

Псевдомагнитное поле в деформированном дираковском материале

А. Д. Заболотский^{1,2,*}, Ю. Е. Лозовик^{1,2,3}

¹Институт спектроскопии РАН

²Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова»

³Московский физико-технический институт (государственный университет)

* zabolotskiy@vniia.ru

Динамику электронов в графене описывает безмассовое уравнение Дирака. Деформации графена приводят к появлению в уравнении псевдомагнитного поля. [1] Можно ожидать аналогичное явление в трехмерных материалах, в которых присутствуют киральные безмассовые фермионы, таких как дираковские и вейлевские полуметаллы.

В работе исследуются дираковские электроны в кристалле (10,3)-*a*, являющемся одной из предсказанных аллотропных модификаций углерода. [2,3] Показано, что деформация кристалла действительно приводит к появлению эффективного потенциала электрического и магнитного поля. Следовательно, в материале с такой кристаллической структурой можно наблюдать квантование Ландау в отсутствие внешнего магнитного поля.

Псевдомагнитное поле в графене

Уравнение Дирака, описывающее динамику частиц в графене, следует из модели сильной связи. Гексагональная кристаллическая решетка графена состоит из двух подрешеток *A* и *B* (Рис. 1). Каждый атом подрешетки *A* соединен ковалентной связью с тремя атомами подрешетки *B*, и связанные атомы соединяют векторы $\mathbf{d}_1 = (0,1)d$, $\mathbf{d}_2 = (\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})d$ и $\mathbf{d}_3 = (-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})d$, где межатомное расстояние *d* равняется $a/\sqrt{3}$, $a = 2,46 \text{ \AA}$ — постоянная решетки. В модели сильной связи гамильтониан в импульсном представлении будет выглядеть следующим образом:

$$H = -t \begin{pmatrix} 0 & \sum_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{d}_j} \\ \sum_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{d}_j} & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Здесь $-t \approx -2,7 \text{ эВ}$ — интеграл перескока, энергия отсчитывается от энергии электрона на $2p$ -орбитали изолированного атома углерода, и везде $\hbar \equiv 1$. Этот гамильтониан дает две зоны, касающиеся друг друга в дираковских точках $\mathbf{K} = (\frac{4\pi}{3a}, 0)$ и $\mathbf{K}' = (-\frac{4\pi}{3a}, 0)$, через которые проходит уровень Ферми $E = 0$. Если разложить гамильтониан (1) по малым импульсам \mathbf{p} в окрестности точек \mathbf{K} и \mathbf{K}' ,

объединить полученные уравнения (каждое из которых имеет форму двумерного уравнения Вейля) и ввести скорость Ферми $v_F = \frac{\sqrt{3}}{2}at \approx \frac{1}{300}c$, получится известное безмассовое уравнение Дирака:

$$v_F \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \end{pmatrix} \Psi = E \Psi \quad (2)$$

Это уравнение описывает киральные частицы с линейным спектром.

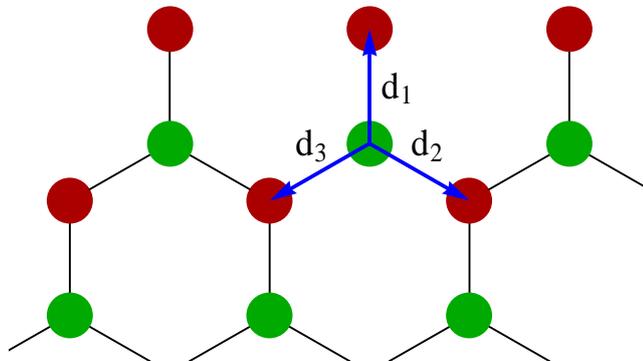


Рис. 1: гексагональная решетка графена, состоящая из двух подрешеток.

Теперь предположим, что графен подвергся достаточно малой, неоднородной, но не слишком неоднородной деформации. В этом случае он локально теряет симметрию относительно поворота на $2\pi/3$, и в гамильтониан входят три разных интеграла перескока $t_j = t + \delta t_j$:

$$H = - \begin{pmatrix} 0 & \sum_j t_j e^{i\mathbf{k} \mathbf{d}_j} \\ \sum_j t_j e^{-i\mathbf{k} \mathbf{d}_j} & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

Если проделать те же выкладки, что описаны выше для случая отсутствия деформаций, это приведет к появлению в уравнении Дирака (2) векторного потенциала калибровочного псевдомагнитного поля \mathbf{A} , отличающегося от истинного магнитного поля тем, что не нарушает симметрию относительно обращения времени [1,4,5]:

$$v_F \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \end{pmatrix} \Psi = E \Psi \quad (4)$$

Здесь $\Psi = (\psi_A, \psi_B, \psi'_B, \psi'_A)$. При этом:

$$\mathbf{A} = \frac{c}{eat} \left(\frac{-2\delta t_1 + \delta t_2 + \delta t_3}{\sqrt{3}}, \delta t_2 - \delta t_3 \right) \quad (5)$$

В не слишком сильно деформированной решетке деформация вызывает изменение межатомных расстояний, а вместе с ними и интегралов перескока, причем их изменение пропорционально изменению постоянной решетки. Пусть смещение

атома в подрешетке A равно \mathbf{u} , а смещения соседних атомов равны $\mathbf{u} + \delta\mathbf{u}_j$. Для интегралов перескока переход к непрерывному пределу дает:

$$\delta t_j = \frac{\beta t}{a^2} \mathbf{d}_j \delta \mathbf{u}_j = \frac{\beta t}{a^2} \kappa \mathbf{d}_j (\mathbf{d}_j \nabla) \mathbf{u} \quad (6)$$

Здесь β — параметр Грюнайзена, близкий к 2 у связи между p -орбиталями, κ — константа порядка 1, связанная с упругими свойствами графена.

Вводя тензор деформаций $u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right)$, приходим к результату:

$$e\mathbf{A} = \frac{c}{v_F} \frac{\kappa\beta}{4} t (u_{xx} - u_{yy}, -2u_{xy}) \quad (7)$$

Собственно вектор индукции псевдомагнитного поля может быть получен, как обычно, по формуле $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = (0, 0, \partial_x A_y - \partial_y A_x)$.

Благодаря коэффициенту $\frac{c}{v_F} \approx 300$ величина псевдомагнитного поля в графене может достигать 1000 Тл. [6] Было экспериментально получено псевдомагнитное поле, превышающее 300 Тл. [7]

Соображения симметрии также допускают появление в деформированном графене псевдоэлектрического поля. [4]

Трехмерные дираковские материалы

Киральные частицы с линейным спектром, подчиняющиеся уравнению типа (2), возможны и в толще трехмерного материала. К таким материалам относятся дираковские и вейлевские полуметаллы. [8] Для ряда веществ (например, TaAs) недавно было установлено, что они являются вейлевскими полуметаллами. [9] Можно предположить, что сильные псевдомагнитные и, возможно, псевдоэлектрические поля будут возникать и в трехмерных дираковских материалах, подвергнутых деформациям. Недавно было показано, что деформация приводит к проявлению калибровочного поля в модельном вейлевском полуметалле. [10] К сожалению, в реальных вейлевских полуметаллах наличие киральных фермионов с линейным спектром обычно можно теоретически установить с помощью первопринципных расчетов, а не вывести из простой модели типа (1), что затрудняет адаптацию линии рассуждений, изложенной в предыдущем разделе, к трехмерному случаю.

Кристалл (10,3)-а

В общем случае вейлевские точки не располагаются в точке высокой симметрии зоны Бриллюэна вейлевского полуметалла, к коим относятся точки \mathbf{K} и \mathbf{K}' в графене. Однако соображения симметрии позволяют, зная одну только группу симметрии материала, установить, возможно ли наличие вейлевской точки в одной из точек высокой симметрии зоны Бриллюэна материала, если возможно, то обязательно ли оно. [3] Наиболее высокая симметрия, требующая наличия вейлевской точки в точке высокой симметрии, описывается группой $I4_132$. Простейшая кристаллическая решетка, имеющая такую группу симметрии, — это кристалл (10,3)-а (Рис. 2),

известный также как решетка K_4 , граф Лавеса и триамант, обладающий рядом интересных математических свойств. [11]

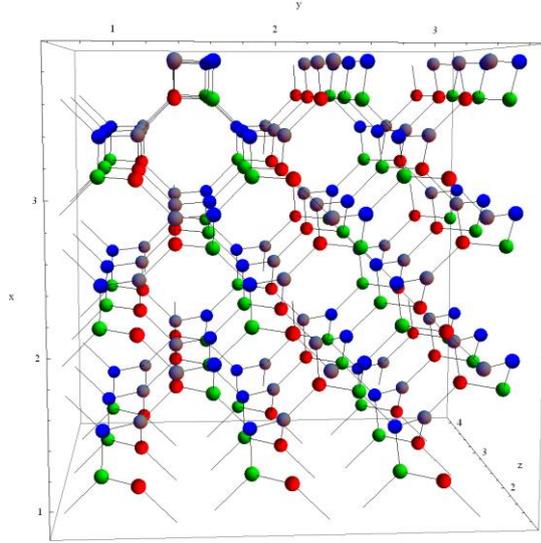


Рис. 2: кристалл (10,3)-а. Четырьмя цветами показаны четыре неэквивалентных атома примитивной элементарной ячейки.

Действительно, рассмотрим модель сильной связи для кристалла (10,3)-а. Гамильтониан имеет вид:

$$H = -t \begin{pmatrix} 0 & e^{\frac{i}{4}a(k_z - k_y)} & e^{\frac{i}{4}a(k_y - k_x)} & e^{\frac{i}{4}a(k_x - k_z)} \\ e^{-\frac{i}{4}a(k_z - k_y)} & 0 & e^{\frac{i}{4}a(k_x + k_z)} & e^{-\frac{i}{4}a(k_x + k_y)} \\ e^{-\frac{i}{4}a(k_y - k_x)} & e^{-\frac{i}{4}a(k_x + k_z)} & 0 & e^{\frac{i}{4}a(k_y + k_z)} \\ e^{-\frac{i}{4}a(k_x - k_z)} & e^{\frac{i}{4}a(k_x + k_y)} & e^{-\frac{i}{4}a(k_y + k_z)} & 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

$-t < 0$ — по-прежнему интеграл перескока. В окрестности точки $\mathbf{P} = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \right)$, где a — постоянная кубической подрешетки, в подходящем базисе гамильтониан примет вид:

$$H = \begin{pmatrix} t\sqrt{3} + v_F \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} & H_{23} \\ H_{23}^\dagger & -t\sqrt{3} - v_F \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (9)$$

Здесь $v_F = \frac{1}{2\sqrt{3}}at$. Аналогично для $-\mathbf{P}$. Таким образом, в точке \mathbf{P} при двух разных энергиях имеются две вейлевские точки. Блок H_{23} вносит вклад, квадратичный по импульсу. [3]

Если теперь ввести деформацию решетки, определяемую тензором u_{ij} , то возникнет шесть различных интегралов перескока $t_{1,2}, t_{1,3}, t_{1,4}, t_{2,3}, t_{2,4}, t_{3,4}$. Выкладки, аналогичные произведенным выше, приводят к появлению потенциала псевдоэлектрического и псевдомагнитного поля, имеющих противоположные знаки для вейлевских точек с противоположной энергией. Для верхней точки:

$$e\varphi = \frac{1}{2\sqrt{3}} (\delta t_{1,2} + \delta t_{1,3} + \delta t_{1,4} + \delta t_{2,3} + \delta t_{2,4} + \delta t_{3,4}), \quad (10)$$

$$e\mathbf{A} = \frac{c}{2v_F} (\delta t_{3,4} - \delta t_{1,2}, \delta t_{2,3} - \delta t_{1,4}, \delta t_{2,4} - \delta t_{1,3})$$

В непрерывном пределе:

$$e\varphi = \frac{\kappa\beta}{8\sqrt{3}} t(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}), \quad e\mathbf{A} = \frac{c}{v_F} \frac{\kappa\beta}{16} t(u_{yz}, u_{zx}, u_{xy}) \quad (11)$$

Соотношения (11) — основной результат работы. Можно собрать численные константы в один коэффициент $\gamma = \frac{\kappa\beta}{8\sqrt{3}}$ порядка 0,1–1, получив $e\varphi = \gamma t(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})$, $e\mathbf{A} = \frac{c}{v_F} \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma t(u_{yz}, u_{zx}, u_{xy})$.

Можно заключить, что, например, чистое и однородное псевдоэлектрическое поле, направленное вдоль оси z , можно получить при $\mathbf{u} = (0, 0, bz^2)$, а однородное псевдомагнитное — при $\mathbf{u} = (0, 0, bx^2)$. Эти деформации показаны на Рис. 3. Последний случай имеет место быть в середине пластины, закрепленной по двум краям и прогнувшейся под действием силы тяжести. Соответственно, установив однородное псевдомагнитное поле, можно наблюдать в нем уровни Ландау, которые для безмассовых частиц имеют энергии, пропорциональные не их номеру n , а \sqrt{n} .

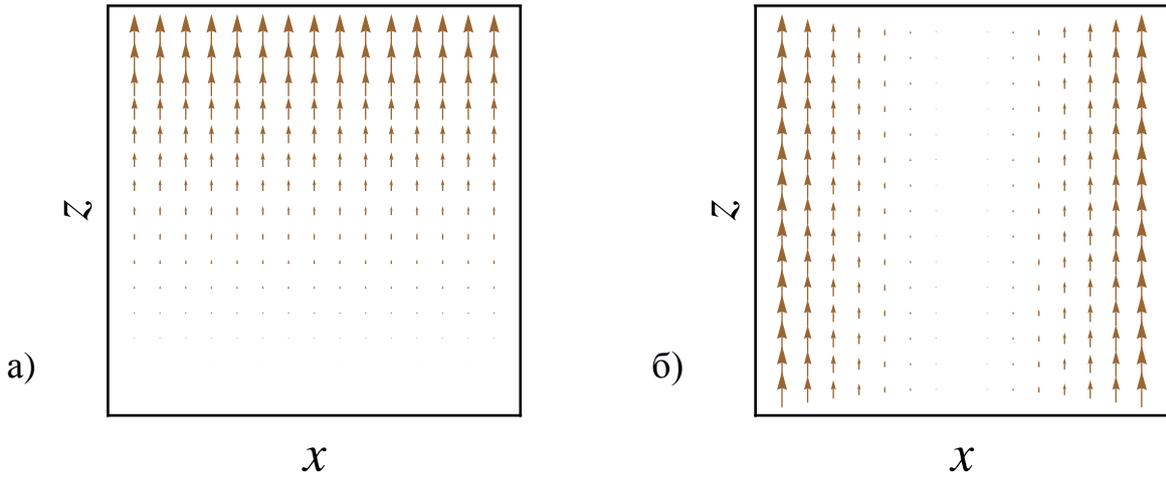


Рис. 3: простейшие деформации, вызывающие появление (а) однородного псевдоэлектрического поля, (б) однородного псевдомагнитного поля.

Проведение соответствующего эксперимента в кристалле (10,3)-*a* все же сопряжено с некоторыми трудностями. Первая из них состоит в том, что если даже поместить уровень Ферми в вейлевскую точку, то поверхность Ферми будет состоять не только из этой точки, но из двумерного фрагмента, т. е. в плотность состояний вблизи вейлевской точки дают вклад отнюдь не только безмассовые частицы; более того, их вклад составляет малую часть. Иными словами, кристалл (10,3)-*a* сам по себе — металл, а не вейлевский полуметалл, и с безмассовыми вейлевскими фермионами в нем сосуществуют обычные, массивные. Тем не менее, эта трудность разрешима: с одной стороны, модификация модели сильной связи позволяет сделать материал вейлевским полуметаллом [3]; с другой стороны, первопринципные расчеты показывают, что в аллотропной модификации углерода с такой структурой при соответствующем уровне Ферми в системе будут присутствовать почти только

вейлевские фермионы, и такое вещество будет стабильно. [2] Вторая трудность состоит в том, что вещество с точностью такой структурой пока не получено. В связи с этим следует распространить рассмотренную задачу на некую более сложную, но более реалистическую модель вейлевского полуметалла.

Список литературы

1. M. A. H. Vozmediano *et al*, Phys. Rep. **496**, 109 (2010).
2. G.-M. Rignanes and J.-C. Charlier, Phys. Rev. B **78**, 125415 (2008).
3. J. L. Mañes, Phys. Rev. B **85**, 155118 (2012).
4. J. L. Mañes, Phys. Rev. B **76**, 045430 (2007).
5. H. Suzuura and T. Ando, Phys. Rev. B **65**, 235412 (2002).
6. M. Neek-Amal *et al*, Phys. Rev. B **86**, 041405(R) (2012).
7. N. Levy *et al*, Science **329**, 544 (2010).
8. T. O. Wehling *et al*, Adv. Phys. **63**, 1 (2014).
9. B. Q. Lv *et al*, Phys. Rev. X **5**, 031013 (2015).
10. A. Cortijo and M. A. Zubkov, arXiv:1508.04462 (2015).
11. T. Sunada, Not. Am. Math. Soc. **55**, 208 (2008).