

Válasz Kriza György opponensi véleményére

Köszönöm Kriza Györgynek a dolgozat alapos elemzését, konstruktív észrevételeit, és fontos vonatkozások tisztázására alkalmat adó kérdéseit. A dolgozat nyelvezetére és az ábrák szerkesztésére vonatkozó megjegyzéseit jövőbeni munkáimban hasznosítom. A bíráló öt kérdést tett fel a bemutatott számításokkal kapcsolatban, amelyekre az alábbiakban igyekszem kimerítő választ adni.

Válaszok a számozott kérdésekre

1. Köszönöm az észrevételt, amely rávilágít néhány fontos, de a lényeget nem érintő hibára a 2.1. fejezetben.

Valóban, kétrétegű grafén pontcsoportja D_{3d} . (Az eredeti publikációkban így szerepelt, én az utolsó pillanatban kapkodva javítottam át hibásra.) Ezért a 2.1. ábrán a sárga sík jelölése helyesen σ_d , nem σ_v .

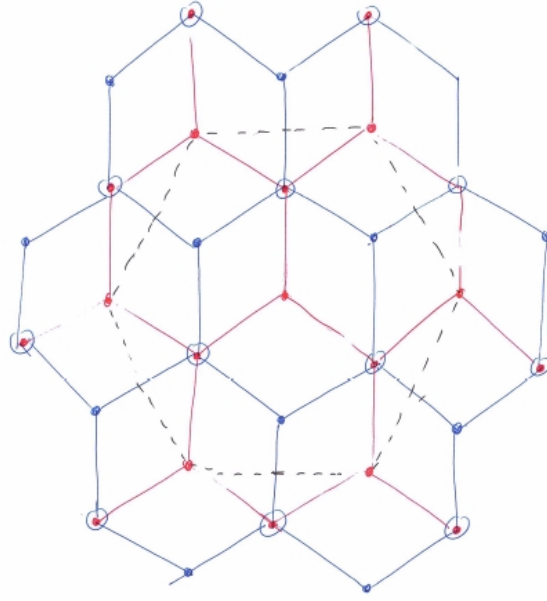
Annak nincs jelentősége, hogy a Brillouin-zóna K pontjában az elektronállapotok szimmetriája D_3 . Nem erre használjuk a szimmetriát, hanem a lokális anizotróp kölcsönhatási tagok osztályozására. Térben ezeket Dirac-deltaként, momentum-térben konstansként modellezzük, viszont, mivel az alacsonyenergiájú kétsávós hamiltoniban a két Dirac-pont (K és K') és két alrács (A és $\tilde{B}$) megjelenik, együttthathóik 4×4 -es mátrixok, amiket $\hat{M}_i^j$ -vel jelöltem [(2.1c) egyenlet].

A C_{6v} és a D_{3d} csoportok karaktertáblája megegyezik; a 1. táblázatban a kettőt együtt adom meg úgy, hogy abból a megfeleltetés kiderüljön. Annak, hogy a D_{3d} csoport terminológiája helyett a C_{6v} csoport terminológiáját használtuk, semmi mélyebb oka sincs: társszerzőim ezt preferálták, mivel egyrétegű grafénról már sok cikket írtak.

C_{6v}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$
D_{3d}	E	$2S_6$	$2C_3$	i	$3C'_2$	$3\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_{1g}						
A_2	1	1	1	1	-1	-1
A_{2g}						
B_1	1	-1	1	-1	1	-1
B_{1g}						
B_2	1	-1	1	-1	-1	1
B_{2g}						
E_1	2	1	-1	-2	0	0
E_u						
E_2	2	-1	-1	2	0	0
E_g						

1. táblázat. A C_{6v} és D_{3d} csoportok karaktertáblája. Jelölések: C_n : $2\pi/n$ forgás a főtengely körül, S_6 : $2\pi/n$ forgatás a főtengely körül plusz tükrözés a főtengelyre merőlegesen (D_{3d}), i : inverzió (D_{3d}), C'_2 : kétfogású tengely, amely a főtengelyre merőleges (D_{3d}), σ_d , σ_v : tükörsíkok, amelyek a főtengelyt tartalmazzák.

A kiterjesztett szimmetriacsoport (nem pontcsoport, elnézést a dolgozatban szereplő bakiért) $D''_{3d} = D_{3d} + \hat{t}_1 D_{3d} + \hat{t}_2 D_{3d}$, ahol $\hat{t}_1$ és $\hat{t}_2$ két elemi rácsvektor. Az elemi cellát is



1. ábra. A kiterjesztett elemi cella, amely 12 atomot tartalmaz. A két réteg atomjait piros illetve kék színnek jelöltem, ahol egymás felett vannak, ott az egyik atom karika lett. A szimmetriacsoport $D''_{3d} = D_{3d} + \hat{t}_1 D_{3d} + \hat{t}_2 D_{3d}$ lesz.

megnöveltük, lásd a 1. ábrát. A csoport kiterjesztésének oka az, hogy az $\hat{M}_i^j$ mátrixok egyben rendparaméterekhez is kapcsolódnak, és a munka során érdekesnek tűnt olyan rendparamétereket is megengedni, amelyek hatszöges plaketteken értelmezhetők, lásd például [1] cikk 2. ábrájának alsó sorát. (Ez utóbbi társszerzőim munkája, amelyben én már nem vettem részt.) Könnyen látható, hogy D''_{3d} -ben $\hat{t}_1$ és $\hat{t}_2$ azonos konjugáltosztályba tartozik. Ez alapján [2] II. táblázatának fejléce a 2. táblázattöredékben mutatott módon módosul. A további sorok nem változnak. Megjegyzem, hogy az első hat sort olyan reprezentációknak felelnek meg, amelyekben a $\hat{t}_1$ és $\hat{t}_2$ eltolások triviálisan reprezentálódnak, itt nincs lényegi eltérés a D_{3d} csoport karaktereitől. A domináns rendparaméter D_{3d} csoport nyelvén E_g reprezentációhoz tartozik, azaz C_3 és S_6 műveletek nem maradnak meg szimmetrának, de az i inverzió (ami C_{6v} -ban a C_2 forgásnak felel meg) igen (lásd az 1. táblázat utolsó sorát).

D''_{3d}	E	$\hat{t}_1, \hat{t}_2$	$i, \hat{t}_1 i, \hat{t}_2 i$	C_3, C_3^2	$\hat{t}_1 C_3, \hat{t}_1 C_3^2, \hat{t}_2 C_3, \hat{t}_2 C_3^2$	$S_6, S_6^5, \hat{t}_1 S_6, \hat{t}_1 S_6^5, \hat{t}_2 S_6, \hat{t}_2 S_6^5$	σ_v	$\hat{t}_1 \sigma_v, \hat{t}_2 \sigma_v$	$\sigma_d, \hat{t}_1 \sigma_d, \hat{t}_2 \sigma_d$
------------	-----	------------------------	-------------------------------	--------------	--	--	------------	--	--

2. táblázat. A D''_{3d} csoport karaktertáblájának konjugáltosztályai. Analóg [2] II. táblázatával, a jelölések apró eltéréseitől eltekintve.

A [?] cikk III. táblázata is módosul, részben az eltérő jelölésrendszer, részben a más szimmetriacsoport, részben az alrácson vett eltérő előjelkonvenció [(2.1c) egyenlet] miatt. Ezt alább a 3. táblázat mutatja.

Természetesen vannak más javaslatok is a kétrétegű grafén alapállapotára, lásd alább a 4. pontot; a kísérleteket Cserti Józsefnek adott válaszok közül a 6. tekinti át. Jelenleg nem tudok olyan elméleti számításról, amely ezek között döntené tudna.

D''_{3d} irr.	A_1	B_1	A_2	B_2	E_1	E_2	E'_1	folyt.	E'_2	folyt.	G	folyt.
D_{3d} irr.	A_{1g}	A_{1u}	A_{2g}	A_{2u}	E_u	E_g	A_{1g}	A_{1u}	A_{2g}	A_{2u}	E_u	E_g
mátrix	$\hat{M}_0^0$	$\hat{M}_3^0$	$\hat{M}_0^3$	$\hat{M}_3^3$	$\hat{M}_0^1, \hat{M}_0^2$	$\hat{M}_3^1, -\hat{M}_3^2$	$\hat{M}_1^3$	$\hat{M}_2^3$	$\hat{M}_1^0$	$\hat{M}_2^0$	$\hat{M}_1^2, -\hat{M}_1^1$	$\hat{M}_2^1, \hat{M}_2^2$

3. táblázat. Analóg [2] III. táblázatával.

2. Lényegében nem. Az éleken terjedő gerjesztések a transzport-tulajdonságokat határozzák meg, az általam kiszámolt gerjesztési spektrum a minta belsejére vonatkozik. Ez utóbbit inelasztikus elektronszórással szokták vizsgálni, bár az általam ismert ilyen jellegű mérések hagyományos kétdimenziós elektrongázra vonatkoznak. Hacsak a minta nem extrém kicsi, az éleken terjedő és a tömbi rész gerjesztései függetlenek egymástól.
3. Kimerítő válaszhoz természetesen szükséges lenne a 2.3. fejezet számolását további tagok figyelembe vételével megismételni. Mivel az említett részecske-lyuk sértő csatolás $\gamma_4 \approx 0.04$ eV, kellően erős mágneses térrel elnyomható:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon\ell} / \gamma_4 \approx \frac{1.4}{\epsilon_r} \sqrt{B[\text{T}]}.$$

Kis B esetén, abban a tartományban, ahol az Ising-típusú kvantuált Hall ferromágneses átalakulást vártam, γ_4 hatása jelentős lehet.

Fontos megjegyezni, hogy a Barlas *et al.* [3] munkájára visszavezethető elméletekben a részecske-lyuk szimmetria sérülése kölcsönhatási effektus, ezért erős mágneses térben $\sqrt{B}$ -vel arányosan egyre erősebb lesz. A fejezet fő állítása, hogy a kölcsönhatásnak nincs ilyen hatása, mindenképpen fennáll.

4. Még elképzelnem sem kell, mivel kétrétegű grafén esetében a spinsűrűség-hullám és a völgyek betöltésével kapcsolatos pszeudospin-sűrűség hullám állapotoknak terjedelmes elméleti irodalma van, és időnként a kísérleti munkák is adnak támpontokat ezen állapotoknak realitásával kapcsolatban. Külön kitérek a nulla és a véges külső mágneses tér esetére.

Az egyik legkorábbi cikk [4] a kétrétegű grafén alapállapotát vizsgálja külső mágneses tér nélkül, kis mértékű dőpolásnál. Ha az elektron-elektron kölcsönhatás hosszú távú részét veszik figyelembe, és elhanyagolják a völgyek közötti kicserélődési kölcsönhatást, ferromágneses instabilitást találnak. (Ez egy Bloch-típusú variációs számolás eredménye, amelyben az egyik völgyben az egyik spin többletét, a másikban az ellentétes spin azonos mértékű többletét engedik meg.) Ellenben, ha a kölcsönhatás rövid távú részét veszik figyelembe egy Hubbard U taggal, antiferromágneses rendeződést kapnak (átlagtér és RPA). Ez utóbbi nem igazán meglepő, mivel a rács páros (bipartite), ugyanakkor kétségbe vonható, mivel a legfeljebb 0.4 eV-ig érvényes kétsáv-modellbe tesznek bele egy Hubbard U -t, aminek több elektronvoltage értéket kell felvennie. Mivel az alacsonyenergiás hullámfüggvényeknek azokon az alrácson van amplitúdójuk, amelyek nincsenek közvetlenül egymás felett/alatt, ez a réteg-antiferromágnes egyben spinsűrűség-hullám állapot a minta síkjában.

Ennél általánosabb a pszeudospin mágnesek elmélete [5]. Ez szintén átlagtérelméleti számolás, amit később RG módszerrel is alátámasztottak [6, 7]. A négy spin- és völgycsatornában egyaránt megengedve részecske-lyuk párok kondenzációját, mindegyik komponensben külön-külön létrejöhet átrendeződés a rétegek között. Azt találták, hogy töl-

tésszemleges esetben az alapállapot „pszeudospin antiferromágnes”, azaz a négy csatornából kettőben a felső, kettőben az alsó rétegre megy át töltés. Ezek között van kvantált anomális Hall (QAH), kvantált spin Hall (QSH) és réteg antiferromágnes (LAF) állapot; az utóbbi egyben spinsűrűség-hullám, amit bizonyos mértékig *ab initio* számolás is megerősít [8]. Másfelől, ha a Coulomb-kölcsönhatás „SU(4) szimmetrikus határesetét” tekintjük, ami praktikusán azt jelenti, hogy eltekintünk a rétegen belüli $V(q) = 2\pi/q$ és a rétegek közötti $V'(q) = 2\pi e^{-dq}/q$ kölcsönhatások különbségétől ($d \approx 0.335$ nm a rétegtávolság), akkor *átlagtérelméleti szinten* minden pszeudospin mágnes – LAF, QSH, QAH, valamint egyéb állapotok, amelyek rétegek közötti töltésmegosztással járnak, pl. a kvantált völgy Hall (QVH) állapot – azonos energiájúak [9]. Ezért az alapállapot kiválasztásában szerepe lehet a kvantumfluktuációknak, a termikus fluktuációknak, annak, hogy a rétegek közötti és a rétegen belüli kölcsönhatás kissé eltér, valamint a kölcsönhatás rövid távú részének, ami a rácsszerkezet szimmetriáját követi. Ezek egymáshoz hasonló nagyságrendű effektusok, csakúgy, mint a háromszöges torzulás, amit a dolgozat 2.1. fejezete diszkutál. A témának kiterjedt elméleti és kísérleti irodalma van, amelyben még nagyon messze vagyunk bármiféle konszenzus kialakulásától. Színvonalas áttekintést adnak a [10, 11] cikkek.

Erős mágneses tér jelenlétében, a kvantált Hall tartományban is javasoltak spin-sűrűség hullám állapotokat. Így $\nu = 0$ betöltést számnál, amelyről a 2.2. fejezet is szól, Kharitonov megmutatta [12], hogy ha figyelembe vesszük azt, hogy az elektronállapotok közötti kölcsönhatás a rácsszimmetriát tükröző módon anizotróp tövid hatótávolságú tagokkal egészítendő ki, a ferromágneses és a rétegpolarizált állapotokon túl *canted* antiferromágnes is kialakulhat. Kidolgozta a fázisdiagramot két anizotrópia-energia paraméter függvényében. Ezeket a paramétereket persze nem lehet közvetlenül mérni. Kharitonov amellettt érvelt, hogy reális esetben a *canted* antiferromágneses alapállapot lesz az alapállapot.

Mivel a külső mágneses térbe helyezett kétrétegű grafén esetében az $n = 0$ és $n = 1$ Landau pályák degeneráltak (ha kisebb effektusoktól eltekintünk), a pályák lineárkombinációinak terén is definiálhatunk egyfajta pseudo- vagy izospint. Nagyon érdekes Côté *et al.* [13] felvetése, akik megmutatták, hogy $\nu = 1, 3$ betöltöttségeknél átlagtérelméletben eze között a pszeudospinok között Dzsalosinszkij-Morija kölcsönhatás lép fel, ami pszeudospin helikális rendet alakít ki. Ezzel kapcsolatban Thierry Jolicoeur kollégám végzett számításokat kis rendszerek ($N \leq 16$) teljes diagonalizációjával. Talált az eltolási invarianciát sértő megoldásokat, de nem azoknál a kvantumszámokál, amiket pszeudospin helikális elmélet jósol. Ez a munka még folyamatban van.

5. Igen, $\nu = 7/2$ tört esetében lényegében ugyanaz történik, mint $5/2$ -nél, hiszen a különbség a két tört között mindössze annyi, hogy más spinkomponensből áll a félig betöltött $n = 1$ Landau-szint. Adott elektronsűrűség mellett persze $\nu = 7/2$ -nél a mágneses tér valamivel kisebb, a Coulomb-kölcsönhatás $\frac{e^2}{4\pi\epsilon\ell}$ energiaskálásának és a ciklotron-energiának hányadosa kissé nagyobb, tehát a Landau-szintek keveredése kissé erősebb, mint $5/2$ -nél.

Más törtekre nem általánosíthatók a 4.2. fejezet eredményei: $\nu \geq 9/2$ feles betöltéseknél anizotróp állapotok jelennek meg (lásd a 1.2. fejezet végén), $\nu \leq 3/2$ feles betöltéseknél pedig összenyomható állapot (lásd a 4.7. fejezetet).

Budapest, 2018. június 5.

Tőke Csaba, PhD
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Elméleti Fizikai Tanszék

Hivatkozások

- [1] Y. Lemonik, I. Aleiner, and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **85**, 245451 (2012).
- [2] D. M. Basko, Phys. Rev. B **78**, 125418 (2008).
- [3] Y. Barlas, R. Côté, K. Nomura, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **101**, 097601 (2008).
- [4] J. Nilsson, A. H. Castro Neto, N. M. R. Peres, and F. Guinea, Phys. Rev. B **73**, 214418 (2006).
- [5] H. Min, G. Borghi, M. Polini, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **77**, 041407 (2008).
- [6] F. Zhang, J. Jung, G. A. Fiete, Q. Niu, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **106**, 156801 (2011).
- [7] F. Zhang, D. Tilahun, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **85**, 165139 (2012).
- [8] Y. Wang, H. Wang, J.-H. Gao, and F.-C. Zhang, Phys. Rev. B **87**, 195413 (2013).
- [9] R. Nandkishore and L. Levitov, Phys. Rev. B **82**, 115124 (2010).
- [10] R. Nandkishore and L. Levitov, Physica Scripta **2012**, 014011 (2012).
- [11] A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Physics Reports **648**, 1 (2016).
- [12] M. Kharitonov, Phys. Rev. Lett. **109**, 046803 (2012).
- [13] R. Côté, J. P. Fouquet, and W. Luo, Phys. Rev. B **84**, 235301 (2011).