

ЛЕКЦИИ ПО МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

А.Г.Сергеев

1. ЛЕКЦИЯ 12. ГРАФЕН

1.1. Структура графена. Рассмотрим шестиугольную решетку, составленную из двух треугольных решеток Λ_A и Λ_B (см. Рис.1). При этом решетка Λ_B получается из решетки Λ_A сдвигом на вектор w , так что

$$\ell^2(\Lambda_A \cup \Lambda_B) \cong \ell^2(\Lambda_A) \otimes \mathbb{C}^2.$$

Треугольную решетку Λ_A можно отобразить на квадратную решетку, выбирая два линейно независимых вектора v_1 и v_2 , соединяющих две соседние с A вершины решетки Λ_A , так что каждую точку $x \in \Lambda_A$ можно записать в виде

$$x = n_1 v_1 + n_2 v_2, \quad \text{где } n_1, n_2 \in \mathbb{Z}.$$

Пользуясь этим представлением, можно построить биекцию

$$\Lambda_A \ni x \longrightarrow (n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2,$$

переводящую вектор v_1 в базисный вектор e_1 , а вектор v_2 в базисный вектор e_2 .

Гамильтониан графена h состоит из членов, представляющих собой матрицы связи между ближайшими соседями на шестиугольной решетке. Запишем его в гильбертовом пространстве $\ell^2(\mathbb{Z}^2) \otimes \mathbb{C}^2$, где верхняя компонента отвечает решетке Λ_A , а нижняя – Λ_B . Каждая A -вершина имеет три ближайших соседа, принадлежащих B -решетке, и обратно. Тем самым, гамильтониан h будет задаваться внедиагональной матрицей, содержащей три слагаемых в каждой внедиагональной компоненте. Обозначим через u_1, u_2 трансляции на решетке \mathbb{Z}^2 . Тогда гамильтониан h примет вид

$$h = \begin{pmatrix} 0 & 1 + u_1 + u_2 \\ 1 + u_1^* + u_2^* & 0 \end{pmatrix}.$$

Внедиагональный характер h объясняется наличием киральной симметрии, задаваемой оператором

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

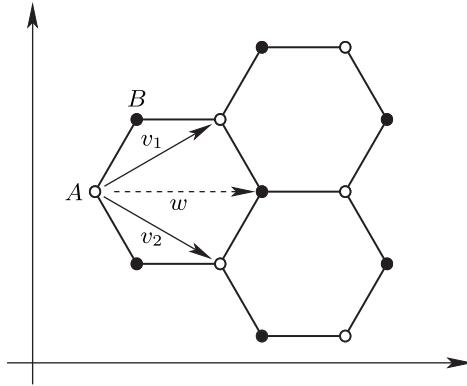


Рис. 1

Перейдем к спектральному анализу гамильтониана h . Применяя преобразование Фуье, запишем h в виде матричной функции $h: \mathbb{T}^2 \rightarrow \text{Mat}_2(\mathbb{C})$ вида

$$h(k) = \begin{pmatrix} 0 & 1 + e^{2\pi i k_1} + e^{2\pi i k_2} \\ 1 + e^{-2\pi i k_1} + e^{-2\pi i k_2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Спектр $h(k)$ имеет вид

$$\sigma(h(k)) = \{\pm|1 + e^{2\pi i k_1} + e^{2\pi i k_2}|\},$$

так что состоит из двух зон, касающихся друг друга в точках Дирака $k_{\pm} = (\pm\frac{1}{3}, \pm\frac{1}{3})$.

Преобразование Фурье унитарного оператора Ферми имеет вид

$$u_F(k) = \frac{1 + e^{2\pi i k_1} + e^{2\pi i k_2}}{|1 + e^{2\pi i k_1} + e^{2\pi i k_2}|}$$

и терпит разрыв в точках Дирака. Этот эффект связан с топологией гамильтониана, поскольку $u_F(k)$ имеет числа вращения, равные ± 1 , при обходе точек Дирака, что было бы невозможно, если бы функция $u_F(k)$ была непрерывна в этих точках. Причина в том, что внедиагональные члены $a_{\pm}(k) = 1 + e^{2\pi i k_{\pm}} + e^{2\pi i k_{\pm}}$ зануляются в точках Дирака.

Вычислим далее числа Черна $\text{Ch}_{\mathcal{T}, \xi}(u_F)$ для этой модели. Достаточно проделать это для базисных векторов e_1, e_2 и в этом случае можно взять только $\xi = e_1$, поскольку гамильтониан h инвариантен относительно замены e_1 на e_2 , так что $\text{Ch}_{\mathcal{T}, e_1}(u_F) = \text{Ch}_{\mathcal{T}, e_2}(u_F)$.

Задача 1. Вычислить инвариант $\text{Ch}_{\mathcal{T}, e_1}(u_F)$.

Рассмотренную модель можно модифицировать, добавляя в нее параметр силы связи λ , т.е. полагая

$$h_{\lambda}(k) = \begin{pmatrix} 0 & \lambda + e^{2\pi i k_1} + e^{2\pi i k_2} \\ \lambda + e^{-2\pi i k_1} + e^{-2\pi i k_2} & 0 \end{pmatrix}$$

с унитарным оператором Ферми $u_{F, \lambda}$.

Задача 2. Разберите эту модель с гамильтонианом h_{λ} самостоятельно.

1.2. Топологические инварианты графена. Рассмотрим периодический гамильтониан, в котором выбрана энергетическая зона E_s , пересекающая другие энергетические зоны в точках k_1, \dots, k_M .

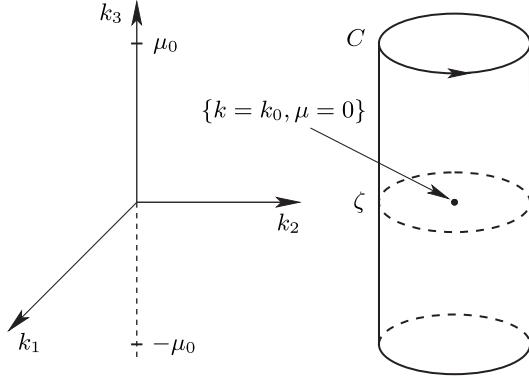


Рис. 2

Фиксируем одну из этих точек, обозначив ее через k_o , и рассмотрим поведение спектрального проектора $t \mapsto P_s(k)$ в окрестности U этой точки.

Определение 1. Семейство проекторов $P(k)$, заданное в проколотой окрестности $\dot{U} = U \setminus \{k_0\}$, такое что отображение $k \mapsto P(k)$ является C^∞ -гладким в окрестности $\dot{U} = U \setminus \{k_0\}$, называется *сингулярным* в точке k_0 , если его нельзя непрерывно продолжить в эту точку, которая называется в этом случае *сингулярной*. Если же указанное семейство проекторов допускает непрерывное продолжение в точку k_0 , то оно называется *регулярным* в этой точке.

Рассмотрим 2-мерное семейство проекторов $\{P_s(k)\}$ в гильбертовом пространстве $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, заданное в окрестности U точки k_0 , такое что $E_s(k) \neq E_n(k)$ при $s \neq n$ и $k \in \dot{U}$. Фиксируем круг $\Delta = \{k \in \mathbb{R}^2 : |k - k_0| < r\}$, содержащийся в U . Мы хотим построить целочисленный инвариант n_V , называемый *захиренностью собственных подпространств* (eigenspace vorticity) или коротко EV-инвариантом.

Для этого введем 2-мерное семейство проекторов $\{P_s^\mu(k)\}$ на U , зависящее от сглаживающего параметра $\mu \in [-\mu_0, \mu_0]$, $\mu_0 > 0$, такое что семейство проекторов $\{P_s^\mu(k)\}$ на $U \setminus \Delta$ является гладкой деформацией семейства $\{P_s(k)\}$, отвечающего $\mu = 0$. Семейство $\{P_s^\mu(k)\}$ при $\mu \neq 0$ определено и непрерывно всюду в U и является там регулярным. Будем предполагать, что отображение $k \mapsto P_s^\mu(k)$ является C^2 -гладким в U .

Деформированное семейство $\{P_s^\mu(k)\}$ позволяет построить векторное расслоение \mathcal{L}_s^μ , называемое *сглаженным блоговским расслоением*, над множеством

$$B = (U \times [-\mu_0, \mu_0]) \setminus C,$$

где $C = \Delta \times [-\mu_0, \mu_0]$ (см. Рис.2).

Тотальное пространство этого расслоения есть

$$\mathcal{L}_s^\mu = \{((k, \mu), v) \in B \times \mathcal{H} : v \in \text{Ran } P_s^\mu(k)\}.$$

Слой \mathcal{L}_s^μ над точкой $(k, \mu) \in B$ совпадает с образом $\{P_s^\mu(k)\}$. Расслоение \mathcal{L}_s^μ можно рассматривать как семейство деформаций расслоения

$$\mathcal{L}_s^0 = \{(k, v) \in (U \setminus \Delta) \times \mathcal{H} : v \in \text{Ran } P_s(k)\}.$$

Обозначим через ω_s^μ *кривизну Берри* для сглаженного блоховского расслоения \mathcal{L}_s^μ . Положим $k_3 = \mu$ и $\partial_j = \partial/\partial k_j$. Тогда

$$\omega_s^\mu = i \sum_{j,l=1}^3 (\omega_s^\mu)_{j,l} dk_j \wedge dk_l,$$

где

$$(\omega_s^\mu)_{j,l}(k) = \text{Tr}(P_s^\mu(k)[\partial_j P_s^\mu(k), \partial_l P_s^\mu(k)]).$$

Обозначим через $\mathcal{C} = \partial C$ и через $\dot{\mathcal{C}} = C \setminus \{k = k_0, \mu = 0\}$.

Определение 2. EV-инвариант для сглаженного семейства проекторов $\{P_s^\mu(k)\}$, $k \in \dot{U}$, в точке $k_0 \in U$ определяется как

$$n_V = n_V(P_s^\mu) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{C}} \omega_s^\mu \in \mathbb{Z}.$$

Это число является целым, поскольку оно совпадает (с точностью до ориентации) с 1-м числом Черна расслоения $\mathcal{L}_s^\mu \rightarrow \mathcal{C}$.

Рассмотрим далее модель, называемую *1-канонической*. В этой модели имеются две энергетических зоны, т.е. $P_s(k)$ является проектором в $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ с $\dim P_s(k) = 1$ при $k \neq k_0$. Обозначим $q = k - k_0$ и запишем q в полярных координатах $q_1 + iq_2 = |q|e^{i\theta_q}$.

Рассмотрим далее гамильтониан $H_{\text{eff}}(q)$, имеющий вид

$$H_{\text{eff}}(q) = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 \\ q_2 & -q_1 \end{pmatrix} = |q| \begin{pmatrix} \cos \theta_q & \sin \theta_q \\ \sin \theta_q & -\cos \theta_q \end{pmatrix}.$$

Собственные значения этой матрицы равны $E_\pm(q) = \pm|q|$.

Отвечающие им собственные функции имеют вид

$$\Phi_+(q) = e^{i\theta_q/2} \begin{pmatrix} \cos(\theta_q/2) \\ \sin(\theta_q/2) \end{pmatrix}, \quad \Phi_-(q) = e^{i\theta_q/2} \begin{pmatrix} -\sin(\theta_q/2) \\ \cos(\theta_q/2) \end{pmatrix}.$$

Эти функции удовлетворяют соотношениям

$$\partial_{|q|} \Phi_\pm = 0, \quad \partial_{\theta_q} \Phi_\pm = \frac{1}{2}(\pm \Phi_\pm + i\Phi_\pm).$$

Отвечающие им собственные проекторы равны

$$P_\pm(q) = \pm \frac{1}{2|q|} \begin{pmatrix} q_1 \pm |q| & q_2 \\ q_2 & -q_1 \pm |q| \end{pmatrix} = \pm \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta_q \pm 1 & \sin \theta_q \\ \sin \theta_q & -\cos \theta_q \pm 1 \end{pmatrix},$$

откуда видно, что семейства $\{P_\pm(q)\}_{q \in \Delta}$ имеют сингулярности при $q = 0$.

Сглаживающий гамильтониан можно взять в виде

$$H_{\text{eff}}^\mu(q) = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 + I\mu \\ q_2 - i\mu & -q_1 \end{pmatrix} = |q| \begin{pmatrix} \cos \theta_q & \sin \theta_q + i\eta \\ \sin \theta_q - i\eta & -\cos \theta_q \end{pmatrix},$$

где

$$\eta = \eta^\mu(q) = \frac{\mu}{|q|}.$$

Собственные значения этого гамильтониана равны

$$E_{\pm}^{\mu}(q) = \pm\sqrt{|q|^2 + \mu^2} = \pm|q|\sqrt{1 + \eta^2}$$

и при $\mu \neq 0$ энергетические зоны не пересекаются.

Собственные функции комплексны и имеют вид

$$\Phi_{\pm}^{\mu}(q) = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} (\Phi_{\pm}(q) + i\alpha\Phi_{\mp}(q)) ,$$

где

$$\alpha = \alpha^{\mu}(q) = \frac{1 - \sqrt{1 + \eta^2}}{\eta} = \frac{|q| - \sqrt{|q|^2 + \mu^2}}{\mu}.$$

Отвечающие им собственные проекторы равны

$$\begin{aligned} P_{\pm}^{\mu}(q) = & \pm \frac{1}{2\sqrt{|q|^2 + \mu^2}} \begin{pmatrix} q_1 \pm \sqrt{|q|^2 + \mu^2} & q_2 + i\mu \\ q_2 - i\mu & -q_1 \pm \sqrt{|q|^2 + \mu^2} \end{pmatrix} = \\ & \pm \frac{1}{2\sqrt{|q|^2 + \mu^2}} \begin{pmatrix} \cos\theta_q \pm \sqrt{1 + \eta^2} & \sin\theta_q + i\eta \\ \sin\theta_q - i\eta & -\cos\theta_q \pm \sqrt{1 + \eta^2} \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Для гамильтонова описания собственных подпространств введем понятие *стратифицированного расслоения*. При $s = \pm$ так называется линейное расслоение \mathcal{P}_s над \dot{C} , слой которого в точке $(q, \mu) \in \dot{C}$ совпадает с $\text{Ran } P_s^{\mu}(q)$. Это расслоение полностью характеризуется своим 1-м классом Черна, задаваемым интегралом по \mathcal{C} от кривизны Берри, которая равна

$$\omega_{\pm}^{\mu} = \pm \frac{1}{2} \left[\partial_{|q|} \left(\frac{\mu}{\sqrt{|q|^2 + \mu^2}} \right) d|q| \wedge d\theta_q - \partial_{\mu} \left(\frac{\mu}{\sqrt{|q|^2 + \mu^2}} \right) d\theta_q \wedge d\mu \right].$$

Интегрируя ее по \mathcal{C} , получим

$$\text{Ch}(P_{\pm}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{C}} \omega_{\pm}^{\mu} = \mp 1,$$

что о эквивалентно $n_V(\mathcal{P}_{\pm}) = \pm 1$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Y.Hatsugai, T.fukui, H.Aoki, *Topological aspects of graphene*, Europ. Phys. J. Special Topics, 148, 133-137, 2007.
- [2] A.Cortijo, G.guinea, M.A.H.Vozmediano, *Geometrical and topological aspects of graphene and related materials*, J. Phys. A: Math. Theor., 45, 383001, 2012.
- [3] D.Monaco, G.Panati, *Topological invariants of eigenvalue intersections and decrease of Wannier functions in graphene*, J. Stat. Phys. 155, No.6,1027-1071, 2014.