

Министерство общего и профессионального образования  
Российской Федерации  
Московский физико-технический институт  
(Государственный Университет)

Бакалаврская диссертация

# **ЭКСИТОНЫ В ГРАФЕНЕ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ**

Студент 328 гр. Имакаев М.В.

Научные руководители:  
д.ф.-м.н., профессор Иорданский С.В.

Москва, 2007г.

# Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Зонная структура графена</b>	<b>2</b>
2.1	Особенности зонной структуры . . . . .	2
2.2	Графен в магнитном поле . . . . .	4
<b>3</b>	<b>Вычисление спектра</b>	<b>5</b>
3.1	Гамильтониан системы . . . . .	5
3.2	Вычисление матричных элементов Кулоновского взаимодействия . . . . .	7
3.3	Уравнение Шредингера . . . . .	9
3.4	Энергия активации . . . . .	10
3.5	Спектр экситона . . . . .	11
<b>4</b>	<b>Анализ полученного выражения</b>	<b>12</b>
4.1	Ассимптотики . . . . .	12
4.2	Критерий применимости . . . . .	12

## 1 Введение

Графен - это монослой углерода, образующий гексагональную кристаллическую решетку. До 2005 года считалось, что графен, как двумерный кристалл, неустойчив, и не может быть получен в лаборатории. В 2005 году группа ученых смогла получить образцы графена на подложке из  $SiO_2$  [1]. С этого момента началось активное теоретическое и экспериментальное изучение графена.

Графен обладает множеством необычных свойств, возникающих из-за его зонной структуры. Спектр носителей в графене вблизи поверхности Ферми линеен, что соответствует безмассовым релятивистским частицам. Зона проводимости и валентная зона соприкасаются в двух неэквивалентных углах зоны бриллюэна.

Необычный закон дисперсии в графене требует пересмотра большого числа явлений, присущих нормальным металлам. В данной работе речь пойдет о спектре экситонов в сильном магнитном поле.

В качестве основного состояния возьмем состояние, в котором нулевой уровень Ландау целиком заполнен, а первый полностью свободен. В случае несмещенного ферми-уровня нулевой уровень Ландау заполнен наполовину, однако, его всегда можно сместить с помощью затворного

напряжения. В случае не целиком заполненного уровня Ландау решение задачи чрезвычайно затруднено из-за многократного вырождения нулевого состояния системы.

Будем представлять экситон, как переброс электрона с нулевого уровня Ландау на первый. Получившееся возбуждение будет электронейтрально, поэтому, в отличие от электрона, оно должно обладать законом дисперсии в магнитном поле. В нулевом приближении энергия возбуждения не зависит от  $q$ , и равна энергии первого уровня Ландау. Кулоновское взаимодействие вносит поправку в энергию, и она становится зависящей от импульса экситона. Задачей моей работы было найти эту поправку, и посмотреть, выполняется ли в случае графена теорема Кона  $V^{(1)}(q = 0) = 0$ , т.е. кулоновское взаимодействие не дает поправки к энергии экситона с импульсом, равным нулю.

## 2 Зонная структура графена

### 2.1 Особенности зонной структуры

В приближении сильно связанных электронов полная волновая функция всех электронов кристалла запишется в виде суммы волновых функций электронов из разных подрешеток.

$$\psi = \phi_1 + \lambda\phi_2$$

где коэффициент  $\lambda$  - вариационный параметр. Входящие в уравнение волновые функции  $\phi_1$  и  $\phi_2$  запишутся в виде суммы волновых функций отдельных электронов в различных подрешетках кристалла

$$\phi_1 = \sum_A e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_A} X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A)$$

$$\phi_2 = \sum_B e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_B} X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B).$$

Здесь  $\mathbf{r}_A$  и  $\mathbf{r}_B$  - радиус-векторы направленные на узлы кристаллической решетки, а  $X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A)$  и  $X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B)$  - волновые функции электронов, локализованных вблизи этих узлов. В приближении сильно связанных электронов мы можем пренебречь перекрытием волновых функций соседних атомов.

$$\int X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) d\mathbf{r} = 0$$

Теперь, подставив в уравнение Шредингера  $H\psi = E\psi$  нашу волновую функцию, получим для энергетического спектра носителей и неизвестного параметра  $\lambda$  следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} H_{11} + \lambda H_{12} &= ES \\ H_{21} + \lambda H_{22} &= \lambda ES, \end{aligned} \quad (1)$$

где используются следующие обозначения для интегралов:

$$\begin{aligned} H_{jj} &= \int \phi_j^* H \phi_j d\mathbf{r} \\ H_{12} = H_{21}^* &= \int \phi_1^* H \phi_2 d\mathbf{r} \\ S &= \int \phi_j^* \phi_j d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (2)$$

Решим эту систему относительно  $E$ :

$$E = \frac{1}{2S} \left( H_{11} + H_{22} \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2} \right).$$

Здесь можно сделать некие упрощения:

$$\begin{aligned} S &= N, \\ H_{11} &= H_{22}, \\ H'_{11} = H'_{22} &= \frac{1}{N} H_{11} = \frac{1}{N} H_{22}, \\ H'_{12} &= \frac{1}{N} H_{12}, \end{aligned} \quad (3) \quad (1.10)$$

где  $N$  - число ячеек в кристалле.

Отсюда приходим к уравнению:

$$E = H'_{11} \pm |H'_{12}|.$$

Учтем только перекрытие между ближайшими атомами, пренебрегая перекрытием внутри одной подрешетки (поскольку атомы этой же подрешетки находятся дальше, чем атомы другой подрешетки).

$$E = \pm |H'_{12}|.$$

Интеграл перекрытия можно представить в виде:

$$\gamma_0 = - \int X^*(\mathbf{r} - \rho) H X(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

где  $\rho$  - радиус-вектор направленный в позиции ближайших соседей. Для величины  $H'_{12}$  получим:

$$H'_{12} = \frac{1}{N} \sum_{A,B} \exp[-2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B)] \int X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) d\mathbf{r}.$$

Подставив сюда координаты ближайших соседей, получим:

$$H'_{12} = -\gamma_0 \left( \exp[-2i\pi k_x(a/\sqrt{3})] + 2 \cos \pi k_y a \exp[2i\pi k_x(a/\sqrt{3})] \right).$$

В итоге, получаем следующий энергетический спектр:

$$E = \pm \sqrt{\gamma_0^2 \left( 1 + 4 \cos^2 \pi k_y a + 4 \cos \pi k_y a \cos \pi k_x \sqrt{3} a \right)} \quad (4)$$

где знак  $\langle + \rangle$  соответствует электронам, а  $\langle - \rangle$  - дыркам.

Вблизи углов зоны, что соответствует волновым векторам  $\left( \pm \frac{a}{\sqrt{3}}, \pm \frac{a}{3} \right)$  и  $\left( 0, \pm \frac{2a}{3} \right)$ , закон дисперсии получается линейным.

## 2.2 Графен в магнитном поле

Поскольку закон дисперсии в графене вблизи углов зоны линейный, то электроны в этой области подчиняются уравнению Дирака. Мы пренебрегаем наличием двух неэквивалентных волновых векторов в первой зоне бриллюэна, и рассматриваем возбуждения только в окрестности одного конуса. Уравнение Дирака для электронов и дырок в окрестности одного конуса примет следующий вид:

$$\begin{aligned} H_0 &= -i\hbar v \begin{pmatrix} \sigma \nabla & 0 \\ 0 & -\sigma \nabla \end{pmatrix} = \\ &= -i\hbar v \begin{pmatrix} 0 & \nabla_x - i\nabla_y & 0 & 0 \\ \nabla_x + i\nabla_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\nabla_x + i\nabla_y \\ 0 & 0 & -\nabla_x - i\nabla_y & 0 \end{pmatrix} \quad (5) \end{aligned}$$

Четыре компоненты соответствуют амплитуде каждой из двух частиц (электрона и дырки) на каждой из двух подрешеток. Уравнения для электронов и дырок в магнитном поле оказываются независимыми. Тогда, решив получившееся уравнение с учетом магнитного поля, получим уровни энергии:

$$E_n = \sqrt{2ev_F^2 B n} \quad (6)$$

Тут и далее полагаем  $\hbar = c = 1$ .

Уровни Ландау для уравнения Дирака получились неэквидистантными. Мы будем рассматривать возбуждения с заполненного нулевого на свободный первый уровень Ландау. В нулевом приближении эти возбуждения имеют энергию:

$$E^{(0)} = \sqrt{2ev_f^2 B} \quad (7)$$

Волновые функции графена в магнитном поле даются комбинациями волновых функций для классической частицы в магнитном поле. Это легко понять следующим образом: если гамильтониан (5) возвести в квадрат, то, с точностью до сдвига энергии, мы получим гамильтониан классической частицы в магнитном поле.

Волновые функции имеют следующий вид:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{array}{l} \eta_{|n|,p}(\mathbf{r}) \\ \pm \eta_{|n|-1,p}(\mathbf{r}) \end{array} \right\} \quad (8)$$

при  $n \neq 0$  либо

$$\Psi = \left\{ \begin{array}{l} \eta_{0,p}(\mathbf{r}) \\ 0 \end{array} \right\} \quad (9)$$

при  $n = 0$ , где знак  $\langle + \rangle$  соответствует валентной зоне, а  $\langle - \rangle$  соответствует зоне проводимости, а

$$\eta_{n,p} = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ipy) \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \exp(-(x+p)^2/2) H_n(x+p) \quad (10)$$

- волновые функции классической частицы в магнитном поле.

Здесь и далее выберем следующий масштаб измерения длины:

$$\lambda_H = \sqrt{\frac{1}{e|H|}} \quad (11)$$

Это приведет к замене:

$$x \rightarrow x\lambda_H, \quad y \rightarrow y\lambda_H, \quad p \rightarrow p/\lambda_H. \quad (12)$$

Двум компонентам волновой функции соответствуют амплитуды волновой функции на двух подрешетках в приближении сильной связи.

## 3 Вычисление спектра

### 3.1 Гамильтониан системы

Воспользуемся тем же методом, что использовался в статье [2] для решения аналогичной задачи в случае нормального металла. Запишем оператор межэлектронного взаимодействия через пси-операторы:

$$H_{int} = \frac{1}{2} \int \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) \quad (13)$$

Разложим операторы  $\hat{\Psi}$  и  $\hat{\Psi}^+$  по операторам рождения и уничтожения, причем оставим только операторы рождения и уничтожения на нулевой и первом уровнях Ландау:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_p [\hat{a}_{0p} \psi_{0p}(\mathbf{r}) + \hat{a}_{1p} \psi_{1p}(\mathbf{r})] \quad (14)$$

В качестве волновой функции  $\psi(\mathbf{r})$  следует подставить волновую функцию электрона, полученную из двухкомпонентной волновой функции суммированием по двум подрешеткам в приближении сильной связи.

$$\psi(\mathbf{r}) = \left\{ \begin{array}{c} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{array} \right\} = \sum_A \psi_1(\mathbf{r}_A) X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) + \sum_B \psi_2(\mathbf{r}_B) X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B), \quad (15)$$

где суммирование ведется по всем узлам подрешеток  $A$  и  $B$ , а  $X(\mathbf{r})$  - волновая функция электрона, локализованного на одном из узлов решетки.

Подставив в (13) волновые функции из (14), получим:

$$\begin{aligned} H_{int} = & \sum_{p,p',q_y} \frac{1}{2} V_0(p, p', p' - q_y, p + q_y) \hat{a}_{0,p}^+ \hat{a}_{0,p'}^+ \hat{a}_{0,p'-q_y} \hat{a}_{0,p+q_y} + \\ & + (V_{0110}(p, p', p' + q_y, p - q_y) - V_{0101}(p, p', p - q_y, p' + q_y)) \times \\ & \times \hat{a}_{0,p}^+ \hat{a}_{1,p'}^+ \hat{a}_{1,p'+q_y} \hat{a}_{0,p-q_y}, \quad (16) \end{aligned}$$

где матричные элементы  $V$  определяются согласно:

$$\begin{aligned} V_{abcd}(p, p_1, p_2, p_3) = \\ = \int \int \psi_{a,p_1}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{b,p_2}^*(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \psi_{c,p_3}(\mathbf{r}_2) \psi_{d,p_3}(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2. \quad (17) \end{aligned}$$

Обозначим через  $U_{abcd}(p, p_1, p_2, p_3)$  матричный элемент кулоновского взаимодействия между классическими осциляторными функциями  $\eta_n(p)$ :

$$U_{abcd}(p, p_1, p_2, p_3) = \int \int \eta_{a,p_1}^*(\mathbf{r}_1) \eta_{b,p_2}^*(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \eta_{c,p_3}(\mathbf{r}_2) \eta_{d,p_3}(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \quad (18)$$

Рассмотрим следующий интеграл, и преобразуем его с помощью (8) и (9). Пусть для примера  $n, m > 0$ .

$$\begin{aligned}
I &= \int \psi_{n,p}(\mathbf{r})\psi_{m,p'}(\mathbf{r})V(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \\
&= C \int \left( \sum_A \eta_{m,p}(\mathbf{r}_A)X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) + \sum_B \eta_{n-1,p}(\mathbf{r}_B)X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) \right) \times \\
&\times \left( \sum_A \eta_{m,p'}(\mathbf{r}_A)X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) + \sum_B \eta_{n-1,p'}(\mathbf{r}_B)X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) \right) V(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (19)
\end{aligned}$$

Поскольку электроны сильно локализованы то перекрытием атомарных волновых функций  $X(r)$  между соседними атомами, можно пренебречь. Соответственно, можно перебречь перекрытием волновых функций между разными подрешетками. Тогда произведение двух сумм сведется к одной. Учитывая, что функции  $\eta_{m,p}$  меняются медленно на атомарных масштабах, можно перейти обратно от суммирования к интегрированию, и, учитывая нормировку  $\psi$ , получим:

$$I = \frac{1}{2} \int \eta_{n,p}(\mathbf{r})\eta_{m,p}(\mathbf{r})V(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int (\eta_{n-1,p}(\mathbf{r})\eta_{m-1,p}(\mathbf{r})V(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}.$$

В случае, если  $n = 0$  или  $m = 0$  последний интеграл занулится, а коэффициент перед первым будет равен  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ . Если же  $m = n = 0$ , то этот коэффициент будет равен единице.

Отсюда легко понять, каким образом коэффициенты  $V_{abcd}$  выразятся через  $U_{abcd}$ :

$$\begin{aligned}
V_0 &= U_0 \\
V_{0110} &= \frac{1}{2} (U_{0110} + U_0) \\
V_{0101} &= \frac{1}{2} U_{0101}.
\end{aligned} \quad (20)$$

### 3.2 Вычисление матричных элементов Кулоновского взаимодействия

Вычислим, для примера, матричный элемент  $U_{0110}$  (18).

Сделаем преобразование Фурье для  $V(r_1 - r_2)$ :

$$V(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} V(q) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}). \quad (21)$$

Перейдем в (21) от интегрирования к суммированию по  $q_y$  и перепишем выражение для  $U_{0110}$ :

$$\begin{aligned} U_{0110} = & \int dq_x \sum_{q_y} \frac{1}{2\pi L} V(\mathbf{q}) \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{1}{L^2 \pi} \exp(iq_y(y_2 - y_1)) \times \\ & \times \exp(iq_x(x_2 - x_1)) \exp(-ip_1 y_2) \exp(-ip y_1) \exp(ip' y_1) \exp(ip'_1 y_2) \times \\ & \times \exp\left(\frac{-(x_1 + p)^2}{2} - \frac{(x_2 + p_1)^2}{2} - \frac{(x_2 + p'_1)^2}{2} - \frac{(x_1 + p')^2}{2}\right) \times \\ & \times (x_2 + p'_1)(x_2 + p_1). \quad (22) \end{aligned}$$

После интегрирования по  $y_1$  и  $y_2$  выражение будет ненулевым при условиях  $q_y = p_1 - p'_1$ ,  $q_y = p' - p$  и домножится на  $L^2$ . Тогда суммирование по  $q_y$  оставит условие  $p + p_1 - p' - p'_1 = 0$ , обеспечивающую закон сохранения импульса по оси  $y$ . В дальнейшем при переходе от суммирования по одному свободному импульсу  $q_y$  к интегрированию, выражение домножится на  $\frac{L}{2\pi}$ . Интегрирование по  $x_1$  и  $x_2$  производится тривиально.

В результате интегрирования по  $x$  получим следующие матричные элементы:

$$U_0(p, p', p' - q_y, p + q_y) = \frac{1}{4\pi^2} \int dq_x V(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{\mathbf{q}^2}{2}\right) \exp(iq_x(p + q_y - p')), \quad (23)$$

$$\begin{aligned} U_{0110}(p, p', p' - q_y, p + q_y) = & \frac{1}{4\pi^2} \int dq_x V(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{\mathbf{q}^2}{2}\right) \times \\ & \times \left(1 - \frac{\mathbf{q}^2}{2}\right) \exp(iq_x(p + q_y - p')), \quad (24) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_{0101}(p, p', p + q_y, p' - q_y) = & \frac{1}{4\pi^2} \int dq_x V\left(\sqrt{q_x^2 + (p' - p - q_y)^2}\right) \times \\ & \times \exp\left(-\frac{q_x^2 + (p' - p - q_y)^2}{2}\right) \frac{q_x^2 + (p' - p - q_y)^2}{2} \exp(-iq_x q_y). \quad (25) \end{aligned}$$

Аргументы  $p - q_y$  и  $p' - q_y$  у последнего матричного элемента переставлены, поскольку этот матричный элемент войдет в итоговое уравнение именно в таком виде, т.к. будет являться коэффициентом перед  $\hat{a}_{0,r'}^+ \hat{a}_{1,r+q_y}^+ \hat{a}_{1,r} \hat{a}_{0,r'+q_y}$ .

### 3.3 Уравнение Шредингера

Определим вакуум  $|0\rangle$  как заполненный нулевой уровень Ландау, и свободный первый. В сильном магнитном поле спектр дискретен, и экситон представляет собой переброс одного электрона с нулевого на первый уровень Ландау. Общий вид этого возбуждения можно записать в следующем виде:

$$\Psi = \sum_{r,r'} C(r,r') \hat{a}_{1,r}^+ \hat{a}_{0,r'} |0\rangle \quad (26)$$

При решении уравнения Шредингера  $\hat{H}\Psi = \epsilon\Psi$  нам потребуются только те члены гамильтониана, которые сдвигают электрон-дырочную пару вдоль уровней Ландау, сохраняя ее вид.

За нуль отсчета энергии примем  $\epsilon_0 = \hat{H}|0\rangle$  - энергию основного состояния без экситона.

Выберем из гамильтониана необходимые члены:

$$\hat{H} = \hat{H}_{q_y} + \hat{H}_0 \quad (27)$$

Где  $\hat{H}_{q_y}$  отвечает перемещению пары, а  $H_0$  дает поправку, не перемещающую пару, а следовательно не зависящую от импульса экситона.  $H_0$  представляет собой энергию активации, т.е. сдвиг невзаимодействующей пары электрон-дырка из-за кулоновского взаимодействия.

$$\hat{H}_{q_y} = \sum_{q_y} \left[ (V_{0110}(r', r + q_y, r, r' + q_y) - V_{0101}(r', r + q_y, r' + q_y, r)) \times \right. \\ \left. \times \hat{a}_{0,r'}^+ \hat{a}_{1,r+q_y}^+ \hat{a}_{1,r} \hat{a}_{0,r'+q_y} \right]. \quad (28)$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{p'} [(V_0(p', r', p', r') - V_0(p', r', r', p')) \hat{a}_{0,p'}^+ + \hat{a}_{0,r'}^+ \hat{a}_{0,p'} \hat{a}_{0,r'}] + \\ + \sum_{p'} [(V_{0110}(p', r, r, p') - V_{0101}(p', r, p', r)) \hat{a}_{0,p'}^+ \hat{a}_{1,r}^+ \hat{a}_{1,r} \hat{a}_{0,p'}]. \quad (29)$$

Поддействуем этим гамильтонианом на волновую функцию экситона. Поскольку фермивские операторы антикоммутируют, то некоторые знаки в получившемся уравнении поменяются. При вычислении матричных

элементов (23)-(25) мы учли, что получившееся выражение будет один раз интегрироваться по импульсу. В результате, уравнение Шредингера:

$$- \int (V_{0110}(r', r + q_y, r, r' + q_y) - V_{0101}(r', r + q_y, r' + q_y, r)) \times \\ \times C(r + q_y, r' + q_y) dq_y = (E - E_0)C(r, r'), \quad (30)$$

где

$$E_0 = \int (V_{0110}(p', r, r, p') - V_{0101}(p', r, p', r) + \\ + V_0(p', r', p', r') - V_0(p', r', r', p')) dp'. \quad (31)$$

Данное уравнение связывает  $C(r + q_y, r' + q_y)$  и  $C(r, r')$ .

### 3.4 Энергия активации

Подставив матричные элементы (20) в (31), получим (в том порядке, в котором члены встречаются в  $E_0$ ):

$$E_0 = \int \frac{1}{4\pi^2} dq_x dp' V(|q_x|) \exp\left(-\frac{q_x^2}{2}\right) \left(1 - \frac{q_x^2}{4}\right) \exp(iq_x p') - \\ - \int \frac{1}{8\pi^2} dq^2 V(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{\mathbf{q}^2}{2}\right) \left(\frac{\mathbf{q}^2}{2}\right) + \int \frac{1}{4\pi^2} d\mathbf{q}^2 V(\mathbf{q}) \exp\left(\frac{\mathbf{q}^2}{2}\right) - \\ - \int \frac{1}{4\pi^2} dx_x dp' V(|q_x|) \exp\left(-\frac{q_x^2}{2}\right) \exp(iq_x p'). \quad (32)$$

Первый и последний интегралы заануляются. Сосчитаем оставшиеся интегралы, подставив в них фурье-образ кулоновского взаимодействия (пусть  $e=1$ ):

$$V(\mathbf{q}) = e^2 \frac{2\pi}{q\epsilon_0} \quad (33)$$

$$E_0 = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{3}{8} \sqrt{2\pi}.$$

### 3.5 Спектр экситона

Подставим в уравнение (30) матричные элементы (20), выраженные через (23), (24) и (25):

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{4\pi^2} \int d\mathbf{q}^2 \frac{1}{2} V(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{\mathbf{q}^2}{2}\right) \exp(iq_x(r' - r)) \left(2 - \frac{\mathbf{q}^2}{2}\right) C(r + q_y, r' + q_y) + \\
& + \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{2} \int d\mathbf{q}^2 V\left(\sqrt{q_x^2 + (r' - r)^2}\right) \exp\left(-\frac{q_x^2 + (r' - r)^2}{2}\right) \frac{q_x^2 + (r' - r)^2}{2} \times \\
& \times \exp(-iq_x q_y) C(r + q_y, r' + q_y) = (E - E_0) C(r, r'). \quad (34)
\end{aligned}$$

Это уравнение связывает  $C(r + q_y, r' + q'_y)$  и  $C(r, r')$ , тогда как подинтегральное выражение зависит только от  $r - r'$ .

Сделаем замену  $r + r' = 2u$ ,  $r - r' = k_y$ . Тогда подинтегральное выражение зависит только от  $k_y$ , а уравнение связывает  $C(k_y, u + q_y)$  и  $C(k_y, u)$ . Это подсказывает нам сделать преобразование Фурье по  $u$ , чтобы  $C$  в обеих частях уравнения сократилось:

$$f(\mathbf{k}) = \int du \exp(ik_x u) C(u, k_y) \quad (35)$$

В результате преобразования Фурье  $f(\mathbf{k})$  сократится в обеих частях уравнения, а на месте  $C(r + q_y, r' + q_y)$  останется  $\exp(-iq_y k_x)$ .

При преобразовании первого члена уравнения (34) используем замену  $q_x \rightarrow q_y$ ,  $q_y \rightarrow q_x$ .

$$\int \frac{d\mathbf{q}}{8\pi^2} V(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{\mathbf{q}^2}{2}\right) \left(2 - \frac{\mathbf{q}^2}{2}\right) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{k}) \quad (36)$$

Преобразуем второй член:

$$\int d\mathbf{q} \frac{1}{8\pi^2} V\left(\sqrt{q_x^2 + k_y^2}\right) \exp\left(-\frac{q_x^2 + k_y^2}{2}\right) \frac{q_x^2 + k_y^2}{2} \exp(-iq_y(q_x + k_x))$$

После интегрирования по  $q_y$  получим  $2\pi\delta(q_x + k_x)$ , тогда после интегрирования по  $q_x$  получим:

$$\frac{1}{4\pi} V(\mathbf{k}) \exp\left(-\frac{\mathbf{k}^2}{2}\right) \frac{\mathbf{k}^2}{2} \quad (37)$$

Подставим в выражения (36) и (37) двумерный фурье-образ кулоновского взаимодействия(33).

Возьмем интеграл (36) возьмем, перейдя в цилиндрические координаты (он выразится через функции Бесселя мнимого аргумента):

$$\begin{aligned} \int e^2 \frac{dq d\varphi}{4\pi\epsilon_0} \exp\left(\frac{q^2}{2}\right) \left(2 - \frac{q^2}{2}\right) \exp(-iqk * \cos(\varphi)) = \\ = \frac{e^2 \sqrt{2\pi}}{2\epsilon_0} \left(\exp\left(-\frac{k^2}{4}\right)\right) \left(\frac{3}{4}I_0\left(\frac{k^2}{4}\right) + \frac{1}{8}k^2 I_0\left(\frac{k^2}{4}\right) - \frac{1}{8}k^2 I_1\left(\frac{k^2}{4}\right)\right). \end{aligned} \quad (38)$$

В итоге получаем следующее значение энергии:

$$\begin{aligned} E = E_0 - \frac{e^2 \sqrt{2\pi}}{2\epsilon_0} \left(\exp\left(-\frac{k^2}{4}\right)\right) \left(\frac{3}{4}I_0\left(\frac{k^2}{4}\right) + \frac{1}{8}k^2 I_0\left(\frac{k^2}{4}\right) - \frac{1}{8}k^2 I_1\left(\frac{k^2}{4}\right)\right) + \\ + e^2 \exp\left(-\frac{k^2}{4}\right) \frac{|k|}{4} \end{aligned} \quad (39)$$

Второй член уравнения (39) убывает экспоненциально при  $k > 1$ , тогда как экспонента в первом члене компенсируется асимптотикой функций Бесселя, и первый член убывает как  $1/k$ .

## 4 Анализ полученного выражения

### 4.1 Асимптотики

Разложим выражение (39) вблизи нуля. Получим:

$$e^{-2}\epsilon_0 E(k \rightarrow 0) = \frac{1}{4}k + \frac{1}{32}\sqrt{2\pi}k^2$$

Мы видим, что вклад  $E_0$  сократился с вкладом нулевого порядка по  $k$ , т.е. кулоновское взаимодействие не вносит вклад в экситоны с  $k = 0$ .

Разложим энергию в ряд при больших  $k$  (второе слагаемое будет экспоненциально мало). Получим:

$$e^{-2}\epsilon_0 E(k \rightarrow +\infty) = \frac{3}{8}\sqrt{2\pi} - \frac{1}{k} - \frac{3}{4}\frac{1}{k^3} \quad (40)$$

### 4.2 Критерий применимости

Сравним полученную поправку к энергии первого уровня Ландау с величиной первого уровня Ландау. В качестве характерного значения поправки возьмем размерную часть величины  $E_1$ , так как безразмерная часть будет порядка единицы на импульсах порядка  $\frac{1}{\lambda_H}$ , т.е. порядка обратной магнитной длины.

$$E_1^{(0)} = \sqrt{\frac{2e\hbar v_F^2 B}{c}} \quad (41)$$

$$E_1^{(1)} \propto \frac{e^2}{\lambda\epsilon_0} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{eB}{\hbar c}} \quad (42)$$

В отличие от нормального металла, в котором при больших магнитных полях поправка  $E_1^{(1)}$  была много меньше уровня Ландау  $E_1^{(0)}$ , в случае графена зависимость от магнитного поля в обоих членах имеет одинаковый вид, и их отношение будет безразмерным параметром, не зависящим от магнитного поля.

Опустив  $\sqrt{2}$ , получим безразмерный параметр:

$$\beta = \frac{e^2}{\hbar\epsilon_0 v_F} = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{\alpha c}{v_f} \quad (43)$$

Этот параметр характеризует отношение характерной энергии поправки к энергии первого уровня Ландау.

Отношение  $\alpha c/v_F$  в случае монослоя графена практически не зависит от постановки эксперимента, и равно приблизительно 2.2 [3]. В экспериментах с графеном на подложке из  $SiO_2$  экспериментальное значение  $\epsilon_0$  равно 5 [4]. Отсюда оценим  $\beta \approx 0.4$ .

При таком значении  $\beta$  поправка будет того же порядка, что и первый уровень Ландау. Это означает, что при рассмотрении экситона необходимо задействовать большее количество уровней Ландау, т.к. экситон будет размазан по нескольким уровням Ландау.

Однако, численные вычисления, приведенные в статье [5], свидетельствуют о том, что даже в случае большего  $\beta = 0.73$  относительная поправка от учета большего числа уровней Ландау составляет порядка 10%. Таким образом, в приближении двух первых уровней Ландау теорема Кона для графена верна, тогда как точная ее проверка потребует учета большего количества уровней Ландау.

## Список литературы

- [1] Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al. // *Nature*. — 2005. — Vol. 438. — P. 197. doi:10.1038/nature04233.
- [2] *Bychkov, Y. A. Provodimost' dvumernyh elektronov v sil'nom magnitnom pole* / Y. A. Bychkov, S. V. Iordanskii, G. M. Eliashberg // *JETP Letters*. — 1981. — Vol. 34. — P. 496.

- [3] Landau level spectroscopy of ultrathin graphite layers / M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski et al. // *Physical Review Letters*. — 2006. — Vol. 97. — P. 266405. <http://www.citebase.org/abstract?id=oai:arXiv.org:cond-mat/0605739>.
- [4] *Alicea, J.* Graphene integer quantum hall effect in the ferromagnetic and paramagnetic regimes / J. Alicea, M. P. A. Fisher // *Physical Review B*. — 2006. — Vol. 74. — P. 075422. <http://www.citebase.org/abstract?id=oai:arXiv.org:cond-mat/0604601>.
- [5] *Iyengar, A.* Excitations from filled landau levels in graphene. — 2006. <http://www.citebase.org/abstract?id=oai:arXiv.org:cond-mat/0608364>.