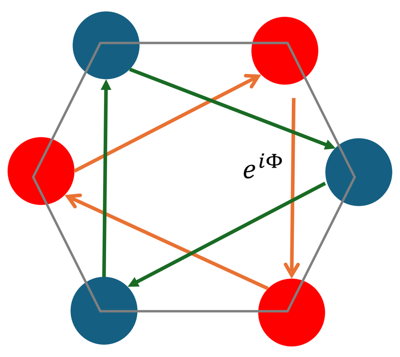
チェビシェフ多項式展開を用いたねじれ3層グラフェンのホール伝導度の計算

物理工学特別輪講　求研究室　上田和樹

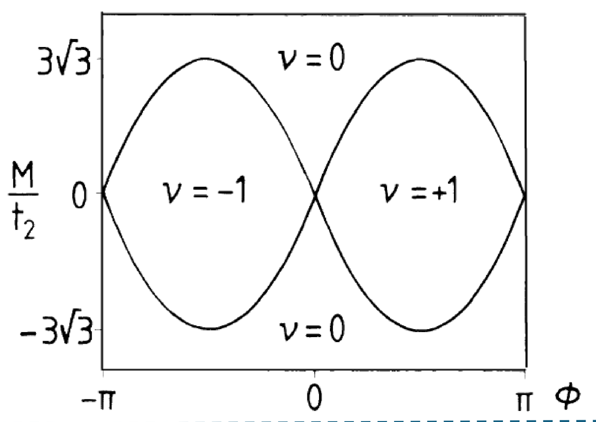
背景

・(整数)量子ホール効果[1]

単層グラフェンは、時間反転対称性が破れると、量子ホール効果を示すことがある。
この時、ホール伝導度は$\sigma_{xy} = \nu e^2/h$で、**νは-1,0,1のいずれかの値を取る。**

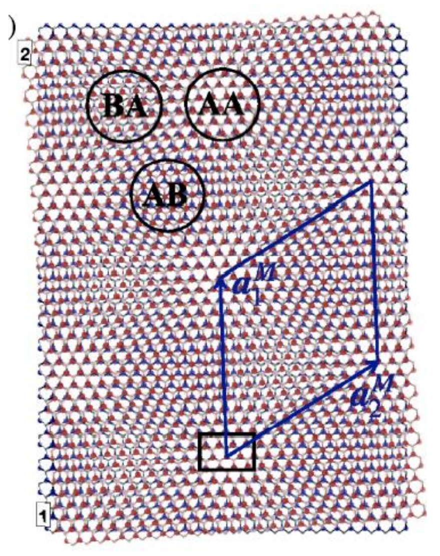


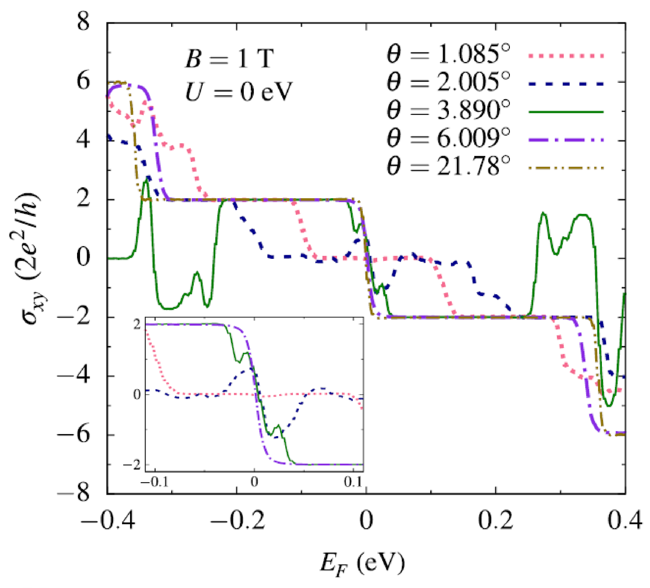
Haldane模型



・モアレ[2]

ねじって重ねたグラフェンには、単層のグラフェンとは異なる周期性が現れる。
2層系では量子ホール効果を示すことがチェビシェフ多項式を用いた計算により確認されている。





・チェビシェフ多項式展開[3][4]

チェビシェフ多項式： $-1 \le x \le 1$で定義される**直交多項式**の一種

定義①：$T_n(x) = \cos(n \arccos(x))$

定義②：
$$\begin{cases} T_0(x) = 1 \\ T_1(x) = x \\ T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) \end{cases}$$

一般の関数$f(x)$の展開：

$$f(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}}\left(\mu_0 + 2\sum_{n=1}^{\infty}\mu_n T_n(x)\right), \mu_n = \int_{-1}^{1} f(x)\, T_n(x) dx$$

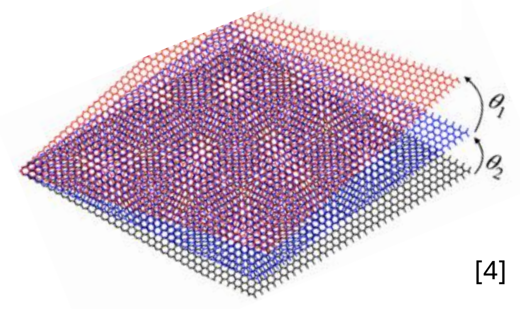
カーネルK_nを導入し、以下のように展開

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\sum_{n=0}^{\infty} g_n T_n(x) \left(g_n = \frac{2K_n}{\pi(1+\delta_{m,0})}\right)$$

→不連続な点の前後でのギブズ振動を低減できる。

目的

ねじれ3層グラフェンでは、モアレの結晶格子同士がずれて重なり、さらに単位胞の大きいモアレが形成される。
ねじれ2層グラフェンについての計算を応用し、**3層系のホール伝導度をチェビシェフ多項式展開を用いて求める。**その結果から、このような系に量子ホール効果が現れるか調べる。



[4]

方法

・ホール伝導度の計算[5]

線形応答理論より、ホール伝導度は以下の式で表される。

$$\sigma_{ab}(\mu, T) = \frac{2e^2\hbar}{\pi\Omega}\int dE\, f(E,\mu,T)\, \Re\, Tr\left[i\hat{v}_a \frac{d\hat{G}(E)}{dE}\, \hat{v}_b\, \Im\, \hat{G}(E)\right]$$

チェビシェフ多項式展開を用いて書き換えると

$$\sigma_{xy}(\mu, T) \cong i\frac{8e^2}{h\Omega}\int dE\, f(E,\tilde{\mu},\tilde{T})\, \left\langle\left\langle \tilde{\zeta}^r_{xy}(\epsilon)\right\rangle\right\rangle_R$$

ただし、

$$\tilde{\zeta}^r_{xy}(\epsilon) = \sum_{m,n=0}^{M-1} g_{mn}(\epsilon)\mu^{r,xy}_{mn}\, , \mu^{r,xy}_{mn} \coloneqq \langle r|T_m(\tilde{H})\hat{v}_x T_n(\tilde{H})\hat{v}_y|r\rangle$$

$$g_{mn}(\epsilon) \coloneqq g_m g_n (1-\epsilon^2)^{-2}\left[\left(\epsilon - in\sqrt{1-\epsilon^2}\right)e^{in \arccos(\epsilon)}T_m(\epsilon) + \left(\epsilon + im\sqrt{1-\epsilon^2}\right)e^{-im \arccos(\epsilon)}T_n(\epsilon)\right]$$

この計算に**高速フーリエ変換**や**高速コサイン変換**を利用
→計算量を$O(DM^2)$から$O(DM \log M)$に減らすことができる(FastCheb)

・状態密度の計算

$$\tilde{\rho}(\tilde{E}) = \frac{1}{D}\sum_{k=0}^{D-1}\delta(\tilde{E} - \tilde{E}_k)$$ →チェビシェフ展開の係数(モーメント)：$\mu_n = \frac{1}{D}Tr\left(T_n(\tilde{H})\right)$

・実空間表示のハミルトニアン[2][6]

$$\hat{H} = \sum_{i,j} M_{ij} c_i^\dagger c_j$$

$$M_{ij} = \begin{cases} -V^0_{pp\pi}e^{i\phi_{ij}}(i,j\text{が最近接}) \\ -t(r)(i,j\text{が隣の層}) \\ \frac{U}{2}(i=j,\text{上層}) \\ -\frac{U}{2}(i=j,\text{下層}) \end{cases}$$

$$t(r) = V^0_{pp\sigma}\exp\left(-\frac{\sqrt{r^2+d_0^2}-d_0}{\lambda}\right)\frac{d_0^2}{r^2+d_0^2}$$

$$\phi_{ij} = \frac{e}{h}\int_i^j \vec{A}\cdot d\vec{l}\, , \vec{A} = (-By, 0, 0)$$

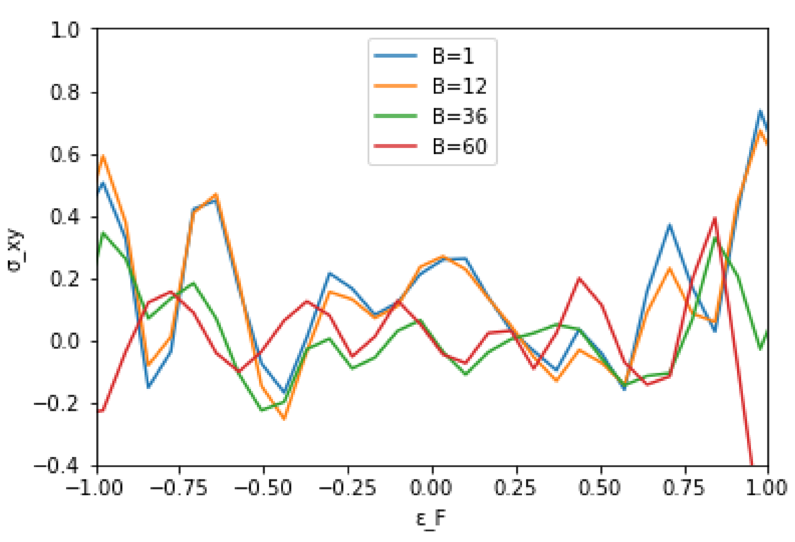
・パラメータの設定[2]

層間距離： $d_0 = 3.35$ Å
原子間距離： $a_0 = 1.42$ Å
減衰係数：$\lambda = 0.27$ Å

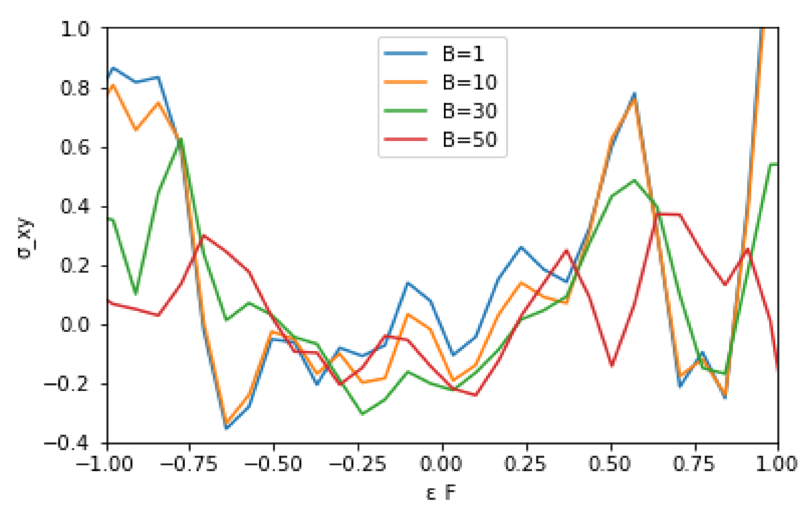
$V^0_{pp\pi} = 3.09$ eV, $V^0_{pp\sigma} = 0.39$ eV
ランダムベクトルの数：R=10
周期境界条件あり

結果

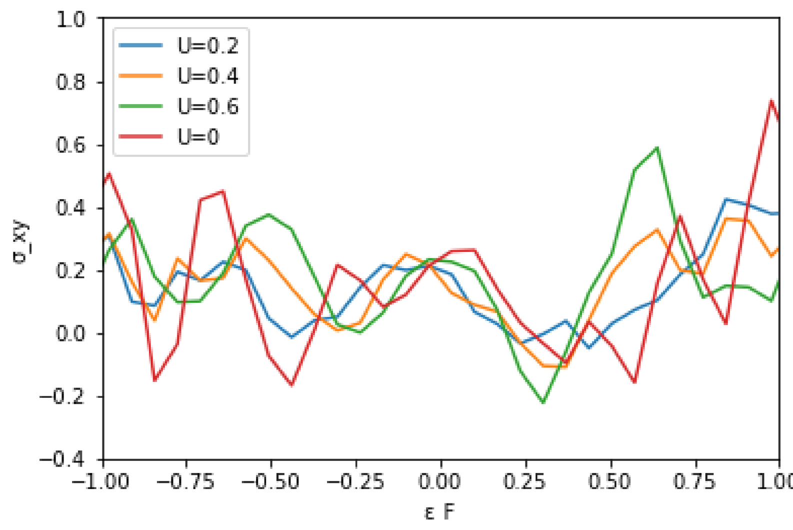
・ホール伝導度



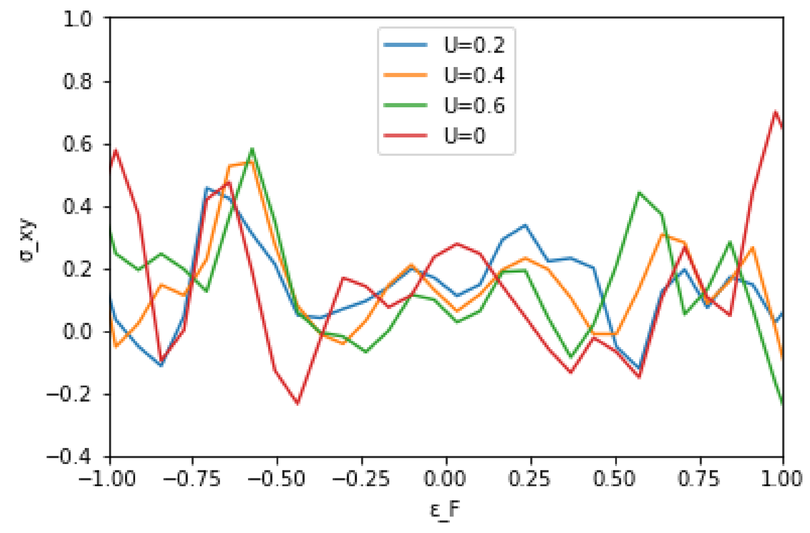
サイト数：75264 , $\theta = 21.78°$, $U = 0$ V, N = 512



サイト数：34656 , $\theta = 13.17°$, $U = 0$ V, N = 512



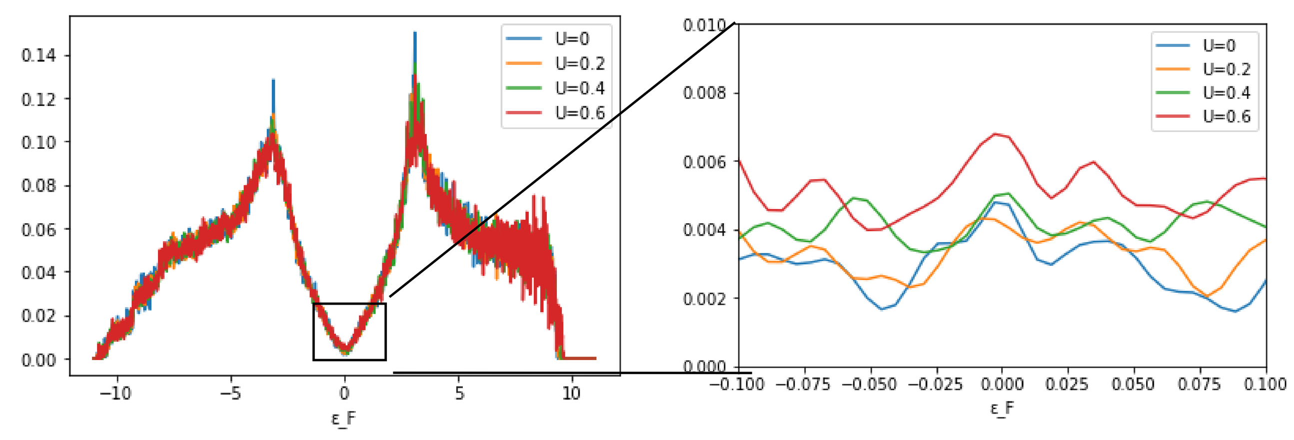
サイト数：75264, $\theta = 21.78°$, $B = 1$ T, N = 512



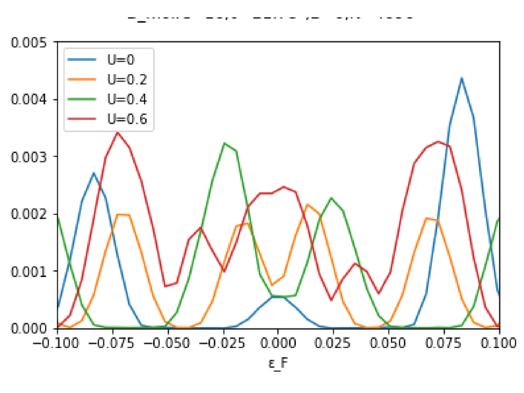
サイト数：75264, $\theta = 21.78°$, $B = 10$ T, N = 512

※ε_Fはフェルミエネルギー
※ホール伝導度の単位は$2e^2/h$

・状態密度

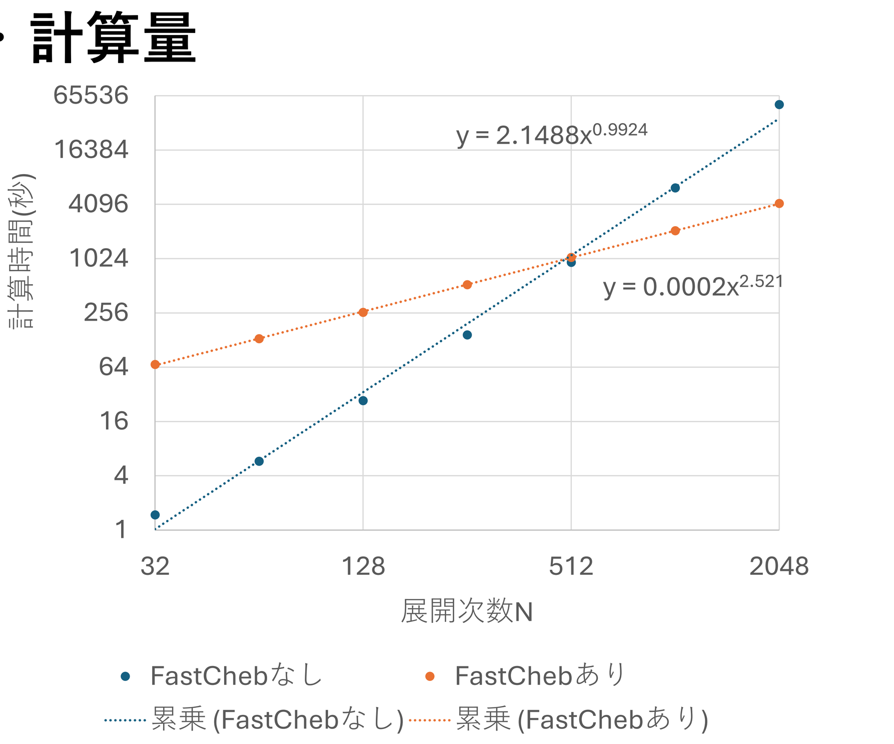


3層系、サイト数：75264, $\theta = 21.78°$, $B = 0$, N = 4096

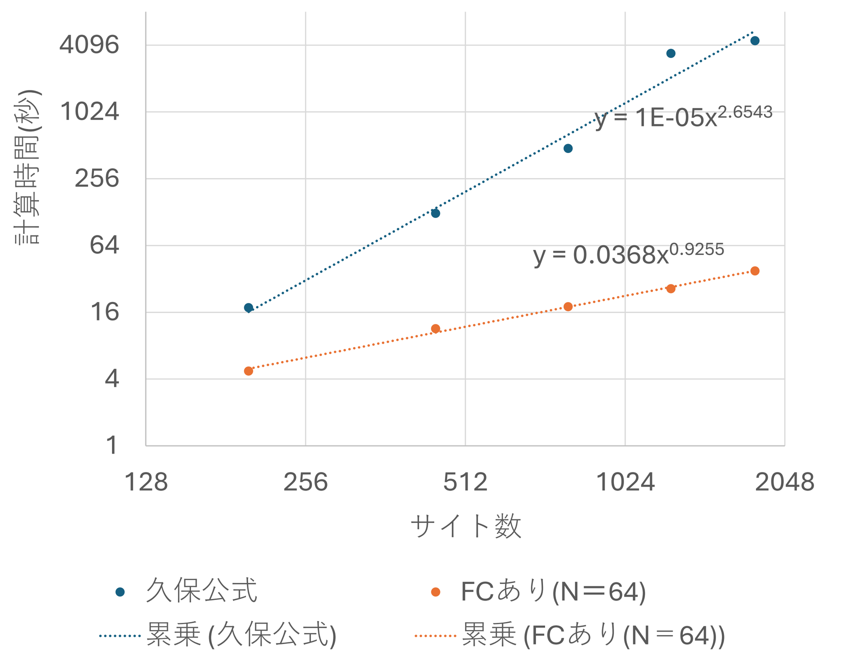


2層系(比較用)
サイト数：70000, θ, B, Nは左に同じ

・計算量



サイト数4704の系についてホール伝導度を計算
Pythonを使用



久保公式から厳密に計算した場合との比較

まとめ

・ねじれ3層系のホール伝導度の振る舞いが分かった。
・行列への磁場の効果の反映のさせ方の見直しや展開次数を増やすことにより量子化が現れる可能性がある。
・チェビシェフ多項式展開を用いることでホール伝導度の計算量を減らせることが確認できた。

参考文献

[1]F. D. M. Haldane PRL **61**, 2015(1988)
[2]P. Sinha et al. PRB **109**, 155412(2024)
[3]A. Weisse et al. Rev. Mod. Phys. **78**, 275-306 (2006)
[4] Y. Mao et al. PRB **107**, 125423(2023)
[5]S. Gimenez et al. PRL 114, 116602 (2015)
[6] P. Sinha et al. PRB **102**, 085416(2020)