Физика низких температур, 2006, т. 32, № 7, с. 923–926

Письма редактору

О возможности наблюдения в графене обычного квантового эффекта Холла

Ю.Б. Гайдидей, В.М. Локтев

Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины
ул. Метрологическая, 14–б, г. Киев, 03143, Украина
E-mail: vloktev@bitp.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 3 марта 2006 г., после переработки 27 марта 2006 г.

Показано, что учет в двухподрешеточной структуре графена внутриподрешеточного электронного транспорта позволяет в больших магнитных полях наблюдать обычный квантовый эффект Холла.

Показано, що врахування у двопідгратковій структурі графену внутрішньопідграткового електронного транспорту дозволяє у великих магнітних полях спостерігати звичайний квантовий ефект Холла.

PACS: 71.70.Di, 73.43.Cd, 81.05.Uw

Ключевые слова: графен, квантовый эффект Холла, необычный квантовый эффект Холла.

1. В последнее время большое внимание привлекает экспериментальное и теоретическое исследование графена или специально приготовленных одиночных графитовых плоскостей (см., к примеру, [1–3]). Хотя их зонная структура была рассчитана еще в 1947 г. [4], лишь много лет спустя было показано [5], что низкоэнергетическая динамика двумерных электронов графена описывается не уравнением Шредингера, как для большинства кристаллов, а уравнением Дирака. Казалось бы, из этого прямо следовало, что мощный матфизический аппарат квантовой электродинамики мог бы использоваться для изучения твердотельных эффектов. Однако случилось это далеко не сразу, поскольку десятилетиями считалось, что отдельно взятый графитовый монослой неустойчив относительно механических (изгибных) искажений, делая тем самым исследование дираковских фермионов в конденсированных средах академическим и не имеющим практического интереса.

Ситуация принципиально изменилась в 2005 г., когда была разработана методика получения стабильных к изгибной деформации и достаточно совершенных образцов графена [6,7], позволивших начать экспериментальное изучение в них кинетических и гальваномагнитных явлений. Оно, не в последнюю очередь, стимулировалось тем, что поведение безмассовых частиц в магнитном поле существенно отличается от поведения массивных; в частности, было показано, что даже само магнитное поле может служить катализатором генерации массы у свободных частиц [8,9]. А недавно было предсказано [10] и действительно скоро обнаружено [1,2], что в графене, также именно вследствие безмассовости квазичастиц, имеет место не целочисленный, а полуцелочисленный квантовый эффект Холла (ЭХ), в котором ступеньки холловской проводимости сдвинуты на половину «кванта проводимости» и наблюдаются при числах $n + 1/2$, где $n = 0, 1, 2 \ldots$

2. Следует при этом заметить, что упомянутое явление, получившее в [10] название «необычного» ЭХ, связано с особым характером дисперсии дираковских квазичастиц в графене, которая, как правило, рассчитывается в приближении сильной связи для свободных электронов (см., например, [11,12]), особенно хорошо разработанному в теории молекулярных и атомарных криокристаллов [13]. По сути графен тоже не что иное, как атомарный кристалл, состоящий из двух, вставленных одна в другую, треугольных (плотноупакованных) плоских решеток, каждая из которых может описываться в приближении сильной связи. Это значит, что гамильтониан графена

$$H = \varepsilon_\pi \sum_{\mathbf{n}_\alpha} a^+_{\mathbf{n}_\alpha} a_{\mathbf{n}_\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta} t_{\mathbf{n}_\alpha \mathbf{m}_\beta} a^+_{\mathbf{n}_\alpha} a_{\mathbf{m}_\beta} \qquad (1)$$

имеет вид, типичный для молекулярных конденсированных систем. В (1) приняты следующие обозначения: ε_π — энергия π-электрона на узле $\mathbf{n}_\alpha$ ($\mathbf{n}$ — вектор ячейки, α(=1, 2) — номер подрешетки), $t_{\mathbf{n}_\alpha \mathbf{m}_\beta}$ — матричный элемент перехода электрона между атомами $\mathbf{n}_\alpha$ и $\mathbf{m}_\beta$, $a^+_{\mathbf{n}_\alpha}$ — ферми-оператор рождения электрона на узле $\mathbf{n}_\alpha$ (спин, учет которого тривиален, мы ради простоты опускаем).

В $\mathbf{k}$-представлении энергии $\varepsilon_\mu(\mathbf{k})$ двух (μ=1, 2) электронных зон графена рассчитываются тривиально и могут быть описаны выражением

$$\varepsilon_\mu(\mathbf{k}) = \varepsilon_\pi + t_2(\mathbf{k}) - (-1)^\mu |t_1(\mathbf{k})|, \qquad (2)$$

в котором $t_2(\mathbf{k})$представляет собой часть зоны, формируемую за счет внутриподрешеточного движения электронов, а $t_1(\mathbf{k})$ – за счет межподрешеточного. Последнее приводит к взаимному расщеплению зон, которое в теории молекулярных экситонов называется *давыдовским*. Ограничиваясь лишь ближайшими меж- и внутриподрешеточными переходами, легко получить, что

$$t_1(\mathbf{k}) = t_1\gamma_1(\mathbf{k});\ \gamma_1(\mathbf{k}) = 1 + \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_2};$$
$$t_2(\mathbf{k}) = t_2\gamma_2(\mathbf{k});$$
$$\gamma_2(\mathbf{k}) = \cos \mathbf{k}\mathbf{a}_1 + \cos \mathbf{k}\mathbf{a}_2 + \cos \mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2), \qquad (3)$$

где t_1 и t_2 — матричные элементы перехода между ближайшими и следующими за ними соседями соответственно, $a_1 = (\sqrt{3}, 0)$, $a_2 = (\sqrt{3}/2, 3/2)$ – постоянные плоской ромбической ячейки, которая, как видно, сориентирована так, что $a_1 \| X$, а расстояние a между ближайшими соседями положено равным единице.

Поведение структурного фактора $\gamma_1(\mathbf{k})$ таково, что в шести точках (например, $\mathbf{K}_{1,2} = (2\pi/9) \times (\pm\sqrt{3}, 3)$) внутри зоны Бриллюэна давыдовское расщепление обращается в нуль и изменяет знак вследствие пересечения зон. В свою очередь, из-за того, что графен содержит по одному π-электрону на атом углерода, заполнение этих зон приводит к тому, что половина электронов занимает состояния ниже указанных характерных точек. Другими словами, сам графен оказывается полуметаллом, поверхность Ферми которого сосредоточена на конечном, равном шести, числе точек. Именно и только вблизи них поведение квазичастиц является дираковским, то есть они — безмассовы, если в выражении (2) ограничиться лишь ближайшими соседями, положив $t_2 = 0$. Если же это не так и $t_2 \neq 0$, то уравнение движения для ферми-операторов несколько изменяется, приобретая вид

$$\begin{aligned} ia_1(\mathbf{k}) &= vt_1[k_y - K_y - i(k_x - K_x)]a_2(\mathbf{k}) + \\ &+ t_2\left\{-\frac{3}{2} + \frac{9}{8}[(k_y - K_y)^2 + (k_x - K_x)^2]\right\}a_1(\mathbf{k}); \\ ia_2(\mathbf{k}) &= v^* t_1[k_y - K_y + i(k_x - K_x)]a_1(\mathbf{k}) + \\ &+ t_2\left\{-\frac{3}{2} + \frac{9}{8}[(k_y - K_y)^2 + (k_x - K_x)^2]\right\}a_2(\mathbf{k}), \end{aligned} \qquad (4)$$

где $v \equiv 3(\sqrt{3} - i)/4$. Переходя в (4) к континуальному описанию, или интегрируя эти уравнения по волновым векторам, и предполагая наличие постоянного магнитного поля $\mathbf{B}\|Z$, направленного перпендикулярно рассматриваемому монослою, приходим к системе

$$\begin{aligned} i\partial_t a_1(\mathbf{r},t) &= -vt_1[i\partial_y + A_y - i(i\partial_x + A_x)]a_2(\mathbf{r},t) - \\ &-\frac{3}{2}t_2 a_1(\mathbf{r},t) + \frac{9}{8}t_2[(i\partial_y + A_y)^2 + (i\partial_x - A_x)^2]a_1(\mathbf{r},t); \\ \partial_t a_2(\mathbf{r},t) &= -v^* t_1[i\partial_y + A_y + i(i\partial_x + A_x)]a_1(\mathbf{r},t) - \\ &-\frac{3}{2}t_2 a_2(\mathbf{r},t) + \frac{9}{8}t_2[(i\partial_y + A_y)^2 + (i\partial_x + A_x)^2]a_2(\mathbf{r},t), \end{aligned} \qquad (5)$$

где для векторного потенциала принята калибровка Ландау $\mathbf{A} = (0, -Bx)$. В результате, учитывая, что тем самым $\partial_y = 0$, и вводя медленно меняющиеся амплитуды

$$a_\mu(\mathbf{r},t) = \alpha_\mu(x) \exp[-i(\varepsilon - 3t_2/2)t],$$

из (5) для них имеем уравнения

$$\begin{aligned} \varepsilon\alpha_1(x) &= -vt_1(\partial_x - Bx)\alpha_2(x) - \\ &- \frac{9}{8}t_2(\partial_x^2 - B^2x^2)\alpha_1(x); \\ \varepsilon\alpha_2(x) &= v^* t_1(\partial_x + Bx)\alpha_1(x) - \\ &- \frac{9}{8}t_2(\partial_x^2 - B^2x^2)\alpha_2(x). \end{aligned} \qquad (6)$$

Переход к уравнению осциллятора осуществляется стандартно, путем введения новых канонически сопряженных бозе-операторов рождения и уничтожения

$$b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{B}x - \frac{i}{\sqrt{B}}\partial_x\right); \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{B}x + \frac{i}{\sqrt{B}}\partial_x\right) \qquad (7)$$

соответственно и использования осцилляторных функций $|n>$, где n — число колебательных квантов, так, что

$$\alpha_{\mu}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_{\mu}(n)|n> . \quad (8)$$

Подставляя теперь (7) и (8) в (6), для коэффициентов $C_{\mu}(n)$ этого разложения получим систему:

$$\varepsilon C_1(n) = v\sqrt{2B(n+1)}t_1 C_2(n+1) + \frac{9}{4}Bt_2(n+\frac{1}{2})\,C_1(n);$$
$$\varepsilon C_2(n) = v^*\sqrt{2Bn}t_1 C_2(n-1) + \frac{9}{4}Bt_2(n+\frac{1}{2})\,C_2(n)\,, \quad (9)$$

где учтено, что $b^+|n> \; = \sqrt{n+1}|n+1>$ и $b|n> \; = \sqrt{n}|n-1>$.

Для основного состояния $n = 0$; тогда из (9) прямо следует, что его энергия $\varepsilon_0 = (9/8)Bt_2$ отвечает нулевым колебаниям, а коэффициенты в (8) удовлетворяют равенствам $C_1(n) = 0$ для всех n и $C_2(0) = 1$, $C_2(n) = 0$ для $n \neq 0$. Энергии возбужденных ($n \neq 0$) состояний следуют из той же системы (9) и имеют вид

$$\varepsilon_{\pm}(n) = \frac{9}{4}Bt_2 n \pm \sqrt{(\frac{9}{8}Bt_2)^2 + 2|v|^2\,Bt_1^2 n}. \quad (10)$$

Эта достаточно простая формула обобщает выражения, известные как для случая $t_2 = 0$ [8], который приводит к необычному (полуцелочисленному) ЭХ и не содержит вклада от нулевых колебаний, так и для случая $t_1 = 0$, отвечающего обычному (целочисленному) ЭХ [11,12]. Обращает на себя внимание отличие полученного спектра (10) от чисто релятивисткого спектра для $n = 0$; в то время как в последнем случае это состояние не реагирует на магнитное поле, в нашем случае имеет место конечный сдвиг, пропорциональный (в размерных единицах) $t_2\Phi/\Phi_0$, где $\Phi \equiv Ba^2$ — поток магнитного поля через ячейку, а Φ_0 — квант потока. Измеряя магнитное поле в теслах, этот сдвиг $\approx 10^{-5}Bt_2$. Причиной этому служит присутствие в дисперсии квазичастиц небольшой «массивной составляющей», целиком обусловленной внутриподрешеточным переносом электронов в графене.

3. Вызывает также интерес «устойчивость» необычного ЭХ относительно увеличения числа плоскостей. Имеются указания [11,14], что, например, для бислойной (2L) системы также появляется массивное слагаемое в законе дисперсии. Действительно, для принятой в [14] геометрии взаимного расположения плоскостей, когда одна из них сдвинута на вектор $(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/2$ относительно другой, в приближении ближайших внутри- (t_1) и межслоевого (t), соседей легко получить уравнения

$$i\dot{a}_{1,I} = t\; a_{2,II} + \gamma_1(\mathbf{k})a_{2,I}\,;\; i\dot{a}_{2,II} = ta_{1,I} + \gamma_1^*(\mathbf{k})a_{1,II}\,;$$

$$i\dot{a}_{1,II} = \gamma_1(\mathbf{k})a_{1,I}\,;\; i\dot{a}_{2,I} = \gamma_1^*(\mathbf{k})a_{2,II}\,,$$

где римские цифры различают плоскости. Повторяя далее те же вычисления в длинноволновом приближении и в предположении о наличии внешнего магнитного поля, приходим к спектру 2L системы:

$$\varepsilon_{1,2}^{(2L)}(n) = \pm\frac{1}{2}t \pm \sqrt{\left(\frac{t}{2}\right)^2 + 2B|v|^2\,t_1^2 n}. \quad (11)$$

Он свидетельствует о прямо противоположной формуле (10) тенденции: сначала (малые поля) спектр (11) отвечает обычному ЭХ, а по мере роста B (и/или n) будет переходить в необычный. Согласно условию, приведенному выше, наблюдение перехода к случаю обычного ЭХ возможно лишь в исключительно больших, пока недостижимых, полях, и учет t_2, скорее, отражается на виде спектра, содержащего нулевые колебания. Более интересным представляется случай бислойных систем, где нет ограничения на наблюдение кроссовера от обычного к необычному ЭХ.

4. Полученные выше выражения (10) и (11) для энергий ландауских уровней в 1L и 2L системах показывают, что было бы необходимо и интересно провести измерения холловской проводимости однослойного и бислойного графена так, чтобы внутриподрешеточное или межслоевое взаимодействия начали давать свой вклад в длинноволновый спектр квазичастиц. Нам неизвестны оценки величин t_2 либо $t_{||}$, и соответствующее исследование квантового ЭХ в графене позволило бы получить о них независимые данные.

Мы благодарим проф. В.П. Гусынина за обсуждение и полезные замечания.

1. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
2. Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. Stormer, and P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
3. V. Wilson, *Physics Today* No 1, 21 (2006).
4. P.R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
5. G.W. Semenoff, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449 (1984).
6. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
7. K.S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T.J. Booth, V.V. Korotkevich, S.V. Morozov, and A.K. Geim, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102**, 10451 (2005).
8. V.P. Gusynin, V.A. Miransky, and I.A. Shovkovy, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3499 (1994); *ibid*. **83**, 1291 (1999).
9. E.V. Gorbar, V.P. Gusynin, V.A. Miransky, and I.A. Shovkovy, *Phys. Rev.* **B66**, 045108 (2002).
10. V.P. Gusynin and S.G. Sharapov, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005).

11. V.S. Dresselhaus and G. Dresselhaus, *Adv. Phys.* **51**, 1 (2002).
12. T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 777 (2005).
13. *Криокристаллы*, Б.И. Веркин, А.Ф. Прихотько (ред.), Киев, Наукова думка (1983).
14. E. McCann and V.I. Falko, *E-print archives: cond-mat/0510237* (2005); *Phys. Rev. Lett.* **96**, 086805 (2006).

On the possibility of observation of the conventional Hall effect in graphene

Yu.B. Gaididei and V.M. Loktev

It is shown that taking into account of intra-sublattice electron transfer in the two-sublattice graphene allows to observe in high magnetic field the conventional quantum Hall effect.

Keywords: graphene, quantum Hall effect, unconventional Hall effect.