma_m = 1$ и 10 eV и $\Delta_\sigma = 0$ и 1 eV. Поскольку при $a = 1$ плотность состояний является четной функцией энергии, на рис. 5 изображена только отвечающая положительным энергиям часть плотности состояний. Ясно видно, что уже в случае квазисвободного ЭГ на металле ($\Gamma_m = 1$ eV) щель в плотности состояний отсутствует, в чем и состоит главный эффект, вносимый металлическим субстратом (то же относится и к графеноподобным слоям на металлах [17]). При удалении от точки Дирака зависимость F_σ от ω приближается к линейной. В случае буферного слоя (при $\Gamma_m = 10$ eV) все характерные черты графена вообще исчезают: плотность состояний ЭГ становится практически постоянной, характерной для металлической подложки (подробнее см. работы [17,24], где обсуждаются характерные особенности плотности состояний ЭГ).

Перейдем теперь к оценкам кулоновских параметров. В работе [22] для свободного однослойного графена получены следующие эффективные (с учетом экранировки собственными электронами) значения кулоновских параметров: $U = 9.3$ eV и $G = 5.5$ eV. В отсутствие экранировки эти параметры равны соответственно $U_0 = 17.0$ eV и $G_0 = 8.5$ eV [22]. Экранировка, таким образом, весьма существенно понижает значения U_0 и G_0 ⁴. Будем считать приведенные выше величины U и G максимальными значениями кулоновских параметров, отдавая себе отчет в том, что электроны металлической подложки усиливают экранировку (некоторые аспекты этой малоизученной проблемы рассматриваются в работах [4,7,32,33]). Таким образом, для буферного слоя имеем $U \sim \xi \sim \Gamma_m > G$, а для квазисвободного графена получаем $U \sim \xi > G > \Gamma_m$.

С учетом найденных параметров рассмотрим фазовую диаграмму кластера из шести углеродных адатомов, представленную на рис. 4. В случае буферного слоя имеем $u \approx 0.3$, $zg \approx 0.5$ и $\eta \approx 1.1$; для квазисвободного графена $u \approx 3.0$, $zg \approx 5.3$ и $\eta \approx 3.5$. Отсюда следует, что условие возникновения ВСП-состояния $u > \eta$ заведомо не выполняется для углеродного буферного слоя. Для квазисвободного ЭГ это неравенство также не выполняется, но различие между значениями u и η сравнительно мало, так что фазовая точка системы хоть и находится в области ПМ, но вблизи границы с состоянием ВСП. ВЗП-состояние, определяемое условием $2zg - u > \eta$, в буферном слое не реализуется, тогда как в квазисвободном ЭГ вполне осуществимо. Следовательно, согласно сделанным оценкам, в буферном слое возможно только спиново- и зарядово-однородное ПМ-состояние, тогда как в квазисвободном ЭГ неоднородное ВЗП-состояние может возникнуть.

В заключение этого раздела, обсудим роль температуры. Для расчета чисел заполнения $n_{\alpha\sigma}$ (как и ранее,

⁴ Отметим, однако, что учет экранировки сравнительно слабо влияет на соотношение между кулоновскими параметрами: $G/U \sim 0.6$ и $G_0/U_0 \sim 0.5$.

$\alpha = A, B$ — индекс подрешетки) нужно умножить плотность состояний $\rho_{\alpha}^{\sigma}(\omega)$ (см. П14) на функцию распределения Ферми–Дирака $f_{FD}(\omega)$ и взять от этого произведения несобственный интеграл по энергии ω . Поскольку ЭГ на металле является металлической системой, можно воспользоваться результатами работы [34] и по аналогии с приведенной там формулой (3) записать числа заполнения для адатома углерода в виде

$$\Delta n_{\alpha\sigma}(T) = n_{\alpha\sigma}(T) - n_{\alpha\sigma}(0) \approx \frac{\pi}{3} T^2 \frac{\varepsilon_{\alpha\sigma} \Gamma_m}{(\varepsilon_{\alpha\sigma}^2 + \Gamma_m^2)^2}, \quad (28)$$

где T — температура в энергетических единицах, $\mu(0) = \varepsilon_F = 0$ — химический потенциал при нулевой температуре. В случае $|\varepsilon_{\alpha\sigma}| \ll \Gamma_m$ получаем $\Delta n_{\alpha\sigma}(T) \sim (T/\Gamma_m)^2 (\varepsilon_{\alpha\sigma}/\Gamma_m)$; при обратном неравенстве $|\varepsilon_{\alpha\sigma}| \gg \Gamma_m$ имеем $\Delta n_{\alpha\sigma}(T) \sim (T/\varepsilon_{\alpha\sigma})^2 (\Gamma_m/\varepsilon_{\alpha\sigma})$; если же $|\varepsilon_{\alpha\sigma}| \sim \Gamma_m$, то $\Delta n_{\alpha\sigma}(T) \sim \text{sgn}(\varepsilon_{\alpha\sigma})(T/\Gamma_m)^2$. Так как $\Gamma_m \sim 1-10$ eV, $|\Delta n_{\alpha\sigma}(T)| \ll 1$. В настоящей работе мы в основном рассматриваем ситуацию, когда $a = n_A + n_B = 2$. Если $n_A \sim n_B \sim 1$, то температурные поправки к числам заполнения малы. Этого, однако, нельзя сказать заранее о величинах параметров порядка $c = (n_A - n_B)/2$ при $|n_A - n_B| \ll 1$ и $|m_A - m_B| \ll 1$. Таким образом, учет конечной температуры влияет лишь на сравнительно узкие полосы ВСП- и ВЗП-областей, примыкающие к границам с ПМ-областью (рис. 4).

6. Заключение

В настоящей работе мы рассмотрели условия существования трех областей фазовой диаграммы однослойного ЭГ, находящегося на металлической подложке: волны спиновой плотности, волны зарядовой плотности и однородное состояние (ПМ). ВСП- и ВЗП-состояния имеют место исключительно благодаря интра- и интератомному кулоновским взаимодействиям электронов графена, однородное по спине и заряду ПМ-состояние существенно отличается от состояния дираковского полуметалла. Мы показали, что учет прямого обмена t между атомами углерода графена и их взаимодействия с металлом, характеризуемого параметром Γ_m , ведет к сужению областей существования ВСП- и ВЗП-состояний. Установлено, что в буферном слое реализуется только спиново- и зарядово-однородное состояние металлического типа, тогда как в квазисвободном ЭГ может присутствовать ВЗП.

В заключение добавим следующее: то обстоятельство, что ряд результатов других авторов, достигнутых путем численных расчетов в рамках более строгой теории, получен нами простым образом и в аналитической форме, представляется нам достоинством модели, использованной в настоящей работе.

Приложение

1. Для свободного графена получаем

$$\bar{E}(0, d) = E_0 - \frac{d^2 U}{2} - \frac{4}{e \xi^2} [(\xi^2 + (dU/2)^2)^{3/2} - (dU/2)^3] \quad (П1)$$

при $c = 0, d \neq 0$ (ВСП),

$$\bar{E}(c, 0) = E_0 + \frac{c^2(U - 2zG)}{2} - \frac{4}{3\xi^2} [(\xi^2 + c^2(U/2 - zG)^2)^{3/2} - c^2|U/2 - zG|^3] \quad (П2)$$

при $c \neq 0, d = 0$ (ВЗП),

$$\bar{E}(0, 0) = E_0 - \frac{4\xi}{3} \quad (П3)$$

при $c = d = 0$ (дираковский ПМ). Полагая $\bar{E}(0, d) = \bar{E}(c, 0)$ при $c = d$, находим условие $U = zG$. Уравнения (П1) и (П2) при $d = 0$ и $c = 0$ соответственно переходят в уравнение (П3).

2. Для недопированного ЭГ при $t = 0$ получаем

$$E'(0, d) = E_0 - \frac{d^2 U}{2} + \frac{2\Gamma_m}{\pi} \ln \frac{(dU/2)^2 + \Gamma_m^2}{W^2} \quad (П4)$$

при $c = 0, d \neq 0$ (ВСП),

$$E'(c, 0) = E_0 + \frac{c^2(U - 2zG)}{2} + \frac{2\Gamma_m}{\pi} \ln \frac{c^2(U/2 - zG)^2 + \Gamma_m^2}{W^2} \quad (П5)$$

при $c \neq 0, d = 0$ (ВЗП),

$$E'(0, 0) = E_0 + \frac{2\Gamma_m}{\pi} \ln \frac{\Gamma_m^2}{W^2} \quad (П6)$$

при $c = d = 0$ (ПМ). Полагая $\bar{E}(0, d) = \bar{E}(c, 0)$ при $c = d$, находим условие $U = zG$. Уравнения (П4) и (П5) при $d = 0$ и $c = 0$ соответственно переходят в уравнение (П6).

3. Введем функции Грина невзаимодействующих адатомов и подшетонок A и B

$$g_{A(B)}^{\sigma}(\omega) = (\omega - \varepsilon_{A(B)\sigma} + i\Gamma_m)^{-1}. \quad (П7)$$

Рассматривая кластер, изображенный на рис. 3, включая t -взаимодействие между адатомами и воспользовавшись уравнением Дайсона, найдем функции Грина для адатомов 0 (подрешетка A) и 3 (подрешетка B)

$$D_{00}^{\sigma}(\omega) = \frac{1}{2}(1 - C_{\sigma})g_{+}^{\sigma}(\omega) + \frac{1}{2}(1 + C_{\sigma})g_{-}^{\sigma}(\omega),$$

$$D_{33}^{\sigma}(\omega) = \frac{1}{2}(1 + C_{\sigma})g_{+}^{\sigma}(\omega) + \frac{1}{2}(1 - C_{\sigma})g_{-}^{\sigma}(\omega), \quad (П8)$$

где

$$g_{\pm}^{\sigma}(\omega) = (\omega - \varepsilon_{\pm\sigma} + i\Gamma_m)^{-1} \quad (\text{П9})$$

и $\varepsilon_{\pm\sigma} = \varepsilon_{\sigma} \pm t_{\sigma}$, $t_{\sigma} = \sqrt{\Delta_{\sigma}^2 + zt^2}$, $C_{\sigma} = |\Delta_{\sigma}|/t_{\sigma}$. После соответствующих преобразований, аналогично [12] получим

$$\pi(a + b) = \text{arccot}((\varepsilon_{+\uparrow} - \varepsilon_F)/\Gamma_m) + \text{arccot}((\varepsilon_{-\uparrow} - \varepsilon_F)/\Gamma_m),$$

$$\pi(a - b) = \text{arccot}((\varepsilon_{+\downarrow} - \varepsilon_F)/\Gamma_m) + \text{arccot}((\varepsilon_{-\downarrow} - \varepsilon_F)/\Gamma_m),$$

$$\begin{aligned} -\pi(c - d) &= C_{\downarrow} [\text{arccot}((\varepsilon_{+\downarrow} - \varepsilon_F)/\Gamma_m) \\ &\quad - \text{arccot}((\varepsilon_{-\downarrow} - \varepsilon_F)/\Gamma_m)], \\ -\pi(c + d) &= C_{\uparrow} [\text{arccot}((\varepsilon_{+\uparrow} - \varepsilon_F)/\Gamma_m) \\ &\quad - \text{arccot}((\varepsilon_{-\uparrow} - \varepsilon_F)/\Gamma_m)]. \end{aligned} \quad (\text{П10})$$

4. Для допированного ЭГ при $t=0$ и $\varepsilon^* - \varepsilon_F = \delta$ имеем $\varepsilon_{A\uparrow, B\uparrow} - \varepsilon_F = \delta \pm U(c - d)/2 - czG$ и $\varepsilon_{A\downarrow, B\downarrow} - \varepsilon_F = \delta \pm U(c + d)/2 - czG$. Тогда при $c = 0$, $d \neq 0$ (ВСП) получаем

$$\begin{aligned} E'(0, d) &= E_0 - \frac{d^2 U}{2} \\ &\quad + \frac{\Gamma_m}{\pi} \ln \frac{[(\delta + dU/2)^2 + \Gamma_m^2][(\delta - dU/2)^2 + \Gamma_m^2]}{W^4}, \end{aligned} \quad (\text{П11})$$

при $c \neq 0$, $d = 0$ (ВЗП) имеем

$$\begin{aligned} E'(c, 0) &= E_0 + \frac{c^2(U - zG)}{2} + \frac{\Gamma_m}{\pi} \\ &\quad \times \ln \frac{[(\delta + c(U/2 - zG))^2 + \Gamma_m^2][(\delta - c(U/2 - zG))^2 + \Gamma_m^2]}{W^4}, \end{aligned} \quad (\text{П12})$$

при $c = d = 0$ (ПМ) получаем

$$E'(0, 0) = E_0 + \frac{2\Gamma_m}{\pi} \ln \frac{\delta^2 + \Gamma_m^2}{W^2}. \quad (\text{П13})$$

Из уравнения $\bar{E}(0, d) = \bar{E}(c, 0)$ при $c = d$ находим условие $U = zG$. Выражения (П11) и (П12) при $d = 0$ и $c = 0$ соответственно переходят в уравнение (П13). Интересно отметить, что значения энергий (П11)–(П13) от знака параметра δ не зависят.

5. Как и ранее, будем считать плотность состояний металлической подложки $\rho_{\text{sub}}(\omega) = \rho_m = \text{const}$. Тогда по аналогии с [17] для плотности состояний ЭГ (на элементарную ячейку) в рамках низкоэнергетической аппроксимации электронного спектра получим следующее выражение

$$\begin{aligned} \rho_{AB}^{\sigma}(\Omega_{\sigma}) &= \frac{\Gamma_m}{\pi\xi^2} \ln \frac{|\xi^4 + B_{\sigma}\xi^2 + C_{\sigma}|}{C_{\sigma}} \\ &\quad + \frac{2\Omega_{\sigma}}{\pi\xi^2} \left(\arctan \frac{2\xi^2 + B_{\sigma}}{4\Gamma_m\Omega_{\sigma}} - \arctan \frac{B_{\sigma}}{4\Gamma_m\Omega_{\sigma}} \right). \end{aligned} \quad (\text{П14})$$

Здесь $B_{\sigma} = -2(\Omega_{\sigma}^2 - \Delta_{\sigma}^2 - \Gamma_m^2)$, $C_{\sigma} = (\Omega_{\sigma}^2 - \Delta_{\sigma}^2)^2 + \Gamma_m^2(\Gamma_m^2 + 2\Delta_{\sigma}^2 + 2\Omega_{\sigma}^2)$, остальные обозначения те

же, что в формуле (20). При $a = 1$ и $b = 0$ имеем $\varepsilon_{\sigma} = 0$ ($\Omega_{\sigma} = \omega$) и $\Delta_{\uparrow, \downarrow} = U(c \mp d)/2 - czG$. Отсюда при $c = d \neq 0$ и $U = zG$ получаем $\Delta_{\sigma}^2(dU)^2$, так что $\rho_{AB}^{\uparrow}(\omega) = \rho_{AB}^{\downarrow}(\omega) \equiv \rho_{AB}(\omega)$ и уравнение $U = zG$ определяет границу ВСП- и ВЗП-состояний.

Список литературы

- [1] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [2] V.N. Kotov, B. Uchoa, V.M. Pereira, A.H. Castro Neto, F. Guinea. *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1067 (2012).
- [3] N. Swain, P. Majumdar. arXiv: 1610.00695.
- [4] M.V. Ulybyshev, P.V. Buividovich, M.I. Katsnelson, M.I. Polikarpov. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 056801 (2013).
- [5] L. Wang, P. Corboz, M. Troyer. *New J. Phys.* **16**, 103008 (2014).
- [6] M. Hohenadler, F.P. Toldin, I.F. Herbut, F.F. Assaad. *Phys. Rev. B* **90**, 085146 (2014).
- [7] W. Wu, A.-M.S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **89**, 205128 (2014).
- [8] L. Classen, I.F. Herbut, L. Janssen, M.M. Scherer. *Phys. Rev. B* **92**, 035429 (2015).
- [9] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **20**, 1752 (1978).
- [10] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **48**, 49 (2014).
- [11] С.Ю. Давыдов. Теория адсорбции: метод модельных гамилтонианов. Изд-во СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, СПб. (2013). 235 с.
- [12] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **21**, 2283 (1979).
- [13] Д.И. Хомский. *ФММ* **29**, 31 (1970).
- [14] Е.В. Кузьмин, Г.А. Петраковский, Э.А. Завадский. *Физика магнитоупорядоченного вещества*. Наука, Новосибирск (1976). 283 с.
- [15] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
- [16] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **46**, 204 (2012).
- [17] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **58**, 779 (2016).
- [18] J.E. Hirsch. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2327 (1984).
- [19] V. Zhang, J. Callaway. *Phys. Rev. B* **39**, 9397 (1989).
- [20] J. van den Brink, M.B.J. Meinders, J. Lorenzana, R. Eder, G.A. Sawatzky. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4658 (1995).
- [21] P. Sengupta, A.W. Sandvik, D.K. Campbell. *Phys. Rev. B* **65**, 155113 (2002).
- [22] T.O. Wehling, E. Şaşıoğlu, C. Friedrich, A.I. Lichtenstein, M.I. Katsnelson, S. Blügel. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 236805 (2011).
- [23] Ч. Киттель. Квантовая теория твердых тел. Наука, М. (1967). 492 с.
- [24] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **47**, 97 (2013).
- [25] Z.Y. Meng, T.C. Lang, S. Wessel, F.F. Assaad, A. Muramatsu. *Nature* **464**, 847 (2010).
- [26] S. Sorella, Y. Otsuka, S. Yunoki. *Sci. Rep.* **2**, 992 (2012).
- [27] A.G. Grushin, E.V. Castro, A. Cortijo, F. de Juan, M.A.H. Vozmediano, B. Valenzuela. *Phys. Rev. B* **87**, 085136 (2013).
- [28] X.Y. Xu, S. Wesse, Z.Y. Meng. *Phys. Rev. B* **94**, 116105 (2016).

- [29] У. Харрисон. Электронная структура и свойства твердых тел. Мир, М. (1983). Т. 2. 334 с.
- [30] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. Энергоатомиздат, М. (1991). 1232 с.
- [31] В.Ю. Ирхин, Ю.П. Ирхин. Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в *d*- и *f*-металлах и их соединениях. Екатеринбург, УрО РАН (2004). 472 с.
- [32] R. Hovdena, A.W. Tsen, P. Liua, B.H. Savitzky, I.El Baggari, Y. Liu, W. Lu, Y. Sun, P. Kim, A.N. Pasupathy, L.F. Kourkoutis. Proc. Nat. Acad. Sci. USA **113**, 11420 (2016).
- [33] J.W.F. Venderbos, M. Manzardo, D.V. Efremov, J. van den Brink, C. Ortix. Phys. Rev. B **93**, 045428 (2016).
- [34] С.Ю. Давыдов. ЖТФ **86**, 7, 145 (2016).