

Необычные электронные свойства двухслойного графена

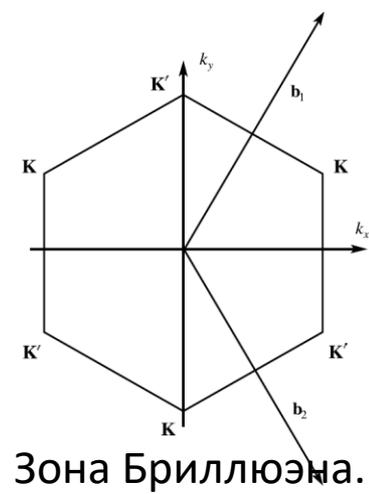
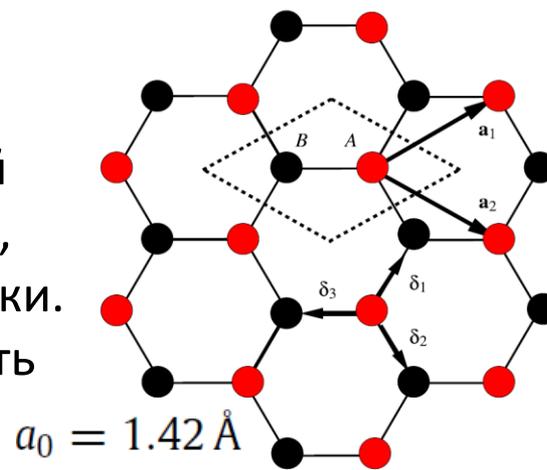
А.Л. Рахманов

Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН
ВНИИА им. Н.Л. Духова

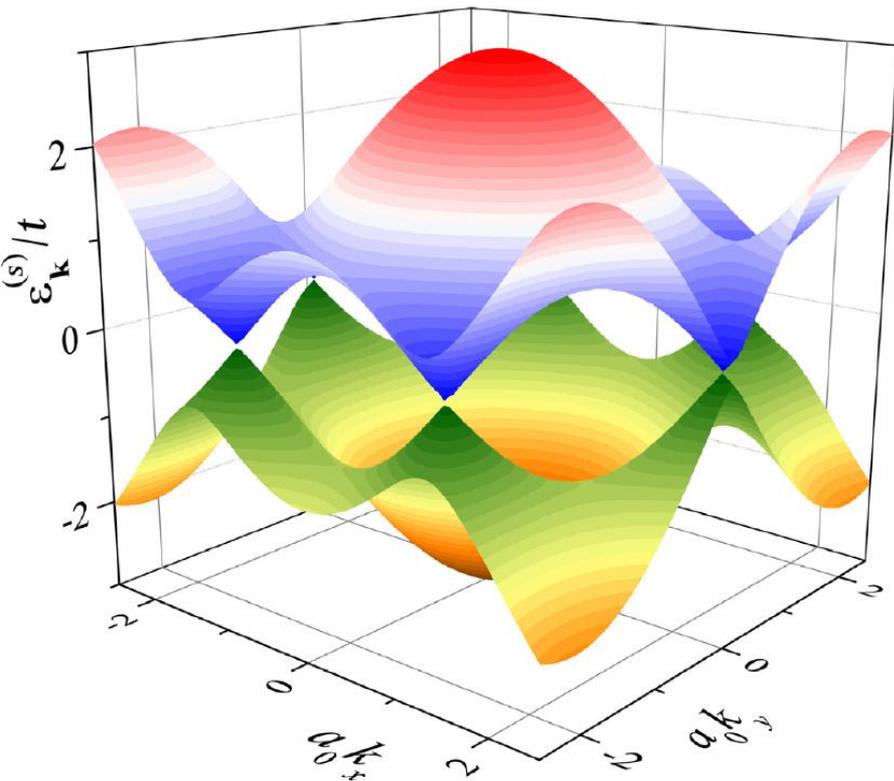
- Три структуры двухслойного графена
- Подкрученный графен
- Магический угол скрутки
- Чем интересен графен со структурой AA
- Квантовая точка из AA графена с магическим радиусом
- «Четверть-металлическое состояние» в AA графене и другие необычные состояния

Однослойный графен

Графен - первый стабильный двумерный кристалл. Высококачественные образцы, отработаны экспериментальные методики. Высокая прочность, высокая подвижность электронов.



В элементарной ячейке кристалла находятся два атома, обозначенные А и В.



Энергетический спектр («мексиканская шляпа»)

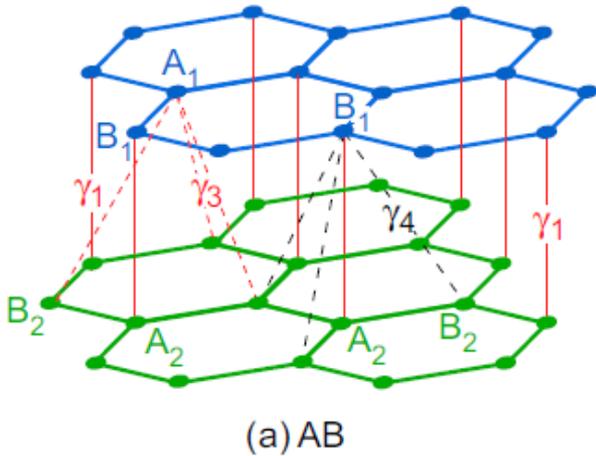
$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \psi_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{H}_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}\sigma},$$

$$\hat{H}_{\mathbf{k}} = -t \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad f_{\mathbf{k}} = 1 + 2e^{\frac{3ik_x a_0}{2}} \cos\left(\frac{ik_y a_0 \sqrt{3}}{2}\right) = |f_{\mathbf{k}}| e^{i\varphi_{\mathbf{k}}}$$

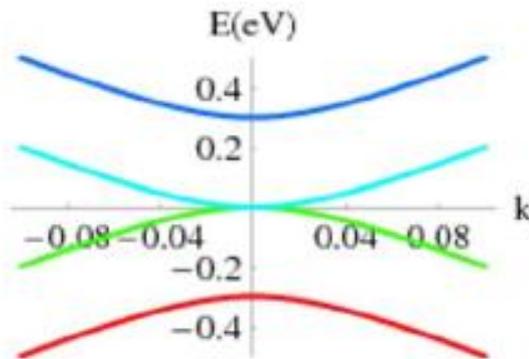
$$\psi_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ b_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix}$$

Структуры двухслойного графена

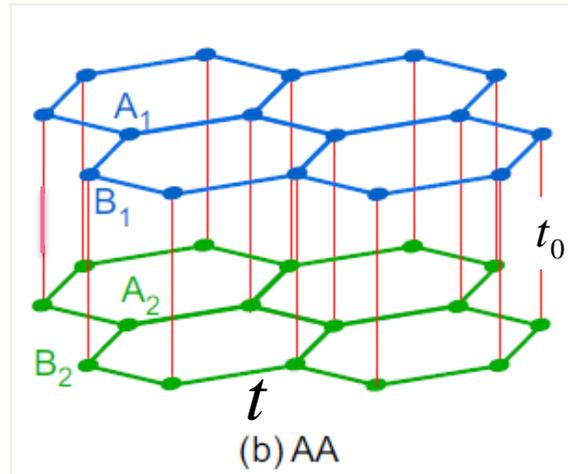
AB (Bernal) упаковка.



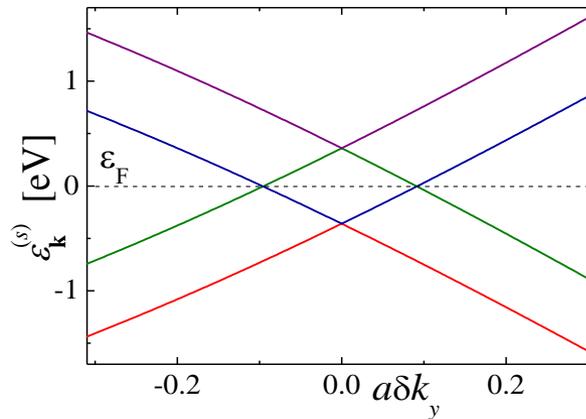
AB низкоэнергетический спектр: :



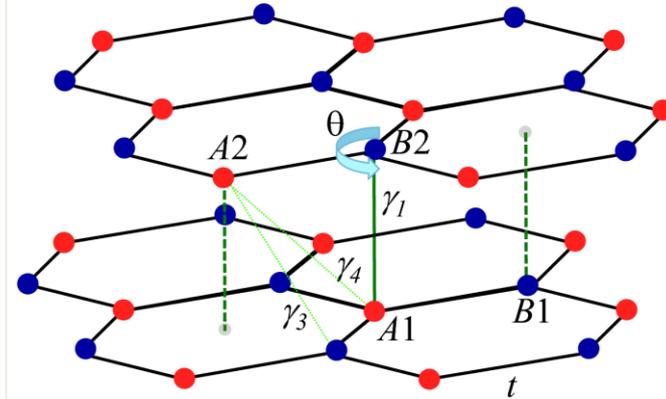
AA упаковка.



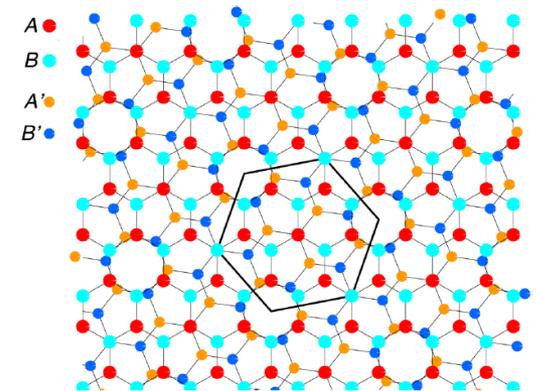
AA низкоэнергетический спектр:



Скрученный графен.



Сверхструктура



При малых $\theta (< 1^\circ)$ tBLG можно представить, как совокупность AA и AB областей.

Экперимент. Муаровая структура

Период :

$$L = \frac{a}{2 \sin(\theta/2)}$$

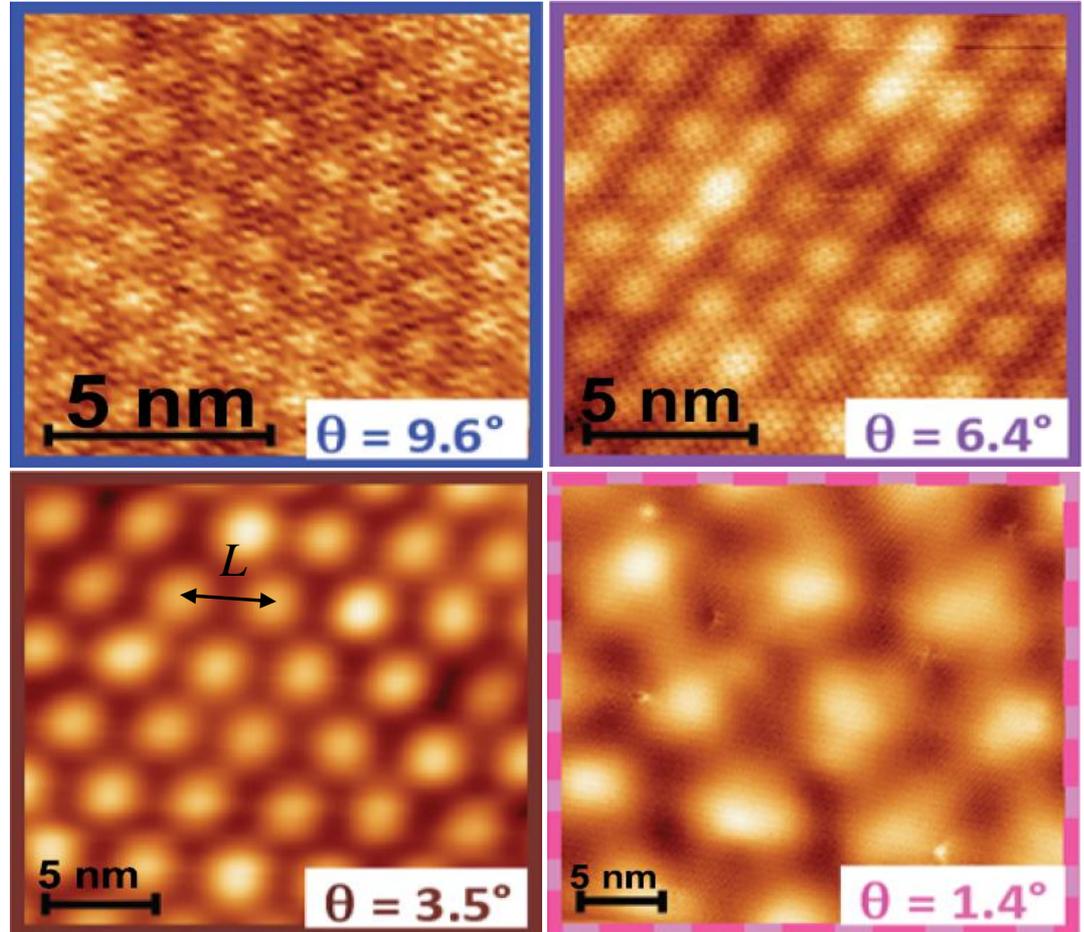
$$a = \sqrt{3}a_0 \cong 2.46 \text{ \AA}$$

For $r=1$

$$L_{sc}(m_0, 1) = L$$

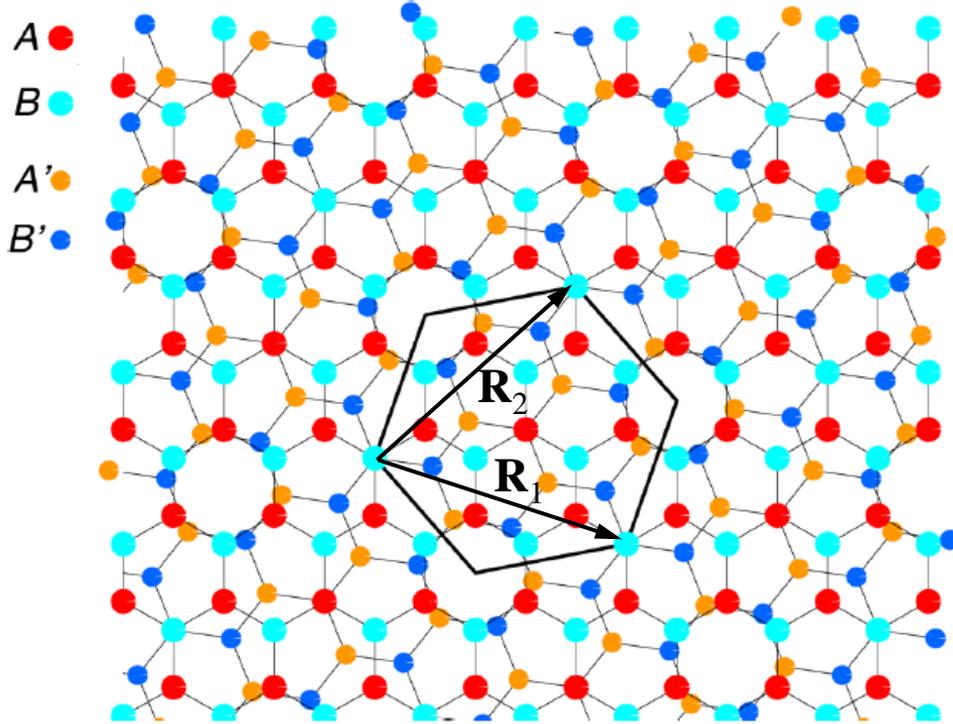
For $r>1$

$$L_{sc}(m_0, r) > L$$



STM images of the tBLG samples with different twist angles θ clearly showing the Moire pattern. PRL **109**, 196802 (2012)

Соизмеримые углы



Число атомов в суперячейке:

$$N_{sc} = 4 \begin{cases} 3m_0^2 + 3m_0r + r^2, & r \neq 3n \\ m_0^2 + m_0r + r^2/3, & r = 3n \end{cases} \propto 1/\theta^2$$

Размер суперячейки: $L_{sc} = |\mathbf{R}_{1,2}| = a(N_{sc})^{1/2}/2$, $a = 2.46 \text{ \AA}$.

Условие соизмеримости

$$\cos \theta = \frac{3m_0^2 + 3m_0r + r^2/2}{3m_0^2 + 3m_0r + r^2}$$

m_0 и r – взаимно простые целые числа

Вектора суперячейки:

$$\begin{cases} \mathbf{R}_1 = m_0 \mathbf{a}_1 + (m_0 + r) \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{R}_2 = -(m_0 + r) \mathbf{a}_1 + (2m_0 + r) \mathbf{a}_2 \end{cases} \text{ if } r \neq 3n$$

or

$$\begin{cases} \mathbf{R}_1 = \left(m_0 + \frac{r}{3}\right) \mathbf{a}_1 + \frac{r}{3} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{R}_2 = -\frac{r}{3} \mathbf{a}_1 + \left(m_0 + \frac{2r}{3}\right) \mathbf{a}_2 \end{cases} \text{ if } r = 3n$$

Скрученный графен в приближении сильной связи

A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, and Franco Nori, Phys. Rev. B **92**, 075402 (2015)

$$H = -t \sum_{\substack{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle \\ s\sigma}} \left(d_{s\mathbf{i}A\sigma}^\dagger d_{s\mathbf{j}B\sigma} + H.c. \right) + \sum_{\substack{\mathbf{i}, \mathbf{j} \\ \alpha\beta\sigma}} \left[t_\perp(\mathbf{R}_i + \mathbf{r}_n^{1\alpha}; \mathbf{R}_j + \mathbf{r}_m^{2\beta}) d_{1\mathbf{i}\alpha\sigma}^\dagger d_{2\mathbf{j}\beta\sigma} + H.c. \right]$$

Positions of sites in the tBLG:

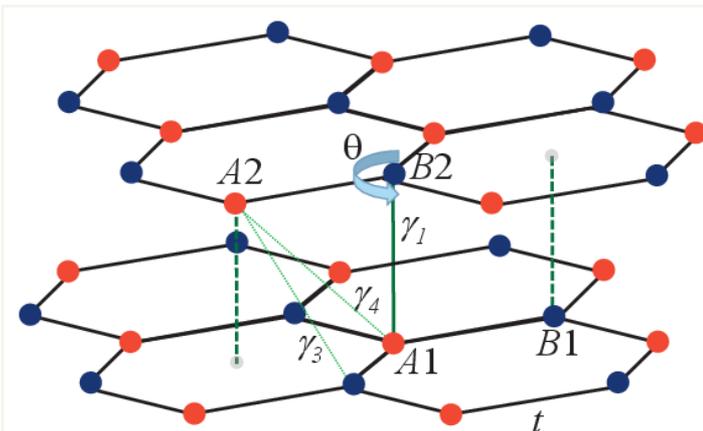
$$\mathbf{R}_{i,n}^{s\alpha} = \mathbf{R}_i + \mathbf{r}_n^{s\alpha}, \quad \mathbf{R}_i = i\mathbf{R}_1 + j\mathbf{R}_2, \quad \mathbf{r}_n^{s\alpha} \leftarrow \text{Describes position}$$

$\mathbf{i} = (i, j), \quad \mathbf{n} = (n, m), \quad s = 1, 2, \quad \alpha = A, B$

Внутри суперячейки \mathbf{i} используются для параметризации $t_\perp(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$.

$$t_\perp(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \cos^2(\gamma) V_\sigma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \sin^2(\gamma) V_\pi(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$V_\sigma(\mathbf{r}) = t_0 \exp(-r/r_0) \quad t_0 = 0.4 \text{ eV}$$



AB-stacked graphene bilayer.

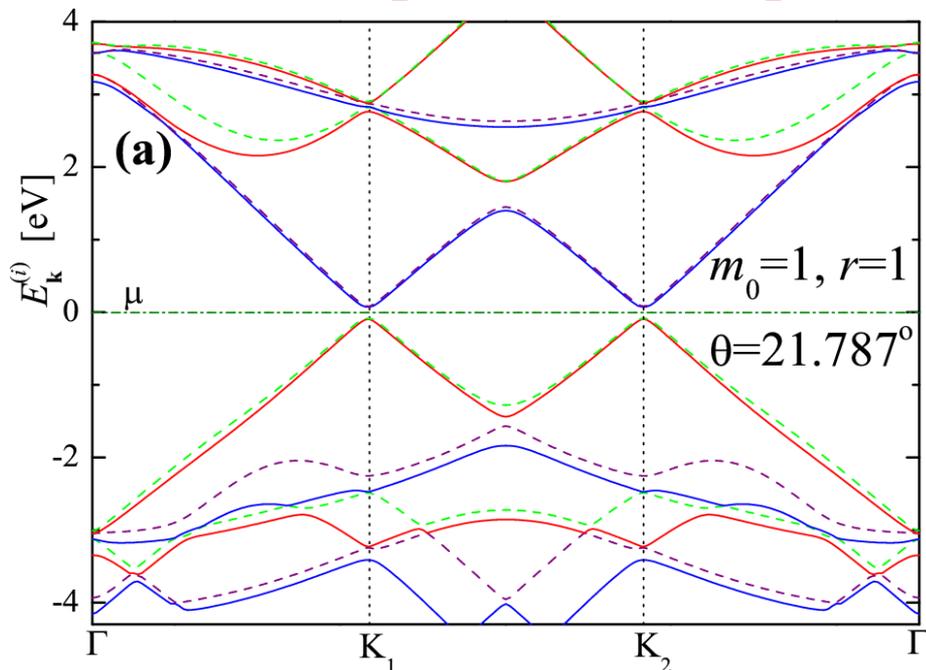
$\gamma_1, \gamma_3,$ и γ_4 – три основные величины, которые используются для параметризации $t_\perp(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$.

$$t = 2.57 \text{ eV}, \quad \gamma_1 = 0.4 \text{ eV}, \\ \gamma_3 = 0.254 \text{ eV}, \quad \gamma_4 = 0.051 \text{ eV}.$$

Параметризация $t_\perp(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ учитывает атомное окружение при перескоках

M.S. Tang, et al., PRB **53** 979 (1996)

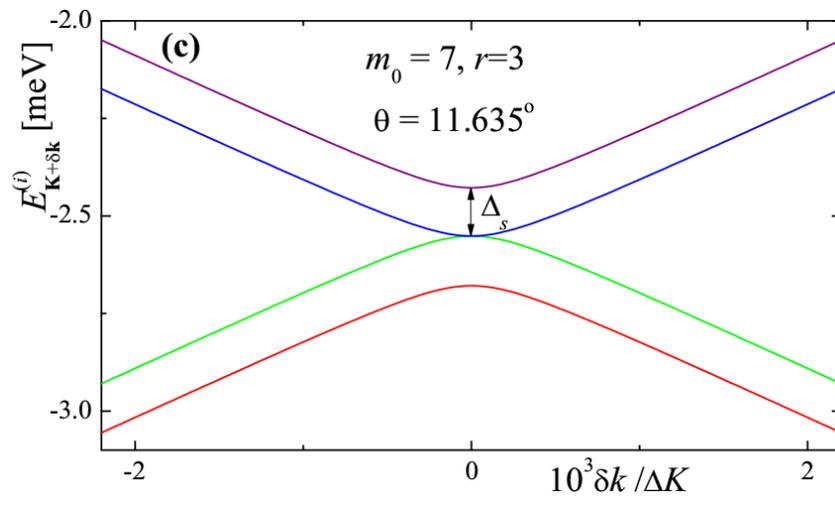
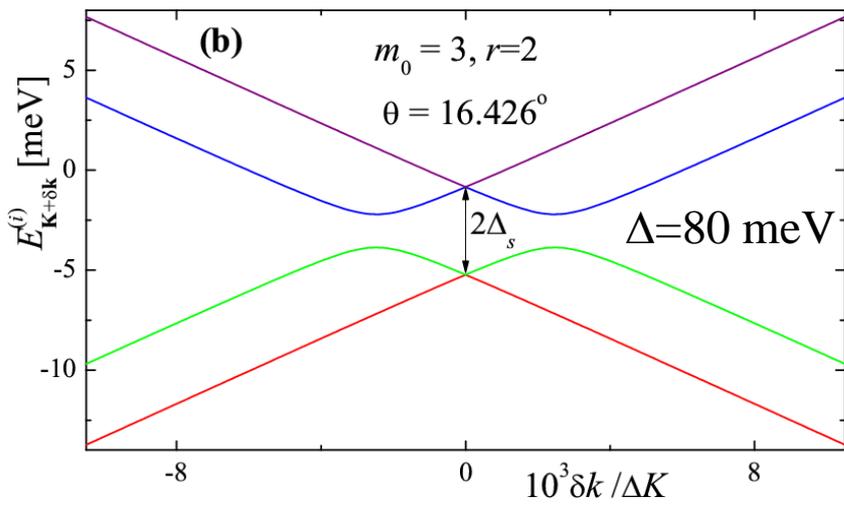
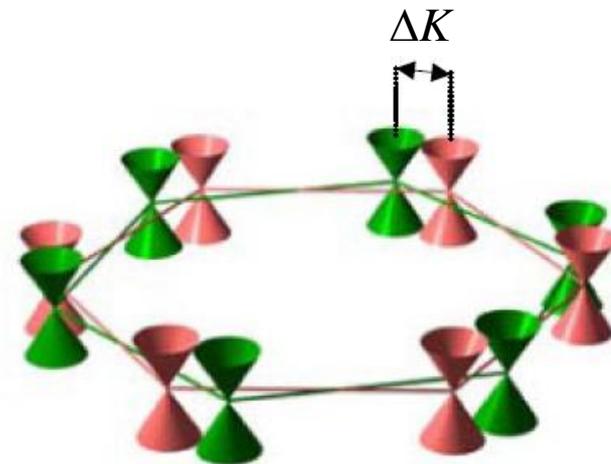
Электронный спектр: большие углы $\theta > \sim 10^\circ$



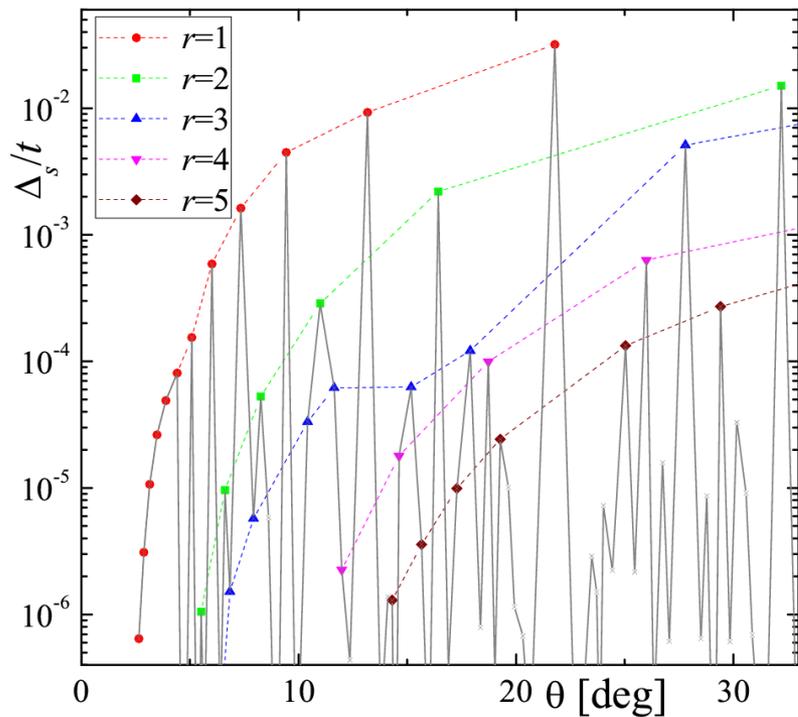
$r \neq 3n$ (n is integer)

Spectrum near Dirac point:

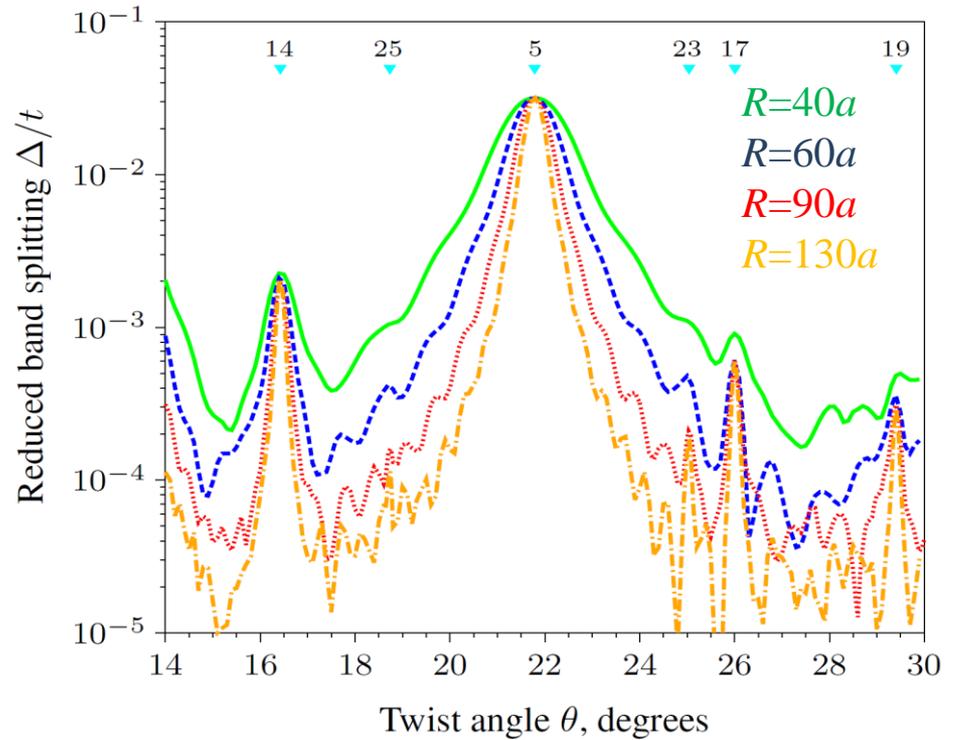
$r = 3n$ (n is integer)



Щель в спектре «идеального образца»



Щель в спектре при учете конечных размеров образца

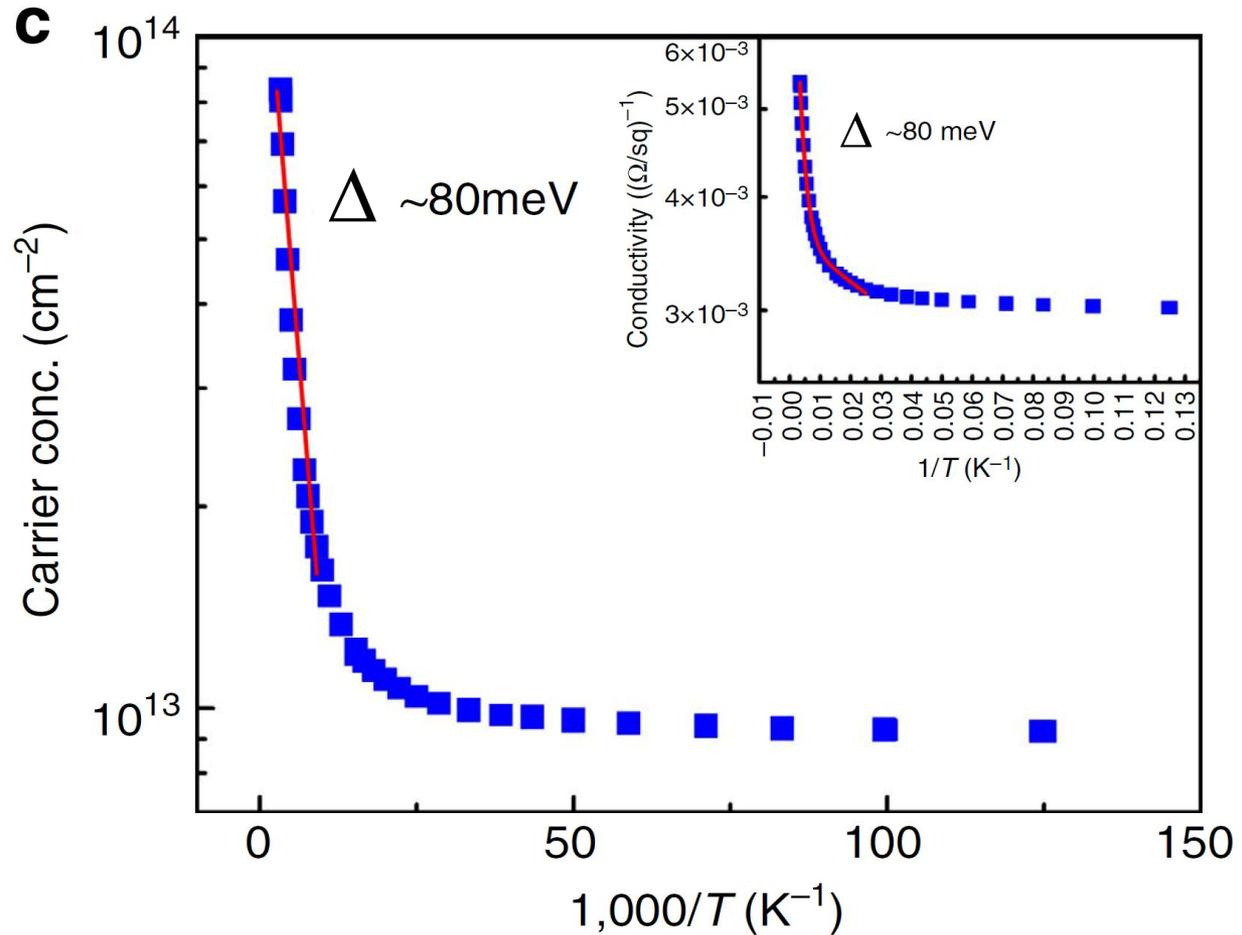


Экспериментальное наблюдение щели

J. Park et al., Nature Commun., **6** 5677 (2015)

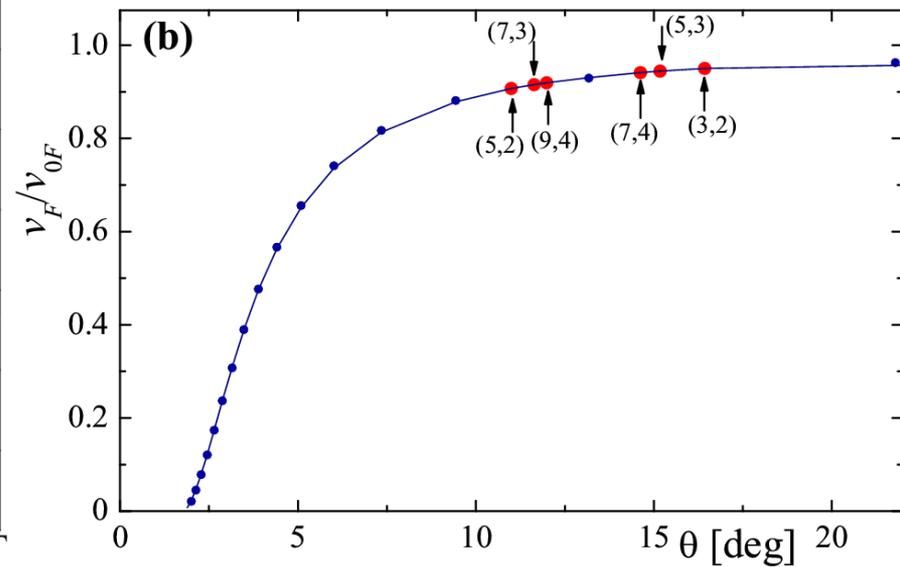
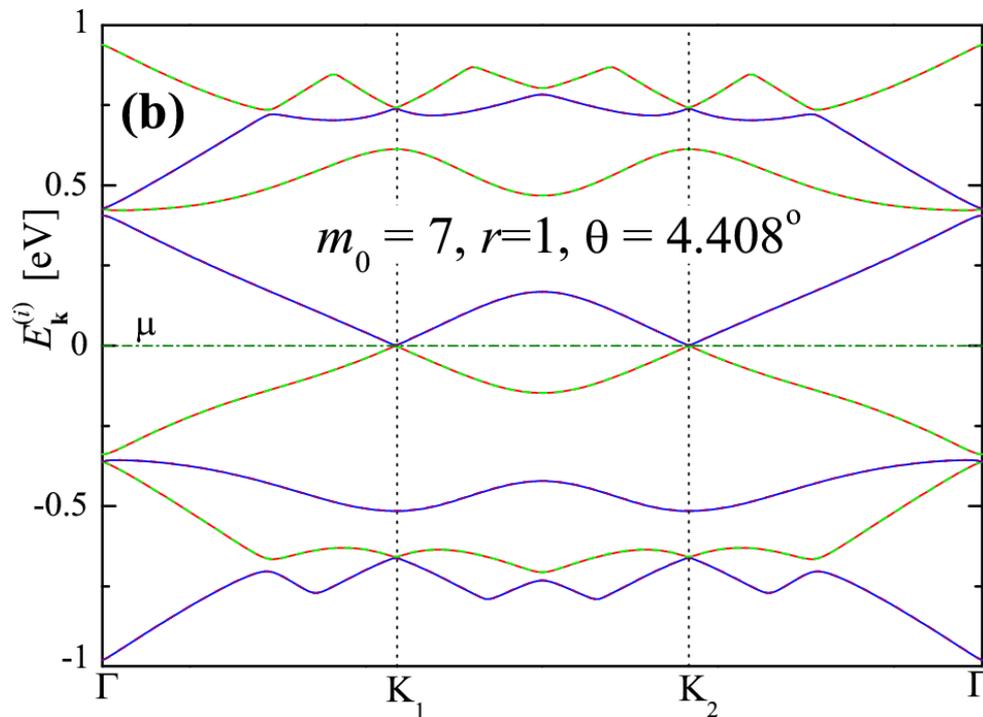
Проводимость σ_{xx} и
плотность носителей n
подчиняются
зависимости:

$$n, \rho_{xx} \propto \exp(-\Delta/T)$$



Электронный спектр: промежуточные углы $\theta_c < \theta < \sim 10^\circ$

Уменьшение скорости Ферми вблизи вырожденных конусов Дирака



Уравнение на щель:

$$\Delta_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \int_{RBZ} \frac{d^2 q}{v_{BZ}} \frac{A(\mathbf{p}; \mathbf{q}) \Delta_{\mathbf{q}}}{\sqrt{\Delta_{\mathbf{q}}^2 + E_{\mathbf{q}}^2}}$$

$$A(\mathbf{p}; \mathbf{q}) = \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{G}_1 \mathbf{G}_1' \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_2'} \bar{U}_{\mathbf{p}\mathbf{G}_1 i \alpha}^{(S^+)*} \bar{U}_{\mathbf{q}\mathbf{G}_1' i \alpha}^{(S^+)} V_{i\alpha; j\beta} (\mathbf{p} - \mathbf{q} + \mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_1'; \mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2 - \mathbf{G}_1' - \mathbf{G}_2') \bar{U}_{\mathbf{q}\mathbf{G}_2 j \beta}^{(S^-)*} \bar{U}_{\mathbf{p}\mathbf{G}_2' j \beta}^{(S^-)}$$

Оценка величины Δ (Расчет Δ на поверхности Ферми):

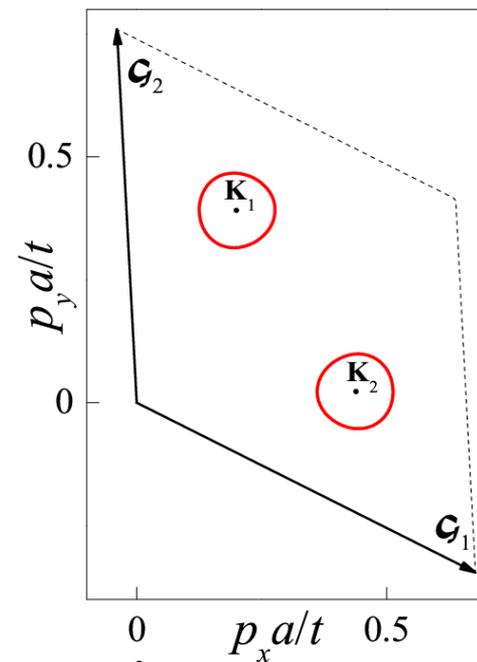
$q_F(\varphi)$ ← параметризация поверхности Ферми

$$A(\mathbf{p}; \mathbf{q}) \rightarrow A(\varphi; \varphi') = A(\mathbf{K}_v + \mathbf{p}(\varphi); \mathbf{K}_v + \mathbf{q}(\varphi'))$$

$$\Delta \sim V_g \exp \left(- \frac{v_{BZ}}{2\pi \langle A(\varphi; \varphi') \rangle \langle q_F(\varphi) / v_F^*(\varphi) \rangle} \right)$$

$$(q_F(\varphi) = const)$$

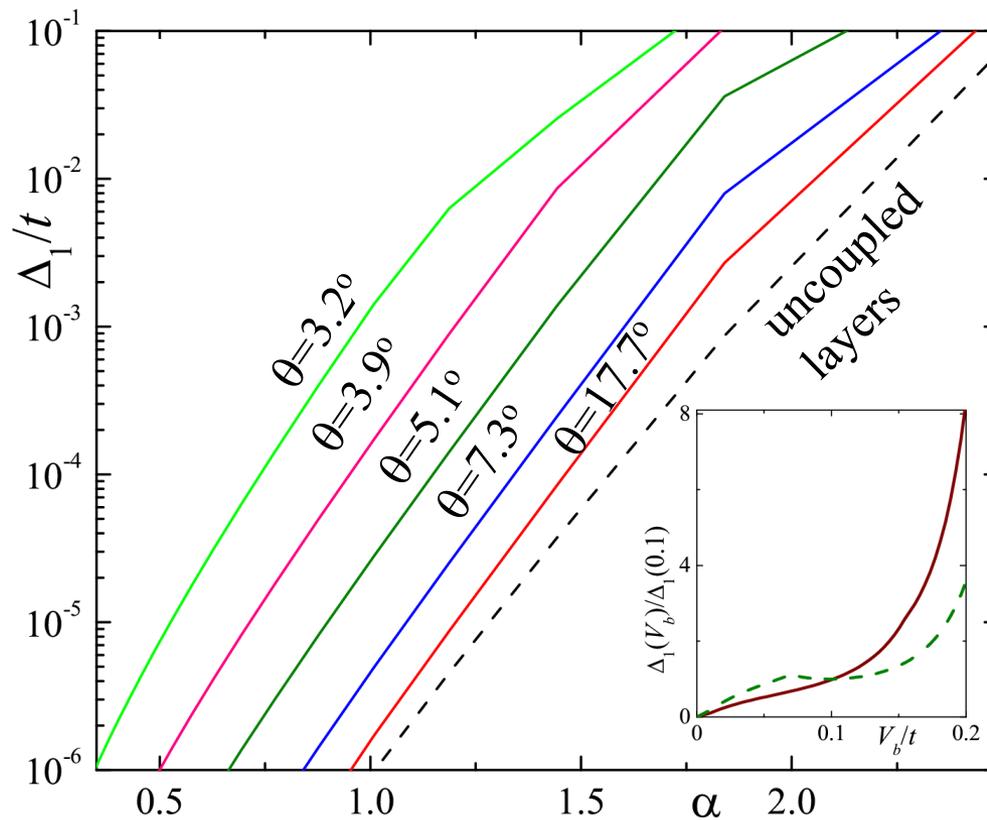
$$A(\varphi; \varphi') \approx \cos^2 \left(\frac{\varphi - \varphi'}{2} \right) V_{12} \left(2q_F \left| \sin \left(\frac{\varphi - \varphi'}{2} \right) \right| \right) \approx \frac{\pi\alpha}{V_{sc} q_F} \frac{\cos^2 \left(\frac{\varphi - \varphi'}{2} \right)}{\left| \sin \left(\frac{\varphi - \varphi'}{2} \right) \right| + \frac{4\alpha}{v_F}}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\varepsilon}$$



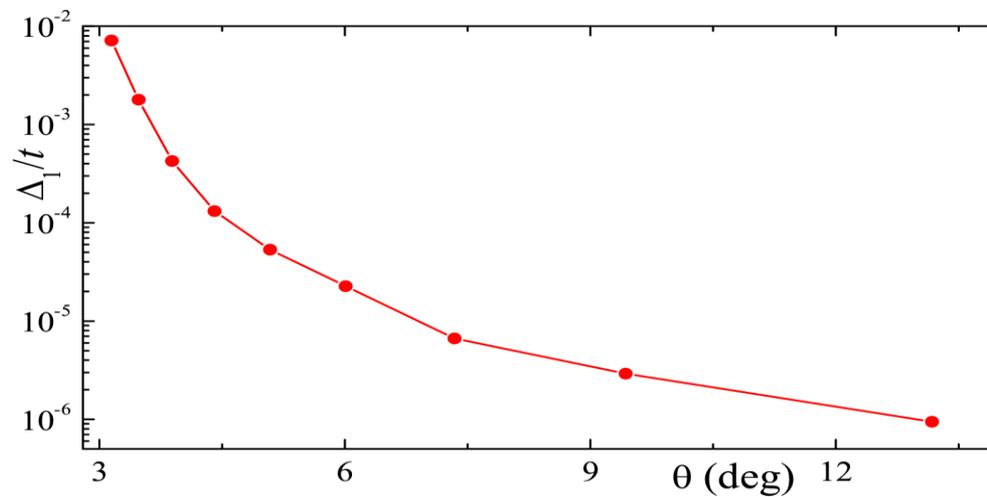
$$\Delta \sim V_g \exp \left(- \frac{2v_F^*}{\alpha} \left\langle \frac{\cos^2(\varphi/2)}{|\sin(\varphi/2)| + 4\alpha/v_F} \right\rangle^{-1} \right), \quad \max(\Delta) \sim 100K \quad (V_g \sim t_0 = 0.35eV)$$

Зависимость
экситонной щели от
параметра
взаимодействия
 $\alpha = e^2 / \epsilon v_F$

A.O. Sboychakov, et al.,
PRL **120**, 266402 (2018)

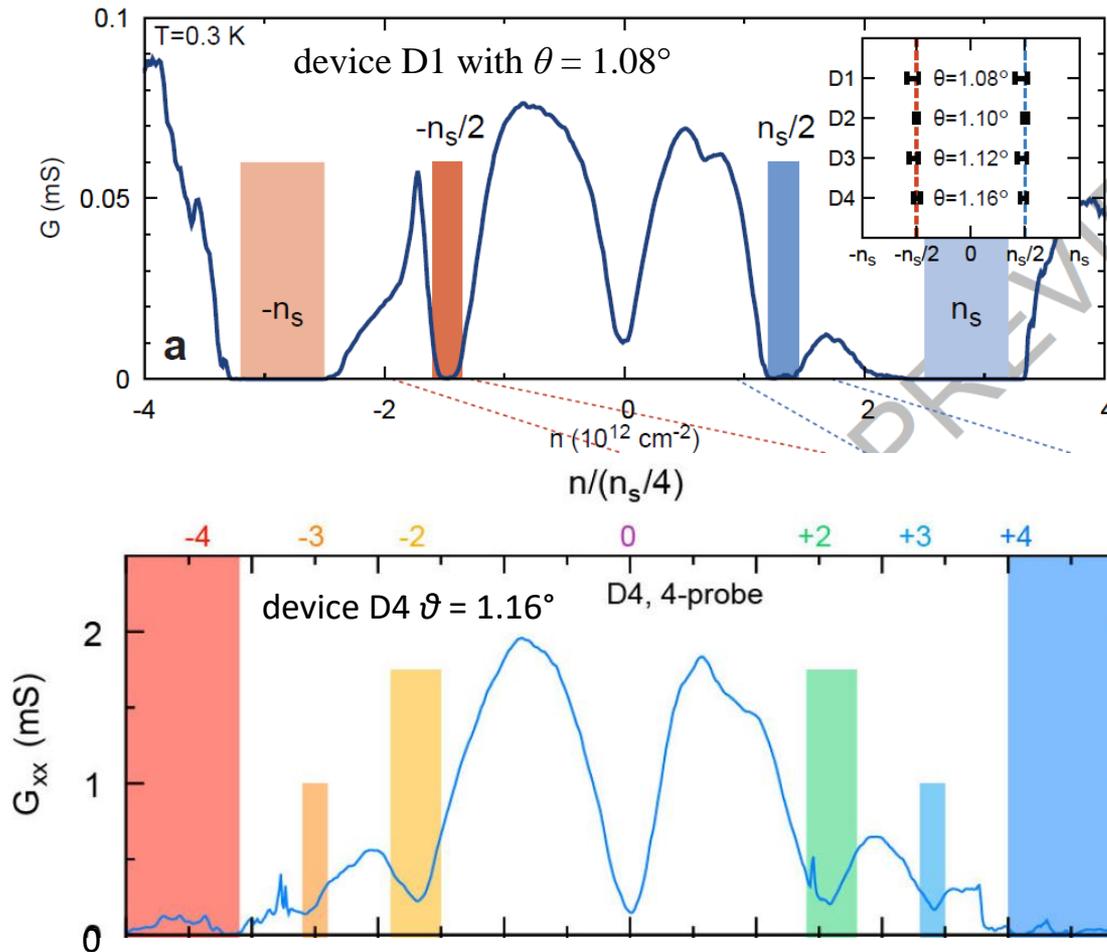


Зависимость щели
от угла θ

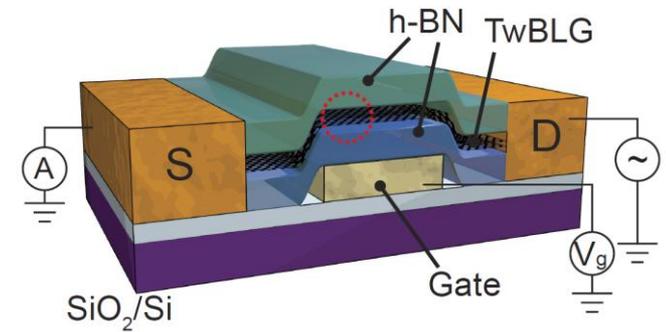


Conductivity of magic angle tBLG as function of doping. Experiment I

Y. Cao, et. al., Nature **556**, 80 (2018)



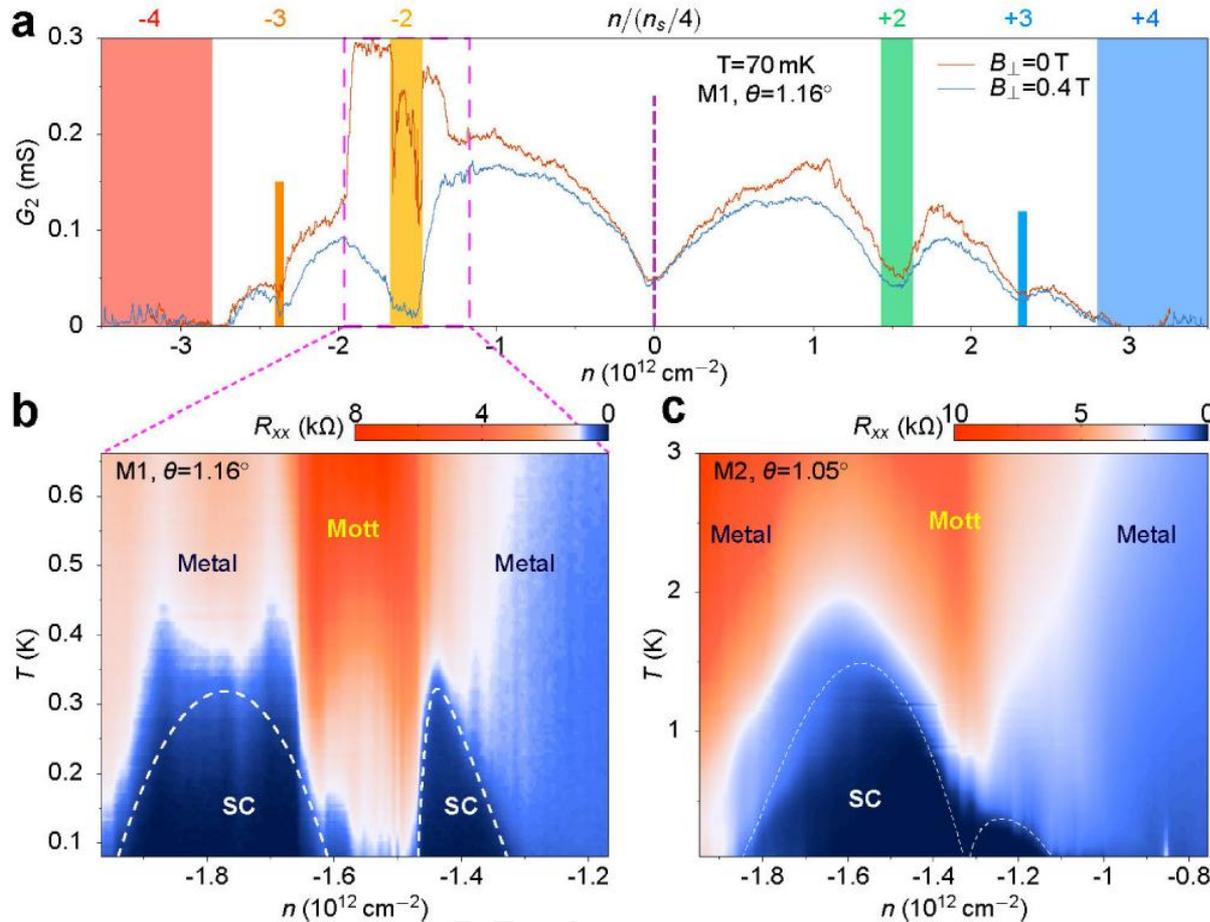
Schematics of the device studied



- Conductivity shows minima at half-filling ($\pm n_s/2$) that is for 2 extra electrons or holes per supercell
- Some samples show also minima of conductivity at $\pm 3n_s/4$

Conductivity of magic angle tBLG as function of doping. Experiment I

Y. Cao, et. al., Nature **556**, 43 (2018)



- Minima of conductivity are observed for integer number of electrons or holes per supercell
- Minima at $n=\pm n_s/2$ and $n=\pm 3n_s/4$ cannot be explained within single particle theory

Результаты в приближении сильной связи с учетом e-e взаимодействия

A.O. Sboychakov, et al., PRB **100**, 045111 (2019)

A.O. Sboychakov, et al., PRB **102**, 155142 (2020)

$$H = \sum_{\mathbf{n}mij} \sum_{\alpha\beta\sigma} t_{\mathbf{n}m}^{ij\alpha\beta} d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}^+ d_{\mathbf{m}j\beta\sigma} + U \sum_{\mathbf{n}i\alpha} n_{\mathbf{n}i\alpha\uparrow} n_{\mathbf{n}i\alpha\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}mij} \sum_{\alpha\beta\sigma\sigma'} V(\mathbf{r}_{\mathbf{n}}^{i\alpha} - \mathbf{r}_{\mathbf{m}}^{j\beta}) n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} n_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}$$

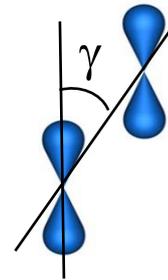
$d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}$, $d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}^+$ - creation and annihilation operators of electron with spin projection σ , located in layer i , at unit cell \mathbf{n} , sublattice α $n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} = d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}^+ d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}$

$t = 2.57\text{eV}$ ← Intralayer nearest-neighbor hopping amplitude

$$t_{\perp}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \cos^2(\gamma) V_{\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \sin^2(\gamma) \cancel{V_{\pi}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$$

$$V_{\sigma}(\mathbf{r}) = t_0 \exp(-r/r_0) \quad t_0 = 0.4\text{eV}$$

too small



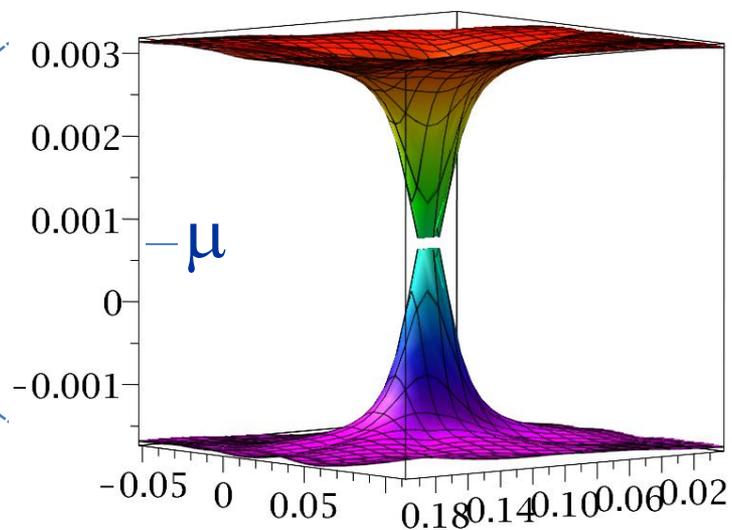
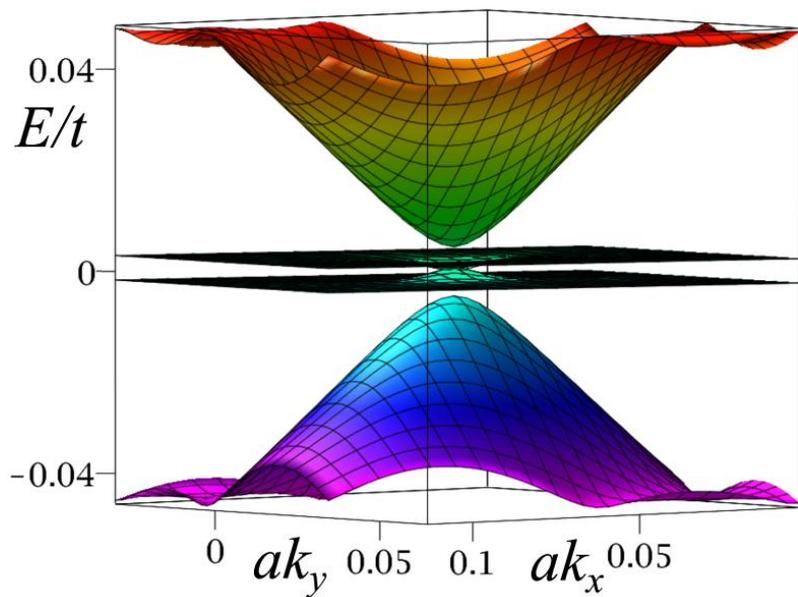
Магический угол $\theta_c = 1.08^\circ$ соответствует эксперименту

Число атомов в суперячейке $N = 11164$

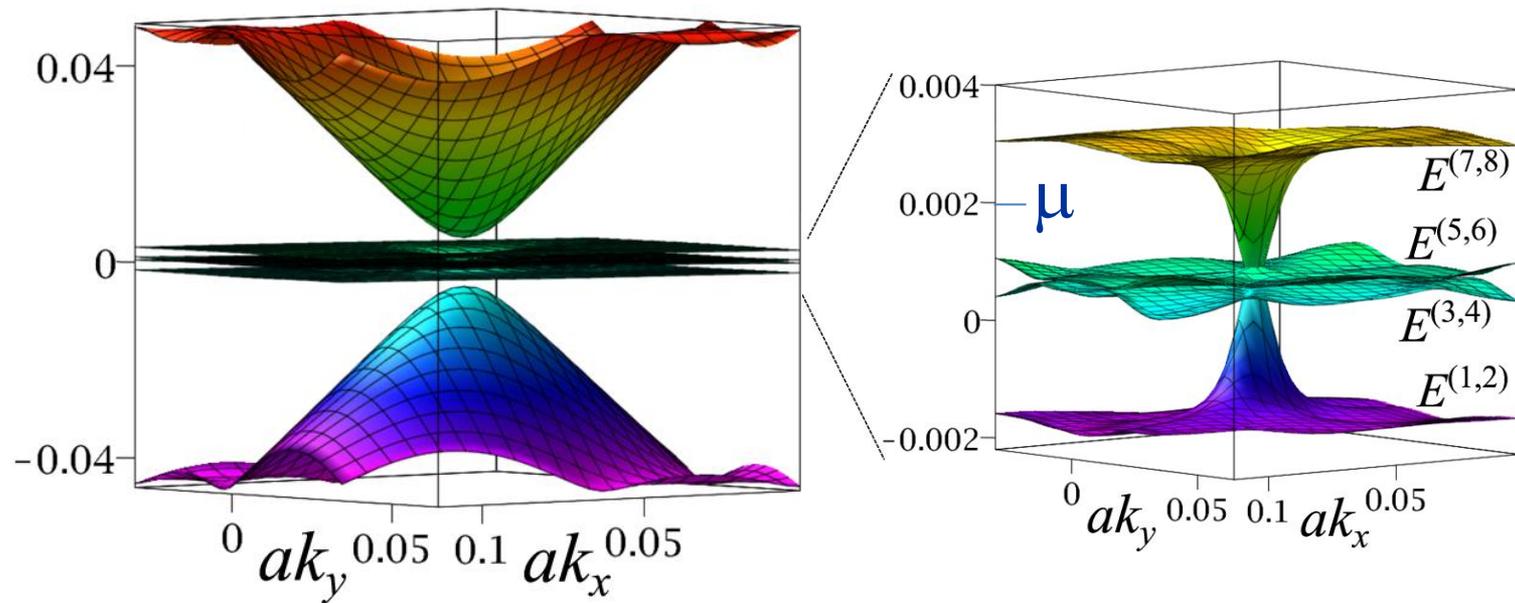
Основное состояние SDW

Низкоэнергетический спектр, допирования нет

- В одноэлектронном приближении имеем 8 почти вырожденных зон.
- При учете взаимодействия структура спектра **квартет-квартет**



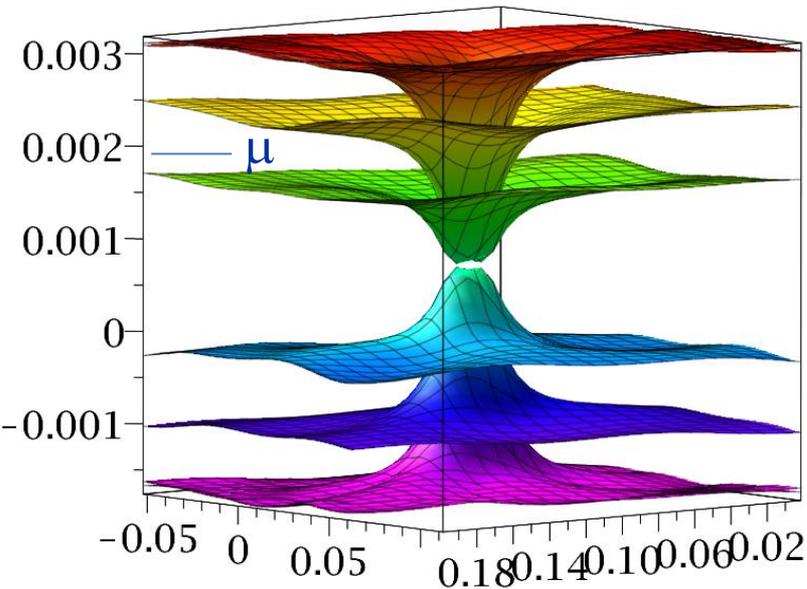
Допированный образец, два электрона или дырки на суперячейку



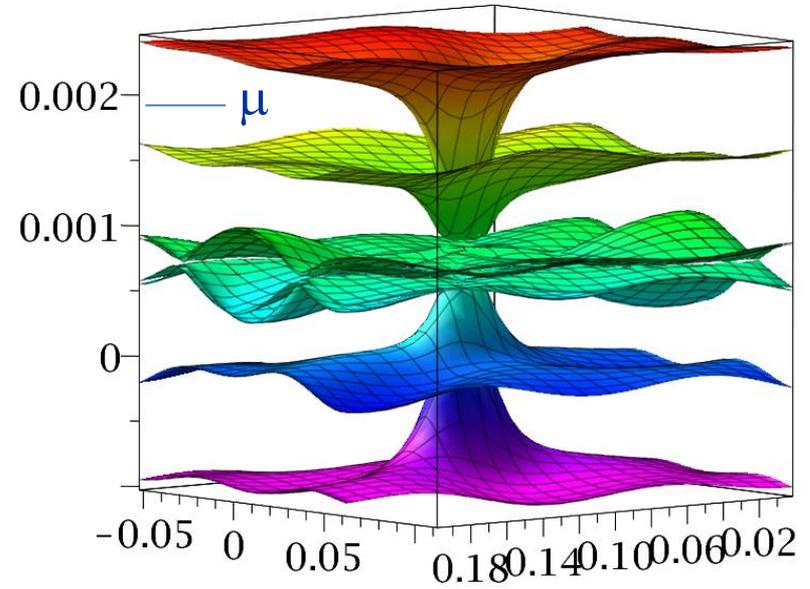
➤ Структура спектра дублет-квартет-дублет

Разные уровни допирования:

$$n = \pm n_s/4$$



$$n = \pm 3n_s/4$$

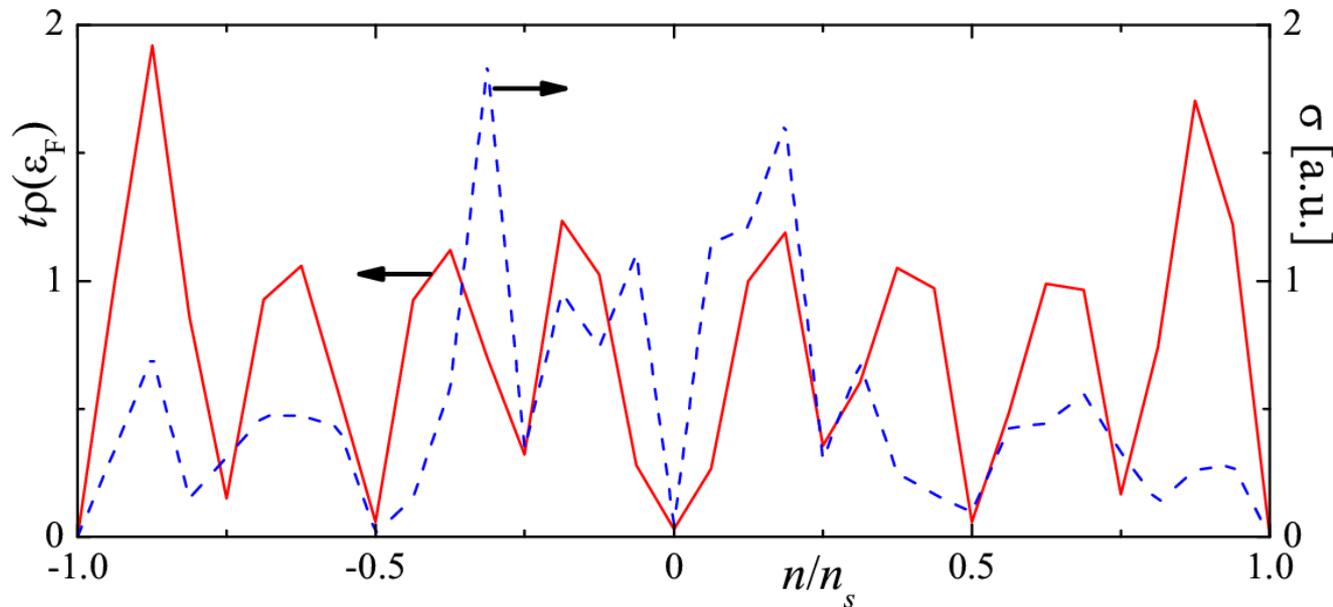


➤ At $n = \pm n_s/4$ we have doublet-singlet-singlet - singlet-singlet-doublet structure

➤ At $n = \pm 3n_s/4$ we have singlet-singlet-quartet-singlet-singlet structure

DOS на уровне Ферми и проводимость в зависимости от допирования

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^2} \sum_S \int d^2\mathbf{p} \left| \partial E_{\mathbf{p}}^S / \partial \mathbf{p} \right|^2 \delta(\mu - E_{\mathbf{p}}^S) \tau(\mathbf{p}), \quad \tau(\mathbf{p}) = \text{const}$$



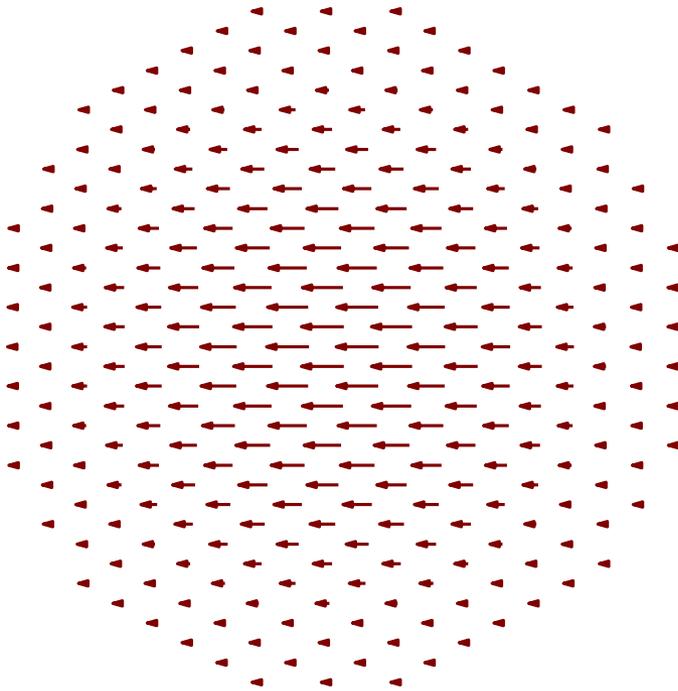
- DOS at Fermi level has minima at $n/n_s = 0, \pm 1/4, \pm 2/4,$ and $\pm 3/4$. (that is for **integer number** of electrons or holes per supercell).
- Minima of conductivity either equal or lay very close to integer-valued doping levels in agreement with experiment

X. Lu, et al., Nature **574**, 653 (2019)

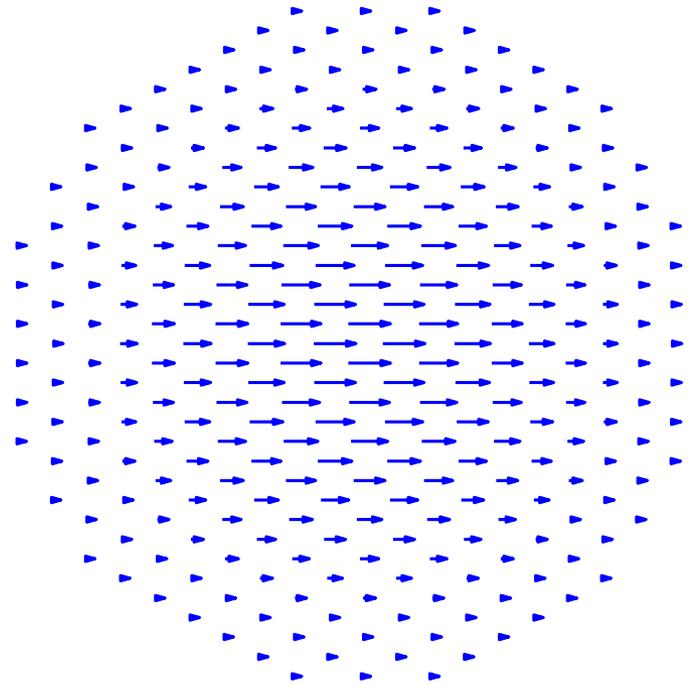
Нарушение вращательной симметрии (нематическое состояние).

$$\mathbf{S}_{ni\alpha} = \frac{1}{U} (\text{Re}(\Delta_{ni\alpha}), \text{Im}(\Delta_{ni\alpha})) \leftarrow \text{Спины на узле}$$

Спины на слое 1, подрешетки A
(показана только область



Тоже на подрешетке B

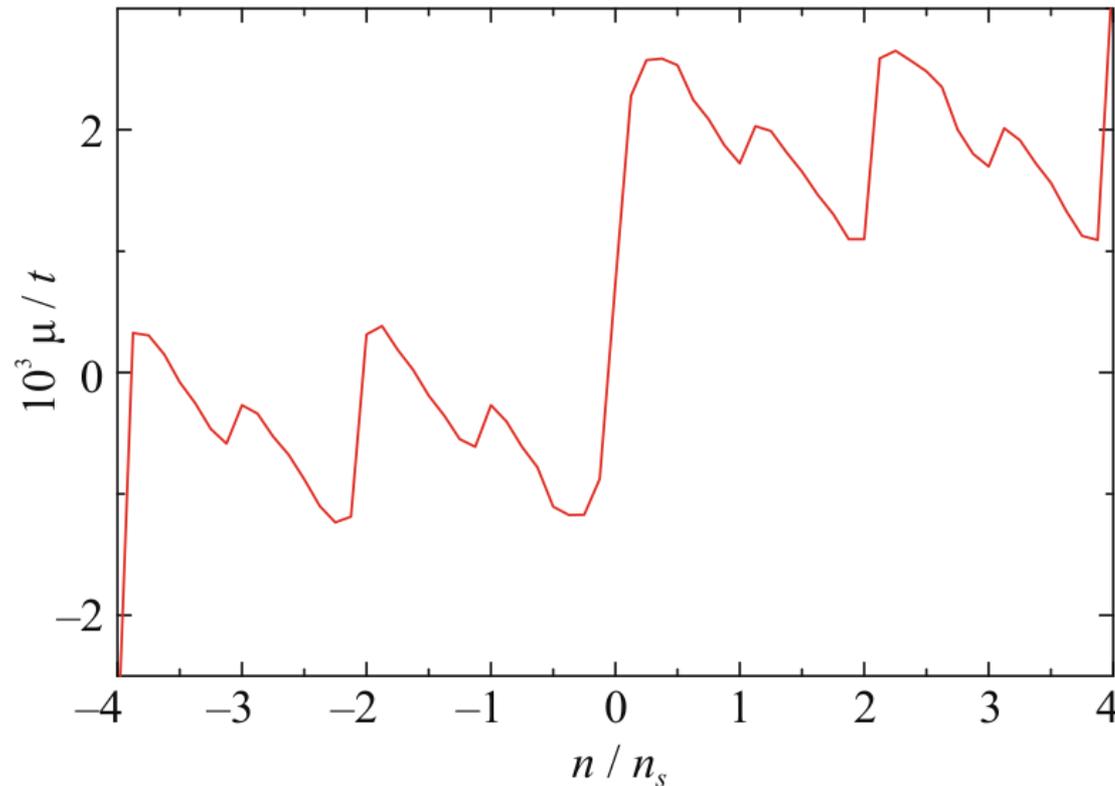


➤ Спины \mathbf{S}_{nia} коллинеарны и АФМ упорядочены в каждом слое

Образование неоднородной электронной структуры (фазовое рааслоение)

А.О. Сбойчаков и др., Письма в ЖЭТФ **112**, 693 (2020) [JETP Letters **112**, 651 (2020)]

Зависимость хим. потенциала от допирования

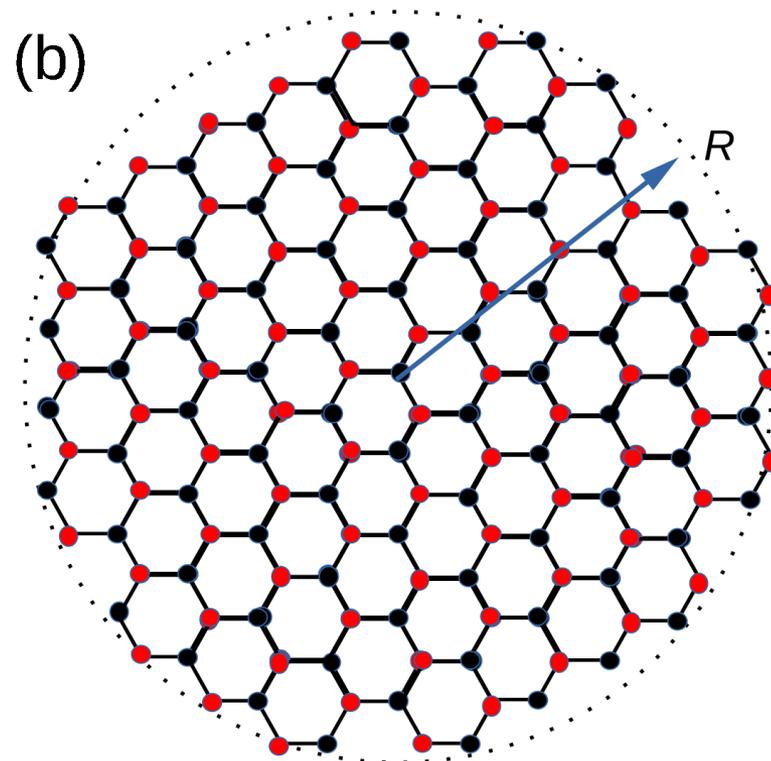
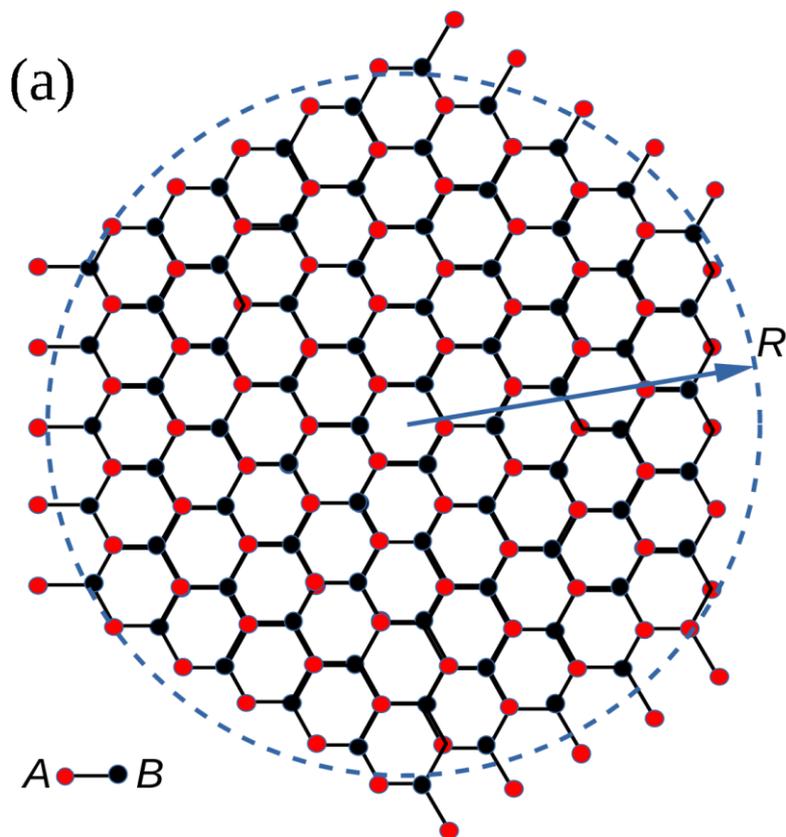
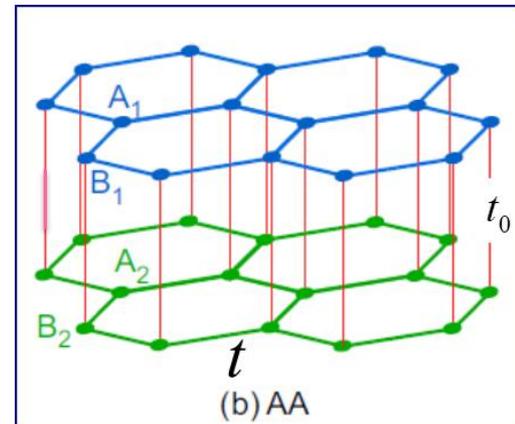


- Поведение немонотонное, что указывает на неустойчивость однородного состояния.

Квантовая точка из двухслойного AA графена

A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, and A. O. Sboychakov

Phys. Rev. B **105**, 235415 (2022)_



Волновые уравнения вблизи конусов Дирака:

$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3a_0} (0,1) = +1 \frac{4\pi}{3a_0} \mathbf{e}_y, \quad \xi = +1: \hat{H}^{SLG} = -iv_F \boldsymbol{\sigma} \nabla$$

$$\mathbf{K}' = \frac{4\pi}{3a_0} (0,-1) = -1 \frac{4\pi}{3a_0} \mathbf{e}_y, \quad \xi = -1: \hat{H}^{SLG} = -iv_F \boldsymbol{\sigma}^* \nabla$$

Характерный
пространственный
масштаб

$$l = \frac{v_F}{t_0} = \frac{3ta_0}{2t_0} \approx 12a_0$$

Гамильтониан в континуальном приближении:

$$\hat{H}_\xi = \begin{pmatrix} 0 & -i\partial_x - \xi\partial_y & 1/l & 0 \\ -i\partial_x + \xi\partial_y & 0 & 0 & 1/l \\ 1/l & 0 & 0 & -i\partial_x - \xi\partial_y \\ 0 & 1/l & -i\partial_x + \xi\partial_y & 0 \end{pmatrix} \quad \Psi_\xi = \begin{pmatrix} \psi_{\xi 1a} \\ \psi_{\xi 1b} \\ \psi_{\xi 2a} \\ \psi_{\xi 2b} \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}_\xi = i\partial_x + \xi\partial_y$$

$$\hat{P}_\xi^* = -i\partial_x + \xi\partial_y$$

Энергия в единицах t_0
Длина в единицах l

Граничные условия для круглой квантовой точки из AA графена:

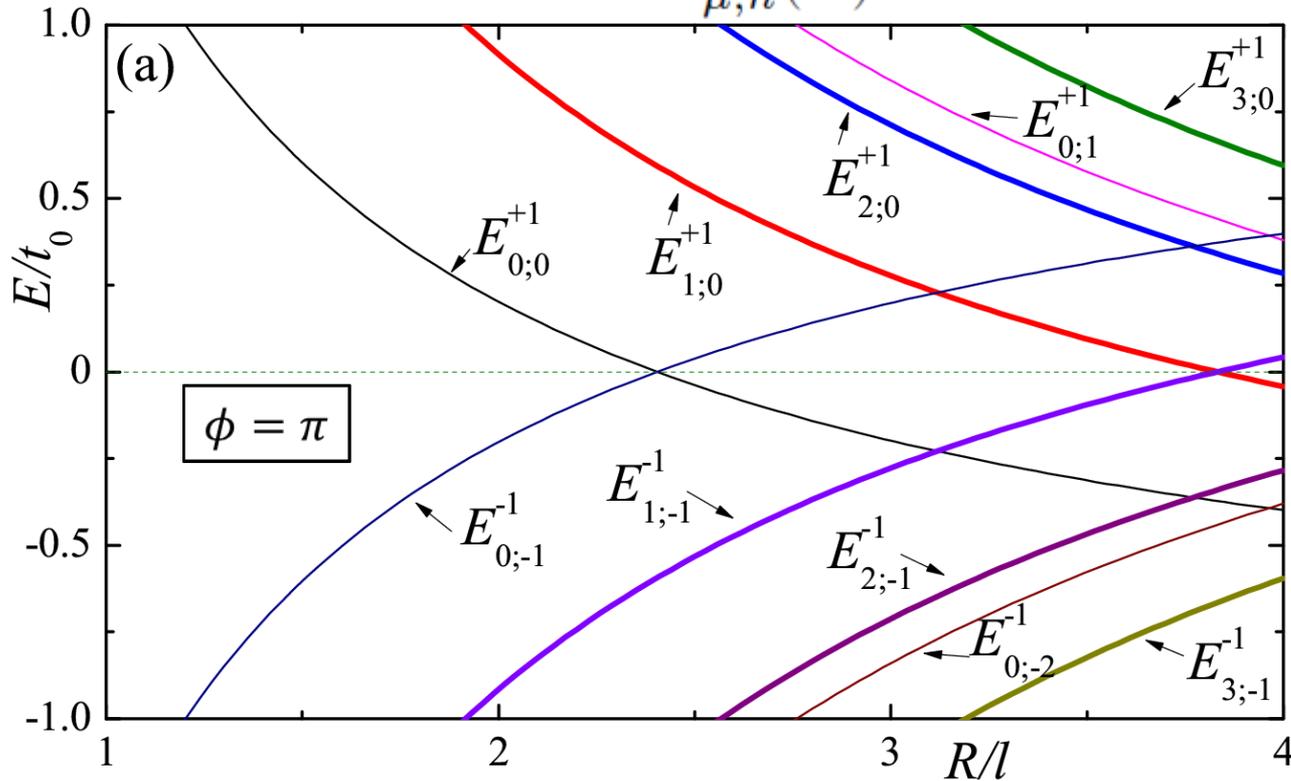
Предполагаем, что рассеяние электронов на границе не перебрасывает их из одного конуса Дирака на другой.

$$\boxed{\Psi_\xi = \widehat{M}_\xi \Psi_\xi}, \quad \underbrace{\widehat{M}_\xi = \widehat{M}_\xi^+ = \widehat{M}_\xi^{-1}, \quad \{\widehat{M}_\xi, \hat{j}_{r\xi}\}_+ = 0,}_{\text{}} \quad \hat{j}_{r\xi} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\xi\theta} & 0 & 0 \\ e^{i\xi\theta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\xi\theta} \\ 0 & 0 & e^{i\xi\theta} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\widehat{M}_\xi = \begin{pmatrix} m_{11} & im_{12}e^{-i\xi\theta} & im_{13}e^{if} & m_{14}e^{i(f-\xi\theta)} \\ -im_{12}e^{i\xi\theta} & -m_{11} & -m_{14}e^{i(f+\xi\theta)} & -im_{13}e^{if} \\ -im_{13}e^{-if} & -m_{14}e^{-i(f+\xi\theta)} & m_{33} & im_{34}e^{-i\xi\theta} \\ m_{14}e^{i(\xi\theta-f)} & im_{13}e^{-if} & -im_{34}e^{i\xi\theta} & -m_{33} \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} m_{11}^2 + m_{12}^2 + m_{13}^2 + m_{14}^2 = 1 \\ m_{33}^2 + m_{34}^2 + m_{13}^2 + m_{14}^2 = 1 \\ m_{13}(m_{11} + m_{33}) - m_{14}(m_{12} + m_{34}) = 0 \\ m_{13}(m_{12} - m_{34}) + m_{14}(m_{11} - m_{33}) = 0 \end{cases}$$

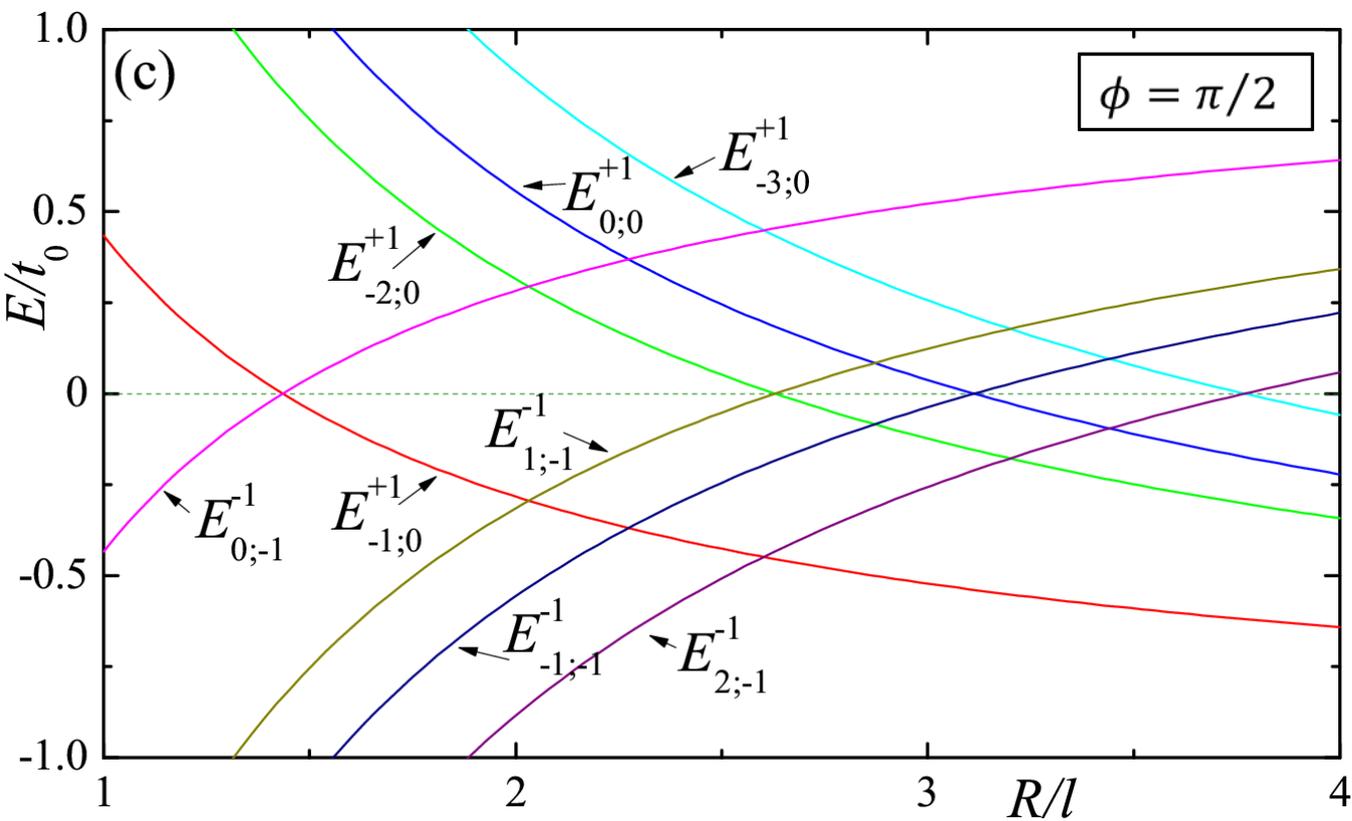
Несколько уровней энергии $E_{\mu;n}^c(R)$ в зависимости от радиуса точки.



Мы наблюдаем набор радиусов, при которых

- ❖ Меняется четность основного состояния относительно перестановке слоев
- ❖ Это состояние вырождено восьмикратно по спину σ , индексу долины ξ и четности c
- ❖ Основное состояние отделено большой щелью от возбужденных
- ❖ Величина первого из этих магических радиусов порядка размера $\Lambda\Lambda$ области в графене, скрученном на магический угол (см. следующий слайд).

Другие гран. условия



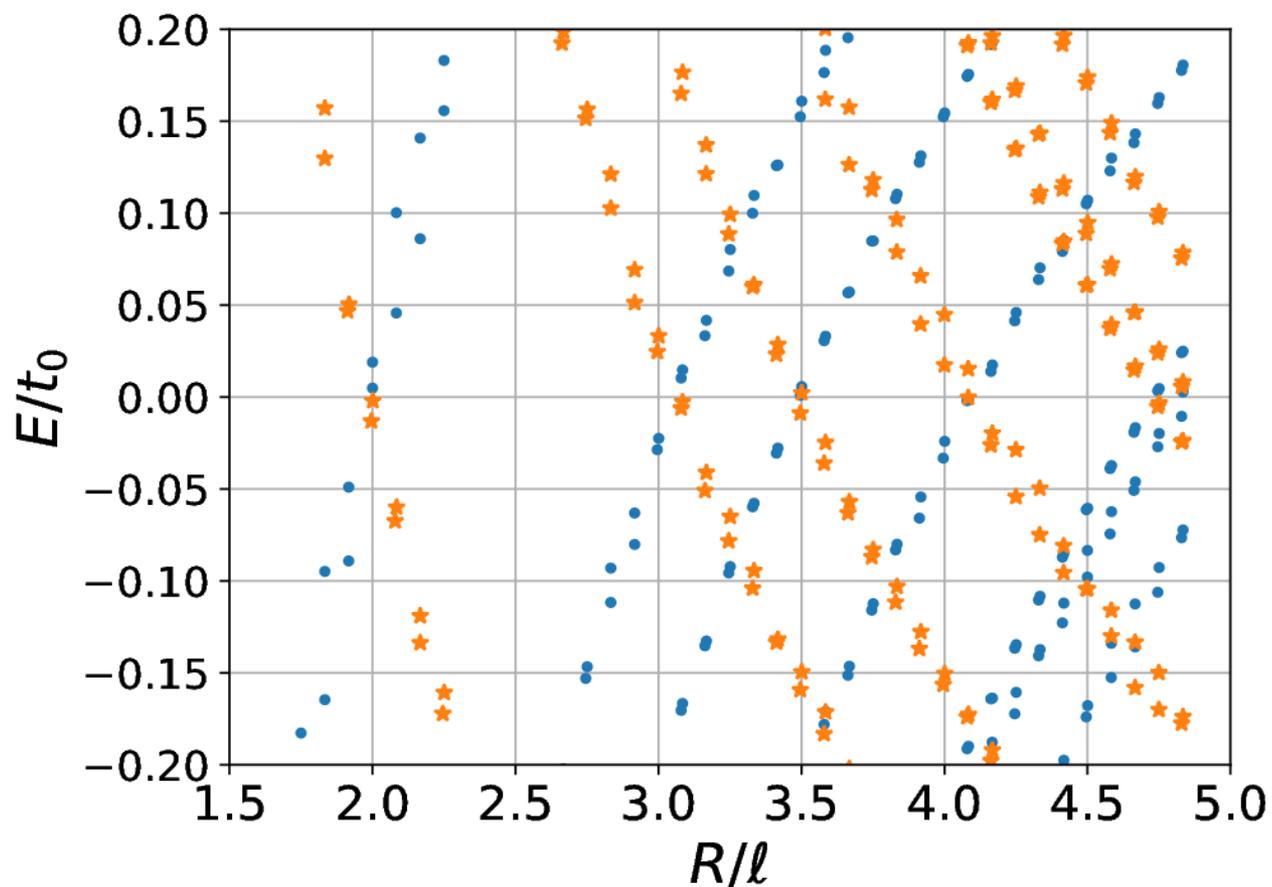
$$\phi = \pi/2$$

↓

$$|\psi_{\xi ia}(R, \theta)| = |\psi_{\xi ib}(R, \theta)|$$

$$E_{\mu;n}^c(R) = c + \frac{z_{\mu;n}}{R}$$

Численный результат для «сложных» гран. условий.

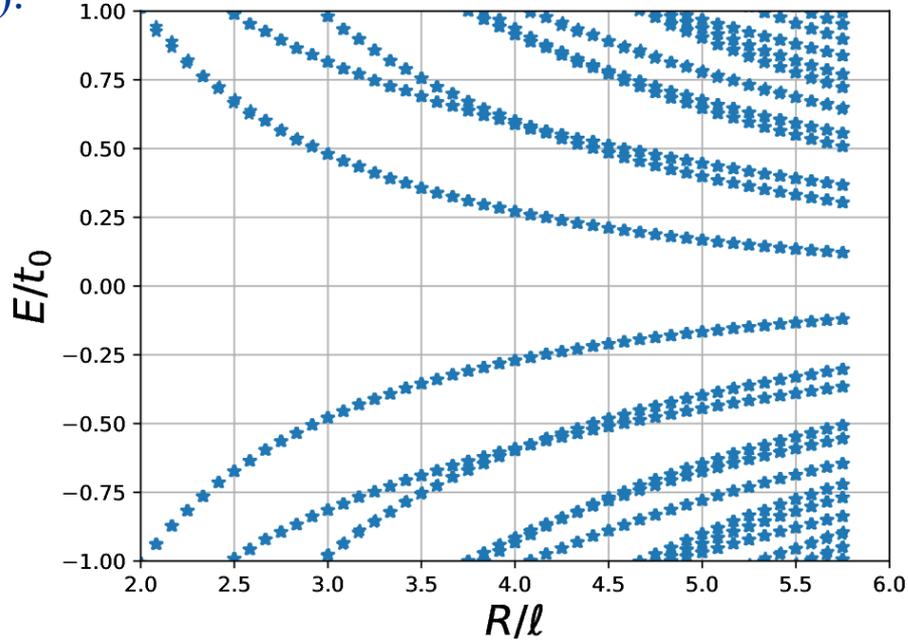


Меняем форму точки с круглой на треугольную или прямоугольную. Основной результат не меняется. Он устойчив.

➤ У квантовой точки из однослойного графена нет такого свойства (нет квантового числа s).

$$J_\mu\left(\frac{\varepsilon R}{\hbar v_F}\right) + \cot\left(\frac{\phi}{2}\right) J_{\mu+1}\left(\frac{\varepsilon R}{\hbar v_F}\right) = 0$$

Нет магических радиусов у квантовых точек из АВ графена:

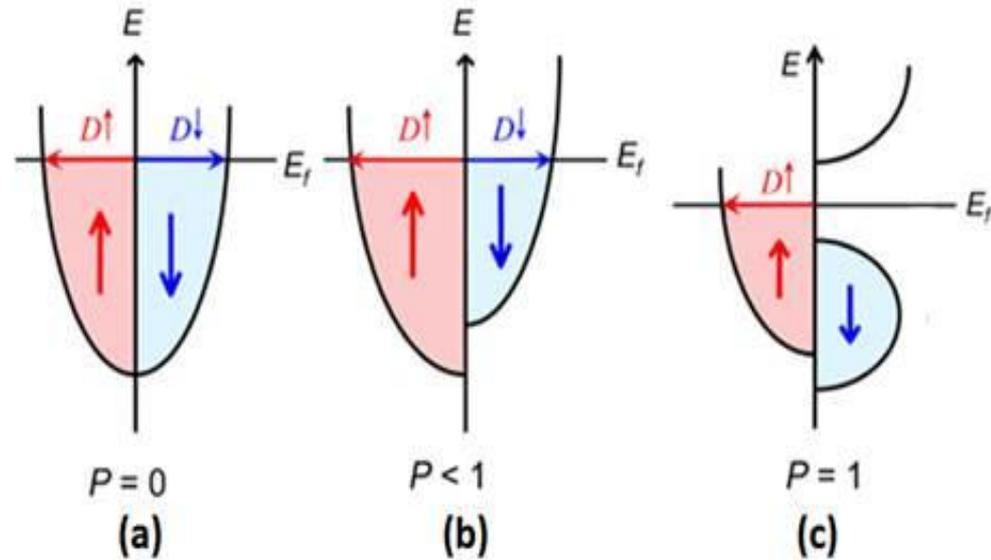


Напрашивается аналогия между «магическими углами» скрученного двухслойного графена и «магическими радиусами» квантовой точки двухслойного АА графена.

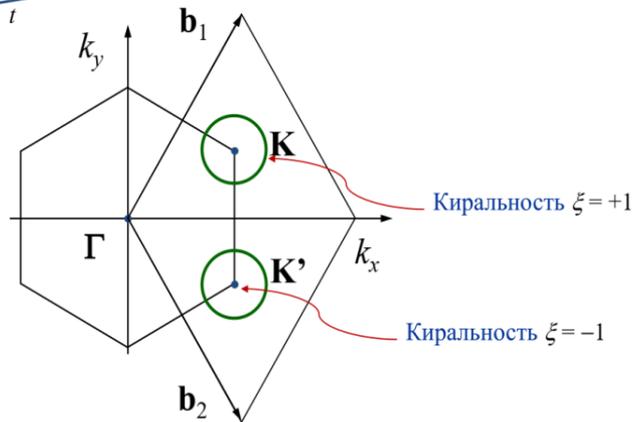
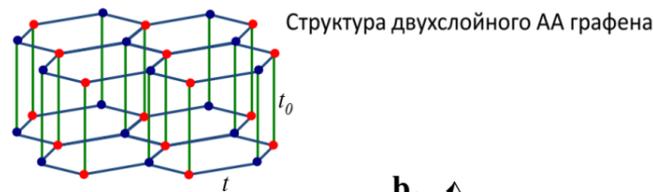
Существование «магических радиусов» уникально для структуры АА и связано с симметрией его слоев.

Дробно-металлическое состояние, четверть-металлическое состояние в АА графене

Электронные состояния на поверхности Ферми обычных металлов вырождены по проекции спина, **рис.(a)**, и спиновая поляризация равна нулю. Сильные электрон-электронные взаимодействия могут снять это вырождение, и электронная жидкость приобретает спиновую поляризацию, **рис. (b)**. В предельном случае только электроны с одной проекцией спина достигают поверхности Ферми, **рис.(c)**.



Эти системы называют полуметаллами (half-metal) [R. A. de Groot, et al. PRL 50, 2024 (1983), M.I. Katsnelson et al. RMP 80, 315 (2008)]. В НМ электрический ток имеет 100% поляризацию по спину, что интересно для приложений в спинтронике [X. Hu, Adv. Mater. **24**, 294 (2012),]. В настоящее время найдены десятки таких систем: NiMnSb, $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$, CrO_2 , Co_2MnSi , $[\text{Pr}_{2-x}\text{Sr}_x\text{MgIrO}_6]_2$. Двухслойном АА графене возможна реализация таких и даже более сложных состояний, несмотря на относительно слабое e-e взаимодействие.

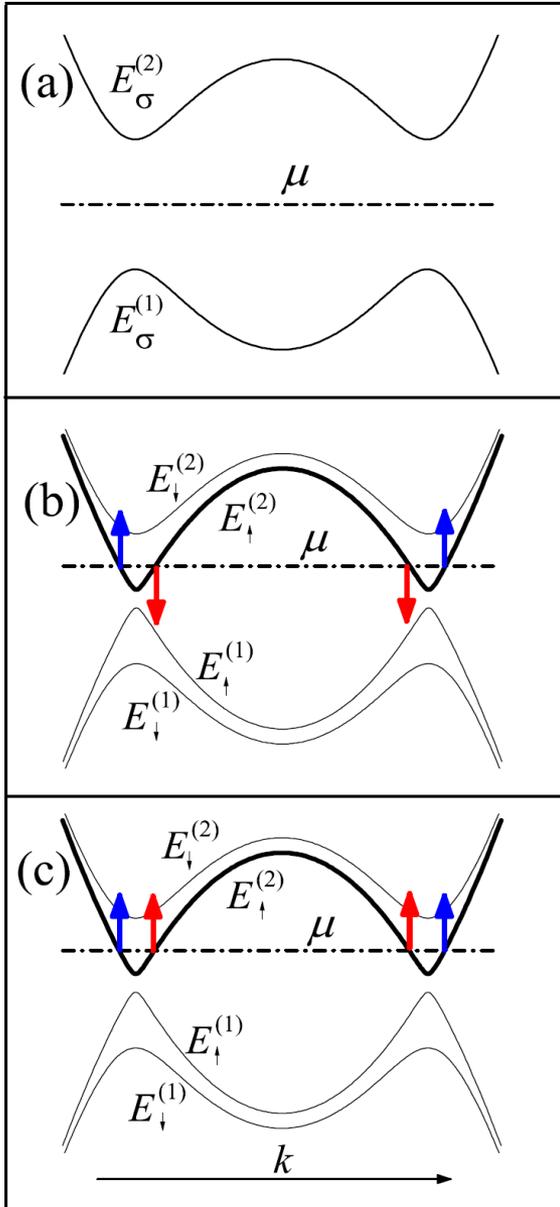


Зона Бриллюэна содержит два неэквивалентных конуса Дирака. Вблизи конусов электроны имеют разную киральность. Их волновые функции являются собственными функциями оператора $k_x + i\xi k_y$, где $\xi = +1$ для одного конуса и $\xi = -1$ для другого.

Двухслойный АА графен может переходить в фазу, «четверть-металла»: на поверхности Ферми электроны со 100% поляризацией по спину и киральностью одного знака. Нарушается вращательная симметрия электронной системы, появляется спонтанная одноосная анизотропия («нематическая» фаза).

Состояние четверть-металла является основным состоянием системы, если взаимодействие электронов в одной долине много больше, чем взаимодействие между долинами,

$$V_C(\mathbf{q}) \gg V_C(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}), |\mathbf{q}| \ll |\Delta\mathbf{K}|.$$



$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle mn \rangle l \sigma} d_{\mathbf{m}l0\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{n}l1\sigma} - t_0 \sum_{\mathbf{n}a\sigma} d_{\mathbf{n}0a\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{n}1a\sigma} + H.c. - \mu n.$$

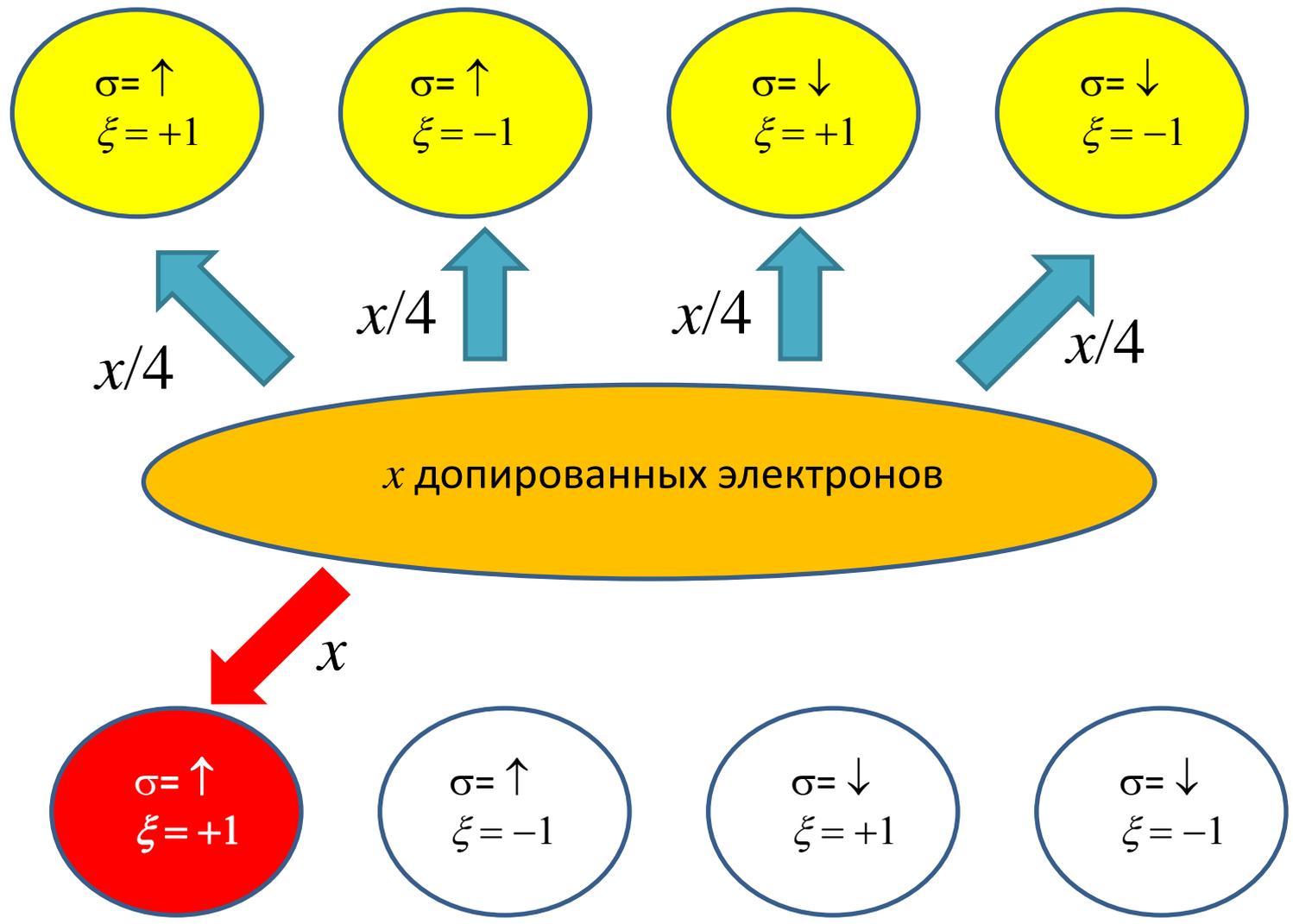
$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2N_c} \sum_{\substack{\mathbf{k}p l a \\ l' a' \sigma}} V_{aa'}^{ll'}(\mathbf{k} - \mathbf{p}) d_{\mathbf{k}l a \sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{p}l a \sigma} d_{\mathbf{p}l' a' \bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}l' a' \bar{\sigma}}$$

Взаимодействие электронов открывает щель в спектре, **рис. (a)**.

При допировании на поверхности Ферми появляются электроны с разной поляризацией по спину и разной киральностью, **рис. (b,c)**.

Очевидно, величина щели зависит от допирования

Электронны на поверхности Ферми можно разделить на 4 сектора $s=(\sigma, \xi)$



$$\Delta_s = \Delta_0 \sqrt{1 - \frac{x_s}{x_0}}, \quad \frac{\mu}{\Delta_0} = 1 - \frac{x_s}{2x_0}, \quad x_0 = \frac{q_{F0}^2 \Delta_0}{4\pi t_0}.$$

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^m = \sqrt{|\Delta_{\mathbf{k}\sigma}|^2 + t_0^2 (1 - q/q_{F0})^2},$$

$$\Omega = -T \ln\{\text{Tr} \exp[-(\hat{H} - \mu \hat{N})/T]\}. \quad F_s(0) = -q_{F0}^2 \Delta_0^2 / 8\pi t_0.$$

$$F_s(x_s) = F_s(0) + \int_0^{x_s} \mu(x) dx \quad F = \sum F_{\xi\sigma}$$

$$F = 4F_s(0) + \Delta_0 x - \frac{\Delta_0}{4x_0} \sum_{\xi, \sigma} x_{\xi\sigma}^2.$$

Если все сектора одинаково допированы, то $x_s = x/4$ и последнее слагаемое $-\Delta_0 x^2/16x_0$. Если только один из секторов принимает дополнительные электроны, то $-\Delta_0 x^2/4x_0$.

Если $x_s \geq x_0$, то щель в одном секторе обращается в нуль, начинает заполняться второй сектор и т.д.

Выводы

- Двухслойный графен является интересным материалом, перспективным для приложений
- В подкрученном графене возможно существование разнообразных электронных состояний, в том числе, сверхпроводимости, магнитного порядка, неоднородной фазы
- Двухслойный графен со структурой AA также обладает весьма необычными свойствами. Возможно, его изучение даст ключ к более полному пониманию электронных свойств подкрученного графена.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!