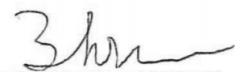


На правах рукописи



ЗАБОЛОТСКИЙ Андрей Дмитриевич

**Корреляционные эффекты и эффекты управления  
в дираковских материалах**

Специальность 01.04.02 – Теоретическая физика

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Троицк, Москва – 2018

Работа выполнена в Федеральном государственном унитарном предприятии «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова»

Научный руководитель: кандидат физ.-мат. наук, профессор  
ЛОЗОВИК Юрий Ефремович,  
Институт спектроскопии Российской академии наук, заведующий лабораторией спектроскопии наноструктур

Официальные оппоненты: доктор физ.-мат. наук, профессор  
ПОЛИЩУК Илья Яковлевич,  
Московский физико-технический институт, профессор кафедры теоретической физики

доктор физ.-мат. наук  
РЫЖОВ Валентин Николаевич,  
Институт физики высоких давлений Российской академии наук, заместитель директора по научной работе

Ведущая организация: Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Защита состоится 6 декабря 2018 г. в 14:00 на заседании диссертационного совета Д 002.014.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении Институте спектроскопии Российской академии наук (ИСАН), расположенном по адресу: 108840, г. Москва, г. Троицк, ул. Физическая, д. 5.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИСАН по адресу: [https://isan.troitsk.ru/ru/diss\\_sovet.php](https://isan.troitsk.ru/ru/diss_sovet.php).

Отзывы на автореферат (два заверенных экземпляра) просим направлять на адрес диссертационного совета.

В отзыве указываются фамилия, имя, отчество лица, представившего отзыв, почтовый адрес, телефон, адрес электронной почты, наименование организации, работником которой является указанное лицо, и должность в этой организации (выдержка из Положения о порядке присуждения ученых степеней).

Автореферат разослан « \_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2018 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
кандидат физ.-мат. наук



Каримуллин К. Р.

## Общая характеристика работы

### Актуальность темы исследования

В некоторых материалах, интенсивно изучаемых теоретически и экспериментально в последние годы, низкоэнергетические электронные возбуждения ведут себя как безмассовые дираковские фермионы: графен [1], трёхмерные дираковские полуметаллы и недавно открытые экспериментально вейлевские полуметаллы [2]. Наличие дираковских фермионов в различных конденсированных средах обусловлено различными физическими механизмами, но вследствие сходства математического описания в этих системах присутствует аналогия ряда физических эффектов (наибольший фундаментальный интерес представляют топологические явления) и инструменты для физических расчётов тоже зачастую можно использовать сходные.

Графен — двумерный кристалл углерода — имеет особенное значение сразу для двух областей физики конденсированного состояния.

С одной стороны, с графена фактически началось активное изучение двумерных кристаллов. Монослои  $\text{MoS}_2$  были выделены ещё в 1980-х годах, но только после работ группы Гейма и Новосёлова в 2000-х годах начался бум исследований сначала графена, а затем и других двумерных кристаллов — дихалькогенидов переходных металлов, включая  $\text{MoS}_2$ , нитрида бора, чёрного фосфора и других.

Двумерные кристаллы важны для возможных приложений по ряду причин. Кремниевая транзисторная электроника почти упёрлась в предел миниатюризации из-за эффектов короткого канала, однако эти эффекты ослабевают с уменьшением толщины канала, поэтому транзисторы на основе двумерных материалов могут обойти эту проблему. Кроме того, двумерные кристаллы гибки, прозрачны и прочны. Химическая модификация позволяет использовать их в химических сенсорах. Слоистые ван-дер-ваальсовы гетероструктуры позволяют использовать свойства различных материалов в одном устройстве. Наконец, в контексте уже не наноэлектроники, а, к примеру, суперконденсаторов становится важна максимальная удельная площадь поверхности графена и других двумерных материалов [3]. На данный момент реальное использование графена в промышленности происходит именно в су-

перконденсаторах, а также в виде добавок в различные материалы, такие как пластик для 3D-печати.

С другой стороны, графен оказался интересен с точки зрения фундаментальных исследований благодаря своему линейному спектру электронных возбуждений. Носители заряда в графене имеют линейный закон дисперсии и поэтому нулевую эффективную массу, киральны и описываются уравнением, подобным уравнению Дирака для нулевой массы из физики элементарных частиц [1] (отсюда термин «дираковские электроны»); по выражению М. И. Кацнельсона, графен — это «ЦЕРН на столе». Впоследствии были открыты и другие материалы, в том числе трёхмерные, в которых носители заряда описываются уравнением типа уравнения Дирака. Их электронные свойства характеризуются рядом необычных явлений, в том числе топологического характера, например, квантовый эффект Холла, связанный с фазой Берри и действием Черна–Саймонса, ассоциированными с присутствием дираковских/вейлевских точек в зонной структуре [2].

Таким образом, графен находится на стыке двух «горячих» тем современной физики конденсированного состояния: физики двумерных материалов и топологических явлений в дираковских материалах.

### **Цели и задачи работы**

1. Теоретическое исследование влияния кулоновского электрон-электронного взаимодействия на наблюдаемые характеристики дираковского электронного газа в графене и объяснение имеющихся в литературе экспериментальных данных.
2. Определение потенциалов псевдомагнитного поля и скалярных деформационных полей, которые могут возникнуть в обусловленных симметрией дираковских материалах и в борофене под воздействием деформаций.
3. Вывод теоремы вириала для дираковских электронов.

Исследование электрон-электронного взаимодействия выполнено с помощью диаграммной техники для дираковских электронов. Для вывода вариантов теоремы вириала использовались пи-теорема и математический аппарат первичного квантования в квантовой механике. Для исследования псевдомагнитного поля использованы модель сильной связи и методы теории групп.

## Научная новизна

В работе впервые:

- рассчитаны многочастичные поправки к наблюдаемым характеристикам дираковского электронного газа в графене с учётом корреляционного вклада и беспорядка и проведено сравнение с экспериментальными данными, частично переинтерпретированными;
- построена модель сильной связи для  $\delta$ -*Pttn*-борофена, воспроизводящая его низкоэнергетическую электронную структуру, известную из первопринципных расчётов;
- найдены потенциалы псевдомагнитного поля и скалярных деформационных полей, возникающие в обусловленных симметрией трёхмерных дираковских материалах и в борофене под воздействием деформаций;
- выведена теорема вириала для дираковских электронов в кристаллах.

## Значимость

Точный учёт влияния многочастичного кулоновского взаимодействия и беспорядка на квантовую ёмкость графена необходим для расчётов параметров графеновых наноструктур. В то же время полученные в работе выражения для энергии электронов в графене могут использоваться в расчётах систем дираковских электронов методом функционала плотности в приближении локальной плотности. Теорема вириала же может использоваться для проверки корректности других обменно-корреляционных функционалов для дираковских электронов.

В свою очередь, псевдомагнитные поля в деформированных дираковских материалах, будучи противоположными по знаку в дираковских точках с противоположными киральностями, позволят сформировать долинно-поляризованные токи для приборов долинной электроники.

## На защиту выносятся следующие положения.

1. Рассчитана квантовая ёмкость и перенормированная скорость Ферми дираковских электронов в графене с учётом кулоновских обменных и корреляционных эффектов. Под их влиянием квантовая ёмкость дираковских электронов в графене уменьшается, скорость Ферми — увеличивается (до 50 %). Сравнение с экспериментальными данными даёт величину затравочной скорости Ферми  $0,93 \times 10^6$  м/с.

2. В графене в магнитном поле рассчитаны энергии электронных переходов дираковских электронов между уровнями Ландау. Энергии переходов перенормируются под влиянием кулоновского взаимодействия; из сравнения теории с экспериментами по магниторамановскому рассеянию получены основные управляющие параметры системы.
3. Показано, что деформация вызывает появление гигантского управляемого псевдомагнитного поля в дираковском материале  $\delta$ - $Pttn$ -борофене; получен потенциал этого поля в зависимости от тензора деформаций. Получен потенциал псевдомагнитного поля для всех возможных трёхмерных дираковских материалов, обусловленных симметрией.
4. В дираковских материалах имеются точные соотношения для кинетической энергии и энергии взаимодействия электронов, связанные с масштабными преобразованиями — различные формы обобщённой теоремы вириала.

### **Достоверность и апробация результатов, публикации**

Достоверность представленных в диссертации результатов обеспечивается использованием надёжных, проверенных методов теоретической физики и подтверждается согласием с результатами ранее опубликованных данных экспериментов (в случае результатов главы 1) и первопринципных расчётов (в случае результатов главы 2).

Материалы диссертации опубликованы в 5 статьях в рецензируемых журналах [А1, А2, А3, А4, А5] и 9 тезисах докладов [Б1, Б2, Б3, Б4, Б5, Б6, Б7, Б8, Б9]. В частности, сделаны устные доклады на Российской конференции по физике полупроводников [Б3] и международной конференции Graphene Week [Б9].

### **Личный вклад автора**

Все представленные в работе оригинальные результаты получены лично автором, либо при его непосредственном участии. Автор выполнил аналитические и численные расчёты, принимал непосредственное участие в постановке задачи и обсуждении полученных результатов.

### **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения, списка используемой литературы и двух приложений. Общий объём диссертации состав-

ляет 106 страниц, включая 19 рисунков, 9 таблиц и библиографию из 160 наименований.

## Содержание работы

**Во введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

**Первая глава** посвящена влиянию кулоновского электрон-электронного взаимодействия на наблюдаемые параметры однородного дираковского электронного газа в графене.

Низкоэнергетические электронные возбуждения в графене описываются гамильтонианом типа безмассового дираковского [1], для определённой долины и спина принимающего вид:  $v_F \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}$ ,  $\mathbf{p}$  — оператор двумерного импульса,  $\boldsymbol{\sigma}$  — вектор, составленный из матриц Паули,  $v_F$  — скорость Ферми, равная примерно 1/300 скорости света. Следовательно, спектр низкоэнергетических одноэлектронных возбуждений — линейный:

$$\epsilon_{\mathbf{p}\gamma} = \gamma v_F |\mathbf{p}|, \quad (1)$$

$\gamma = \pm$  — индекс зоны.

Кулоновское взаимодействие двумерных дираковских электронов характеризуется не зависящей от электронной плотности «постоянной тонкой структуры в графене»  $r_s$ , равной  $\frac{e^2}{\epsilon \hbar v_F}$ , где  $\epsilon$  — эффективная диэлектрическая постоянная окружающей среды. При достаточно больших  $\epsilon$  это позволяет использовать пертурбативный диаграммный подход к вычислению вклада взаимодействия в наблюдаемые величины. Вычисления проводятся для температуры  $T = 0$ . Диаграммы строятся из электронных функций Грина  $G_0$ , линий кулоновского взаимодействия  $V$  и вершинных множителей  $f_v$ , возникающих

из-за киральности дираковских электронов [4]:

$$G_{0\gamma}(\mathbf{p}, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \epsilon_{\mathbf{p}\gamma} + \mu + i0^+ \operatorname{sgn}(\epsilon_{\mathbf{p}\gamma} - \mu)}, \quad (2)$$

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{2\pi\hbar e^2}{\varepsilon q} \equiv 2\pi\hbar v_{\text{F}} r_s \frac{1}{q}, \quad f_{v\gamma\gamma'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{1}{2}(1 + \gamma\gamma' e^{i(\varphi_{\mathbf{p}'} - \varphi_{\mathbf{p}})}).$$

Термодинамический потенциал большого канонического ансамбля  $\Omega$  вычисляется как сумма всех связанных замкнутых диаграмм. В свою очередь, имея  $\Omega$  как функцию химического потенциала  $\mu$  или электронной плотности  $n$ , можно связать эти две величины между собой посредством соотношения  $n = -\frac{1}{S} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu}$ .

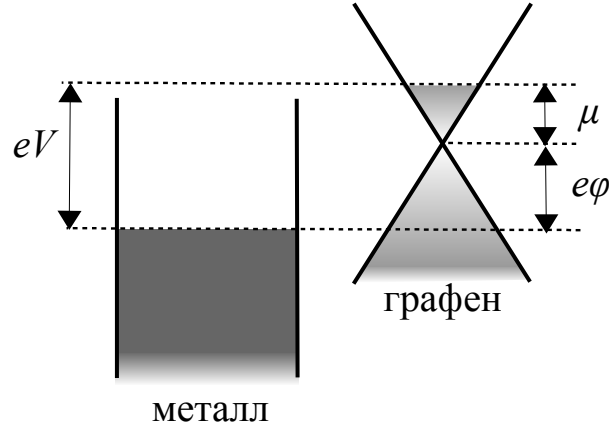


Рис. 1. Зонная диаграмма конденсатора, состоящего из графена и металлической пластины, между которыми приложено напряжение  $V$ . Плотность состояний в дираковской точке графена равна нулю, при удалении от неё растёт, но всё равно значительно меньше плотности состояний в металле.

Непосредственно наблюдаемой величиной является квантовая ёмкость  $C_Q = e^2 dn/d\mu$ . Это понятие и формула происходят из следующего рассуждения: рассмотрим плоско-параллельный конденсатор, одна обкладка которого — чешуйка графена, другая — металлическая пластина. Если между пластинами имеется падение напряжения  $V$ , то оно складывается из двух слагаемых: разность электростатических потенциалов  $\varphi$  и химический потенциал электронов в графене  $\mu/e$  (рис. 1). Дифференцирование по заряду на обкладках показывает, что полная электрическая ёмкость на единицу площади  $C_{\text{total}}$  складывается из классической геометрической ёмкости  $C_C$  и квантовой ёмко-



сти  $C_Q$  как  $1/C_{\text{total}} = 1/C_C + 1/C_Q$ . Таким образом, чем меньше квантовая ёмкость графена, тем сильнее она уменьшает полную ёмкость.

Для демонстрации эффектов взаимодействия удобной величиной оказывается перенормированная скорость Ферми  $v_F^*(n) = |\mu|/p_F$ , где импульс Ферми  $p_F$  связан с электронной плотностью как  $|n| = gp_F^2/(4\pi\hbar^2)$ ,  $g = 4$  — фактор вырождения ( $n$  и  $\mu$  здесь отсчитываются от значения концентрации и химического потенциала при полностью заполненной валентной зоне); при отсутствии взаимодействий скорость Ферми постоянна:  $v_F^*(n) = v_F$ , при наличии взаимодействий она приобретает зависимость от  $n$ .

В результате диаграммных вычислений в различных приближениях получена связь концентрации  $n$  и химического потенциала  $\mu$ , а также  $\Omega$ ,  $C_Q$ ,  $v_F^*$ , кинетическая энергия и энергия взаимодействия дираковских электронов как функция концентрации  $n$ , «затравочной скорости» Ферми  $v_F$ , параметра взаимодействия  $r_s$  и малого безразмерного параметра  $\rho = \text{sgn } n \cdot p_F/p_c$ , где импульс обрезания  $p_c \sim \hbar/a$  связан с конечной глубиной валентной зоны ( $a \approx 2.46 \text{ \AA}$  — постоянная решётки графена). Использовались следующие приближения: приближение первого порядка по взаимодействию, приближение Хартри–Фока (HFA), приближение хаотических фаз (RPA), самосогласованное приближение хаотических фаз (соответствующее использованию «одетых» функций Грина в поляризационных «пузырьках»).

В приближении Хартри–Фока, полностью учитывающем обменное взаимодействие, для химического потенциала, кинетической энергии и энергии взаимодействия имеем:

$$\mu_{\text{HF}} = \mu_0(\rho) \cdot \left(1 + r_s \tilde{\Sigma}(\rho)\right), \quad (3)$$

$$E_{\text{kin}}^{(\text{HF})}(\rho) = E_0(\rho), \quad E_{\text{int}}^{(\text{HF})}(\rho) = r_s E_0(\rho) \tilde{\varepsilon}(\rho), \quad (4)$$

где  $\mu_0 = \rho v_F p_c$  и  $E_0 = \frac{Sg v_F p_c^3 |\rho|^3}{6\pi \hbar^2}$  — химический потенциал и энергия невзаимодействующего дираковского электронного газа, а безразмерные функции  $\tilde{\Sigma}$  и  $\tilde{\varepsilon}$  таковы:

$$\tilde{\Sigma}(\rho) = -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} \ln |\rho| + \frac{2\mathcal{C} + 1}{\pi} + \frac{1}{4} - \ln 2 + \frac{1}{\rho} \left( \frac{2}{\pi} E(\rho) - 1 \right) + f_2(\rho^2) \right), \quad (5)$$

$$f_2(\rho^2) = \frac{3\rho^2}{128} \left( {}_4F_3\left(1, 1, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}; 2, 3, 3; \rho^2\right) + 3 {}_4F_3\left(1, 1, \frac{5}{2}, \frac{5}{2}; 2, 3, 3; \rho^2\right) \right), \quad (6)$$

$E$  — полный эллиптический интеграл второго рода,  $C \approx 0.916$  — постоянная Каталана,  ${}_4F_3$  — обобщённая гипергеометрическая функция.  $\tilde{\Sigma}$  разлагается в ряд по своему аргументу  $\rho$ :

$$\tilde{\Sigma}(\rho) = \frac{1}{2} \left( -\frac{1}{2} \ln |\rho| - \frac{2C + 1}{\pi} - \frac{1}{4} + \ln 2 + \frac{1}{4}\rho - \frac{3}{32}\rho^2 + \frac{3}{64}\rho^3 - \dots \right). \quad (7)$$

$$\tilde{\varepsilon}(\rho) = \frac{1}{2} \left( -\frac{1}{2} \ln |\rho| - \frac{2C + 1}{\pi} - \frac{1}{12} + \ln 2 + \frac{3}{16}\rho - \frac{9}{160}\rho^2 + \frac{3}{128}\rho^3 - \dots \right). \quad (8)$$

Квантовая ёмкость и  $v_F^*(n)$  извлекаются из этих формул непосредственно. Старшее, логарифмическое слагаемое в (5) приводит к известному эффекту [4] — логарифмической же перенормировке скорости Ферми.

Как показано на рис. 2, обменное взаимодействие приводит не только к увеличению перенормированной скорости Ферми, но и к заметному уменьшению квантовой ёмкости.

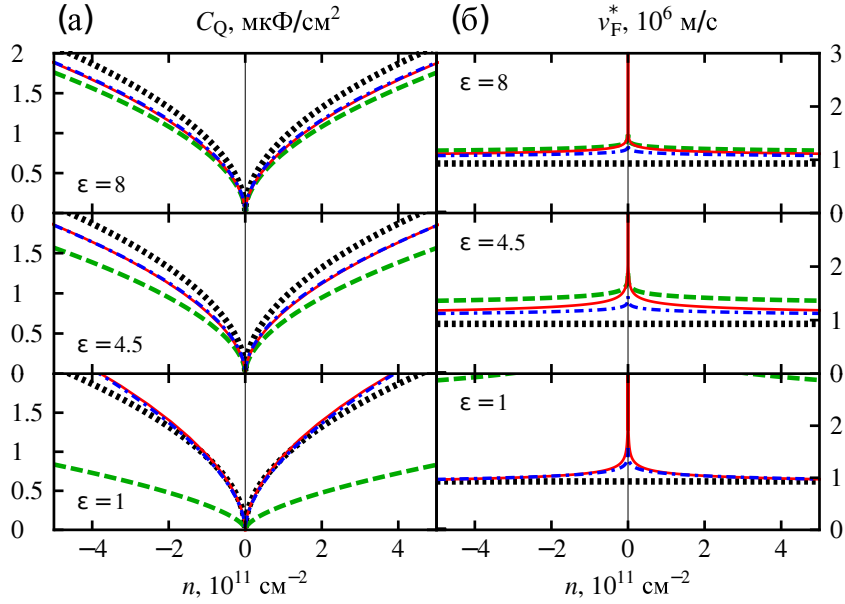


Рис. 2. Квантовая ёмкость  $C_Q$  (а) и перенормированная скорость Ферми  $v_F^*$  (б) в графене в зависимости от электронной плотности  $n$  при различных значениях диэлектрической проницаемости окружающей среды  $\varepsilon$  и в различных приближениях: приближение невзаимодействующего электронного газа (чёрный короткий пунктир), приближение Хартри–Фока (зелёный длинный пунктир), несамосогласованное приближение хаотических фаз (красные сплошные линии), самосогласованное приближение хаотических фаз (синий штрихпунктир).

Корреляционные поправки мы учитываем с помощью RPA. Соответствующие «пузырьковые» диаграммы — старшие в разложении по малому параметру  $1/g$  ( $1/N$ -разложении) [4], что делает его наиболее надёжным для вычисления  $\Omega$  и производных величин, включая  $C_Q$  и  $v_F^*$ . Ключевым объектом в этом приближении является поляризационный оператор для графена [5]. Эффективным параметром разложения для RPA в графене является не  $r_s$ , а  $\alpha_{gr} = gr_s$ . Для химического потенциала и энергии в самосогласованном RPA получены формулы:

$$E_{RPA} = E_0 \times \left( 1 + \frac{1}{g} \alpha_{gr} \tilde{\varepsilon}(\rho) + \frac{3}{2\pi g} \left( -a(\alpha_{gr}) \ln |\rho| + c(\alpha_{gr}) + \sum_{n=2}^{\infty} |\rho|^n b_n(\alpha_{gr}) \right) \right), \quad (9)$$

$$\mu_{RPA} = \mu_0 \times \left( 1 + \frac{1}{g} \alpha_{gr} \tilde{\Sigma}(\rho) + \frac{1}{2\pi g} \times \left( (-3 \ln |\rho| - 1) a(\alpha_{gr}) + 3c(\alpha_{gr}) + \sum_{n=2}^{\infty} |\rho|^n (n+3) b_n(\alpha_{gr}) \right) \right), \quad (10)$$

где  $a, b_n, c$  — определённые элементарные функции.

Как видно из рис. 2, корреляционный вклад частично компенсирует обменный, а при  $\varepsilon = 1$  даже происходит сверхкомпенсация.

Было учтено и влияние беспорядка с помощью модели случайного потенциала с гауссовым распределением; рассматривались  $\langle C_Q \rangle$  и  $\langle v_F^* \rangle$  как функции  $\langle n \rangle$  — все величины усреднены по  $\mu$ . Получено, что пик в перенормированной скорости Ферми пропадает при дисперсии распределения около 12–15 мэВ.

Проанализированы экспериментальные данные из четырёх экспериментальных работ, в которых даются результаты измерения  $v_F^*$  [6, 7] или  $C_Q$  [8, 9]. Результаты фитирования (подгонки методом наименьших квадратов) «затраченной» скорости Ферми  $v_F$  и эффективной диэлектрической постоянной  $\varepsilon$  к экспериментальным данным по  $v_F^*$  приведены в табл. 1. Как следует из таблицы, фитирование в НФА завышает  $\varepsilon$ , чтобы имитировать экранирование взаимодействия, в то время как RPA показывает реалистичное значение  $v_F$  около  $0.93 \times 10^6$  м/с. Данные вместе с фитированными кривыми показаны

Экспериментальные результаты			HFA		RPA	
Статья	$v_F$	$\varepsilon$	$v_F$	$\varepsilon$	$v_F$	$\varepsilon$
Ю и др. [6]	0.850	8	0.892	9.01	0.922	4.5
Чхэ и др. [7]	0.957	3.15	0.910	8.45	0.938	3.15

Таблица 1. Подгоночные параметры для экспериментальных\* данных по перенормированной скорости Ферми, определённые авторами соответствующих статей в простейших приближениях и найденные в нашей работе в HFA и самосогласованном RPA (см. текст);  $v_F$  дана в единицах  $10^6$  м/с.

на рис. 3.

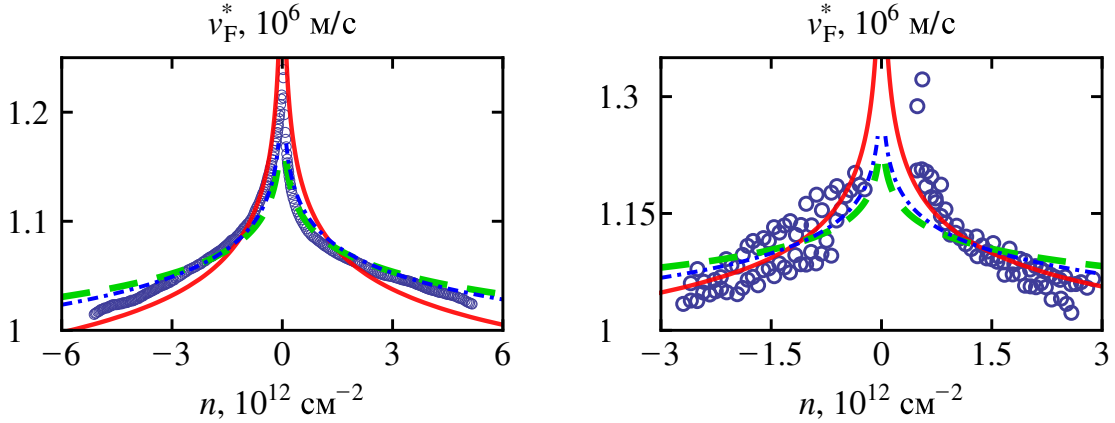


Рис. 3. Экспериментальные данные (синие круги) по перенормированной скорости Ферми  $v_F^*$  как функции электронной плотности  $n$  из [6] (слева) и [7] (справа), фитированные в различных приближениях (обозначения те же, что на рис. 2).

Также рассмотрено влияние кулоновского электрон-электронного взаимодействия на графен, помещённый в магнитное поле  $B$ . Энергия  $n_1$ -го одночастичного дираковского уровня Ландау равна  $E_{n_1}^{(0)} = \text{sgn } n_1 \cdot v_F \sqrt{2|n_1|eB\hbar}$ . Заполненность уровней характеризуется фактором заполнения  $\nu$ , конечная глубина валентной зоны — предельным допустимым номером уровня Ландау  $n_c = \frac{4\pi\hbar}{eBgS_0}$ , где  $S_0 = a^2\sqrt{3}/2$  — площадь элементарной ячейки решётки графена. Наблюдаемые величины в этом случае — энергии  $E_{n_1 \rightarrow n_2}$  переходов между уровнями Ландау  $n_1$  и  $n_2$ , удобная величина для их характеристики — перенормированная скорость Ферми  $v_{F_{n_1 \rightarrow n_2}}^* = v_F \times E_{n_1 \rightarrow n_2} / (E_{n_2}^{(0)} - E_{n_1}^{(0)})$ . Поправки от взаимодействия при наличии магнитного поля также могут быть рассчитаны пертурбативно [10]. В работе получены аналитические выражения для обменной и корреляционной вершинной (с учётом смешивания экситонных состояний) поправок к энергиям переходов, использованные для

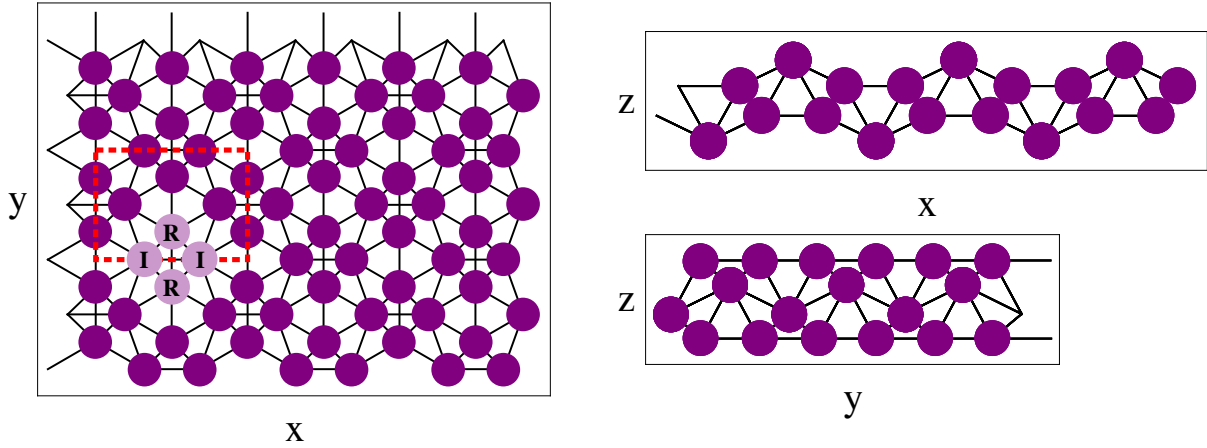


Рис. 4. Кристаллическая структура  $8\text{-}Pmmn$ -борофена. Буквами I и R обозначены два типа неэквивалентных с точки зрения симметрии атомов — внутренние и гребневые. Пунктирная красная линия очерчивает элементарную ячейку.

воспроизведения экспериментальных данных по циклотронному резонансу и магниторамановскому рассеянию.

Результаты первой главы опубликованы в работах [A1, A4].

**Вторая глава** посвящена вызванному деформациями псевдомагнитному полю в дираковских материалах.

Среди необычных свойств дираковских электронов в графене имеется и такое: воздействие упругих деформаций на них проявляется как гигантское эффективное магнитное поле (а также эффективный скалярный потенциал) [11]. Такой эффект возможен и в трёхмерных дираковских материалах.

В данной работе изучается воздействие деформаций на предсказанный двумерный дираковский полуметалл  $8\text{-}Pmmn$ -борофен и демонстрируется, что они также приводят к возникновению псевдомагнитного поля. Борофены — это двумерные кристаллы бора; несколько их разновидностей недавно было получено, и множество — предсказано. Кристаллическая структура  $8\text{-}Pmmn$ -борофена показана на рис. 4. В работе [12] было предсказано, что эта структура будет одной из самых стабильных, а также что этот материал будет являться дираковским полуметаллом.

В работе построена модель сильной связи для борофена, параметры модели получены подгонкой под данные DFT-расчёта для низкоэнергетических орбиталей из [12]. Для двухцентровых интегралов  $V_{ss\sigma}$  и т. д. использована

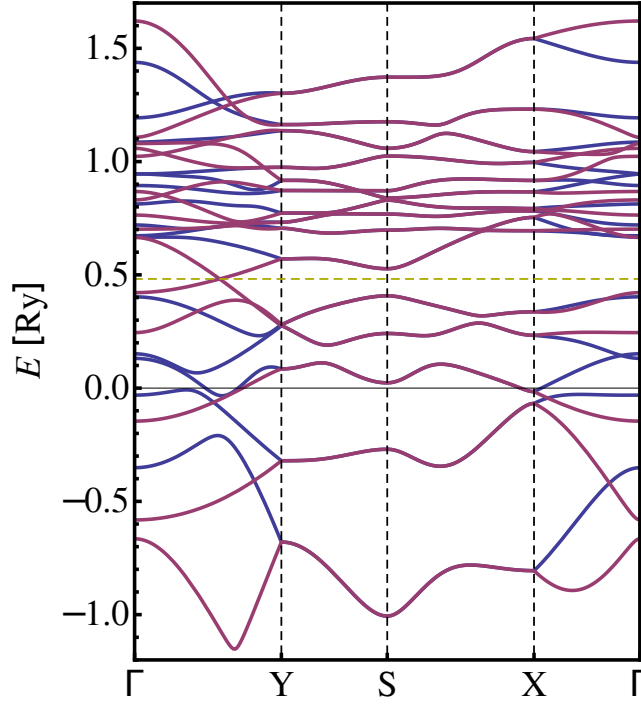


Рис. 5. Зонная структура 8-*Pmmn*-борофена. Жёлтой горизонтальной линией отмечен уровень Ферми, на котором на линии  $\Gamma$ - $Y$  находится наклонный дираковский конус.

т. н. параметризация NRL:  $V_i(d) = (e_i + f_i d + g_i d^2) \exp(-h_i^2 d)$ ,  $d$  — межатомное расстояние. Полученная зонная структура показана на рис. 5.

Низкоэнергетический гамильтониан в окрестности дираковской точки  $\mathbf{k}_D$  имеет вид:

$$H = v_x \sigma_x p_x + v_y \sigma_y p_y + v_t \sigma_0 p_y. \quad (11)$$

Этот гамильтониан задаёт анизотропный наклонный дираковский конус с нулевой массой и киральностью  $\text{sgn}(v_x v_y)$ . Наша модель дала значения параметров  $v_x = 0.86 \times 10^6$  м/с,  $v_y = 0.69 \times 10^6$  м/с,  $v_t = 0.32 \times 10^6$  м/с. В зоне Бриллюэна имеется и вторая дираковская точка  $-\mathbf{k}_D$ , в окрестности которой гамильтониан имеет похожий вид, но описывает частицы с противоположной киральностью.

Симметрия кристалла накладывает ограничения на то, как внешнее возмущение (в частности, малая деформация) может модифицировать гамильтониан. А именно, разрешены лишь такие вклады в дираковский гамильтониан, которые инвариантны относительно кристаллографических симметрий решётки вместе с обращением времени, оставляющих на месте саму дираковскую точку  $\mathbf{k}_D$  [11]. С другой стороны, деформация решётки может быть

учтена через изменение межатомных расстояний при вычислении матричных элементов гамильтониана. Оба метода показывают, что деформации действительно дают вклад в гамильтониан в виде скалярного потенциала и векторного потенциала псевдомагнитного поля, т. е. гамильтониан в долине  $\mathbf{k}_D$  принимает вид:

$$H = v_x \sigma_x \left( p_x - \frac{e}{c} A_x(u_{ij}) \right) + (v_y \sigma_y + v_t \sigma_0) \left( p_y - \frac{e}{c} A_y(u_{ij}) \right) + e \varphi(u_{ij}), \quad (12)$$

где вызванные деформациями потенциалы зависят от тензора деформаций  $u_{ij}$  как

$$\varphi = V_{xx} u_{xx} + V_{yy} u_{yy}; \quad (13)$$

$$\mathbf{A} = (\alpha_{xy} u_{xy}, \alpha_{xx} u_{xx} + \alpha_{yy} u_{yy}). \quad (14)$$

Скалярный потенциал имеет такой же знак в долине  $-\mathbf{k}_D$ , векторный — противоположный знак. При этом из модели сильной связи численно получаются следующие значения потенциалов:

$$V_{xx} = -6.2 \text{ В}, \quad V_{yy} = -6.0 \text{ В}; \quad (15)$$

$$\alpha_{xy} = 3.63 \text{ Гс} \times \text{см}, \quad \alpha_{xx} = 3.58 \text{ Гс} \times \text{см}, \quad \alpha_{yy} = -1.15 \text{ Гс} \times \text{см}. \quad (16)$$

Таким образом, псевдомагнитное поле в  $8\text{-}Pm\bar{1}n$ -борофене может достигать сотен тесла. Гигантское псевдомагнитное поле может использоваться для создания долинно-поляризованных токов и управления ими, а также использоваться как ондулятор для электронов в кристалле.

Вторая задача, решённая во второй главе диссертации, касается псевдомагнитного поля в трёхмерных дираковских материалах, обусловленных симметрией. Это немагнитные материалы, у которых в точках высокой симметрии зоны Бриллюэна присутствуют дираковские точки в силу требований симметрии; лишь некоторые кристаллографические группы разрешают присутствие дираковских точек в точках высокой симметрии зоны Бриллюэна, как показано в работе [13].

Как и в случае графена и борофена, деформация приводит к добавлению в безмассовый дираковский, или вейлевский гамильтониан слагаемых,

Группы симметрии	Точка зоны Бриллюэна	Скалярный потенциал	Векторный потенциал
$I4_132$ (214)	$\mathbf{P}$ $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	$V \times (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})$	$A \times (u_{yz}, u_{zx}, u_{xy})$
$P4_132$ (213), $P4_332$ (212)	$\mathbf{R}$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$V \times (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})$	0
$I2_13$ (199)	$\mathbf{P}$	$V \times (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})$	$A \times (u_{yz}, u_{zx}, u_{xy})$
$P2_13$ (198)	$\mathbf{R}$	$V \times (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})$	$A \times (u_{yz}, u_{zx}, u_{xy})$
$I4_122$ (98)	$\mathbf{P}$	$V \times (u_{xx} + u_{yy}) + V_z u_{zz}$	$(A u_{yz}, -A u_{zx}, A_z u_{xy})$
$P4_32_12$ (96), $P4_12_12$ (92)	$\mathbf{A}$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$V \times (u_{xx} + u_{yy}) + V_z u_{zz}$	$A \times (u_{yz}, -u_{zx}, 0)$
$I2_12_12_1$ (24)	$\mathbf{W}$ $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	$V_x u_{xx} + V_y u_{yy} + V_z u_{zz}$	$(A_x u_{yz}, A_y u_{zx}, A_z u_{xy})$
$P2_12_12_1$ (19)	$\mathbf{R}$	$V_x u_{xx} + V_y u_{yy} + V_z u_{zz}$	$(A_x u_{yz}, A_y u_{zx}, A_z u_{xy})$
$P622$ , $P6_{1,5,2,4,3}22$ (177–182)	$\mathbf{K}$ $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0)$	$V \times (u_{xx} + u_{yy}) + V_z u_{zz}$	$A \times (u_{xx} - u_{yy}, -2u_{xy}, 0)$
$P622$ , $P6_{2,4}22$ (177,180,181)	$\mathbf{H}$ $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$	$V \times (u_{xx} + u_{yy}) + V_z u_{zz}$	$A \times (u_{xx} - u_{yy}, -2u_{xy}, 0)$
$P321$ , $P3_{1,2}21$ (150,152,154)	$\mathbf{K}, \mathbf{H}$	$V \times (u_{xx} + u_{yy}) + V_z u_{zz}$	$A \times (u_{xx} - u_{yy}, -2u_{xy}, 0) +$ $+ A_z \times (u_{yz}, -u_{zx}, 0)$

Таблица 2. Возникающие за счет деформаций скалярный и векторный потенциалы в требуемых симметриями (верхняя часть таблицы) и допускаемых симметриями (нижняя часть) дираковских точках в указанных высокосимметричных точках при наличии указанных кристаллографических групп симметрии.  $V, V_{x,y,z}, A, A_{x,y,z}$  — некоторые постоянные, которые должны определяться уже из конкретных количественных моделей конкретных материалов.

отвечающих скалярному потенциалу и потенциалу псевдомагнитного поля:

$$H = v_x \sigma_x (p_x - \frac{\epsilon}{c} A_x(\mathbf{r})) + v_y \sigma_y (p_y - \frac{\epsilon}{c} A_y(\mathbf{r})) + v_z \sigma_z (p_z - \frac{\epsilon}{c} A_z(\mathbf{r})) + V(\mathbf{r}). \quad (17)$$

Зависимость потенциалов  $V$  и  $\mathbf{A}$  от тензора деформации вновь может быть получена лишь из соображений симметрии: слагаемые должны быть инвариантны относительно симметрий кристалла, включая обращение времени, которые оставляют нетронутой соответствующую высокосимметричную точку зоны Бриллюэна. Иными словами, компоненты вектора  $\mathbf{A}$  должны преобразовываться так же, как компоненты импульса.

В табл. 2 указаны результаты — допустимые формы зависимости вызванных деформациями потенциалов в материалах с различными кристаллографическими группами симметрии. Во всех случаях, помимо дираковской точки в указанной высокосимметричной точке зоны Бриллюэна, существует ещё одна дираковская точка в противоположном углу этой зоны, в которой потенциал псевдомагнитного поля имеет противоположный знак.



Псевдомагнитное поле в дираковских полуметаллах позволяют контролировать долинные токи и накопление долинных зарядов, открывая дальнейшие возможности для долинной электроники.

Результаты второй главы опубликованы в работах [A3, A5].

**Третья глава** посвящена теореме вириала в графене и других дираковских материалах.

Теорема вириала (ТВ) предоставляет точное соотношение между кинетической и потенциальной энергиями классических и квантовых систем, когда эти энергии — степенные функции координат и импульсов составляющих частиц [14]. Приложения ТВ включают оценки различных величин в физике атомов, молекул, твёрдых тел, плазмы, в астрофизике. С фундаментальной точки зрения, ТВ связана с масштабными преобразованиями системы (дилатациями). Генератором этих преобразований является величина  $\sum \mathbf{r}\mathbf{p}$ , называемая вириалом. Когда рассматривается пространственно ограниченная многочастичная система (например, электронный газ в твёрдом теле конечного размера), ТВ содержит дополнительный «граничный» член, пропорциональный термодинамическому давлению в системе.

Размерный анализ (равно как и другие соображения, такие как минимизация энергии системы по отношению к дилатациям) приводит к форме «макроскопической» (связывающий термодинамические параметры системы) обобщённой ТВ для однородного газа дираковских электронов в кристалле, взаимодействующих по закону Кулона:

$$E + D\Omega = p_c \left. \frac{\partial \Omega}{\partial p_c} \right|_{\mu, T}. \quad (18)$$

Теорема справедлива при произвольной размерности системы  $D$  и температуре  $T$ . Правая часть специфична именно для дираковских электронов в кристалле, обусловлена наличием конечной глубины валентной зоны и численно заметно отличается от нуля, особенно при малых  $\varepsilon$ .

С другой стороны к проблеме влияния дилатаций на дираковские электроны в двумерном кристалле можно подойти через многочастичную квантовую механику в формализме первичного квантования. Для этого удобно, действуя аналогично разделам II.B.4–7 обзора [14], ввести понятие обобщён-

ного тока оператора  $A$ :

$$\mathbf{J}_a[A](\{\mathbf{r}_a\}, t) = v_F \Psi^\dagger \boldsymbol{\sigma}_a A \Psi. \quad (19)$$

Ср. с обобщённым током в шрёдингеровском случае:

$$\mathbf{J}_a[A](\{\mathbf{r}_a\}, t) = \frac{i\hbar}{2m} ((A\Psi)\nabla_a\Psi^* - \Psi^*\nabla_a A\Psi). \quad (20)$$

Здесь индекс  $a$  нумерует частицы.

Для этих величин выполняется обобщённое уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial(\Psi^\dagger A\Psi)}{\partial t} + \sum_a \nabla_a \mathbf{J}_a[A] = \frac{1}{i\hbar} \Psi^\dagger [A, H] \Psi. \quad (21)$$

Оно принимает такой же вид, как обычное уравнение непрерывности, если  $A$  коммутирует с гамильтонианом.

Для любого стационарного состояния с энергией  $E$  (не обязательно основного) в ограниченной двумерной области получена ТВ в виде:

$$E = \sum_c \int d\{\mathbf{r}_{a \neq c}\} \oint d\ell_c \mathbf{n}_c \mathbf{J}_c \left[ \sum_b \mathbf{r}_b \mathbf{p}_b \right]. \quad (22)$$

Теорема справедлива и при периодических граничных условиях.

Кроме того, получена теорема Гельмана–Фейнмана для дираковских материалов в виде:

$$\frac{dE}{d\lambda} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle - i\hbar \sum_c \int d\{\mathbf{r}_{a \neq c}\} \oint d\ell_c \mathbf{n}_c \mathbf{J}_c \left[ \frac{\partial}{\partial \lambda} \right]. \quad (23)$$

Показано, что граничные члены в правых частях (22) и (23) дают ненулевой вклад и в пределе большой области, в которой ограничены дираковские электроны (большого куска графена).

Результаты третьей главы опубликованы в работе [A2].

## Основные результаты работы

- Под влиянием обменных и корреляционных эффектов многочастичного кулоновского взаимодействия квантовая ёмкость дираковских электронов в графене уменьшается, скорость Ферми — увеличивается (до 50 %). Сравнение с экспериментальными данными даёт величину затравочной скорости Ферми  $0,93 \times 10^6$  м/с.
- В графене, помещённом в магнитное поле, энергии переходов между уровнями Ландау перенормируются под влиянием кулоновского взаимодействия; из сравнения теории с экспериментами по магниторамаоновскому рассеянию получены основные управляющие параметры системы.
- Деформация вызывает появление гигантского управляемого псевдомагнитного поля в различных дираковских материалах, в частности, в  $\delta$ -*Pttn*-борофене; получен потенциал поля в зависимости от тензора деформаций.
- В дираковских материалах имеются точные соотношения для кинетической энергии и энергии взаимодействия электронов, связанные с масштабными преобразованиями — различные формы обобщённой теоремы вириала.

## Список публикаций по теме диссертационной работы

Публикации в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК:

- A1. Yu. E. Lozovik, A. A. Sokolik, A. D. Zabolotskiy. Quantum capacitance and compressibility of graphene: The role of Coulomb interactions // *Physical Review B*. — 2015. — Vol. 91. — P. 075416.
- A2. A. A. Sokolik, A. D. Zabolotskiy, Yu. E. Lozovik. Generalized virial theorem for massless electrons in graphene and other Dirac materials // *Physical Review B*. — 2016. — Vol. 93. — P. 195406.
- A3. A. D. Zabolotskiy, Yu. E. Lozovik. Strain-induced pseudomagnetic field in the Dirac semimetal borophene // *Physical Review B*. — 2016. — Vol. 94. — P. 165403.

- A4. A. A. Sokolik, A. D. Zabolotskiy, Yu. E. Lozovik. Many-body effects of Coulomb interaction on Landau levels in graphene // *Physical Review B*. — 2017. — Vol. 95. — P. 125402.
- A5. A. D. Zabolotskiy, Yu. E. Lozovik. Strain-induced pseudomagnetic and scalar fields in symmetry-enforced Dirac nodes // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2018. — Vol. 459. — Pp. 43–45.

Тезисы докладов на конференциях:

- Б1. А. Д. Заболотский, Ю. Е. Лозовик, А. А. Соколик. Квантовая ёмкость графена с учётом обменных и корреляционных поправок // Труды 56-й научной конференции МФТИ. Нано-, био-, информационные и когнитивные технологии. — М.: МФТИ, 2013. — С. 10.
- Б2. А. Д. Заболотский, Ю. Е. Лозовик. Квантовая ёмкость и скорость Ферми электронного газа в графене: влияние многочастичных эффектов // Тезисы докладов IX научно-технической конференции «ВНИИА-2015». — М.: ВНИИА, 2015. — С. 12.
- Б3. Ю. Е. Лозовик, А. Д. Заболотский, А. А. Соколик. Квантовая ёмкость и скорость Ферми электронного газа в графене: влияние многочастичных эффектов // Тезисы докладов XII Российской конференции по физике полупроводников. — М.: ФИАН, 2015. — С. 44.
- Б4. А. Д. Заболотский, Ю. Е. Лозовик. Псевдомагнитное поле в деформированном дираковском материале // Тезисы докладов XII Российской конференции по физике полупроводников. — М.: ФИАН, 2015. — С. 294.
- Б5. A. D. Zabolotskiy, Yu. E. Lozovik, A. A. Sokolik. Quantum capacitance of graphene: The role of Coulomb interactions // Graphene Week 2015 Abstract Book. — 2015. — P. 80.
- Б6. А. Д. Заболотский, Ю. Е. Лозовик. Псевдомагнитное поле в деформированном дираковском материале // Труды 58-й научной конференции МФТИ. Проблемы современной физики. — М.: МФТИ, 2015. — С. 16.
- Б7. A. D. Zabolotskiy, Yu. E. Lozovik. Strain-induced pseudo-magnetic field in Dirac semimetal borophene // Conference on Interactions and Topology in Dirac Systems. — Trieste: ICTP, 2016.
- Б8. А. Д. Заболотский. Псевдомагнитное поле в дираковском полуметал-

ле борофене // Сборник докладов XI научно-технической конференции «ВНИИА-2017». — М.: ВНИИА, 2017. — С. 469–474.

- Б9. *A. A. Sokolik, A. D. Zabolotskiy, Yu. E. Lozovik.* Many-body effects of Coulomb interaction on Landau levels in graphene // Graphene Week 2017 Abstract Book. — 2017. — P. 263.

## Цитированная литература

1. *A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al.* The electronic properties of graphene // *Rev. Mod. Phys.* — 2009. — Vol. 81. — P. 109.
2. *N. P. Armitage, E. J. Mele, A. Vishwanath.* Weyl and Dirac semimetals in three dimensional solids // *Rev. Mod. Phys.* — 2018. — Vol. 90. — P. 15001.
3. *Andrea C. Ferrari, Francesco Bonaccorso, Vladimir Fal'ko et al.* Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems // *Nanoscale.* — 2015. — Vol. 7. — P. 4598.
4. *M. S. Foster, I. L. Aleiner.* Graphene via large  $N$ : A renormalization group study // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 195413.
5. *B. Wunsch, T. Stauber, F. Sols, F. Guinea.* Dynamical polarization of graphene at finite doping // *New J. Phys.* — 2006. — Vol. 8. — P. 318.
6. *G. L. Yu, R. Jalil, B. Belle et al.* Interaction phenomena in graphene seen through quantum capacitance // *PNAS.* — 2013. — Vol. 110. — P. 3282.
7. *J. Chae, S. Jung, A. F. Young et al.* Renormalization of the graphene dispersion velocity determined from scanning tunneling spectroscopy // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Vol. 109. — P. 116802.
8. *A. Kretinin, G. L. Yu, R. Jalil et al.* Quantum capacitance measurements of electron-hole asymmetry and next-nearest-neighbor hopping in graphene // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 88. — P. 165427.
9. *X. Chen, L. Wang, W. Li et al.* Electron-electron interactions in monolayer graphene quantum capacitors // *Nano Research.* — 2013. — Vol. 6. — P. 619.
10. *A. Iyengar, J. Wang, H. A. Fertig, L. Brey.* Excitations from filled Landau levels in graphene // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 75. — P. 125430.
11. *B. Amorim, A. Cortijo, F. de Juan et al.* Novel effects of strains in graphene

- and other two dimensional materials // *Phys. Rep.* — 2016. — Vol. 617. — P. 1.
12. *Z.-F. Zhou, X. Dong, A. R. Oganov et al.* Semimetallic two-dimensional boron allotrope with massless Dirac fermions // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 112. — P. 085502.
  13. *J. L. Mañes.* Existence of bulk chiral fermions and crystal symmetry // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Vol. 85. — P. 155118.
  14. *G. Marc, W. G. McMillan.* The virial theorem // *Adv. Chem. Phys.* — 1985. — Vol. 58. — P. 209.