

На правах рукописи

АХМЕД АБДУЛЛАХИ БАШПАХ

**СПИНОВЫЕ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ
В ГРАФЕНЕ**

01.04.02 — ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико – математических наук

Москва – 2017

Работа выполнена на кафедре теоретической физики и механики Факультета физико-математических и естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов» (РУДН)

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук,
профессор

Рыбаков Юрий Петрович

Заслуженный деятель науки РФ,
заведующий кафедрой теоретической
физики и механики РУДН,

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук

Саха Биджан

ведущий научный сотрудник Лаборатории
информационных технологий
Объединенного
института ядерных исследований
(ЛИТ ОИЯИ, Дубна)

кандидат физико-математических наук

Камалов Тимур Фянович

доцент кафедры теоретической физики
ФГАОУ ВО «Московский физико-технический
институт (государственный университет)»

Ведущая организация:

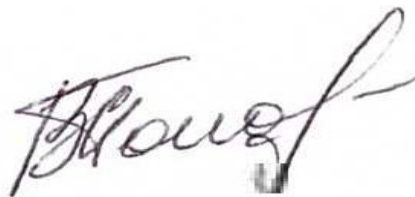
Московский автомобильно-дорожный
государственный технический университет
(МАДИ)

Защита состоится “15” июня 2017 г. в 17:00 на заседании диссертационного совета Д 212.203.34 в ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов» (РУДН) по адресу: 115419 г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3, ауд. 110.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов» (РУДН) по адресу: 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6 или на официальном сайте диссертационных советов РУДН по адресу: <http://dissovet.rudn.ru>

Автореферат разослан “ ___ ” _____ 2017г.

Ученый секретарь диссертационного совета
Д 212.203.34,
кандидат физико-математических наук,
Попова Вера Анатольевна



Общая характеристика работы

Актуальность темы

Графен, однослойный графит, предоставил много возможностей для физики изучить интересные аналогии с релятивистской квантовой механикой. Графит состоит из правильных гексагональных ячеек на углеродных листах (графен), наложенных друг на друга, но раньше считалось, что одиночный лист не мог быть получен в изолированном виде, с тем, чтобы с ним могли быть выполнены электрические измерения. Графен является одним из самых известных и обсуждаемых материалов в современном мире; в 2010 году Нобелевскую премию по физике получили два ученых, которые внесли решающий вклад в развитие этой области исследований. Это были Андре К. Гейм и К. С. Новоселов, работавшие в университете г. Манчестер, в Великобритании. Они преуспели в производстве, изолировании, идентификации и измерении характеристик графена. Теория графена впервые развита П. Р. Уоллесом в 1947 году. В качестве отправной точки для понимания его электронных свойств он использовал графит. Уоллес заметил, что теоретически графеновые дисперсионные кривые содержат пару безмассовых дираковских К-конусов. Конусы Дирака в настоящее время наблюдаются экспериментально методами фото-эмиссионной спектроскопии с хорошим угловым разрешением. На безмассовые возбуждения типа Дирака впервые указал Гордон Уолтер Семенов, а также Давидчензо и Евгений Ж. Меле. Семенов отметил появление дополнительных линий в магнитном поле на электронном уровне Ландау именно в точке Дирака (Шарапов, С. 2005 г.). Экспериментальное и теоретическое исследование графена как двумерной структуры стало чрезвычайно быстро развивающейся областью и привлекает большой интерес исследователей как из-за необычных магнитных свойств, так и высокой электропроводности и теплопроводности.

Графен состоит из атомов углерода, расположенных наподобие пчелиных сот, имеющих вид правильных шестиугольников. Эту шестиугольную ячейку можно рассматривать как бензольное кольцо с удаленными атомами водорода (Полинг, 1972). Несмотря на углеродный, т.е. совершенно немагнитный состав, этот материал имеет некоторые магнитные свойства. Подключение магнетизма к длинному списку необычных возможностей графена осуществляется с момента его первого получения в 2004 году Геймом и Новоселовым. То, что делает уникальным графен, это не только бесщелевые состояния, но и особые, киральной природы, состояния электрона. Этот эффект известен как так называемая гибридизация sp -состояний. Эти свойства делают графен рекордсменом с точки зрения прочности и электропроводности. Данное исследование имело целью построение феноменологических подходов к описанию графена, инициированных работами Ю.П. Рыбакова.

Цели исследования

1. Несмотря на то, что графен имеет некоторые магнитные свойства, это немагнитный материал, что создает проблемы в теории графена. Это и послужило основным мотивом для осуществления настоящего исследования. Применение киральной модели графена позволит получить некоторые топологические решения в графене, изучить возможность скручивания и изгиба графена в рамках предложенной модели.

2. Другая цель - проверка применимости “киральной модели графена” для исследования спиновых и электромагнитных возбуждений в графене. Конкретной целью данного исследования является изучение поведения графеновой плоскости во внешнем магнитном поле, ориентированном либо вдоль, либо перпендикулярно плоскости графена, поскольку магнетизм в графене является сильно анизотропным.

Методы исследования

Модель, принятая для анализа, а именно, “киральная модель графена” - является обобщением скалярной киральной модели графена путем введения 8-спинорной полевой переменной для описания спиновых и квази-спиновых возбуждений в графене. Последние связаны с наличием двух независимых мод колебаний кристаллической решетки графена: колебаний двух треугольных подрешеток. Плотность лагранжиана модели будет построена с использованием принципа положительности энергии. Электромагнитное взаимодействие включается с помощью принципа калибровочной инвариантности, а также путем добавления прямого взаимодействия Паули для учета магнитного момента электрона.

Новизна результатов проведенных исследований

Впервые в рамках 8-спинорной реализации киральной модели графена описаны спиновые и магнитные возбуждения в однослойном и двухслойном графене, структура которых согласуется с экспериментальными данными.

Практическая значимость проведенных исследований

Результаты, полученные в настоящей диссертации, могут найти применение в физике конденсированного состояния и, в частности, в спинтронике.

Достоверность полученных результатов и выводов

Степень достоверности результатов проведенных исследований обеспечивается строгостью примененных математических методов и согласованностью с исследованиями других авторов.

Апробация результатов работы

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях:

1. The International advanced materials and surface forum, GAMS Dubai 2015. International Conference Proceedings.
2. LII Conference on Problems of Dynamics, Particle Physics, Plasma Physics and Optoelectronics, Moscow: RUDN.
3. International school and conference “Saint-Petersburg OPEN 2017”.

Публикации

Основное содержание диссертации изложено в 5 научных работах, 2 из которых опубликованы в рецензируемых журналах ВАК (список приводится ниже).

Структура и объем работы

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, включая 10 рисунков и 3 таблицы, и списка литературы из 100 наименований. Объем диссертации составляет 70 страниц.

Содержание работы

Глава первая. Как мы уже говорили в начале нашего введения, атомы углерода в графене связываются в гексагональной решетке из-за sp^2 – гибридизации связей. Однако атом углерода имеет четыре валентных электрона в гибридизированных состояниях: один из них оказывается “свободным” в графеновой решетке, а три оставшиеся образуют сильные ковалентные связи с соседями. Это обстоятельство и служит основой для введения кирального параметра порядка $[1^*, 2^*]$.

Раздел 1.1. В этой главе, состоящей из 4 разделов, описывается скалярная киральная модель графена и ее следствия: двумерный лист графена (кинковое решение), волны в графене, углеродные нанотрубки («ежовое» решение).

Подраздел 1.1.1. Является естественным ввести скалярное a_0 и векторное \vec{a} поля, которые соответствуют s- и p-орбитальным состояниям “свободного” электрона. Объединение двух полей осуществляется с помощью унитарной матрицы $U \in SU(2)$, которая рассматривается как параметр порядка модели в длинноволновом приближении:

$$U = a_0 \tau_0 + i \vec{a} \cdot \vec{\tau} , \quad (1)$$

где τ_0 является единичной матрицей 2×2 и $\vec{\tau}$ являются матрицами Паули, с $SU(2)$ условием

$$a_0^2 + \vec{a}^2 = 1 . \quad (2)$$

Удобно построить путем дифференцирования кирального поля (1) левый киральный ток:

$$l_\mu = U^+ \partial_\mu U , \quad (3)$$

где μ принимает значения $0, 1, 2, 3$ и ∂_μ обозначает производные по времени x_0 и пространственным координатам x^i , $i=1, 2, 3$.

Лагранжева плотность модели принимает вид:

$$L = -\frac{1}{4} \text{ISp}(l_\mu l^\mu) - \frac{1}{2} \lambda^2 \vec{a}^2 . \quad (4)$$

Это соответствует сигма-модельному подходу в теории векторного поля, с массовым членом.

В подразделе 1.1.2. мы рассмотрим случай конфигурации, соответствующей идеальной графеновой плоскости с нормалью вдоль оси Z , когда параметр порядка будет иметь вид:

$$U = \exp(i\psi\tau_3), \quad \psi = \psi(z) . \quad (5)$$

Лагранжиан при этом принимает вид:

$$L = -\frac{1}{2}I\psi'^2 - \frac{1}{2}\lambda^2 \sin^2 \psi \quad (6)$$

Мы получаем уравнения движения из (6):

$$2I\psi'' - \lambda^2 \sin 2\psi = 0 \quad (7)$$

Решение уравнения (7), удовлетворяющее естественным граничным условиям

$$\psi = (-\infty) = 0, \psi(+\infty) = \pi$$

имеет кинк- форму (доменная стенка):

$$\psi_0(z) = 2 \arctan \exp(z/\ell) \quad (8)$$

с характерной толщиной (параметр длины)

$$\ell = \sqrt{I/\lambda}$$

Подраздел 1.1.3. Однако понимание стабильности графена имеет решающее значение для объяснения электронного транспорта в этом материале. Начнем с рассмотрения малых возмущений решения (8) в непосредственной близости от идеальной графеновой плоскости, т. е. при малых z . В нашем случае $\psi_0(0) = \pi/2$ и поэтому для возмущений $\xi = \delta a_z$ и $a_{\pm} = a_1 \pm ia_2$ составим лагранжеву плотность:

$$L = \frac{1}{2}I(z^{-2}\partial_{\mu}\xi\partial^{\mu}\xi + \partial_{\mu}a_+\partial^{\mu}a_-) - \frac{1}{2}\lambda^2 a_+ a_- \quad (9)$$

Из (9) можно сделать вывод, что уравнение для статических возмущений имеет вид:

$$z^2 \partial_z(z^{-2} \partial_z \xi) + \Delta_{\perp} \xi = 0, \quad (\Delta - \ell^{-2})a_{\pm} = 0 \quad (10)$$

где $\Delta_{\perp} = \partial_x^2 + \partial_y^2$. В декартовых координатах x, y на идеальной графеновой плоскости $Z=0$ легко находим возбуждения периодической формы:

$$\xi = \xi_0 \exp(-k^2 z^2 / 2) \cos kx, \quad a_+ = A_+ e^{\bar{k}z} \cos Kx, \quad K^2 = \bar{k}^2 - \lambda^2 / I, \quad (11)$$

где $\bar{k}\ell > 1$. Экспоненциальный рост по Z решения (11) указывает на нестабильность идеальной графеновой плоскости, впервые упомянутой Мерминым и Вагнером в 1966 году в случае магнетиков.

Существуют также кольцевые возбуждения аксиально-симметричной формы:

$$\xi = \xi_0 \exp(-k^2 z^2 / 2) J_0(k\rho), \quad a_+ = A_+ e^{im\varphi} e^{\bar{k}z} J_m(K\rho) \quad (12)$$

где J_m - функции Бесселя m -го порядка, $m = 0, 1, 2, \dots$, и ρ, φ - полярные координаты в плоскости графена. Таким образом, можно сделать вывод, что графеновые плоскости имеют тенденцию к изгибанию.

Подраздел 1.1.4. В этом разделе мы будем изучать углеродные нанотрубки, сделанные из одного или нескольких концентрических цилиндрических графеновых слоев. В этом случае параметр порядка имеет вид:

$$U = \exp(i\psi\sigma), \quad \psi = \psi(\rho), \quad \sigma = \tau_1 \cos\phi + \tau_2 \sin\phi, \quad \phi = n\varphi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (13)$$

Конфигурация (13) описывает бесконечную нанотрубку со структурой «ежа» в поперечном сечении. Подставляя (13) в лагранжиан в (4), получим

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}I(\psi'^2 + \frac{n^2}{\rho^2}\sin^2\psi) - \frac{1}{2}\lambda^2\sin^2\psi . \quad (14)$$

Соответствующие уравнения движения для кирального угла $\psi(\rho)$ будут следующими:

$$2\rho(\rho\psi')' = (n^2 + \rho^2/\ell^2)\sin 2\psi . \quad (15)$$

Замена переменной $\eta = \log(\rho/\ell)$ приводит в пределе $n \gg \rho/\ell$ к решению уравнения (15) типа кинка:

$$\psi(\eta) = 2\arctan[\exp(n\eta_0 - n\eta)] , \quad (16)$$

удовлетворяющему граничным условиям $\psi(+\infty) = 0, \psi(-\infty) = \pi$, где $R = \ell\exp\eta_0$ играет роль радиуса трубки.

Вторая глава. В каждой К-долине возбуждение имеет волновую функцию из двух компонент ψ_1, ψ_2 , относящихся к двум подрешеткам в двумерной сотовой решетке графена. Чтобы включить в нашу модель взаимодействие с электромагнитным полем для описания проводимости и магнитных свойств, мы используем принцип калибровочной инвариантности.

Раздел 2.1. Для описания спинового и квазиспинового возбуждения в графене было предложено спинорное обобщение [2*] скалярной киральной модели графена. С этой целью введем дираковские спиноры ψ_1, ψ_2 , и рассмотрим комбинированное спинорное поле Ψ в качестве нового параметра порядка, $\psi = \xi \otimes (\psi_1 \otimes \psi_2)$ где ξ обозначает первый столбец унитарной матрицы (1).

Лагранжева плотность L модели включает стандартную γ -5-инвариантную конструкцию, квадратичную по производным:

$$L = \frac{1}{2}\partial_\mu\bar{\psi}P\partial^\mu\psi - \frac{\lambda^2}{2}\tilde{a}^2j_\mu j^\mu \quad (17)$$

Взаимодействие с электромагнитным полем может быть включено через ковариантное продолжение производной:

$$D_\mu = \partial_\mu - ie_0A_\mu\Gamma_e,$$

где $e_0 > 0$ является константой связи и $\Gamma_e = (1-\tau_0 / 2)$ является оператором заряда, выбранным в соответствии с естественным граничным условием на бесконечности: $a_0(\infty) = 1$. Полученный в результате лагранжиан примет вид:

$$L = \frac{1}{2}D_\mu\bar{\psi}PD^\mu\psi - \frac{\lambda^2}{2}\tilde{a}^2j_\mu j^\mu + i\mu_0\bar{\psi}\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\psi , \quad (18)$$

где $\sigma_{\mu\nu} = [\gamma_\mu, \gamma_\nu] / 4$, $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ и $\mu_0 > 0$ обозначает магнетон Бора, деленный на постоянную решетки в кубе.

Рассматриваемая модель удовлетворяет принципу соответствия, так как все предыдущие результаты следуют из (18), если положить $j^2 \equiv j_\mu j^\mu = 1$, $\Psi_1 = const_i$, $A_\mu = 0$. Электромагнитный ток выглядит так:

$$j_\mu = e_0 \text{Im}(\bar{\psi} P \Gamma_e \partial_\mu \psi) - e_0^2 I j^2 (a_1^2 + a_2^2) A_\mu + 2i\mu_0 \partial^\mu (\bar{\psi} \sigma_{\mu\nu} \psi) \quad (19)$$

и содержит помимо стандартного тока проводимости, диамагнитный ток и ток поляризации Паули.

Раздел 2.2. В качестве иллюстрации рассмотрим взаимодействие графенового моноатомного слоя $z = 0$ со статическим однородным магнитным полем B_0 , ориентированным вдоль оси x . Вводя векторный потенциал $A_y = A(z)$, найдем, что напряженность магнитного поля равна

$$B_x = B(z) = -A'(z),$$

с естественным граничным условием на бесконечности: $A \rightarrow -B_0 z$.

Модель, о которой идет речь, допускает очевидную симметрию:

$$\psi_1 \Leftrightarrow \psi_2, \quad \gamma_0: \psi \Rightarrow \gamma_0 \psi$$

а также дискретную симметрию:

$$\psi_1 \Leftrightarrow \psi_i^*; \quad a_{2,3} \Rightarrow -a_{23}.$$

Это позволяет ввести вещественный 2-спинор $\varphi(z) = \text{col}(u, -u)$, $\psi_1 = \psi_2 = \text{col}(\varphi, \varphi)$. В результате плотность лагранжиана принимает вид:

$$L = -8I|\varphi|^4 \left(\theta'^2 + e_0^2 A^2 \sin^2 \theta + \frac{|\varphi'|^2}{|\varphi|^2} \right) - 8\lambda^2 |\varphi|^4 \sin^2 \theta + \mu_0 A' \varphi^+ \tau_1 \varphi - A'^2 / (8\pi) \quad (20)$$

Видно, что модель допускает симметрию: $\varphi \Rightarrow -\tau_1 \varphi$, что является следствием противоположной ориентации магнитного поля и спина электрона. Этот факт позволяет положить $\varphi_1 = -\varphi_2 = u$. Введем новую переменную:

$$U = |\varphi|^2 = 2u^2, \text{ учитывая, что } j^2 = 16U^2.$$

Наша лагранжева плотность будет иметь вид:

$$L = -2IU'^2 - 8IU^2(\theta'^2 + e_0^2 A^2 \sin^2 \theta) - 4U \sin^2 \theta (2\lambda^2 U + \mu_0 A') - A'^2 / (8\pi) \quad (21)$$

При этом используется граничное условие на бесконечности:

$$j^2(\infty) = 1, \quad \theta(\infty) = 0, \quad A'(\infty) = -B_0.$$

Составим соответствующий «энергетический» интеграл: $E = P_\theta \theta' + P_U U' + P_A A' - L$

$$E = -2IU'^2 - 8IU^2(\theta'^2 + e_0^2 A^2 \sin^2 \theta) - 4U \sin^2 \theta (2\lambda^2 U + \mu_0 A') - \frac{A'^2}{(8\pi)} = -\frac{B_0^2}{(8\pi)} \quad (22)$$

Это означает, что уравнение Гамильтона-Якоби для «действия» S имеет вид:

$$\frac{1}{8I} \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)^2 + \frac{1}{32IU^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 + 2\pi \left(\frac{\partial S}{\partial A} + 4\mu_0 U \sin^2 \theta \right)^2 = \frac{B_0^2}{8\pi} + 8U^2 \sin^2 \theta (\lambda^2 + I e_0^2 A^2) \quad (23)$$

Здесь используются следующие определения импульсов Якоби:

$$\frac{\partial S}{\partial U} = -4IU'; \quad \frac{\partial S}{\partial \theta} = -16IU^2\theta'; \quad \frac{\partial S}{\partial A} = -4\mu_0 U - \frac{A'}{4\pi} \quad (24)$$

Изучим поведение решения уравнения (23) в асимптотической области $z \rightarrow \infty$:

$$S \approx \left(\frac{B_0}{4\pi} - 8e_0 IU^2 \sin^2 \theta \right) A \quad (25)$$

При этом можно найти напряженность магнитного поля в асимптотической области $z \rightarrow \infty$:

$$B = A' \approx B_0 - 2\pi(e_0 I - 2\mu_0) \tan^2 \theta_0 \exp(-e_0 B_0 z^2). \quad (26)$$

Как видно из (26), эффект ослабления магнитного поля проявляется при положительном значении константы $e_0 I - 2\mu_0$. Этот эффект аналогичен эффекту лондоновского «экранирования», вызванного вторым членом электромагнитного тока

$$j_\mu = e_0 I \text{Im}(\bar{\psi} P \Gamma_e \partial_\mu \psi) - e_0^2 I j^2 (a_1^2 + a_2^2) A_\mu + 2i\mu_0 \partial^\mu (\bar{\psi} \sigma_{\mu\nu} \psi). \quad (27)$$

Ток (27) содержит кроме стандартного тока проводимости, диамагнитный ток и ток поляризации Паули. Как следует из уравнения (26), при отрицательном значении постоянной $e_0 I - 2\mu_0$ имеет место парамагнитное поведение материала.

Третья глава. Однако магнетизм обычного металла определяется двумя различными причинами: вкладом парамагнетизма Паули, обусловленного спиновым магнитным моментом, и диамагнетизма Ландау, обусловленного орбитальным движением электронов.

Раздел 3.1. В этом случае мы использовали киральную модель графена в спинорной реализации для исследования магнитных характеристик графенового слоя.

Подсекция 3.3.2. Начнем со случая, когда внешнее магнитное поле B_0 ориентировано вдоль оси z . Используя цилиндрические координаты r, ϕ, z , введем векторный потенциал $A_\phi = A$, причем напряженность магнитного поля равна

$$B_z = \partial_r(rA)/r, \quad B_r = -\partial_z A.$$

При этом накладывается естественное граничное условие на бесконечности:

$$A(z \rightarrow \infty) = B_0 r / 2.$$

Рассматриваемая модель допускает очевидную симметрию $\psi_1 \Leftrightarrow \psi_2$ и γ_0 -инвариантность $\psi \Rightarrow \gamma_0 \psi$, которая позволяет ввести 2-спинор φ , полагая

$$\psi_1 = \psi_2 = \text{col}(\varphi, \varphi), \quad \varphi = \text{col}(w, u).$$

Для упрощения расчетов предположим малость радиального магнитного поля:

$$B_r \ll B_z.$$

В этом приближении имеет место новая дискретная симметрия:

$$\varphi \Rightarrow -\sigma_3 \varphi, \quad w \Rightarrow -w, \quad u \Rightarrow u^*, \quad a_{2,3} \Rightarrow -a_{2,3},$$

Это позволяет ввести киральный угол: $a_0 = \cos\Theta$, $a_1 = \sin\Theta$.

Рассмотрим аксиально-симметричную конфигурацию: $u = u(r, z)$, $\Theta = \Theta(r, z)$.

В результате новая плотность лагранжиана принимает вид:

$$L = -8I \left[R^2 (\partial_\perp \Theta)^2 + \frac{1}{4} (\partial_\perp R)^2 + e_0^2 R^2 A^2 \sin^2 \Theta \right] - 8\lambda^2 R^2 \sin^2 \Theta + 8\mu_0 R \sin^2 \Theta \frac{1}{r} \partial_r (rA) - \frac{1}{8\pi} \left[\frac{1}{r^2} (\partial_r (rA))^2 + (\partial_z A)^2 \right] \quad (28)$$

Уравнения движения, соответствующие (28), имеют вид:

$$I \left[\frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r R) + \partial_z^2 R - 4R (\partial_\perp \Theta)^2 - 4e_0^2 R A^2 \sin^2 \Theta \right] = 2 \sin^2 \Theta \left[2\lambda^2 R - \mu_0 \frac{1}{r} \partial_r (rA) \right] \quad (29)$$

$$I \left[\frac{2}{r} \partial_r (r R^2 \partial_r \Theta) + 2 \partial_z (R^2 \partial_z \Theta) - e_0^2 R^2 A^2 \sin 2\Theta \right] = R \sin 2\Theta \left[\lambda^2 R - \mu_0 \frac{1}{r} \partial_r (rA) \right] \quad (30)$$

$$\frac{1}{4\pi} \left[\frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r A) + \partial_z^2 A - \frac{A}{r^2} \right] = 16I e_0^2 R^2 A \sin^2 \Theta + 8\mu_0 \partial_r (R \sin^2 \Theta) \quad (31)$$

Теперь будем искать решение уравнений (29), (30) и (31) в асимптотической области $z \rightarrow \infty$, где

$$\Theta \rightarrow 0; \quad R = 1/4 + \zeta, \quad \zeta \rightarrow 0; \quad A = B_0 r / 2\alpha \quad \alpha \rightarrow 0.$$

Таким образом, уравнение для Θ принимает вид:

$$I \left[\frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r \Theta) + \partial_z^2 \Theta - \frac{1}{4} e_0^2 B_0^2 r^2 \Theta \right] = \Theta (\lambda^2 - 4\mu_0 B_0).$$

Его решение может быть найдено путем разделения переменных:

$$\Theta = \Theta_0 \exp(-vr^2 - kz), \quad \Theta_0 = \text{const}, \quad (32)$$

Подставляя (32) в (29) и (31), получим неоднородные уравнения для ζ и α :

$$\frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r \zeta) + \partial_z^2 \zeta = (\partial_\perp \Theta)^2 + \left[\frac{1}{4} e_0^2 B_0^2 r^2 + \frac{1}{I} (\lambda^2 - 2\mu_0 B_0) \right] \Theta^2 \quad (33)$$

$$\frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r \alpha) + \partial_z^2 \alpha - \frac{\alpha}{r^2} = 2\pi e_0 B_0 (e_0 I - 4\mu_0) r \Theta^2 \equiv \delta r \Theta^2 \quad (34)$$

Найдем теперь напряженность магнитного поля:

$$B_z = B_0 + B_z, b_z = \frac{1}{r} \partial_r(r\alpha), B_r = b_r = -\partial_z \alpha.$$

Однако при малых $r \rightarrow 0$ из (34) следует, что $\alpha \propto r^3$, поэтому напряженность магнитного поля равна:

$$b_z = \pi e_0 B_0 (e_0 I - 4\mu_0) \Theta_0^2 r^2 \exp(-2vr^2 - 2kz), \quad (35)$$

$$b_r = \frac{\pi k}{2} e_0 B_0 (e_0 I - 4\mu_0) \Theta_0^2 r^3 \exp(-2vr^2 - 2kz). \quad (36)$$

Как видно из уравнений (35), (36), в зависимости от знака множителя $e_0 I - 4\mu_0$ графеновый материал обнаруживает диамагнитное или парамагнитное поведение.

Поэтому было бы интересно получить численные оценки параметров модели. В связи с принятым определением

$$e_0 = \frac{e}{\hbar c}, \quad \mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e c a^3}, \quad I = \frac{E_{\text{exch.}}}{a}. \quad \text{[7]}$$

В тех случаях, когда обменная энергия обычно принимается равной $E_{\text{exch}} = 2.9 \text{ eV}$ и параметр решетки $a = 3.56 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, где e - абсолютная величина заряда электрона, имеем следующие числовые значения:

$$e_0 I = 2 \cdot 10^3 \text{ Gauss}, \quad \mu_0 = 2 \cdot 10^2 \text{ Gauss}.$$

Это означает, что параметр $e_0 I - 4\mu_0$ положителен и предсказывается усиление магнитного поля при малых r в соответствии с (35) и (36).

Подраздел 3.3.3. Ввиду важности последнего вывода было бы желательно исследовать поведение магнитного поля в центральной области графенового материала, т. е. при малых r , но произвольных z . С этой целью мы рассмотрим экстраполяцию конфигурации (32) на решение типа доменной стенки:

$$\theta = 2 \arctan[\exp(-vr^2 - kz)] \quad (37)$$

Позже будет показано, что это приближение справедливо в пределе малого поля. Для начала введем (37) в уравнение (32), учитывая, что

$$\partial_r \theta = -\frac{4vr \exp^{-vr^2 - kz}}{1 + e^{-2vr^2 - 2kz}} = -2vr \frac{1}{\cosh(vr^2 + kz)}$$

Это сводится к следующим уравнениям:

$$\frac{1}{r} \partial_r(r \partial_r \alpha) + \partial_z^2 \alpha - \frac{\alpha}{r^2} = 2\pi e_0 B_0 \sin^2 \theta [e_0 I - 4\mu_0 \tanh(vr^2 + kz)] \equiv 2\pi j \quad (38)$$

Решение уравнения (38), удовлетворяющее граничному условию $\alpha(0) = 0$, можно найти методом функций Грина:

$$\frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r G) + \partial_z^2 G - \frac{G}{r^2} = \delta(r, r') \delta(z - z') \quad (39)$$

Общая структура решения:

$$\alpha \approx \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{is(z-z')} \left[\int_0^r dr' r'^2 [I_1(sr) K_1(sr') - K_1(sr) I_1(sr')] \times e_0 B_0 \sin^2 \theta (e_0 I - 4\mu_0 \tanh(vr'^2 + kz')) \right] \quad (40)$$

Принимая во внимание поведение функций Бесселя при малых g :

$$I_1(sr) K_1(sr') - K_1(sr) I_1(sr') = \frac{1}{2} \left(\frac{r}{r'} - \frac{r'}{r} \right)$$

$$\frac{1}{2} \int_0^r dr' r'^2 \left(\frac{r}{r'} - \frac{r'}{r} \right) = \frac{1}{2} \left(r \cdot \frac{1}{2} r^2 - \frac{1}{r} \cdot \frac{1}{4} r^4 \right) = \frac{r^3}{8}$$

$$\alpha \cong \int_{-\infty}^{+\infty} dz' 2\pi \delta(z - z') \frac{r^3}{8} e_0 B_0 \frac{1}{\cosh^2(vr^2 + kz')} \times (e_0 I - 4\mu_0 \tanh(vr^2 + kz')) \quad (41)$$

что при малых g :

$$\alpha \cong \frac{\pi^3 e_0 B_0}{4 \cosh^2(vr^2 + kz')} (e_0 I - 4\mu_0 \tanh(vr^2 + kz')) \quad (42)$$

Это подтверждает парамагнитное поведение графена в центральной области.

Подставив в (29) (42) и $R = \frac{1}{4} + \zeta$, $A = \frac{B_0 r}{2}$ получаем:

$$I \left[\frac{1}{2} \partial_r (r \partial_r R) + \partial_z^2 R - 4R(\partial \perp \theta)^2 - 4e_0 R \frac{1}{4} B_0^2 r^2 \sin^2 \theta \right] = 2 \sin^2 \theta [2\lambda^2 R - \mu_0 B_0] \quad (43)$$

где $(\partial \perp \theta)^2 \cong \frac{k^2 + 4\nu^2 r}{\cosh^2(\nu r^2 + kz)}$ и $\text{Sin}^2 \theta = \frac{1}{\cosh^2(\nu r^2 + kz)}$

Уравнение (43) принимает вид:

$$R_r'' + \frac{1}{r} R_r' + \partial_z^2 R = \frac{R}{\cosh^2(\nu r^2 + kz)} \left[4(k^2 + 4\nu^2 r^2) + I e_0^2 B_0^2 r^2 + 4 \frac{\lambda^2}{I} - \frac{2\mu_0 B_0 / I}{\cosh(\nu r^2 + kz)} \right] \equiv j \quad (44)$$

со следующим постоянным параметром

$$k^2 = e_0 B_0 + \frac{1}{I} (\lambda^2 - 4\mu_0 B_0)$$

Решение уравнения (44) можно найти также методом функции Грина:

$$\zeta(r, z) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{is(z-z')} \left[\int_0^r dr' r' I_0(sr) K_0(sr') j(r', z') - \int_0^r dr' r' K_0(sr) I_0(sr') j(r', z') \right] \quad (45)$$

Принимая во внимание асимптотическое поведение функций Бесселя, найдем:

$$I_0(x) \approx 1 + x, \quad K_0(x) \approx \log[2/x]$$

$$\begin{aligned} & \int_0^r dr' r' \left[\ln \frac{2}{sr} (1 + sr') - (1 + sr) \ln \frac{2}{sr'} \right] = \\ & = -\left(\ln \frac{2}{sr} \right) \frac{1}{6} r^3 s - \frac{1}{4} r^2 (1 + sr) \approx -\frac{r^2}{4} \end{aligned}$$

из уравнения (3.33) следует, что в центральной области

$$\begin{aligned} \zeta &= -\frac{r^2}{4} j(r, z) \approx -\frac{r^2}{4 \cosh^2} \left[k^2 + \frac{\lambda^2}{I} - 2\mu_0 B_0 / I + e_0^2 B_0^2 r^2 / 2 \right] \\ \zeta(r, z) &\approx -\frac{r^2}{4 \cosh^2} \left[\frac{2}{I} (\lambda^2 - 2\mu_0 B_0) + e_0 B_0 (1 + e_0 B r^2 / 2) \right] \quad (46) \end{aligned}$$

Используя уравнение (46), можно проверить справедливость приближения (37) для центральной области в пределе малого поля, если считать, что

$$\lambda^2/I \gg e_0 B_0, e_0 B_0 r^2 \ll 1, k^2 r^2 \ll 1.$$

Подраздел 3.3.4. В этом случае мы изучили магнитные возбуждения в двухслойном графене для магнитного поля, ортогонального плоскости графена. Было подтверждено парамагнитное поведение в центральной области.

В заключении перечислены основные научные результаты, полученные в диссертационной работе.

Основные результаты, выносимые на защиту:

1. В этой диссертации мы применили феноменологическую модель к описанию однослойного и двухслойного графена, исследовали спиновые и магнитные возбуждения уникального двумерного кристалла (графена), используя киральную модель графена в спинорной реализации.
2. В рамках киральной 8-спинорной модели графена было обнаружено, что магнетизм в графене является чрезвычайно анизотропным. Так, в случае внешнего магнитного поля, параллельного плоскости графена выявляется явно диамагнитный эффект: предсказывается ослабление магнитного поля в образце графена. Наконец, в случае внешнего магнитного поля, перпендикулярного к плоскости графена, обнаружилось парамагнитное поведение графена, т.е. усиление магнитной напряженности внутри материала в центральной области при малых g .
3. В рамках 8-спинорной киральной модели рассмотрено взаимодействие магнитного поля с двухслойным графеном. Показано, что для поля, ортогонального графеновому слою, также обнаруживается парамагнитное поведение, аналогичное поведению однослойного графена.

Цитируемые статьи:

1*Rybakov Yu. P. On chiral model of graphene//Solid State Phenomena, v.190. 2012, P.59-62.

2* Rybakov Yu. P. Spin excitations in chiral model of graphene//Solid State Phenomena, v.233-234. 2015, P.16-19.

Личный вклад автора:

Все основные результаты работы получены автором. В совместных работах с Ю. П. Рыбаковым последнему принадлежат постановка задачи и обсуждение результатов. Используемые материалы других авторов отмечены ссылками.

Публикации по теме диссертации:

В научных журналах, рекомендованных ВАК:

1. *Rybakov.Yu.P., M. Iskandar, A.B. Ahmed*, Magnetic excitations of graphene in 8 spinor-realization of chiral model // RUDN Journal of Mathematics, Information Physics [Bulletin of People's Friendship University of Russia (RUDN University). Series "Mathematics. Information Sciences. Physics"], 2017, Vol. 25, No. 3.
2. *Рыбаков Ю.П., Ахмед А.Б.* Взаимодействие двухслойного графена с внешним магнитным полем//Физическое образование в вузах. Т. 23, № 4.

Другие публикации:

- 1.*Rybakov,Yu.P., M. Iskandar, A.B. Ahmed*, Magnetic excitation in chiral model of graphene // GAMS Dubai 2015. International Conference Proceedings, No.1, pp. 56-66.
- 2.*Rybakov.Yu.P. M. Iskandar, A.B. Ahmed*, Graphene interaction with an external magnetic field in the chiral model // LII Conference on Problems of Dynamics, Particle Physics, Plasma Physics and Optoelectronics, Moscow: RUDN, 2016, pp. 90-91.
- 3.*A.B. Ahmed*, The interaction of graphene with external magnetic field orthogonal to the plane//International school and conference "Saint-Petersburg OPEN 2017".

Аннотация

Ахмед А.Б.

Спиновые и электромагнитные возбуждения в графене

Графен представляет собой двумерную совокупность атомов углерода с толщиной всего в один атом, образующих гексагональную решетку. Ранее была предложена скалярная киральная модель графена, использующая в качестве параметра порядка унитарную матрицу, содержащую скалярное и векторное поля. При этом идеальная плоскость графена определяется кинк-подобным решением. Гофрирование поверхности графена было описано в форме колец ряби. Было найдено приближенное решение, соответствующее бесконечным углеродным нанотрубкам. Рассмотрено обобщение скалярной киральной модели графена, включающей 8-спинорное поле для описания спиновых и квазиспиновых возбуждений в графене. Электромагнитное взаимодействие было включено через расширение производной и добавлен член прямого взаимодействия Паули. Подробно рассмотрено взаимодействие графена с внешним магнитным полем. В случае магнитного поля, параллельного плоскости графена, предсказан диамагнитный эффект, т. е. ослабление магнитной напряженности в объеме материала. Однако для случая магнитного поля, ортогонального к плоскости графена, предсказывается усиление магнитной напряженности в центральной области (при малых r). Двухслойный графен также обнаруживает парамагнитное поведение. Таким образом, магнитные свойства графена оказываются сильно анизотропными.

ABSTRACT

Ahmed A.B

Spin and electromagnetic excitations in graphene

Graphene is a two-dimensional collection of carbon atoms, with thickness of only one atom, forming the hexagonal lattice. The scalar chiral model of graphene based on the unitary matrix as an order parameter, was suggested in the long wave approximation and the ideal graphene plane was determined by the kink-like solution. Corrugation of the graphene surface was described in the form of ripple rings. The approximate solution corresponding to infinite carbon nanotubes was found. We considered the generalization of the scalar chiral model of graphene, the 8-spinor field being included for the description of spin and quasi-spin excitations in graphene. The electromagnetic interaction was included through the extension of derivative and Pauli direct interaction term was added. We considered in detail an example of the interaction of the graphene plane with the external magnetic field. We studied the case of the magnetic field parallel to the graphene plane, and the diamagnetic effect was predicted. However, for the case of the magnetic field orthogonal to the graphene plane the strengthening of the magnetic intensity is revealed in the central domain (at small r). We studied magnetic excitations in bilayer graphene which also reveals a paramagnetic behavior. Thus, the magnetic properties of the graphene prove to be strongly anisotropic.

