

各向异性诱导的二维材料磁场所产生的磁场生成

Diogo Simões,¹ Hugo Terças,^{2,1} and Jorge Ferreira³

¹GoLP/Instituto de Plasmas e Fusão Nuclear, Instituto Superior Técnico, Lisboa, Portugal*

²Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Instituto Politécnico de Lisboa, Lisboa, Portugal

³Instituto de Plasmas e Fusão Nuclear, Instituto Superior Técnico, Lisboa, Portugal

(10Dated: 2025 年 6 月 26 日)

我们研究了二维材料中由于费米表面各向异性而引起的电磁不稳定性，利用了一个考虑温度值、化学势和各向异性比的影响以及线性和二次低能带结构的动理论模型。这些模式的增长率随波数在直线性区域导出，并描述了它们与系统中的稳定电磁波对比下的约束情况。通过完全动力学和非线性的模拟展示了有结构的垂直磁场的生成及其饱和行为。

I. 介绍

近年来，二维材料已被证明是理论物理、实验物理和工程学中一个非常活跃的研究领域，由于它们能够实现新颖的光学、电子和机械特性 [1]，因此具有众多应用。这些材料的特点是电荷载流子的波函数被限制在平面内。除此之外，高浓度导体以及这种几何结构对它们之间库仑相互作用的修改，导致了一系列有趣的物理现象。

在流体力学精神的指引下，石墨烯场效应晶体管 (GFETs) 已被提出作为激发等离子波 [2] 的平台，这些等离子波可用于生成和检测太赫兹波 [3, 4]，构成了一种填补太赫兹空白的候选方案，在传感 [5]、医学成像 [6] 等领域具有重要应用。此外，非线性 [7] 和手性波 [8] 已被理论化，在涉及磁畴边界的设置中具有潜在的通信应用 [9]。

单层和双层石墨烯分别是线性能带和二次能带二维材料的代表性示例，然而，在这里忽略了材料能带的确切性质。我们假设仅知道费米能量附近的电子行为，并专注于这种行为为线性或二次的材料，因为这两种情况涵盖了大量二维导电材料，而能带的具体系数 v_F 或 m 将在分析工作中作为变量保留，并在模拟中进行无量纲化处理，以便尽可能保持分析的一般性。

等离子体学领域在这些系统中主要关注横向磁波 (TM)，因为已经证明横向电波 (TE) 不被支持，除了由于带间跃迁导致的狭窄频率范围 [10]。尽管如此，本文专注于二维材料中因各向异性能带结构而产生的 TE 不稳定现象，这种不稳定现象因其非振荡特性得以存在。研究表明该不稳定现象会生成可调出平面磁场，可通过改变诸如栅极化学势等参数来调节。

尽管这些系统的平衡、弹道 [11] 和流体力学 [12] 状

态已被广泛研究，但这里提出并使用了一个量子动力学模型，以便进行超出线性范围的分析，在这个范围内，局部平衡的假设是无法证明的。

II. 动力学模型

为了在不求助于流体动力学模型中固有的局部平衡假设的情况下建模这些系统中的载流子动态，使用了基于威格纳函数

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \langle \mathbf{r} - \mathbf{s}/2 | \hat{\rho} | \mathbf{r} + \mathbf{s}/2 \rangle e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}/\hbar} d\mathbf{s}, \quad (1a)$$

的量子动力学描述，其中 $\hat{\rho}$ 是密度算符。从这个算子的定义和时间演化方程出发，并使用上述定义的 Wigner 变换，这个准概率分布的时间演化可以写为 [13]，

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} &= \{H, W\} \\ &:= \frac{2}{\hbar} W(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \sin\left(\frac{\overleftarrow{\nabla}_p \cdot \overrightarrow{\nabla}_r - \overleftarrow{\nabla}_r \cdot \overrightarrow{\nabla}_p}{2}\right) H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \end{aligned} \quad (2)$$

该方程的经典极限是 Liouville 方程，在忽略关联后，BBGKY 层级截断后得到单粒子 Vlasov 方程，

$$\partial_t f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + \mathbf{F} \cdot \nabla_p f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0, \quad (3)$$

其中 $\mathbf{v} = \nabla_p E(\mathbf{p})$ 是微观粒子速度，依赖于由 $E(\mathbf{p})$ 定义的能带，而 \mathbf{F} 是洛伦兹力。

III. 数值实现

建立了支配系统时演化的行为的运动方程后，进行非线性数值模拟以超越可解析获得的结果是有意义的。为此，开发了这种偏微分方程 (PDE) 的离散化以及一个

*Electronic address: diogo.s.simoes@tecnico.ulisboa.pt

用于其数值求解的算法。这些努力导致了一个名为**绿嘲鸟** (QUantum Electrodynamic bolTZmann ALgorithm) 的模拟代码的创建。

该算法由一个有限体积方案组成, 作用于相空间笛卡尔网格上。通量通过单峰上游方案估算, 基于单元值的分段线性重构结合单峰中心通量限制器, 得到二阶精度的通量。时间演化采用二阶精度的 Runge-Kutta 总变差减小 (TVD) 方法。

另一方面, 场通过相同的 TVD 龙格-库塔方法随时间演化, 它们的时间导数通过谱方法估算, 计算当前密度与核的必要卷积, 该卷积将通过快速傅里叶变换 (FFT) 算法推导得出。

IV. 修改后的麦克斯韦系统

电磁场由时变的麦克斯韦方程组控制, 然而, 系统中的二维几何结构, 电荷被限制在材料平面内, 改变了它们的演化。为了在这种几何结构下计算控制方程, 沿平面轴 (\hat{x} 和 \hat{y}) 对场进行傅里叶变换, 并解出材料平面上下方介质中波的形式, 这些波表现为入射波和出射波, 可以是任意极化形式, 每个区域总共得到 4 个未知常数。

然后, 通过在平面 ($z = 0$) 上施加边界条件来设定未知常数,

$$E_{x,y}(z = 0^+) = E_{x,y}(z = 0^-), \quad (4a)$$

$$\begin{aligned} B_x(z = 0^+) - B_x(z = 0^-) &= \mu J_y(\mathbf{q}), \\ B_y(z = 0^+) - B_y(z = 0^-) &= -\mu J_x(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (4b)$$

对应于电场的连续性和由于电流密度 $\mathbf{J}_{3D}(x, y, z) = \mathbf{J}(x, y)\delta(z)$ 引起的磁场不连续性的条件, 以及假设不存在来自 $z \rightarrow \pm\infty$ 的入射波。这一过程导致了由下列方程组给出的结果:

$$\partial_t E_x = -iq_y B_z - \kappa_z \frac{J_x}{2}, \quad (5a)$$

$$\partial_t E_y = iq_x B_z - \kappa_z \frac{J_y}{2}, \quad (5b)$$

$$\partial_t B_z = -iq_y E_x + iq_x E_y, \quad (5c)$$

其中 $\kappa_z = \sqrt{q^2 - \omega^2/c^2}$ 是沿 \hat{z} 方向场衰减率。

计算色散关系或增长率的一般过程包括对 Vlasov 方程 (公式 3) 进行傅里叶变换, 并围绕适当的平衡状态 f_0 进行线性化。这一过程导致了第一次扰动

$$\tilde{f}_1 = i \frac{\tilde{F}_1}{\omega - \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f_0(\mathbf{p}). \quad (6)$$

。我们在这里假设材料中没有驱动永久的零级电流, 因此电流是由对分布函数的这个扰动进行积分给出的。

利用这一结果, 我们通过将此结果代入方程组 5 中, 在 \hat{z} 方向上沿磁场极化并限制在材料内的面内电场的电磁模式进行搜索。这导致了如下本征方程

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{\kappa_z} \frac{\omega e^2}{2c^2 \epsilon} \left[\frac{q}{\omega} \int \frac{v_y^2}{\omega - v_x q} \frac{\partial f_0}{\partial p_x} d^2 \mathbf{p} \right. \\ &\quad \left. + \int v_y \frac{1 - v_x \frac{q}{\omega}}{\omega - v_x q} \frac{\partial f_0}{\partial p_y} d^2 \mathbf{p} \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

在费米-狄拉克分布平衡且能带为二次型的情况下, 得到的色散关系是

$$\omega^2 = c^2 q^2 - g_e \kappa_z \zeta Z_1^{2\text{DFD}}(\zeta), \quad (8)$$

其中 $g_e = \frac{e^2 n_e}{2\epsilon m}$, n_e 表示电子密度, $\zeta = \omega/(qv_{\text{th}})$ 和 $Z_1^{2\text{DFD}}(\zeta)$ 分别是二维和费米统计学中的经典等离子体色散函数的类似物。这由积分给出

$$Z_n^{\text{FD}}(\zeta) = -\frac{e^{-\alpha}}{\sqrt{\pi}} \int \frac{1}{s - \zeta} \text{Li}_{n-\frac{1}{2}}(-e^{-s^2+\alpha}) ds, \quad (9)$$

通过适当的幂级数展开, 可以写成级数的形式

$$Z_n^{\text{FD}}(\zeta) = \frac{e^{-\alpha}}{\sqrt{\pi} \zeta} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\zeta^{2l}} \Gamma(l + \frac{1}{2}) \text{Li}_{l+n}(-e^{-\alpha}) + \text{P.C.}, \quad (10a)$$

$$Z_n^{\text{FD}} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1} \sqrt{\pi} e^{-\alpha}}{\Gamma(k + \frac{1}{2})} \text{Li}_{n-k}(-e^{-\alpha}) \zeta^{2k-1} + \text{P.C.}, \quad (10b)$$

其中 P.C. 是极点对积分的贡献所给定的虚部, 在大波长和短波长近似中分别通过对截断是有用的。

等离子体色散函数具有负实部, 考虑到 $\kappa_z = \sqrt{q^2 - \omega^2/c^2}$ 是沿着与材料垂直方向电磁场的衰减率, 我们可以看出这个量得到一个虚数值。因此, 在这种模型下, 这类波不会被限制在二维材料中, 并且沿 \hat{z} 方向传播。

V. 各向异性不稳定性

在本节中, 我们的目标是举例说明一种电磁不稳定性, 即众所周知的魏布尔不稳定性 [14, 15] 的二维版本, 考虑了电荷载流子的线性和二次能带结构。

这种不稳定性源于动量空间中的各向异性, 通常在经典等离子体中表现为沿每个笛卡尔方向粒子热速度的各向异性, 引入了依赖于轴的温度到平衡分布函数。然而, 在固态等离子体中, 实现电荷载体的这种各向异性可能非

常困难。此外，由于其高度密集的性质，碰撞的存在及其对分布函数向平衡状态的松弛使得维持这样的各向异性变得不太可能。最后，值得注意的是，在这些系统中的电荷载流子通常是非常冷的，具有一个比值 $\mu/T \gg 1$ ，使得温度各向异性对这些粒子的整体速度分布影响不大。因此，实现这一效应更为可行的方法是通过化学势的各向异性，即各向异性的费米表面，在如三层石墨烯等材料中就体现了这一点，其具有三角形的费米面 [16]，以及其他 [17–19] 材料，由于它们依赖于角度的能带结构。

我们考虑一个简单的平衡分布函数模型，即具有椭圆形费米面的模型，

$$f_0 = \left[1 + \exp \left(\frac{p_x^2}{2mT} + \frac{\mu_x}{\mu_y} \frac{p_y^2}{2mT} - \frac{\mu_x}{T} \right) \right]^{-1}, \quad (11)$$

对于二次色带和

$$f_0 = \left[1 + \exp \left(\frac{v_F}{T} \sqrt{p_x^2 + \frac{\mu_x^2}{\mu_y^2} p_y^2} - \frac{\mu_x}{\mu_y} \right) \right]^{-1}. \quad (12)$$

对于线性色带。

首先考虑二次带情况，我们使用方程 7，因为这个结果对于分布函数是通用的，仅假设其沿 \hat{y} 对称。这导致了隐式色散关系

$$\omega^2 = c^2 q^2 + g_e \kappa_z \left[\frac{n_e}{n_0} - \frac{\mu_y}{\mu_x} \left(\frac{n_e}{n_0} + \zeta Z_1^{\text{FD}}(\zeta) \right) \right], \quad (13)$$

，其中 ω 作为衰减系数 $\kappa_z = \sqrt{q^2 - \omega^2/c^2}$ 和 $\zeta = \frac{\omega}{qv_{\text{th}}}$ 的一部分出现在右端。由于我们期望有限波数的相对较低的增长率，这一假设需要通过数值解来确认，等离子体色散函数用其围绕 $\zeta = 0$ 的级数近似，并为了数值目的截断为前五项。数值求解该方程得到图 1 左面板所示的色散关系。

如所见，该模式的频率实部为零，因此它代表了一个纯增长的驻波。通过将值 $\omega = 0$ 代入公式 13 中，可以找到导致增长模式的波数范围，在零和 $q_{\text{crit}} = \frac{e^2 n_e}{2m\epsilon c^2} \left(\frac{\mu_y}{\mu_x} - 1 \right)$ 之间，并且在这个区域中间附近有一个最大的增长率。由于波动的横向性质以及粒子相对于波矢量的运动，进行了一个位置轴和两个动量轴的模拟，在不稳定性线性阶段的表现与理论结果吻合良好，在较高波数处有所偏差，此时近似 $\zeta \ll 1$ 的效果最差。

考虑现在线性带的情况，转换到极坐标系是有用的，利用在这种系统中粒子速度与动量的绝对值无关这一事实。在这种情况下，我们选择椭圆坐标系，这样既能利用速度仅依赖于角坐标的特性，又能使分布函数只依赖于径

向坐标，定义为

$$\sigma = \frac{v_F}{T} \sqrt{p_x^2 + \frac{\mu_x^2}{\mu_y^2} p_y^2} \quad (14)$$

$$\theta = \arctan \left(\frac{\mu_x p_y}{\mu_y p_x} \right).$$

对 7 的第一个积分的被积函数进行级数展开，围绕值 $\omega/(qv_F) = 0$ ，在短波长极限下使用二次带情况的方法。保留这个展开式的前两项后，色散关系采取近似形式

$$\omega^2 = c^2 q^2 + \frac{e^2 n_e v_F^2}{2\epsilon T} \kappa_z \frac{\text{Li}_1(-e^\alpha)}{\text{Li}_2(-e^\alpha)} \left[2E_0(\gamma) - \gamma^2 \left(2E_0(\gamma) \pm i \frac{\omega}{qv_F} \right) \right], \quad (15)$$

其中 Li_n 是多对数函数， $\gamma = \mu_y/\mu_x$ 是各向异性比率。此隐式关系对于 ω 类似于二次带情况，其在各向异性参数 γ 上的依赖性更为复杂，并通过椭圆函数编码，

$$E_0(\gamma) = \frac{E \left(\text{arccsc} \left(\frac{\gamma}{\sqrt{\gamma^2 - 1}} \right); \frac{\gamma^2}{\gamma^2 - 1} \right)}{\pi \sqrt{\gamma^2 - 1}}, \quad (16)$$

其中 $E(\phi|k^2) = \int_0^\phi \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta} d\theta$ 是第二类不完全椭圆积分，由于平衡分布函数的不可分离性，但因为如上所述速度独立于动量的绝对值而缺乏等离子体色散函数。此增长率绘制在图 1 的右面板中。

我们可以得出结论，其行为类似于已研究的情况，具有零实频率，并且在 $q = 0$ 和 q_{crit} 之间存在不稳定模式带，具有

$$q_{\text{crit}} = \frac{e^2 n_e v_F^2}{c^2 \epsilon T} \frac{\text{Li}_1(-e^\alpha)}{\text{Li}_2(-e^\alpha)} E_0(\gamma) (\gamma^2 - 1). \quad (17)$$

与二次情况类似的模拟显示出，在给定条件下的不稳定性增长率的整体值方面有很好的的一致性，但在波数轴上有一些偏差，因为在这种情况下我们只有一个关于 ζ 的一阶近似。

由于 ω 的纯虚数值，沿 \hat{z} 的衰减系数由 $\kappa_z = \sqrt{q^2 + \gamma^2/c^2}$ 给出，这是一个实数值，因此表明，与之前研究的波不同，这些不稳定模式在二维材料中得到支持并被限制。

A. 非线性模拟

为了研究这种不稳定的饱和阶段，在四维相空间中进行了一系列模拟，采用了线性和二次色散关系来处理电荷载体。在线性情况下，垂直于平面 (\hat{z}) 的磁场结果见图 2。

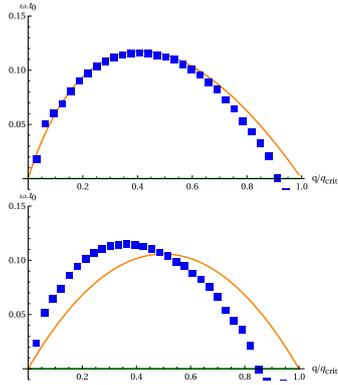


图 1: 二维 Weibel 不稳定性增长率作为波数 q 的函数, 对于化学势各向异性分别为 $\mu_y/\mu_x = 3$ 和 5 的二次 (左) 和线性 (右) 带材料, 以及具有形状参数 $\alpha = \mu_x/T = 10$ 的费米-狄拉克分布。模拟结果用蓝色表示。

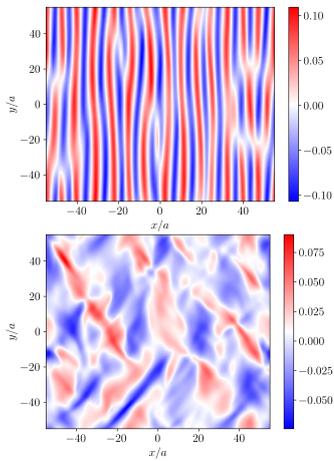


图 2: 横向 (垂直于平面) 磁场在二维 Weibel 不稳定性二次色散荷载载体的 $t = 150 \sqrt{\frac{\epsilon m}{e^2 n_0^3/2}}$ (左) 和 $t = 300 \sqrt{\frac{\epsilon m}{e^2 n_0^3/2}}$ 处。温度为 $T = 0.01$, 化学势 $\mu_x = 0.5$ 和各向异性参数为 $\gamma = 5$

如所见, 沿着化学势最小方向形成的特征磁场带按预期出现。然而, 在任何情况下, 当达到非线性阶段时, 这些结构会发生湍流破坏, 从而转变为低幅度的无序磁场分布。

这一阶段伴随着二次不稳定性现象, 在这种现象中, 电荷沿着波矢流动, 并形成空间依赖的电子密度, 这与线性区域中波动的横向性质相反。目前, 生成稳定磁畴的方法尚未被发现。

VI. 结论

一种二维横向电各向异性不稳定性动力学理论被提出, 在低能线性 and 二次带隙附近的电荷中性材料中。我们展示了这些模式的存在、增长和限制, 这与已知的 TE 波结果不同, 表明与经典的三维情况不同, 增长率在 $q = 0$ 处降至零, 并推导出了定义不稳定区域的最大临界波数。理论预测通过数值方法得到了证实, 非线性模拟显示了磁畴的形成及其饱和行为, 涉及电荷载流子的纵向运动和相干丝状结构的破坏。这些发现开启了自发生成稳定磁畴的可能性, 可以通过材料特性和外部施加的条件进行调节。

致谢

作者衷心感谢 FCT- Fundação para a Ciência e a Tecnologia 通过项目 2025.00002.HPCVLAB.ISTUL 分配的 Deucalion 超级计算机的计算时间。

-
- [1] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [2] G. R. Aizin and G. C. Dyer, *Phys. Rev. B* **86**, 235316 (2012).
- [3] P. Cosme and H. Terças, *ACS Photonics* **7**, 1375 (2020).
- [4] P. Cosme and D. Simões, *Journal of Physics: Condensed Matter* **36**, 175301 (2024).
- [5] R. Stantchev, D. Phillips, P. Hobson, S. Hornett, M. Padgett, and E. Hendry, *Optica* **4**, 989 (2017).
- [6] A. J. Fitzgerald, E. Berry, N. N. Zinovev, G. C. Walker, M. A. Smith, and J. M. Chamberlain, *Physics in Medicine and Biology* **47**, R67 (2002).
- [7] P. Cosme and H. Terças, *Phys. Rev. B* **107**, 195432 (2023).
- [8] P. Cosme, H. Terças, and V. Santos, in *2023 IEEE Nanotechnology Materials and Devices Conference (NMDC)* (2023) pp. 908–912.
- [9] T. Nagatsuma, G. Ducournau, and C. C. Renaud, *Nature Photonics* **10**, 371 (2016).
- [10] P. A. Gonçalves and N. Peres, *An Introduction to Graphene Plasmonics* (World Scientific Publishing Company, 2016) Chap. 4.
- [11] X. Du, I. Skachko, A. Barker, and E. Y. Andrei, *Nature Nanotechnology* **3**, 491 (2008).
- [12] B. N. Narozhny, I. V. Gornyi, A. D. Mirlin, and

- J. Schmalian, *Annalen der Physik* **529**, 1700043 (2017).
- [13] J. E. Moyal, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **45**, 99 (1949).
- [14] E. S. Weibel, *Phys. Rev. Lett.* **2**, 83 (1959).
- [15] B. D. Fried, *The Physics of Fluids* **2**, 337 (1959).
- [16] M. Qi and A. Lucas, *Phys. Rev. B* **104**, 195106 (2021).
- [17] C. Fu, T. Scaffidi, J. Waissman, Y. Sun, R. Saha, S. J. Watzman, A. K. Srivastava, G. Li, W. Schnelle, P. Werner, M. E. Kamminga, S. Sachdev, S. S. P. Parkin, S. A. Hartnoll, C. Felser, and J. Gooth, “Thermoelectric signatures of the electron-phonon fluid in PtSn₄,” (2018), [arXiv:1802.09468 \[cond-mat.mtrl-sci\]](https://arxiv.org/abs/1802.09468) .
- [18] U. Vool, A. Hamo, G. Varnavides, Y. Wang, T. X. Zhou, N. Kumar, Y. Dovzhenko, Z. Qiu, C. A. C. Garcia, A. T. Pierce, J. Gooth, P. Anikeeva, C. Felser, P. Narang, and A. Yacoby, *Nature Physics* **17**, 1216 (2021).
- [19] P. J. W. Moll, P. Kushwaha, N. Nandi, B. Schmidt, and A. P. Mackenzie, *Science* **351**, 1061 (2016).