

**Національна академія наук України
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова**

Гамаюн Олександр Володимирович

УДК 530.145, 538.9

**ЕЛЕКТРОН-ЕЛЕКТРОННА ВЗАЄМОДІЯ
ТА ГЕНЕРАЦІЯ ЩІЛИНИ В ГРАФЕНІ**

Спеціальність 01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ – 2011

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України.

Науковий керівник:

доктор фізико-математичних наук, професор

Гусинін Валерій Павлович, Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, завідувач відділу астрофізики та елементарних частинок

Офіційні опоненти:

доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАН України

Лев Богдан Іванович, Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, завідувач відділу синергетики

доктор фізико-математичних наук

Голод Петро Іванович, Національний Університет “Києво-Могилянська Академія”, завідувач кафедри фізико-математичних наук

Захист відбудеться « 16 » лютого 2012 р. об 12³⁰ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01 Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної Академії Наук України за адресою: м. Київ, вул. Метрологічна, 14-б.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної Академії Наук України за адресою: м. Київ, вул. Метрологічна, 14-б.

Автореферат розісланий « 12 » січня 2012 р.

Вчений секретар

спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01,
доктор фіз.-мат. наук

В. Є. Кузьмичев

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми

Графен – двовимірний шар атомів вуглецю, об'єднаних у правильну гексагональну ґратку, – був експериментально відкритий в 2004 році [1*]. Завдяки спеціальній симетрії ґратки низькоенергетична структура графену складається з валентної зони та зони провідності, котрі дотикаються одна до одної в так званих діраківських точках. В околі цих точок закон дисперсії для електронів і дірок має лінійний за імпульсом енергетичний спектр зі швидкістю Фермі v_F в 300 разів меншою за швидкість світла c . Квазічастинкові електронні збудження в графені описуються безмасовим рівнянням Дірака замість звичайного для фізики конденсованого середовища рівняння Шредінґера. Тому поведінка електронів в графені має глибоку аналогію з фізикою елементарних частинок і квантовою теорією поля. Блискучим підтвердженням “релятивістської” природи носіїв заряду стало спостереження незвичайного квантового ефекту Хола в графені, який експериментально встановили А. Гейм з К. Новосоловим (Англія) та їхні співавтори, а також група Ф. Кіма (США). Багато унікальних властивостей графена як раз і пов'язано з діраківським характером його квазічастинок.

Оскільки квазічастинкові електронні збудження в графені мають заряд e , то їх кулонівська взаємодія характеризується величиною $\alpha = e^2/\hbar v_F \sim 1$, і є аналогом постійної тонкої структури $\alpha = e^2/\hbar c \sim 1/137$ в електродинаміці. Таким чином, у континуальному наближенні графен можна описувати за допомогою двовимірної квантової електродинаміки з сильною константою зв'язку тому такі ефекти як *zitterbewegung* (рух з тремтінням), клейнівське тунелювання, народження пар зовнішнім полем (ефект Швінгера), падіння на надкритичний заряджений центр мають шанс бути експериментально перевіреними в графені. Наприклад, клейнівське тунелювання вже експериментально спостерігалось в роботі [2*].

Незважаючи на те, що більшість спостережуваних явищ у графені добре описується в рамках теорії вільних діраківських квазічастинок, наразі залишається відкритим питання про роль кулонівської взаємодії між електронами. Її дослідження, окрім того, що є принциповою задачею для фізики конденсованого стану, також може пролити світло на фундаментальні проблеми релятивістської квантової теорії поля. Треба також зазначити ріст числа публікацій протягом 2011 року, які націлені саме на дослідження ефектів взаємодії в графені експериментальними та чисельними методами.

Одним із важливих проявів взаємодії є те, що при достатньо великій константі взаємодії може відбутися багаточастинковий аналог падіння на центр – екситонна нестабільність, яка приведе до фазового переходу метал-ізолятор і появи основного стану зі щільною в спектрі квазічастинок. Знання щільності важливе також з точки зору практичних застосувань, зокрема для побудови різних електронних приладів на основі графену.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами

Результати, що увійшли в дисертаційну роботу, були отримані в рамках планової наукової тематики відділу астрофізики та елементарних частинок

Інституту теоретичної фізики НАН України (тема “Дослідження структури і динаміки фізичного вакууму та частинкових і колективних збуджень в фізиці високих енергій, квантових макросистемах, космології та астрофізиці” 2006-2010 рр., шифр 1.4.7, № д.р. в УкрІНТЕІ 0105У008402); “Динаміка квантово-польових конденсатів в фізиці і астрофізиці високих енергій та квантовій космології” 2011-2015 рр, шифр 1.4.7, № д.р. в УкрІНТЕІ 0110U007541).

Мета і задачі дослідження

Метою дисертаційної роботи є вивчення умов, за яких можливе динамічне порушення симетрії в графені внаслідок сильної електрон-електронної взаємодії. Зокрема, розв'язувалися наступні задачі:

1. Знаходження і аналіз одночастинкового спектру графену в полі кулонівського центру, визначення критичного заряду центру.

2. Розв'язок рівняння Бете-Солпітера для зв'язаного електрон-діркового стану і визначення умов, за яких цей стан стає нестабільним.

3. Розв'язок рівняння на щілину в спектрі квазічастинок та його аналіз при врахуванні локальної чотирьохферміонної та статично екранованої кулонівської взаємодії. Чисельний розв'язок рівняння при врахуванні динамічної поляризації.

4. Знаходження і аналіз одночастинкового спектру графену в однорідному магнітному полі та в полі потенціальної ями. Чисельний аналіз одночастинкового спектру графену в однорідному магнітному полі та в полі кулонівського потенціалу.

5. Знаходження аналітичного виразу однопетльової поляризаційної функції у двошаровому графені для довільних значень імпульсу, енергії, хімічного потенціалу. Знаходження дисперсійного закону колективних збуджень електронної густини (плазмонів). Аналіз статичного екранування кулонівського потенціалу точкової домішки на великих та малих відстанях.

Об'єктами дослідження є квазічастинкові електронні збудження у графені.

Предметом дослідження є амплітуда Бете-Солпітера, щілина в спектрі квазічастинок, поляризаційний тензор.

В роботі було застосовано наступні **методи дослідження**: методи пересумування діаграм в квантовій теорії поля, що приводять до непертурбативних рівнянь Швінгера-Дайсона, Бете-Солпітера, а також дають можливість обчислити поляризаційний тензор в наближенні випадкових фаз (однопетльове наближення).

Наукова новизна одержаних результатів

В дисертаційній роботі вперше:

1. Отримано розв'язок рівняння Бете-Солпітера для зв'язаного електрон-діркового стану в графені. Знайдено критичне значення константи зв'язку, при якій цей зв'язаний стан стає тахіонним, що вказує на екситонну нестабільність, котра приводить до перебудови спектру збуджень та генерації щілини в спектрі квазічастинок.

2. Знайдено і проаналізовано розв'язки рівняння на щілину в графені з урахуванням динамічної поляризації та чотириферміонної взаємодії. Показано,

що врахування чотириферміонної взаємодії приводить до коректного опису фазового переходу з формуванням щілини, а динамічна поляризація приводить до зменшення критичної константи, за якої власне відбувається цей фазовий перехід.

3. Для рівняння Дірака у двовимірному просторі для квазічастинок в потенціальної ямі у постійному магнітному полі показано, що для деякого критичного значення потенціалу ями найнижчий незаповнений енергетичний рівень перетинає межу заповнених електронних станів із від'ємною енергією, що призводить до нестабільності системи. Значення критичного потенціалу зменшується зі зменшенням щілини у спектрі квазічастинок і дорівнює нулю в безщілинному випадку, що може розглядатися як квантовомеханічний прояв явища магнітного каталізу в графені.

4. Знайдено аналітичний вираз для однопетльової поляризаційної функції у двошаровому графені при довільній частоті, імпульсі та хімічному потенціалі. Отриманий результат використано для аналітичного та чисельного знаходження спектру колективних електронних збуджень (плазмонів) та екранованого кулонівського потенціалу.

Практичне значення одержаних результатів

Результати, отримані в дисертації, мають теоретичний характер. Отримані передбачення для екситонного фазового переходу показують, що він може бути реалізований в графені, який не знаходиться на підкладці. Це відкриває можливість експериментальної перевірки. Отримані результати важливі для дослідження домішок в графені у магнітному полі та без нього, що може мати практичне застосування з точки зору зовнішнього контролю щілини.

Одержані точні аналітичні вирази для поляризаційного оператора в двошаровому графені можуть бути застосовані при розв'язанні рівнянь типу Швінгера-Дайсона для щілини та ряду інших задач. Результати для дисперсійного закону плазмонів та екранування статичного кулонівського потенціалу можуть бути безпосередньо перевірені на експерименті. Порівняння з експериментом, зокрема, дасть змогу визначити, наскільки застосовним є використане при обчисленнях однопетльове наближення.

Особистий внесок здобувача

В роботах [1,2] автором було проведено аналітичні та чисельні розрахунки для дискретного та неперервного спектру в графені в полі регуляризованого кулонівського центру і, з рівняння Бете-Солпітера в драбинному наближенні зі статичною поляризацією, знайдено критичну константу, за якої відбувається екситонна нестабільність.

В роботі [3] автором чисельно з рівняння на щілину з урахуванням динамічної поляризації було знайдено залежність критичної константи від числа ароматів в теорії, а також залежність щілини від імпульсу та константи зв'язку. В цій же роботі автором була аналітично отримана фазова діаграма в площині констант кулонівської та локальної взаємодії типу Гросса-Неве.

В роботах [4,5] автором чисельно та в першому порядку теорії збурень знайдено спектр і значення критичного потенціалу для квазічастинок в графені в однорідному магнітному полі, в полі потенціальної ями та кулонівського центру.

Робота [6] виконана автором одноосібно. В ній знайдено точний аналітичний вираз однопетльової поляризаційної функції в двошаровому графені. Використовуючи цей вираз отримано екранований кулонівський потенціал в двошаровому графені і дисперсійний закон колективних електронних збуджень (плазмонів).

Апробація роботи

Матеріали дисертації пройшли апробацію на семінарах ІТФ НАН України (Київ, 2009-2011), доповідалися на всеукраїнських конференціях: “Сучасні проблеми теоретичної фізики”, Київ, 24-26 грудня 2009, 11-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 1-3 червня 2011, та на міжнародних конференціях: Quantum theory from small to large scales, Les Houches, France, August 2-27, 2010, The 2nd International Conference for Young Scientists, Low Temperature Physics, Kharkiv, Ukraine, 6-10 June 2011, The 4th Workshop on Geometric Methods in Theoretical Physics, SISSA, Trieste, Italy, July 6-12, 2011.

Публікації

За матеріалами дисертації опубліковано 9 робіт, 6 із них складають статті в наукових журналах [1,2,3,4,5,6], а три роботи були опубліковані як тези конференцій [7,8,9].

Структура дисертаційної роботи

Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел, що містить 148 найменувань. Робота викладена на 135 сторінках машинописного тексту, містить 16 рисунків.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ

У Вступі обґрунтовано актуальність теми дисертації, сформульовано мету та задачі дослідження, оцінено наукову новизну та практичне значення отриманих результатів і коротко викладено зміст розділів дисертації. Також подано інформацію про особистий внесок автора та про зв'язок досліджень за темою дисертації з науковими темами Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України. Подано перелік наукових конференцій та семінарів, де робились доповіді за темою дисертації з метою апробації отриманих результатів.

В першому розділі розглядається екситонна нестабільність та її квантовомеханічний аналог — падіння на заряджений центр.

Підрозділ 1.1 має вступний та оглядовий характер, в ньому проаналізовано існуючу літературу та описано структуру розділу.

В *підрозділі 1.2* вивчається одночастинкова задача взаємодії електрона в графені з кулонівським центром. Як параметр вводиться скінченна щілина – Δ . Відповідний гамільтоніан системи

$$H = \sigma^3 \Delta + \frac{Ze^2}{r} - i\hbar v_F \sigma^1 \partial_x - i\hbar v_F \sigma^2 \partial_y,$$

де σ^i – матриці Паулі, v_F – швидкість Фермі, не є самоспряженим для великих значень заряду Ze (падіння на заряджений центр), тому вводиться регуляризація

кулонівського потенціалу, яка полягає у заміні його на постійний, для відстаней, менших за деякий радіус R , що фізично відповідає скінченним розмірам домішки.

Спектр є неперервним при $|E| > \Delta$ та дискретним – при $|E| < \Delta$. При зростанні заряду центру Z енергія дискретних рівнів наближається до енергії нижнього континууму $E = -\Delta$, а потім “пірнає” в нього (Рис. 1). При цьому дискретні стани перетворюються на резонанси зі скінченною шириною, які описують квазістаціонарні стани з комплексною енергією $\text{Im}E \neq 0$.

Такі стани відповідають процесам народження електрон-діркових пар з вакууму із подальшим розповсюдженням позитивно зарядженої дірки на нескінченність і екрануванням електроном заряду центра. Критичний заряд Z_c визначається з умови появи першого квазістаціонарного стану з ненульовою уявною частиною енергії. Він зростає при збільшенні Δ .

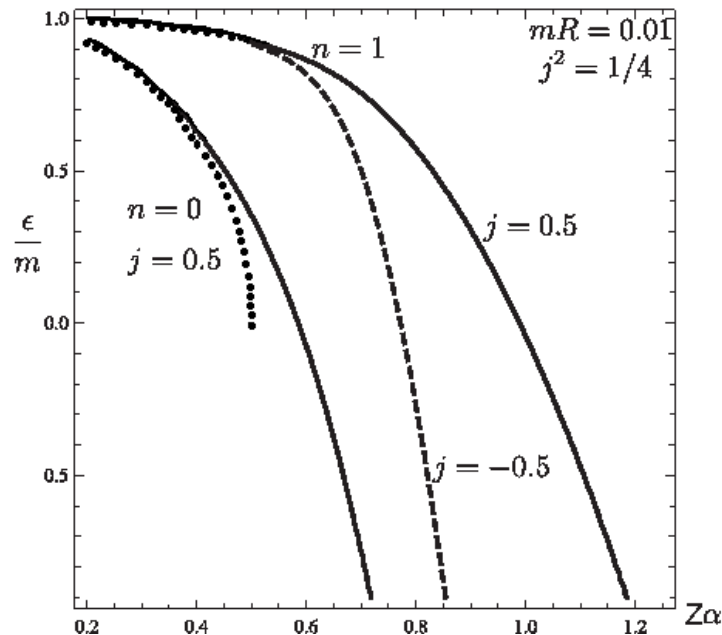


Рис. 1 Найнижчі енергетичні рівні як функція $Z\alpha$

На Рис.1 точковані лінії відповідають чистому кулонівському потенціалу (вони існують тільки до $Z\alpha < 1/2$); суцільні лінії відповідають чисельним розв'язкам для кутового моменту $j = 1/2$, $mR = 0.01$; пунктирні лінії – чисельним розв'язкам для $j = -1/2$, $mR = 0.01$; ($m = \Delta / \hbar v_F$).

Для безмасових квазічастинок в регуляризованому кулонівському потенціалі дискретні рівні відсутні для значень $Z\alpha < 1/2$, натомість при $Z\alpha > 1/2$ в спектрі починають з'являтися квазістаціонарні стани. Енергія квазістаціонарного стану для регуляризованого потенціалу має характерну експоненціальну залежність від заряду

$$E_n^0 = -\hbar v_F \frac{1.18 + 0.17i}{R} \exp\left[-\frac{\pi n}{\sqrt{Z^2 \alpha^2 - 1/4}}\right], \quad n = 1, 2, \dots$$

Аналітичні розрахунки, проведені в цьому ж підрозділі показали, що наявність

ферміонної щілини Δ модифікує енергію резонансу

$$E_n = E_n^{(0)} - \Delta + \frac{\Delta^2}{|E_n^{(0)}|} (0.24 + 0.20i),$$

зменшуючи $|\text{Im}E|$ і збільшуючи таким чином, стабільність системи.

В *підрозділі 1.3* розглядається екситонна нестабільність, яка є польовим аналогом явища падіння на центр. Спершу описується функціонал дії системи діраківських частинок, що відповідають квазічастинковим збудженням в графені:

$$S = \int dt d^2r \bar{\Psi}_a(t, \mathbf{r}) (i\gamma^0 \partial_t - iv_F \boldsymbol{\gamma} \nabla) \Psi_a(t, \mathbf{r}) - \frac{1}{2} \int dt dt' d^2r d^2r' \rho(t, \mathbf{r}) U_0(t-t', |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) \rho(t', \mathbf{r}'),$$

де Ψ — чотирьохкомпонентний діраківський спіно́р, $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^0$, γ -матриці $\gamma^\mu = \tau^3 \otimes (\sigma^3, i\sigma^2, -i\sigma^1)$ утворюють звідне представлення алгебри Дірака в 2+1 вимірах. Матриці Паулі τ, σ діють на просторі діраківських точок та підґраток, відповідно. Вводяться дві інші γ -матриці $\gamma^3 = i\tau_2 \otimes \sigma_0$, $\gamma^5 = i\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 = \tau_1 \otimes \sigma_0$, де σ_0 — одинична 2×2 матриця, $\rho(t, \mathbf{r}) = \bar{\Psi}_a(t, \mathbf{r}) \gamma^0 \Psi_a(t, \mathbf{r})$ — густина електронів, індекс a приймає значення $a = 1, \dots, N_f$, де N_f — кількість «ароматів», тут $N_f = 2$, що відповідає спіну електрона. $U_0(t, |\mathbf{r}|) = e^2 \delta(t) / (\kappa |\mathbf{r}|)$ — гола кулонівська взаємодія в середовищі з діелектричною проникністю κ , яка при врахуванні поляризації замінюється на наступну:

$$U_0(t, |\mathbf{r}|) \rightarrow U(t, |\mathbf{r}|) = \frac{e^2}{\kappa} \int \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^2k}{2\pi} \frac{\exp(-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r})}{|\mathbf{k}| + \Pi(\omega, \mathbf{k})},$$

де однопетльова поляризаційна функція дорівнює $\Pi(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\pi e^2 N_f}{4\kappa} \frac{\mathbf{k}^2}{\sqrt{\hbar^2 v_F^2 \mathbf{k}^2 - \omega^2}}$.

Розглядається рівняння Бете-Солпітера для електрон-діркового зв'язаного стану в драбинному наближенні при врахуванні статичної поляризації, тобто коли повна поляризація апроксимується виразом $\Pi(0, k)$:

$$\hat{\chi}(q, p) = \frac{2i\lambda}{(2\pi)^2} \int \frac{d^3k}{|\mathbf{q}-\mathbf{k}|} \gamma^0 S(k+p) \hat{\chi}(k, p) S(k-p) \gamma^0,$$

де $S(p)$ – вільний електронний пропагатор, $\hat{\chi}(k, p)$ – редукована амплітуда Бете-Солпітера в імпульсному просторі (хвильова функція зв'язаного стану), а

$\lambda = \frac{\alpha}{2(1 + \pi\alpha N_f / 4)}$ – ефективна константа електрон-електронної взаємодії з

урахуванням статичної поляризації.

Хвильова функція зв'язаного стану має наступну спіно́рну структуру

$$\hat{\chi}(q, p) = \chi_5(q, p) \gamma^5 + \chi_{05}(q, p) q^i \gamma^i \gamma^0 \gamma^5,$$

а рівняння Бете-Солпітера зводиться до системи інтегральних рівнянь на скалярні функції χ_5 , χ_{05} . Після чого із застосуванням деяких апроксимацій для ядер інтегральних рівнянь знаходиться розв'язок. При $\lambda > \lambda_c = 1/4$ (або еквівалентно

$\alpha > \alpha_c = 1.62$) розв'язок існує для чисто уявних (тахіонних) значень енергії:

$$E^2 = -\Lambda^2 \exp\left(-\frac{2\pi n}{\sqrt{\lambda - \lambda_c}} + 7.3\right), \quad n = 1, 2, \dots$$

де введено скінченне ультрафіолетове обрізання Λ , котре можна вибрати порядку π/a , де a — характерний розмір кроку ґратки, для графену $a = 0.246 \text{ nm}$. В роботі відзначається однакова експоненційна залежність енергії тахіона з відповідною залежністю енергії одночастинкових резонансів, що є наслідком масштабної інваріантності кулонівської взаємодії в обох задачах. Також зауважено, що критичне значення $\lambda_c = 1/4$ співпадало б з критичним значенням, отриманим в задачі надкритичного кулонівського центру $Z_c \alpha = 1/2$ в попередньому підрозділі, при ігноруванні ефектів поляризації.

Біфуркаційними методами знаходиться точне значення критичної константи, яке виявляється близьким до наближеного

$$\lambda_c = \frac{4\pi^2}{\Gamma^4(1/4)} \approx 0.23.$$

Наявність тахіонів вказує на нестабільність основного стану. Аргументується чому формування екситонного конденсату приводить до зникнення цієї нестабільності та генерації щілини у вільному графені.

В *другому розділі* детально досліджується генерація щілини в графені.

Підрозділ 2.1 має вступний та оглядовий характер, в ньому проаналізовано існуючу літературу та описано структуру розділу.

В *підрозділі 2.2* розглядається рівняння Швінгера-Дайсона для щілини. Із врахуванням динамічної поляризації біфуркаційними методами знаходиться критичне значення константи зв'язку, яке виявляється меншим, ніж у випадку статичної поляризації, і становить $\alpha_c = 0.92$. Також, на відміну від статичної поляризації, де

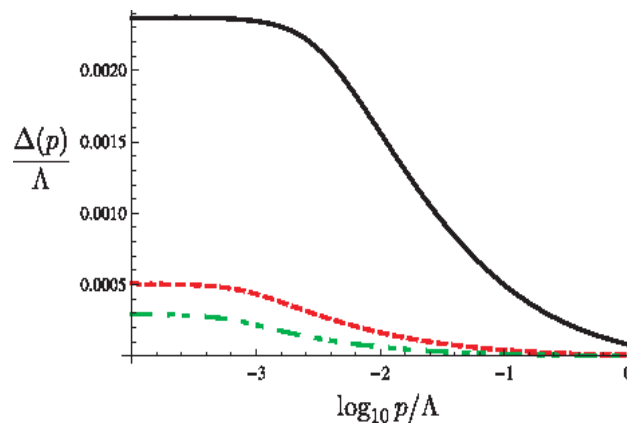


Рис. 2 Залежність від імпульсу розв'язку рівняння Швінгера-Дайсона: суцільна лінія для $\lambda = 0.3$, пунктирна лінія для $\lambda = 0.27$ і пунктирно-точкова лінія для $\lambda = 0.25$

критична константа зв'язку як формальна функція числа “ароматів” N_f мала розбіжність при $N_f \approx 2.53$, при врахуванні динамічної поляризації критична константа зв'язку залишається скінченною для скінченних N_f .

В *підрозділі 2.3* з чисельних розв'язків рівняння Швінгера-Дайсона отримано залежність щілини від імпульсу (Рис. 2). Для значень λ , використаних в Рис. 2, можна оцінити $\Delta(0) = 200\text{К}, 40\text{К}, 25\text{К}$ для $\lambda = 0.3, 0.27, 0.25$, відповідно.

Використовуючи деякі наближення для інтегральних ядер вдалося аналітично проаналізувати фазовий перехід з утворенням щілини. В зробленому наближенні критична константа $\lambda_c = 1/4$, а залежність щілини від константи зв'язку

$$\Delta(0) \sim \Lambda \exp\left(-\frac{\pi}{\sqrt{\lambda - \lambda_c}}\right),$$

є аналогічною відповідним залежностям в попередньому розділі. Відповідно, сам фазовий перехід є фазовим переходом Березинського-Костерліца-Таулеса, що є наслідком масштабної інваріантності системи з кулонівською взаємодією.

В *підрозділі 2.3*, мотивуючись тим, що в чисельних моделюваннях на ґратці [3*] фазовий перехід виявився фазовим переходом другого роду, початкову неперервну теорію було доповнено іррелевантними членами, наявність яких впливає з існування ґратки. Такі члени моделюються чотириферміонною взаємодією типу Гроса-Неве. Аналізуючи рівняння Швінгера-Дайсона для модифікованої взаємодії, знаходиться фазова діаграма системи (Рис. 3). Фази з порушеною та непорушеною симетріями розділені кривими:

$$\tilde{g} = \frac{1}{4N_f} \left(1 + \sqrt{1 - \lambda/\lambda_c}\right)^2, \quad \lambda \leq \lambda_c = \frac{1}{4}; \quad \tilde{g} < \frac{1}{4N_f}, \quad \lambda = \lambda_c = \frac{1}{4}.$$

Тут \tilde{g} — ефективна константа взаємодії Гроса-Неве, $\lambda = \frac{\alpha}{2(1 + \pi N_f \alpha / 4)}$, а $N_f = 2$ — фізична кількість “ароматів”.

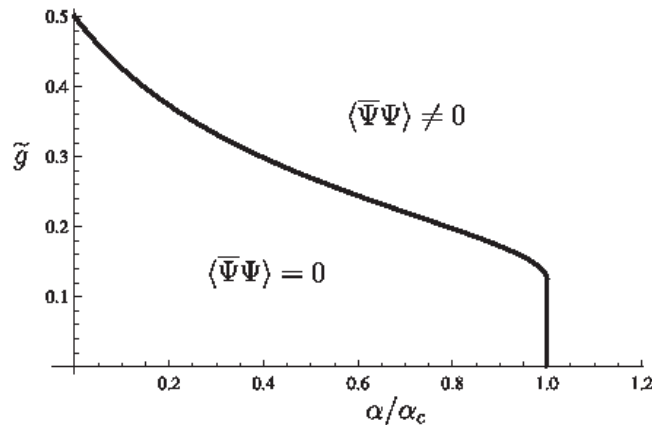


Рис. 3 Фазова діаграма в площині константи взаємодії Гроса-Неве \tilde{g} та нормованої електрон-електронної константи взаємодії

Фазовий перехід вздовж верхньої частини кривої є фазовим переходом другого роду, а відповідні критичні індекси $\nu = \frac{1}{2\omega}$, $\delta = \frac{3/2 + \omega}{3/2 - \omega}$, $\beta = \frac{1}{2\omega} \left(\frac{3}{2} - \omega \right)$, $\gamma = 1$, де $\omega = \sqrt{\lambda_c - \lambda}$, є близькими до отриманих в ґраткових симуляціях [3*].

В *третьому розділі* розглядається вплив зовнішнього магнітного поля на критичну константу електронної взаємодії в графені.

Підрозділ 3.1 має вступний та оглядовий характер, в ньому проаналізовано існуючу літературу та описано структуру розділу. Зокрема, аргументується, що магнітне поле має каталізувати формування щілини і для будь-якого притягуючого потенціалу критичне значення константи зв'язку має прямувати до нуля.

В *підрозділі 3.2* досліджується поведінка спектру електронів в полі радіальної ями розміру r_0 та глибини V_0 в магнітному полі B . Через наявність потенціалу рівні Ландау перестають бути виродженими і з ростом V_0 все більше рівнів перетинають енергетичний рівень $E = -\Delta$ (Рис. 4).

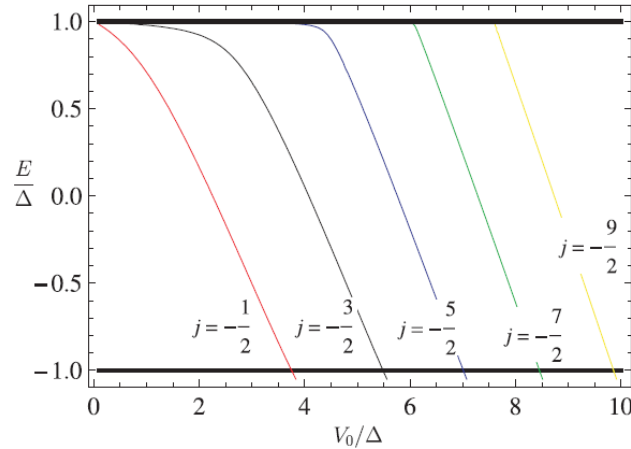


Рис. 4 Залежність нижнього рівня Ландау від V_0 / Δ для різних кутових моментів j

У відповідній вторинно квантованій теорії це означало б, що вакуум стає нестабільним відносно формування електрон-діркових пар. Критичний потенціал V_{0cr} визначається як потенціал, для якого відбувається перше занурення. З рівняння на V_{0cr} визначаються його аналітичні властивості, зокрема для ненульового магнітного поля критичний потенціал прямує до нуля для нульової щілини Δ , в той же час при $B=0$ він прямує до скінченного значення: $V_{0cr} = 2.41\hbar v_F / r_0$. Також суттєвою відмінністю енергетичного спектру за наявності магнітного поля є відсутність резонансних станів. Це відбувається через наявність додатного квадратичного члену в потенціалі ефективного рівняння Шредінґера для однієї з компонент спінора, що не дозволяє частинкам йти на нескінченність.

В *підрозділі 3.3* досліджується поведінка спектру електронів в полі кулонівського потенціалу, регуляризованого на відстані R , в магнітному полі. Результати отримано чисельно та в першому порядку за теорію збурень.

На Рис. 4 зображено критичну кулонівську константу зв'язку $Z_c \alpha$ як

функцію щілини для нульового (пунктирна лінія) $Z_c\alpha = \frac{1}{2} + \frac{\pi^2}{\ln^2(0.21\Delta R / \hbar v_F)}$, та

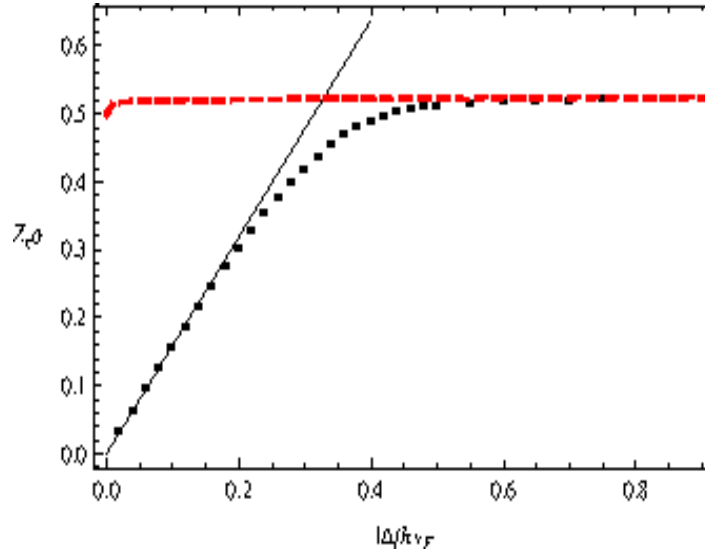


Рис.4 Критична кулонівська константа зв'язку $Z_c\alpha$ як функція щілини

ненульового магнітного поля (точкова чорна лінія). Прямая чорна лінія відповідає критичній кулонівській константі в першому наближенні теорії збурень $Z_c\alpha = 2\sqrt{2}\Delta l / (\sqrt{\pi}\hbar v_F)$, де l — магнітна довжина.

Подібно до випадку потенціальної ями в магнітному полі, критичний заряд прямує до нуля при $\Delta \rightarrow 0$. Це означає, що магнітне поле суттєво впливає на задачу кулонівського центру в графені, роблячи будь-який заряд надкритичним.

В **четвертому розділі** наведено розрахунки і проаналізовано однопетльову поляризацію двошарового графену.

Підрозділ 4.1 має вступний та оглядовий характер, в ньому проаналізовано існуючу літературу та описано структуру розділу. Зокрема, показано, що спектр двошарового графену описується чотирьохзонною моделлю, низько енергетичні збудження в якій мають параболічний характер, як в звичайному металі, а високоенергетичні збудження є лінійними, як в моношаровому графені. Аргументується важливість визначення поляризації саме в двошаровому графені.

В *підрозділі 4.2* наводяться обчислення поляризації в наближенні випадкових фаз. В результаті вдається записати компактний вираз для поляризації в елементарних функціях.

В *підрозділі 4.3* аналізується довгохвильова та статична границі поляризації. Статична поляризація, нормована на густину станів на поверхні Фермі, порівнюється з відповідними значеннями в моношарі графену та в двошаровій параболічній моделі двошарового графену. Показано, що поляризаційна функція, обчислена в 4-зонній моделі, має розрив при $k = 2k_F$, подібно до того, як це було в 2-зонній моделі, однак, вона не прямує до постійного значення при великих імпульсах. Натомість вона зростає лінійно, як і у випадку моношару графену. Для малих допущень поляризаційна функція подібна до поляризаційної функції в 2-

зонній моделі і прямує до поляризації моношару при хімічному потенціалі порядку константи перескоку між шарами графену $t = 0.4\text{eV}$.

Також обчислюється модифікація закону Кулона. При скінченному допуванні поляризація має розрив при $k = 2k_F$, отже, на великих відстанях потенціал поводить себе як

$$V(r) \sim \frac{1}{r} \frac{\sin(2rk_F)}{rk_F}, rk_F \rightarrow \infty.$$

Просторові осциляції з частотою $2k_F$ є звичайними фріделівськими осциляціями. При нульовому допуванні розрив відсутній і основна асимптотика визначається довгохвильовою асимптотикою поляризаційної функції. Маємо

$$V(r) \sim \frac{1}{r} \frac{1}{(rt)^2}, rt \rightarrow \infty.$$

Довгохвильова границя поляризації дає змогу визначити плазмонні моди, які для різних відношень хімічного потенціалу μ до константи перескоку t зображені на Рис. 5. На графіках (а), (b), (c) представлено дисперсійні співвідношення (чорні суцільні лінії) для плазмонів у вільному графені для значень електронної густини $\mu/t = 0.6$, $\mu/t = 0.3$, і $\mu/t = 0.05$, відповідно. Чорні пунктирні лінії описують класичний плазмон

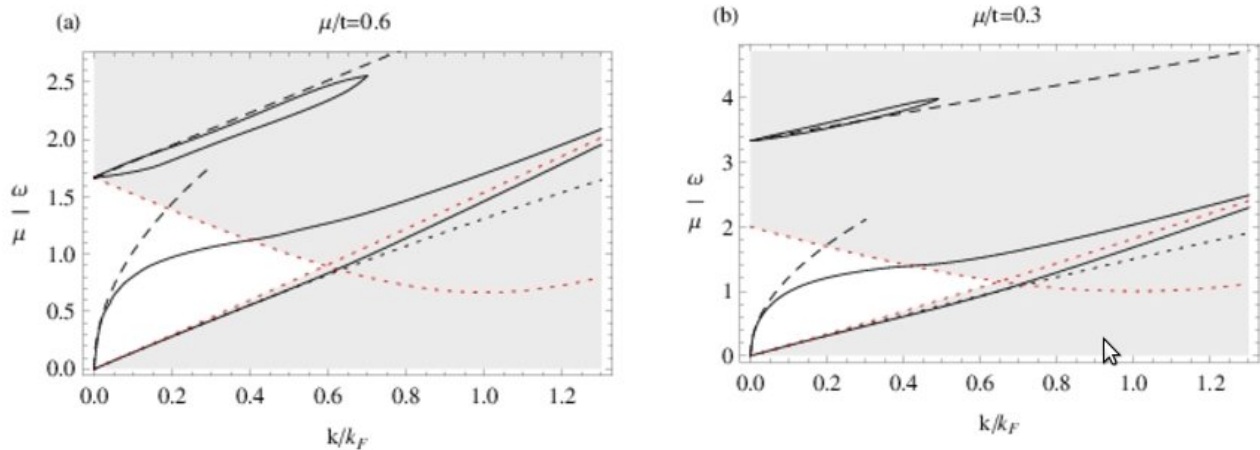
$$\omega(k) = \sqrt{e^2 k q \frac{\partial E_q}{\partial q} \Big|_{q=q_F}} = \sqrt{2k e^2 \frac{\mu(\mu+t)}{\mu+2t}}$$

та високоенергетичний плазмон

$$\omega(k) = t + \frac{e^2 N_f}{2\kappa} k \log\left(1 + \frac{2\mu}{t}\right).$$

Чорні точковані лінії відповідають додатковим низькоенергетичним плазмонам

$$\omega(k) = \frac{2k(t+\mu)}{t+2\mu} - \frac{k^2 t^2 \mu(t+\mu)^2}{(t+2\mu)^3}$$



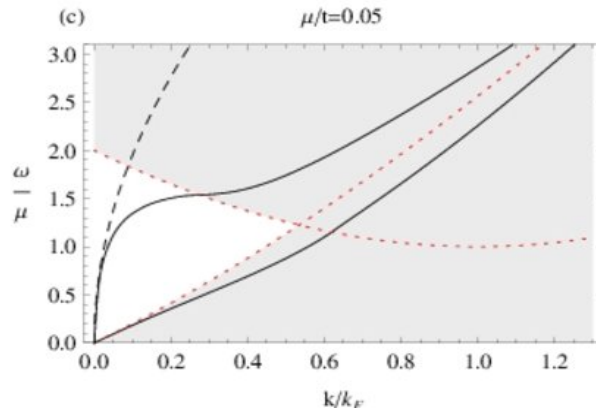


Рис. 5. Дисперсійні співвідношення для плазмонів у вільному графені

Заповнені області показують зони з ненульовою уявною частиною поляризації, границі яких (сірі точкові лінії) визначаються рівняннями

$$\omega_{\pm}(k) = \sqrt{\frac{t^2}{4} + (k \pm k_F)^2} - \left| \frac{t}{2} \pm \mu \right|,$$

що описує границі континууму одночастинкових збуджень (затухання Ландау). На відміну від звичайного 2-вимірною електронного газу, плазмони починають затухати за менших імпульсів завдяки міжзонним переходам.

Нарешті, у **Висновках** підсумовуються основні результати роботи.

ВИСНОВКИ

1. Досліджено вільні квазічастинкові збудження в графені в полі кулонівського центру. Знайдено критичний заряд центру, при перевищенні якого система стає нестабільною. Ця нестабільність, відома також від назвою “падіння на центр”, полягає в появі квазістаціонарних рівнів з комплексними значеннями енергії. Енергії квазістаціонарних рівнів у випадку безмасових збуджень характеризуються суттєво-сингулярним типом залежності від константи зв'язку, що є наслідком масштабної інваріантності кулонівського потенціалу. Показано, що наявність щілини в спектрі квазічастинок стабілізує систему, зменшуючи уявну частину енергії квазістаціонарних рівнів, збільшуючи таким чином їх час життя. Цей результат вказує на те, що кулонівська взаємодія може привести до формування щілини в спектрі квазічастинок навіть якщо вона була спочатку відсутня. Для квазічастинкових збуджень, що взаємодіють за законом Кулона, досліджено нестабільність в екситонному каналі. Знайдено критичну константу зв'язку, при якій в системі з'являється тахіонне збудження. Тахіонні стани грають роль квазістаціонарних станів в задачі надкритичного кулонівського центру і приводять до перебудови основного стану та формування екситонного конденсату. Тахіонна нестабільність є польовим аналогом “падіння на центр”, а критична константа зв'язку – аналогом критичного кулонівського заряду. Отже, аналогічна фізика, обумовлена сильною кулонівською взаємодією в квантовомеханічній та польовій задачах, вказує на правильний якісний опис навіть в драбинному наближенні, яке використовувалось для обчислень в багаточастинковому випадку.

2. Детально досліджено генерацію щілини в графені. Зокрема, враховано ефекти динамічної поляризації, що приводить до зниження критичної константи від $\alpha_c = 1.62$ в статичному випадку до $\alpha_c = 0.92$. Показано, що врахування локальної чотирьохферміонної взаємодії дозволяє правильно описати фазовий перехід у фазу зі щілиною. Знайдено фазову діаграму та розраховано критичні індекси екситонного фазового переходу, які виявились близькими до відповідних значень, отриманих в квантових монте-карлівських симуляціях.

3. Досліджено вплив магнітного поля на генерацію щілини. Розглядалися невзаємодіючі електрони в полі радіальних потенціалів. Так, для потенціалу радіальної ями аналітично, а для кулонівського центру чисельно було показано, що зовнішнє магнітне поле знижує до нуля значення критичної константи, при якому відбувається зародження нестабільності. Цей результат є квантовомеханічним аналогом явища магнітного каталізу в графені. По аналогії з випадком без магнітного поля можна очікувати, що нестабільність буде присутня і в польовій задачі.

4. Знайдено аналітичний вираз однопетльової поляризації в двошаровому графені в загальній чотирьохзонній моделі при довільних значеннях частоти, імпульсу та рівня допущання. Проаналізовано статичну та довгохвильову границі поляризації, що дозволило знайти екранований кулонівський потенціал та дисперсію плазмонів, відповідно.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Gamayun O. V. Supercritical Coulomb Center and Excitonic Instability / O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // Phys. Rev. B. - 2009. - Vol. 80. - P. 165429.
2. Gamayun O. V. Excitonic Instability and Gap Generation in Monolayer Graphene / O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // Ukrainian Journal of Physics. - 2010. - Vol. 55, No. 1, - P. 95-103.
3. Gamayun O. V. Gap generation and semimetal-insulator phase transition in graphene / O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // Phys. Rev. B. - 2010. - Vol. 81. - P. 075429.
4. Gamayun O. V. Magnetic field driven instability of charged center in graphene / O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // Phys. Rev. B. - 2011. - Vol. 83. - P. 235104.
5. Gamayun O. V. Dirac Electrons in a Planar Potential Well in a Magnetic Field / O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // Ukrainian Journal of Physics. - 2011. - Vol. 56, No. 7, - P. 688-693.
6. Gamayun O. V. Dynamical screening in bilayer graphene / O. V. Gamayun // Phys. Rev. B. - 2011. - Vol. 84. - P. 085112.
7. Gamayun O. V. Supercritical Coulomb center, excitonic instability and gap generation in graphene / O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // Сучасні проблеми теоретичної фізики, 24-26 грудня 2009: Програма та тези доповідей конференції молодих вчених. - Україна, Київ, 2009. - С. 45.

8. Гамаюн О. В. Нестабільність надкритичного кулонівського центру індукована магнітним полем в графені / О. В. Гамаюн, Е. В. Горбар, В. П. Гусинін // 11-а Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 1-3 червня 2011: збірка тез. - Україна, Львів, 2011. - С. 53.

9. Gamayun O. V. Dynamical screening in bilayer graphene / O. V. Gamayun // Low temperature physics: 2nd International Conference for Young Scientists, 6-10 June: Conference programme and Abstract book. - Ukraine, Kharkov, 2011. - P. 136.

СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1*. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al. // Science. - 2004. - Vol. 306, No. 5696. - P. 666-669.

2*. Young A. Quantum interference and carrier collimation in graphene heterojunctions / A. Young, P. Kim // Nature Physics. - 2009. - Vol. 5. - P. 222.

3*. Drut J.E. Lattice field theory simulations of graphene / J. E. Drut, T. A. Lande // Phys. Rev. B. - 2009. - Vol. 79. - P. 165425.

АНОТАЦІЯ

Гамаюн О. В. Електрон-електронна взаємодія та генерація щілини в графені. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. – Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ, 2011.

Дисертація присвячена розгляду електрон-електронної взаємодії в графені. Знайдено критичне значення константи електрон-електронної взаємодії, при якому в системі відбувається екситонна конденсація, яка приводить до генерації щілини в спектрі квазічастинок. Продемонстровано зв'язок явища генерації щілини з явищем падіння на надкритичний заряджений центр. Чисельно отримано залежність згенерованої щілини від імпульсу. При врахуванні додаткової чотирьохферміонної взаємодії знайдено фазову діаграму та розраховано критичні індекси екситонного фазового переходу. Показано, що за наявності магнітного поля значення критичної константи зменшується до нуля. Для двошарового графену знайдено аналітичний вираз однопетльової поляризації в чотирьохзонній моделі при довільних значеннях частоти, імпульсу та рівня допування. Знайдено екранований кулонівський потенціал та закон дисперсії плазмонів.

Ключові слова: графен, екситонна нестабільність, генерація щілини, магнітний каталіз, поляризація.

АННОТАЦИЯ

Гамаюн А. В. Электрон-электронное взаимодействие и генерация щели в графене. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. – Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины, Киев, 2011.

Диссертация посвящена рассмотрению электрон-электронного взаимодействия в графене. Найдено критическое значение константы электрон-электронного взаимодействия, при превышении которого в системе происходит экситонная конденсация, приводящая к генерации щели в спектре квазичастиц. Продемонстрирована связь явления генерации щели с явлением падения на сверхкритический заряженный центр. Численно получена зависимость сгенерированной щели от импульса. При учете дополнительного четырехфермионного взаимодействия найдено фазовую диаграмму и посчитаны критические индексы экситонного фазового перехода. Показано, что при наличии магнитного поля значение критической константы уменьшается до нуля. Для двухслойного графена найдено аналитическое выражение однопетлевой поляризации в четырехзонной модели для произвольных значений частоты, импульса и уровня допирования. Найдены экранированный кулоновский потенциал и закон дисперсии плазмонов.

Ключевые слова: графен, экситонная нестабильность, генерация щели, магнитный катализ, поляризация.

ABSTRACT

Gamayun O.V. Electron-electron interaction and gap generation in graphene – Manuscript.

Thesis for the Doctor of Philosophy degree (Candidate of Science in Physics and Mathematics) in speciality 01.04.02 – theoretical physics. – Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2011.

The dissertation is devoted to theoretical investigation of the electron-electron interaction in graphene. The problem of a gapped electron interacting with the Coulomb center is considered in graphene. It is shown that the Hamiltonian of the problem is not self-adjoint and a regularization of the Coulomb potential is required. As the charge of the regularized potential increases, the energies of discrete states approach the negative energy continuum and then dive into it transforming into resonances with finite lifetime, which can be described as quasistationary states with complex energies. The presence of such states corresponds to a rearrangement process when an electron-hole pair is created from the vacuum. Meanwhile, the positively charged hole of the pair goes to infinity, the electron is coupled to the Coulomb center, thus shielding the charge of the latter. The critical charge is determined as the threshold of the appearance of a nonzero imaginary part of the energy and increases with the increase of gap. The presence of a nonzero gap of quasiparticles decreases the imaginary part of the energy of quasistationary states and stabilizes the system. For gapless quasiparticles with strong Coulomb interaction, the Bethe-Salpeter equation for the electron-hole bound state is solved and a tachyonic solution for strong enough coupling $\alpha = e^2 / \kappa \hbar v_F$ is found leading to the excitonic instability of the system. In the random-phase approximation, the critical coupling is estimated to be $\alpha_c = 1.62$ and is an analogue of the critical charge in the Coulomb center problem. It is argued that the excitonic instability should be resolved through the formation of an electron-hole condensate and gap generation in the quasiparticle spectrum.

The gap generation is considered and studied in suspended clean graphene in the continuum model for quasiparticles with the Coulomb interaction. The gap equation with the dynamical polarization function is solved and it is shown that, comparing to the case of the static polarization function, the critical coupling constant lowers to the value $\alpha_c = 0.92$, which is close to that obtained in lattice Monte Carlo simulations. It is argued that the effective continuum theory for quasiparticles in graphene in addition to the Coulomb interaction should contain some certain contact four-fermion interaction terms that arise from the microscopic graphene lattice interactions. In order to take into account these four-fermion interaction terms, the simplest Gross–Neveu interaction term is considered. It is shown that the presence of this interaction term plays an important role. At first, instead of a critical point one has a critical line in the plane of electromagnetic and four-fermion coupling constants separating the symmetric and symmetry broken phases. At second, the inclusion of this term changes the order of phase transition from infinite to the second order along a part of the upper part of critical line. Third, it lowers the value of the critical electromagnetic coupling comparing to the case of the purely Coulomb interaction. At last, the critical indices stay closer to those obtained in lattice simulations.

Further, the influence of the magnetic field is explored. It is shown that a magnetic field dramatically affects the problem of supercritical charge in graphene making any charge in gapless theory supercritical. The cases of radially symmetric potential well and Coulomb center in a homogeneous magnetic field are considered. It is shown that, at some critical value of the potential strength, the lowest empty energy level crosses the topmost filled negative energy level leading to an instability of the system. The critical potential strength decreases with decrease of quasiparticle gap and becomes zero in the gapless case. The case of the radially symmetric symmetric potential is solved analytically, while the case of the Coulomb center is treated numerically as well as analytically in the perturbation theory. It is argued that the magnetically induced instability of the supercritical Coulomb center can be considered as a quantum mechanical counterpart of the magnetic catalysis phenomenon in graphene.

Finally, the polarization function in bilayer graphene in the 4-band model for arbitrary values of frequency, momentum and doping is calculated. Calculations are performed within random phase approximation. The final result can be expressed in terms of the elementary functions. Through the analysis of the polarization as a function of the interlayer coupling the expressions for the monolayer graphene polarization (weak coupling) as well as for bilayer graphene in the 2-band model (strong coupling) are recovered. In the case where doping is smaller than the interlayer coupling the polarization function in the static and long-wavelength limits is found. Using these results, the improved Coulomb interaction and the dispersion relation for the plasmon mode are obtained.

Key words: graphene, excitonic instability, gap generation, magnetic catalysis, polarization.

Гамаюн Олександр Володимирович

Електрон-електронна взаємодія та генерація щілини в графені
(Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата
фізико-математичних наук)

Зам. – 1 Формат 60 x 84/16 Обл.-вид. арк. - 0.93

Підписано до друку 05.01.2012 р. Тираж 100 прим.

Поліграфічна дільниця ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України,
03680, м. Київ, вул. Метрологічна, 14-б