

1 Solution

In the case $B \neq 0$, wave function can be expressed as the coefficients of C_{ji}^λ in the tight-binding wave function

$$\psi_{\lambda, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_j^3 \sum_i^{2q} C_{ji}^\lambda(\mathbf{k}) \sum_\alpha^{N_{UC}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_\alpha + \mathbf{r}_i)} \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha - \mathbf{r}_i). \quad (1)$$

where $i = 1 \dots 2q$. We have shown that, under an uniform magnetic field, Bloch bands λ construct Landau levels at small fields and become fractal-structured at strong fields, which is known as the Hofstadter butterfly.

We now consider a new basis consisting of three eigenfunctions of the angular momentum operators L^2 and L_z , for $l = 2, m = 0, \pm 2$,

$$|\tilde{\phi}_1\rangle = |d_{m=0}\rangle, \quad |\tilde{\phi}_2\rangle = |d_{m=+2}\rangle, \quad |\tilde{\phi}_3\rangle = |d_{m=-2}\rangle. \quad (2)$$

The new basis can be obtained from the old one by the transformation

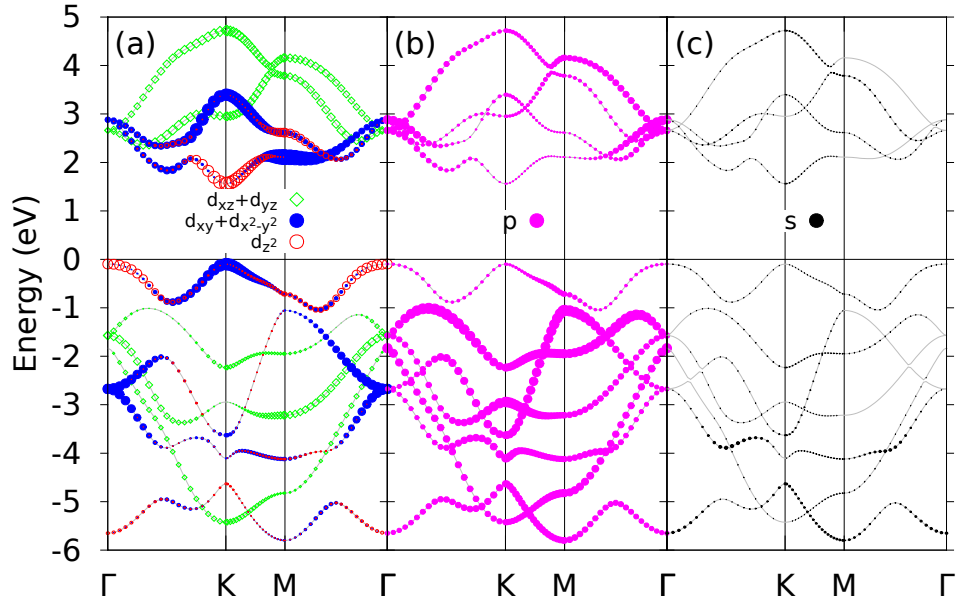
$$W = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

The TB Hamiltonian in new basis reads

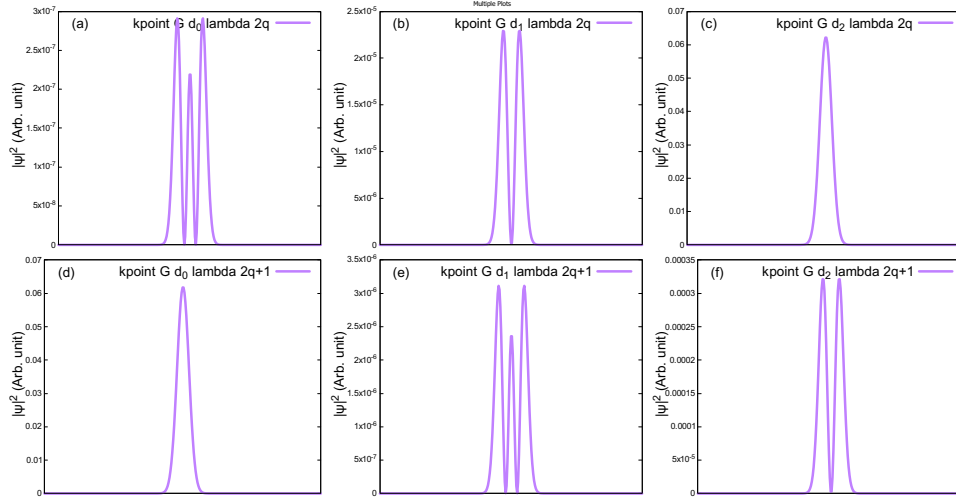
$$\begin{aligned} \tilde{H}^{NN}(\mathbf{k}) &= W H^{NN}(\mathbf{k}) W^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} h_0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(h_1 - ih_2) & \frac{1}{\sqrt{2}}(h_1 + ih_2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(h_1^* + ih_2^*) & \frac{1}{2}(h_{11} + h_{22} + 2\text{Im}\{h_{12}\}) & \frac{1}{2}(h_{11} - h_{22} + 2i\text{Re}\{h_{12}\}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(h_1^* - ih_2^*) & \frac{1}{2}(h_{11} - h_{22} - 2\text{Im}\{h_{12}\}) & \frac{1}{2}(h_{11} + h_{22} - 2i\text{Re}\{h_{12}\}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4)$$

Ở Hình 1, tại điểm K , dải hoá trị có đóng góp chủ yếu từ hai orbital d_{xy} và $d_{x^2-y^2}$, trong khi dải dẫn chủ yếu đến từ orbital d_{z^2} . Khi có mặt từ trường, vùng Brillouin zone bị thu nhỏ lại $2q$ lần so với vùng Brillouin gốc, khiến các điểm K và K' co lại và nằm gần điểm Γ . Do đó, trong bài này, chúng tôi chỉ xét phổ Hofstadter butterfly tại điểm Γ .

Ở Hình 2, khi có từ trường, hàm sóng được biểu diễn tại $\Gamma = (0, 0)$. Cụ thể, các hình (a), (b), (c) tương ứng với mức $2q$ (dải hoá trị), trong khi các hình (d), (e), (f) tương ứng với mức $2q + 1$ (dải dẫn).



Hình 1: Bandstructure lấy từ bài Liu.



Hình 2: Wavefunctions using NN model.

1.1 Cyclotron frequency

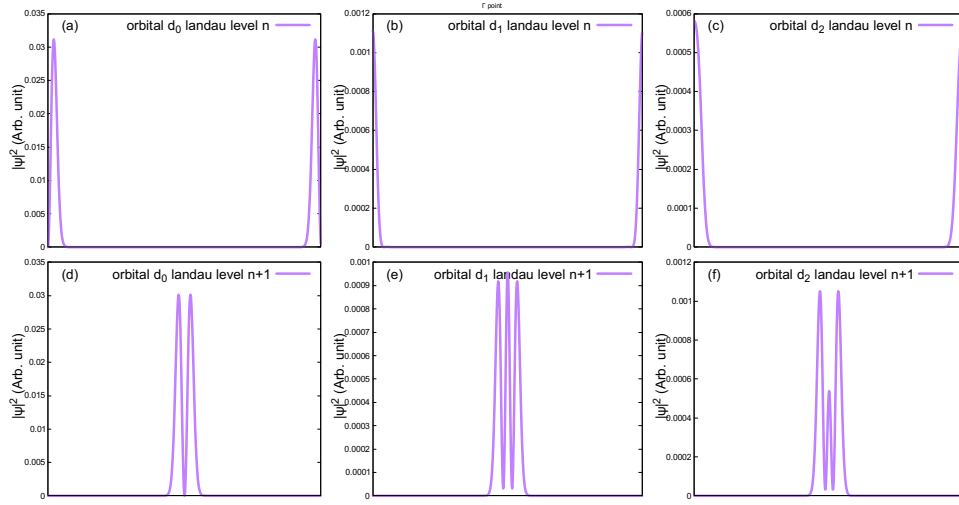
Tại $p = 1$, $q = 4723$, tần số cyclotron được tính theo công thức

$$\begin{aligned}\hbar\omega_c &= E_{n+1} - E_n \\ \Rightarrow \omega_c &= \frac{E_{n+1} - E_n}{\hbar},\end{aligned}\tag{5}$$

và khối lượng hiệu dụng cyclotron được tính bằng công thức

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*} \Rightarrow m^* = \frac{eB}{\omega_c} = \frac{eB}{\frac{E_{n+1}-E_n}{\hbar}} = \frac{eB\hbar}{E_{n+1} - E_n}\tag{6}$$

trong đó n là chỉ số mức Landau. Hàm sóng của 2 mức Landau kế tiếp nhau ở điểm K được thể hiện qua Fig.3. Ở hình 3(a),(b),(c) là hàm sóng ở mức Landau $n = 1$, với dải $2q + 4$, hình 3(d),(e),(f) là hàm sóng ở mức Landau $n = 2$ với dải $2q + 8$



Hình 3: Hàm sóng của 2 mức Landau kế tiếp nhau.

Band λ	Label	Band λ	Label
$2q + 1$	$\langle 0, 0 \rangle_{K'}$	$2q + 7$	$\langle 0, 2 \rangle_K$
$2q + 2$	$\langle 0, 0 \rangle_{K'}$	$2q + 8$	$\langle 0, 2 \rangle_K$
$2q + 3$	$\langle 0, 1 \rangle_K$	$2q + 9$	$\langle 0, 1 \rangle_{K'}$
$2q + 4$	$\langle 0, 1 \rangle_K$	$2q + 10$	$\langle 0, 1 \rangle_{K'}$
$2q + 5$	$\langle 0, 0 \rangle_{K'}$	$2q + 11$	$\langle 0, 2 \rangle_K$
$2q + 6$	$\langle 0, 0 \rangle_{K'}$	$2q + 12$	$\langle 0, 3 \rangle_K$

Bảng 1: Dán nhãn cho từng band λ .

Từ Eq.(6) ta tính ra được khối lượng hiệu dụng m^*/m_0 và tần số cyclotron, được biểu diễn trong hình.4 và hình.5

Ở hình.4 khối lượng hiệu dụng ở $B = 40$ T đột ngột tăng lên bất thường là do năng lượng ở 2 mức Landau kết tiếp nhau $\Delta E \approx 0$ dẫn đến tăng lên đột ngột. Điều này có thể thấy ở hình.5 tần số Cyloctron giảm từ $\approx 3 \times 10^{13}$ xuống còn 5×10^{12} Hz

Band λ	Label
$2q - 1$	$\langle 2, 0 \rangle_{K'}$
$2q - 2$	$\langle 2, 0 \rangle_{K'}$
$2q - 3$	$\langle 0, 0 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 4$	$\langle 0, 0 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 5$	$\langle 0, 1 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 6$	$\langle 0, 1 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 7$	$\langle 2, 1 \rangle_{K'}$
$2q - 8$	$\langle 2, 1 \rangle_{K'}$
$2q - 9$	$\langle 2, 2 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 10$	$\langle 0, 2 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 11$	$\langle 0, 3 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 12$	$\langle 0, 3 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 13$	$\langle 0, 4 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 14$	$\langle 0, 4 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 15$	$\langle 2, 0 \rangle_K$
$2q - 16$	$\langle 2, 0 \rangle_K$
$2q - 17$	$\langle 2, 2 \rangle_{K'}$
$2q - 18$	$\langle 2, 2 \rangle_{K'}$
$2q - 19$	$\langle 0, 5 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 20$	$\langle 0, 5 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 21$	$\langle 0, 6 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 22$	$\langle 0, 6 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 23$	$\langle 0, 7 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 24$	$\langle 0, 7 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 25$	$\langle 2, 3 \rangle_{K'}$
$2q - 26$	$\langle 2, 3 \rangle_{K'}$
$2q - 27$	$\langle 2, 1 \rangle_K$
$2q - 28$	$\langle 2, 1 \rangle_K$
$2q - 29$	$\langle 0, 8 \rangle_{\Gamma}$
$2q - 30$	$\langle 0, 8 \rangle_{\Gamma}$

Bảng 2: Dán nhãn cho từng band λ .

Band λ	Label
$2q + 1$	$\langle 0, 0 \rangle_{K'}$
$2q + 1$	$\langle 0, 0 \rangle_{K'}$

Bảng 3: Dán nhãn cho từng band λ .