

Магический радиус квантовой точки двухслойного AA графена

Сбойчаков А.О. *¹, Рожков А.В.¹, Рахманов А.Л.¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук

Статья поступила в редакцию 01.09.2022

Одобрена после рецензирования 19.10.2022

Принята к публикации 31.10.2022

Аннотация

В статье исследуются электронные свойства квантовой точки, изготовленной из двухслойного AA графена круглой формы. Наблюдается дискретный набор радиусов точки, при которых электронные состояния с низкой энергией вырождены по квантовому числу, характеризующему четность волновой функции относительно перестановки слоев. По аналогии с “магическими углами” в подкрученном двухслойном графене мы называем эти радиусы “магическими”. Такая особенность уникальна для структур AA и связана со специфической слоевой симметрией двухслойного AA графена: четность самого высокого занятого уровня энергии изменяется с симметричного по индексу слоя на антисимметричный, когда радиус точки AA равен ее магическому значению. Исследуется аналогия в электронной структуре между подкрученным двухслойным графеном при магическом угле поворота и квантовой точкой AA графена с магическим радиусом. Эта аналогия может быть полезна для теоретического описания электронных свойств подкрученного двухслойного графена.

Ключевые слова: двухслойный графен, электронная структура, квантовая точка

Введение

В последние годы мы стали свидетелями большого успеха в изготовлении двумерных (2D) ван-дер-ваальсовых гетероструктур. Современный уровень технологий позволяет обеспечить исключительную степень контроля над геометрией и составом искусственно созданных 2D-систем. Эти достижения открывают новые направления исследований и ставят оригинальные вопросы как перед теоретиками, так и перед экспериментаторами. Руководствуясь этими факторами, в данной статье мы исследуем интересный мезоскопический объект - квантовая точка, вырезанная из двухслойного AA графена (AA-BLG). Двухслойный AA графен представляет собой один из двух типов высокосимметричной упаковки двухслойного графена (другой тип упаковки называется AB или фаза Бернала) [1]. Хотя AA-BLG менее изучен экспериментально, существуют работы [2] - [5], рассказывающие об изготовлении образцов AA-BLG.

В работе исследуются электронные свойства квантовых точек круглой формы, изготовленных из двухслойного AA графена (AA-QD). Показывается, что существует дискретный набор радиусов точек, для которых электронные состояния точки являются вырожденными. По аналогии с “магическими углами” в теории подкрученного двухслойного графена (tBLG) мы называем эти радиусы “магическими”.

Вырождение при магическом радиусе происходит из-за исчезновения щели между самым низким пустым и самым высоким занятым одноэлектронными состояниями. Такое свойство является эксклюзивным только для AA-QD. Это связано со специфическим топологическим свойством киральных электронов в AA-BLG: симметрия волновой функции самого высокого занятого уровня меняется с симметричного относительно перестановки слоев на антисимметричный, когда радиус AA-QD равен его магическому значению.

Идентификация последовательности магических радиусов является основным результатом этой работы. Вырождение основного состояния квантовой точки позволяет стабилизировать экзотические упорядоченные состояния, обусловленные взаимодействием. Кроме того, можно ожидать, что наше исследование будет полезно для дальнейшего теоретического описания электронных свойств tBLG с магическими значениями угла подкрутки. Мы утверждаем, что существует простая связь между магическими углами поворота tBLG и магическими радиусами AA-QD. Это соответствие основано

* Автор, ответственный за переписку: Артём Олегович Сбойчаков, sboycha@mail.ru

на том факте, что образец tBLG можно рассматривать как структуру, состоящую из чередующихся областей с AA и AB упаковками, при этом электроны проводимости находятся в основном в областях с AA упаковкой [1].

Гамильтониан квантовой точки двухслойного AA графена

При исследовании электронных свойств AA-QD мы будем работать в низкоэнергетическом континуальном приближении. В однослойном графене электроны на низких энергиях описываются безмассовым гамильтонианом Дирака, где компоненты спинора ψ_α соответствуют волновым функциям электрона в подрешетке $\alpha = a, b$. Так, гамильтониан для электронов с импульсами в окрестности дираковской точки \mathbf{K} (долина $\xi = +1$) имеет вид

$$\hat{H}^{SLG} = -iv_F \boldsymbol{\sigma} \nabla, \quad (1)$$

где ∇ - матрицы Паули, а v_F - скорость Ферми. В окрестности точки \mathbf{K}' (долина $\xi = -1$) имеем

$$\hat{H}^{SLG} = -iv_F \boldsymbol{\sigma}^* \nabla \quad (2)$$

В двухслойном AA графене имеется два графеновых слоя, при этом атомы в разных слоях, но в одной подрешетке располагаются один над другим. Волновая функция электрона в каждой долине описывается четырехкомпонентным спинором вида

$$\Psi_\xi = \begin{pmatrix} \psi_{\xi 1a} \\ \psi_{\xi 1b} \\ \psi_{\xi 2a} \\ \psi_{\xi 2b} \end{pmatrix} \quad (3)$$

Предполагая, что перескоки электронов между слоями осуществляются только между ближайшими атомами углерода в разных слоях (амплитуда перескока t_0), гамильтониан двухслойного AA графена в континуальном приближении можно записать в виде

$$\hat{H}_\xi = \begin{pmatrix} 0 & -i\partial_x - \xi\partial_y & 1/l & 0 \\ -i\partial_x + \xi\partial_y & 0 & 0 & 1/l \\ 1/l & 0 & 0 & -i\partial_x - \xi\partial_y \\ 0 & 1/l & -i\partial_x + \xi\partial_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

В этом уравнении используются безразмерные единицы энергии и длины. Энергия измеряется в единицах t_0 , а длина в единицах $l = v_F/t_0$. Подставляя характерные значения амплитуд перескоков электронов внутри слоя и между слоями, $t = 2.7$ эВ, $t_0 = 0.35$ эВ, а также имея в виду, что $v_F = 3ta_0/2$, получим: $l \approx 12a_0$, где a_0 - расстояние между ближайшими атомами углерода в графене.

Волновая функция квантовой точки двухслойного AA графена. Граничные условия и уровни энергии

Волновое уравнение $\hat{H}_\xi \Psi_\xi = E \Psi_\xi$ есть система четырех дифференциальных уравнений первого порядка. Для круговой квантовой точки удобнее всего работать в полярных координатах $x = r \cos \theta$, $y = r \sin \theta$. В общем виде решение есть

$$\begin{cases} \psi_{\xi 1a} = e^{i\mu\xi\theta} [C_\mu J_\mu((1-E)r) + B_\mu J_\mu((1+E)r)] \\ \psi_{\xi 1b} = -ie^{i(\mu+1)\xi\theta} [C_\mu J_{\mu+1}((1-E)r) - B_\mu J_{\mu+1}((1+E)r)] \\ \psi_{\xi 2a} = e^{i\mu\xi\theta} [C_\mu J_\mu((1-E)r) - B_\mu J_\mu((1+E)r)] \\ \psi_{\xi 2b} = -ie^{i(\mu+1)\xi\theta} [C_\mu J_{\mu+1}((1-E)r) + B_\mu J_{\mu+1}((1+E)r)] \end{cases}, \quad (5)$$

где μ - орбитальный момент частицы, $J_\mu(z)$ - функция Бесселя, а C_μ и B_μ - комплексные коэффициенты, которые находятся из граничных условий и условия нормировки. В случае, когда $B_\mu = 0$, волновая функция симметрична относительно перестановки слоев, а если $C_\mu = 0$, то она антисимметрична.

Радиальная компонента тока в каждой долине, $j_{\xi r} = \sigma_x \cos \theta + \xi \sigma_y \sin \theta$, должна быть равна нулю на границе точки, $r = R$. Следуя работе [6], сформулируем граничные условия для волновой функции (5). Мы интересуемся низкоэнергетическим спектром. Поэтому для достаточно гладкой границы междолинным рассеянием можно пренебречь. При этих предположениях граничные условия можно записать в виде

$$\left[\widehat{M}_\xi(\theta) - I \right] \psi_\xi(R, \theta) = 0 \quad (6)$$

для любого угла θ . Матрица $\widehat{M}_\xi(\theta)$ равна

$$\widehat{M}_\xi(\theta) = \begin{pmatrix} m_{11} & im_{12}e^{-i\xi\theta} & im_{13}e^{if} & m_{14}e^{i(f-\xi\theta)} \\ -im_{12}e^{i\xi\theta} & -m_{11} & -m_{14}e^{i(f+\xi\theta)} & -im_{13}e^{if} \\ -im_{13}e^{-if} & -m_{14}e^{-i(f+\xi\theta)} & m_{33} & im_{34}e^{-i\xi\theta} \\ m_{14}e^{i(\xi\theta-f)} & im_{13}e^{-if} & -im_{34}e^{i\xi\theta} & -m_{33} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где фаза f произвольна, а вещественные параметры $m_{\alpha\beta}$ связаны между собой соотношениями

$$\begin{cases} m_{11}^2 + m_{12}^2 + m_{13}^2 + m_{14}^2 = 1 \\ m_{33}^2 + m_{34}^2 + m_{13}^2 + m_{14}^2 = 1 \\ m_{13}(m_{11} + m_{33}) - m_{14}(m_{12} + m_{34}) = 0 \\ m_{13}(m_{12} - m_{34}) + m_{14}(m_{11} - m_{33}) = 0 \end{cases} \quad (8)$$

Матрица (7) с условиями (8) есть общий вид унитарной и эрмитовой матрицы 4x4, которая антикоммутирует с радиальной компонентой оператора тока $j_{\xi r}$. Последнее условие гарантирует, что ток на границе точки обнуляется для каждого слоя графена.

Рассмотрим здесь простейший случай, когда недиагональные элементы матрицы $\widehat{M}_\xi(\theta)$, перепутывающие слои, равны нулю, т.е. $m_{13} = m_{14} = 0$. При этом будем считать, что $m_{11} = m_{33} = \cos \phi$, а $m_{12} = m_{34} = \sin \phi$, где $-\pi < \phi < \pi$ - феноменологический параметр, определяемый детальной структурой границы точки. В принципе, ϕ может быть функцией θ , но в статье такая возможность не рассматривается.

Уравнение (6) формирует систему четырех линейных уравнений для двух независимых констант B_μ и C_μ . Однако из условий, наложенных на матрицу \widehat{M}_ξ , следует, что $\det \left[\widehat{M}_\xi(\theta) - I \right] = 0$, в результате чего ранг системы редуцируется до двух. Это позволяет однозначно найти энергетический спектр квантовой точки. Оказывается, что уровни энергии удовлетворяют одному из двух следующих уравнений:

$$\begin{cases} J_\mu((1-E)R) - \text{ctg} \frac{\phi}{2} J_{\mu+1}((1-E)R) = 0 \Rightarrow B_\mu = 0, \\ J_\mu((1+E)R) + \text{ctg} \frac{\phi}{2} J_{\mu+1}((1+E)R) = 0 \Rightarrow C_\mu = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Если уровень энергии удовлетворяет верхнему уравнению, то волновая функция оказывается симметричной относительно перестановки слоев. Если же уровень энергии удовлетворяет второму из уравнений (9), то волновая функция, соответствующая этому уровню, антисимметрична относительно перестановки слоев. Таким образом, можно ввести квантовое число $c = \pm 1$, характеризующее четность волновой функции (если $c = +1$, то волновая функция симметрична относительно перестановки слоев, а если $c = -1$, то волновая функция антисимметрична). Помимо этого, существуют еще два квантовых числа: орбитальный момент μ и главное квантовое число n ($-\infty < n < \infty$). Уровень энергии, характеризующийся квантовыми числами n , μ и c есть

$$E_{\mu;n}^c(R) = c + \frac{z_{\mu;n}}{R}, \quad (10)$$

где $z_{\mu;n}$ - n -тый корень характеристического уравнения

$$J_\mu(z) + \text{ctg} \frac{\phi}{2} J_{\mu+1}(z) = 0. \quad (11)$$

Будем считать, что все $z_{\mu;n}$ упорядочены в порядке возрастания главного квантового числа n , при этом $z_{\mu;n}$ есть первый положительный корень уравнения (11).

Магические радиусы

Рассмотрим зависимость низкоэнергетических уровней энергии как функций радиуса квантовой точки R . Для произвольного ϕ , вообще говоря, спектр не показывает электрон-дырочной симметрии. Электрон-дырочная симметрия, однако, существует при $\phi = 0, \pi$ и при $\phi = \pi/2$. При $\phi = \pi$ имеем на границе $\psi_{\xi ia}(R, \theta) = 0$, а при $\phi = 0$, $\psi_{\xi ib}(R, \theta) = 0$. Если же $\phi = \pi/2$, то на границе имеет место равенство $|\psi_{\xi ia}(R, \theta)| = |\psi_{\xi ib}(R, \theta)|$. На рисунке 1 представлена зависимость первых нескольких близких к нулю уровней энергии как функций радиуса точки R , рассчитанных при $\phi = \pi/2$.

Поскольку в системе есть электрон-дырочная симметрия, то в недопированном образце все уровни энергии меньше нуля заняты электронами, а все уровни энергии выше нуля пусты (каждый уровень энергии четырехкратно вырожден, дважды по спину и дважды по долине). При малых радиусах точки заполненными уровнями энергии являются все уровни с $c = +1$. При увеличении радиуса точки происходит пересечение уровня $E_{0;-1}^{+1}$ с уровнем $E_{-1;0}^{-1}$. Это происходит при $R = R_1 \approx 1.4$ (в единицах l). Будем называть этот радиус первым магическим радиусом. При дальнейшем увеличении R наступает момент, когда $E_{1;-1}^{+1} = E_{-2;0}^{-1}$. Это происходит при $R = R_2 \approx 2.5$ (второй магический радиус). При еще большем увеличении R пересекаются некоторые другие уровни энергии и т.д. Таким образом, имеется бесконечный набор магических радиусов R_i . При прохождении R через R_i симметрия волновой функции ближайшего к нулю снизу уровня энергии меняется с симметричного на антисимметричный. Отметим, что магические радиусы квантовой точки, сделанной из двухслойного АА графена, существуют, вообще говоря, при любом ϕ .

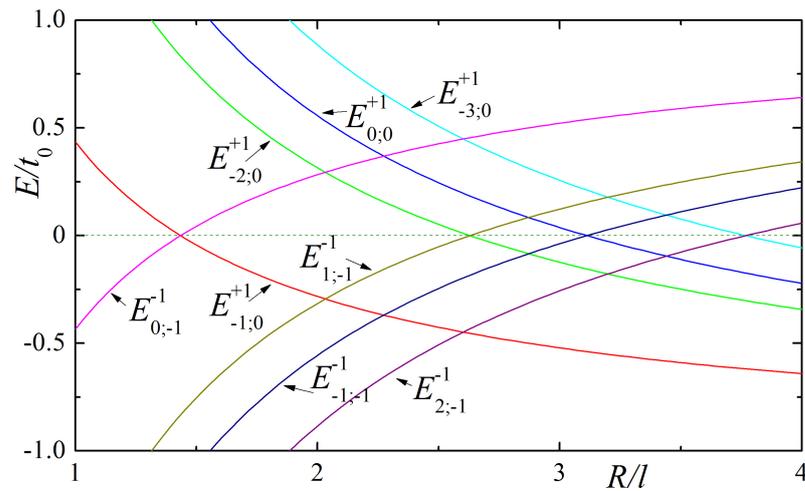


Рисунок 1 – Первые несколько близких к нулю уровней энергии $E_{\mu;n}^c$ как функции радиуса квантовой точки R , рассчитанные при $\phi = \pi/2$

Магические радиусы и магические углы

Таким образом, мы показали, что для квантовой точки, сделанной из двухслойного АА графена, существует бесконечный набор магических радиусов R_i , при которых основное состояние системы является вырожденным. Это обстоятельство чрезвычайно существенно, поскольку при наличии вырождения даже сколь угодно слабое взаимодействие электронов будет это вырождение снимать (по крайней мере частично), формируя некое нетривиальное основное состояние. Анализ основного состояния при учете электрон-электронного взаимодействия выходит за рамки данной статьи и будет произведен отдельно. Здесь же мы хотим указать на связь между магическими радиусами квантовой точки АА графена и магическими углами подкрученного двухслойного графена.

Чтобы установить связь между АА-QD и tBLG, рассмотрим следующие обстоятельства. Подкрученный двухслойный графен при малых углах подкрутки можно рассматривать как периодическую структуру областей с АА, АВ и ВА упаковками [1]. Известно, что низкоэнергетические электронные состояния локализованы в областях с АА упаковкой. Следовательно, можно предвидеть, что соответствующие волновые функции могут быть описаны формализмом, разработанным в данной статье. Гибридизация между ячейками муара расширяет локализованные в АА области одноэлектронные состояния на восемь когерентных зон (по одной зоне на долину, на спин и на четность слоев). Эти зоны отделены от других электронных состояний щелью порядка 0.1эВ. Это устанавливает желаемое отображение между спектром “магической” АА-QD и низкоэнергетической зонной структурой tBLG при магическом угле подкрутки. Когда система выходит из “магического состояния” (либо магического

радиуса, либо магического угла поворота), расположение зон резко меняется: вырождение исчезает, а ширина зоны увеличивается на порядок. Этот факт также имеет простое объяснение в рамках предлагаемой схемы. Действительно, можно ожидать, что ширина зоны будет наименьшей, когда вырождение зон будет максимальным. Это происходит, когда размер области AA, R_{AA} , близок к магическому радиусу R_1 . Поскольку R_{AA} пропорционально $1/\theta$, последнее условие может быть использовано для связи магического угла и магического радиуса области AA. Характерный размер ячейки муара можно оценить как $L_1 \approx a_0\sqrt{3}/\theta$, и для первого магического угла ($\theta \approx 1^\circ$) имеем $L_1 \approx 100a_0$. Что касается R_{AA} , то он, естественно, меньше, чем L_1 . Величину R_{AA} можно оценить следующим образом. Известно [1], что при малых углах подкрутки сверхъячейку подкрученного двухслойного графена можно рассматривать как состоящую из областей с AA, AB и BA упаковками равной площади. Площадь ячейки сверхрешетки равна $S_{sc} = \sqrt{3}L_1^2/2$. Таким образом, имеем оценку: $R_{AA} \sim \sqrt{S_{sc}/3\pi} \approx 0.3L_1 \approx 30a_0$. Согласно нашим результатам, в зависимости от граничных условий для первого магического радиуса мы имеем $17a_0 < R_1 < 23a_0$, что согласуется с нашей оценкой для R_{AA} подкрученного двухслойного графена при первом магическом угле.

Заключение

Итак, в статье изучены электронные свойства круглой квантовой точки, изготовленной из двухслойного AA графена. Наблюдается дискретный набор “магических” радиусов, при которых основное состояние вырождено по четности волновой функции относительно перестановки слоев. Существует аналогия между “магическими углами” подкрученного двухслойного графена и “магическими радиусами” двухслойной графеновой квантовой точки типа AA. Существование “магических радиусов” уникально для структур AA и связано со специфической слоевой симметрией двухслойного AA графена. Аналогия между “магическими углами” и “магическими радиусами” может быть полезна для описания электронных свойств подкрученного двухслойного графена.

Список литературы

- [1] A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Electronic properties of graphene-based bilayer systems // Phys. Reports.–2016.– № 648.P.1.
- [2] H.-V. Roy, C. Kallinger, and K. Sattler, Study of single and multiple foldings of graphitic sheets // Surf. Sci. – 1998. – № 407.P. 1.
- [3] J.-K. Lee, S.-C. Lee, J.-P. Ahn, S.-C. Kim, J. I. B. Wilson, and P. John, The growth of AA graphite on (111) diamond // J. Chem. Phys. – 2008. – №129. P. 234709.
- [4] Z. Liu, K. Suenaga, P. J. F. Harris, and S. Iijima, Open and Closed Edges of Graphene Layers // Phys. Rev. Lett. – 2009. – №102.P. 015501.
- [5] J. Borysiuk, J. Soltys, and J. Piechota, Stacking sequence dependence of graphene layers on SiC (0001) – Experimental and theoretical investigation // J. Appl. Phys. – 2011. – № 109.P. 093523.
- [6] A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker, Boundary conditions for Dirac fermions on a terminated honeycomb lattice // Phys. Rev. B. – 2008. – № 77. P. 085423.