

Peremeffektusok szemiklasszikus értelmezése grafénben

P. Rakyta, J. Cserti

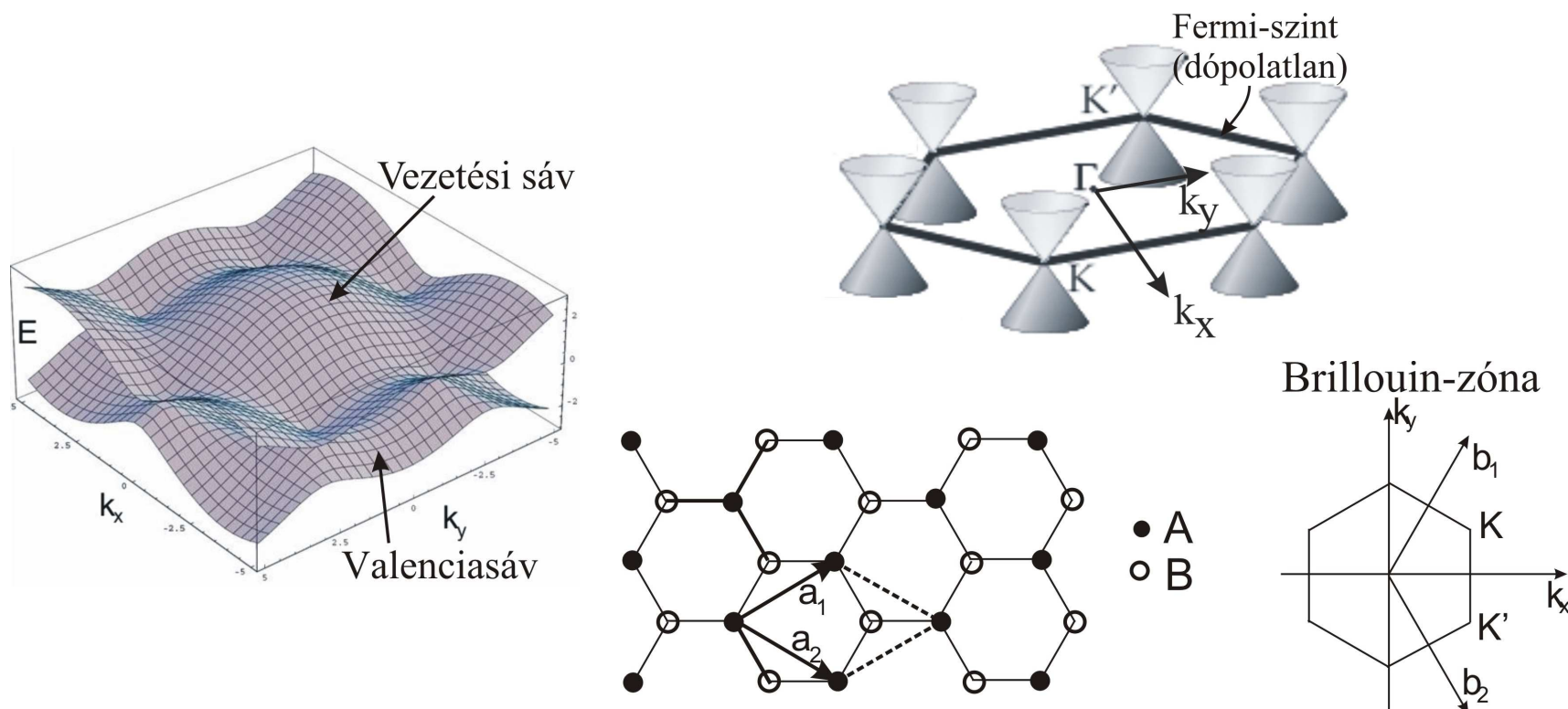
Department of Physics of Complex Systems, Eötvös University, H-1117 Budapest,
Pázmány Péter sétány 1/A, Hungary

L. Oroszlány, A. Kormányos, C. J. Lambert

Department of Physics, Lancaster University, Lancaster, LA1 4YB, UK

Bevezetés a grafén fizikájába - Tight Binding modell

2004-ben előállította Novoselov, Geim és csapatuk (Science **306**, 666).



Bevezetés a grafén fizikájába - burkoló függvények

- ▣▣▣▣ $\mathbf{k} = \mathbf{K}$ és $\mathbf{k} = \mathbf{K}'$ -re a TB Bloch-függvények: $\Psi_K(\mathbf{r}), \Psi_{K'}(\mathbf{r})$.
- ▣▣▣▣ Lassan változó $\Psi_1(\mathbf{r}), \Psi_2(\mathbf{r}), \Psi_3(\mathbf{r}), \Psi_4(\mathbf{r})$ burkolófüggvények.

$$\Psi_A(\mathbf{r}) = \Psi_1(\mathbf{r})\Psi_K(\mathbf{r}) - \Psi_4(\mathbf{r})\Psi_{K'}(\mathbf{r})$$

$$\Psi_B(\mathbf{r}) = i\Psi_2(\mathbf{r})\Psi_K(\mathbf{r}) - i\Psi_3(\mathbf{r})\Psi_{K'}(\mathbf{r})$$

	K	K'
A	$\Psi_1(\mathbf{r})$	$\Psi_4(\mathbf{r})$
B	$\Psi_2(\mathbf{r})$	$\Psi_3(\mathbf{r})$

$$\hat{H} = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y & 0 & 0 \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ 0 & 0 & \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{H} \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \\ \Psi_3(\mathbf{r}) \\ \Psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \\ \Psi_3(\mathbf{r}) \\ \Psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

- ▣▣▣▣ \hat{H} a **kontinuum modell** Hamilton-operátora.

Bevezetés a grafén fizikájába - Dirac-féle Hamilton-operátor

⇒ Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = \tau_0 \otimes \hat{H}_\sigma ,$$

$$\tau_0 = \mathbb{I}_2 , \quad \hat{H}_\sigma = v_F \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}$$

\hat{H}_σ egy nulla tömeget leíró Dirac-féle Hamilton-operátor

⇒ Hilbert-tér:

$$\text{izospin-tér} \otimes \text{pszeudospin-tér} \otimes L_2$$

$$K, K' \text{ kúpok} \otimes A, B \text{ bázisatomok} \otimes \Psi_i$$

az **izospin** és **pszeudospin** $SU(2)$ algebrát követnek

⇒ $\frac{2}{\hbar} \langle \hat{\boldsymbol{\sigma}} \rangle$ a mozgás irányába mutató egységvektor. Ezt a vektort nevezzük az elektron **kiralitásának**.

Az izospin

☛ Kontinuum modellben nincsenek $K - K'$ oszcillációk. Ezt a $\Psi_K(\mathbf{r})$, $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$ bázisfüggvények kódolják.

☛ A hiányosságot az **izospinnel** pótoljuk:

$$\mathbf{i}_{K,K'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Psi_K(\mathbf{r}) \\ \Psi_{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

☛ szabad elektronra: $\Psi_K(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}$, $\Psi_{K'}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}}$

☛ **izospin-vektor:** $\hat{\nu} = \langle \mathbf{i}_{K,K'} | \hat{\boldsymbol{\tau}} | \mathbf{i}_{K,K'} \rangle = \begin{pmatrix} \cos(\mathbf{K}\mathbf{r} - \mathbf{K}'\mathbf{r}) \\ \sin(\mathbf{K}\mathbf{r} - \mathbf{K}'\mathbf{r}) \\ 0 \end{pmatrix}$ az $x - y$ síkban forgó vektor.

Az izospin

Az izospin megválasztása egy S^1

- ➡ szimmetria erejéig egyértelmű:
(a TB hullámfüggvény nem változik)

- ➡ Ez egy forgatás az **izospin-vektoron**:

A forgatást egy $SU(2)$ transz-

- ➡ formációval kompenzáljuk a Dirac-spinor **izospin-terén**:

- ➡ a Hamilton-operátor invariáns marad bármilyen izospin-terén ható $SU(2)$ transzformációra.

$$\Psi_K(\mathbf{r}) \longrightarrow \Psi_K(\mathbf{r})e^{i\frac{\varphi}{2}}$$

$$\Psi_{K'}(\mathbf{r}) \longrightarrow \Psi_{K'}(\mathbf{r})e^{-i\frac{\varphi}{2}}$$

$$\hat{\nu} = \begin{pmatrix} \cos(\mathbf{K}\mathbf{r} - \mathbf{K}'\mathbf{r} + \varphi) \\ \sin(\mathbf{K}\mathbf{r} - \mathbf{K}'\mathbf{r} + \varphi) \\ 0 \end{pmatrix}$$

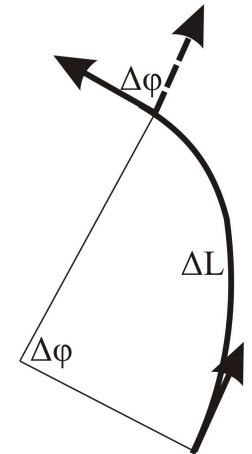
$$\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} \longrightarrow \Psi_\varphi = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Szemiklasszikus közelítések: sorfejtés \hbar hatványokban

- végtelen grafén minta, egy Dirac-kúp ($\hat{H}_\sigma = v_F \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}$)
- a hullámfüggvény és Dirac-egyenlet sorfejtése \hbar hatványaiban

- a \hbar^0 rendű hullámfüggvény:

$$\Psi_\sigma = \frac{\mathcal{A}(\mathbf{r})}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tau_1(\mathbf{r}) \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\gamma(\mathbf{r})} e^{iS(\mathbf{r})/\hbar}$$



$$\gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} d\varphi,$$

ahol $d\varphi$ a **pszeudospin** elfordulása a Γ_i trajektória dl hosszú szakaszán. \Rightarrow A trajektória mentén változik az elektron **kiralitása**.

Szemiklasszikus közelítések: kvantálási feltétel

A **hatás** az $E - \mathcal{H} \left(\frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \mathbf{r} \right) = 0$ Hamilton-Jacobi egyenlettel definiált, ahol a **Hamilton-függvény**:

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = v_F \sqrt{(p_x(\mathbf{r}) - eA_x(\mathbf{r}))^2 + (p_y(\mathbf{r}) - eA_y(\mathbf{r}))^2}$$

☛ A kvantálási feltételt a **hullámfüggvény egyértékűsége** szabja meg:

$$\frac{1}{\hbar} \oint_{\Gamma_j} \mathbf{p} \, d\mathbf{r} + \gamma_j = 2\pi \left(n_j + \frac{\mu_j}{4} \right) .$$

☛ n_j pozitív egészek,

☛ μ_j -k a Maslov-indexek (a trajektória Γ_j -re vett vetületén az érintett klasszikus fordulóponatok száma),

Kötött állapotok szemiklasszikus leírása grafénben

P. Carmier, U. Denis:

Berry phase in graphene: Semiclassical perspective,

Physical Review B **77**, 245413 (2008);

A. Kormanyos, P. Rakyta, L. Oroszlany, J. Cserti:

Bound states in inhomogeneous magnetic field in graphene:

Semiclassical approach,

Physical Review B **78**, 045430 (2008).

A peremfeltétel általános alakja

▣ A Ψ hullámfüggvény a peremen (\mathcal{E}) az alábbi peremfeltételt elégíti ki:

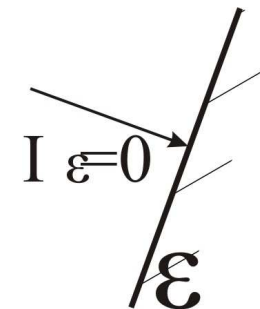
$$\hat{M}\Psi = \Psi, \quad \text{ahol } \hat{M} = \hat{M}^\dagger, \quad \hat{M}^2 = \hat{I}$$

▣ a legáltalánosabb alak: $\hat{M} = \sum_{i,j=0}^3 (\tau_i \otimes \sigma_j) c_{ij}$

Feltételek:

▣ a peremre merőlegesen nem folyik áram: $I_{\mathcal{E}} = 0$

▣ elektron-lyuk szimmetria



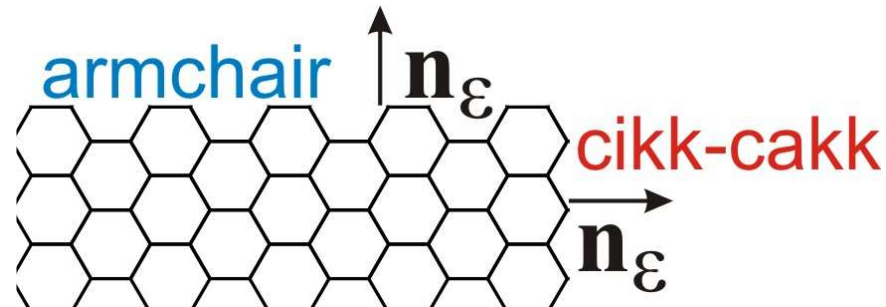
Ezek a feltételek csökkentik a független c_{ij} együtthatók számát.

A peremfeltétel általános alakja

⇒ Az előző feltételek és egyéb TB megfontolások alapján:

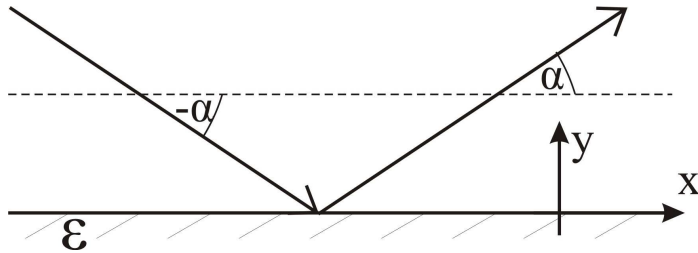
$$\hat{M} = \sin \Lambda (\tau_0 \otimes \sigma_z) + \cos \Lambda (\hat{\nu} \tau \otimes \hat{n} \sigma)$$

- *cikk-cakk* perem: $\hat{\nu} \parallel \hat{z}, \hat{n} \parallel \hat{z}, \Lambda = 0$.
- *armchair* perem: $\hat{\nu} \perp \hat{z}, \hat{n} \perp \hat{z}, \hat{n} \perp \hat{n}_\varepsilon, \Lambda \in \mathbb{R}$.



⇒ Armchair perem esetében **időtűkrözésre invariáns** rendszerre $\Lambda = 0$, egyébként határozatlan.

A reflexió mechanizmusa: armchair perem esetében



Az i^\pm izospin bázis: $\langle i^\pm | \boldsymbol{\tau} | i^\pm \rangle = \pm \hat{\nu}$

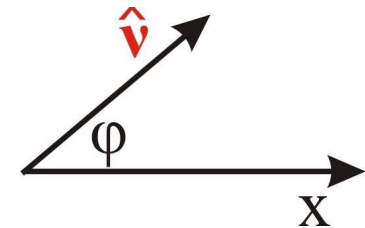
\hat{M} mátrix $i^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \pm e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}$ izospinű

sajátvektorai: $\hat{M} \mathbf{Z}^\pm = \mathbf{Z}^\pm$

$$\mathbf{Z}^\pm = i^\pm \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \varrho \end{pmatrix}, \quad \varrho = \frac{1 - \sin \Lambda}{\cos \Lambda}$$

⇒ A határfeltételt kielégítő hullámfüggvény:

$$\Psi^\pm = \eta^\pm \mathbf{Z}^\pm e^{ikx} = i^\pm \otimes \left(\Psi_\sigma^{be} + \hat{r}^\pm \Psi_\sigma^{ki} \right) e^{ikx}$$



$$\Psi_\sigma^{be} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \Psi_\sigma^{ki} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix}$$

⇒ a megfelelő hullámfüggvénynek határozott izospinje van ⇒ az izospin megmarad a reflexió során. Meghatározható \hat{r}^\pm és η^\pm .

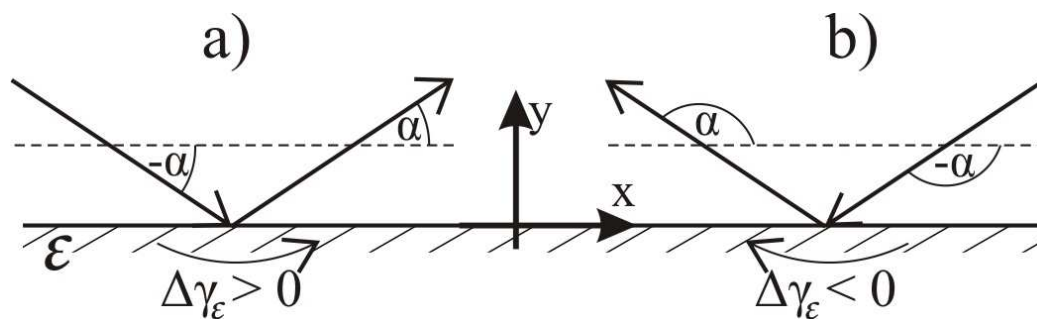
Reflexiós fázistolás $\Lambda = 0$ esetben

időtüközésre invariáns rendszer esete:

$$\hat{r}^{\pm} = \text{Exp} (i\Delta\Phi_{\varepsilon}^{\pm})$$

$$\Delta\Phi_{\varepsilon}^{+} = \gamma_{\varepsilon} + \Theta \left(-\frac{p_x^M}{|p_x^M|} \Big|_{\varepsilon} \right) \pi, \quad \Delta\Phi_{\varepsilon}^{-} = \Delta\Phi_{\varepsilon}^{+} + \pi$$

γ_{ε} a pseudospin elfordulási szöge. Ugyanaz a geometriai jelentése mint a Berry-fázis szerű γ fázisnak a szemiklasszikus formalizmusban.



$$\gamma_{\varepsilon} = \begin{cases} \alpha & \text{a)} \\ \alpha - \pi & \text{b)} \end{cases}$$

Reflexió-mátrix

\Rightarrow Reflexiós-mátrix: $\hat{R} = \begin{pmatrix} \hat{r}^+ & 0 \\ 0 & \hat{r}^- \end{pmatrix}$. A

\hat{R}	i^+	i^-
i^+	\hat{R}_{11}	\hat{R}_{12}
i^-	\hat{R}_{21}	\hat{R}_{22}

mátrixelemek leírják a szórást az i^\pm izospin bázisok között.

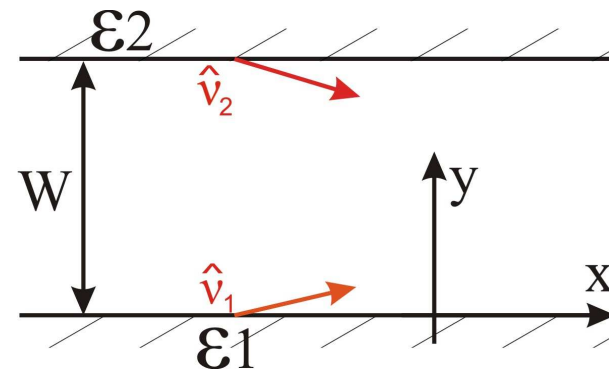
\Rightarrow Több perem esetében az **eredő fázistolásokat az azonos izospin bázisba**

traszformált **reflexió-mátrixok szorzatának sajátértékei** határozzák meg.

\Rightarrow például: grafén cső

$$\hat{R}^{(2)} = \hat{U} \hat{R}(\mathcal{E}_2) \hat{U}^+ \hat{R}(\mathcal{E}_1)$$

$$\begin{pmatrix} i_{\mathcal{E}_1}^+ \\ i_{\mathcal{E}_1}^- \end{pmatrix} = \hat{U} \begin{pmatrix} i_{\mathcal{E}_2}^+ \\ i_{\mathcal{E}_2}^- \end{pmatrix}$$



Armchair cső gyenge mágneses mezőben

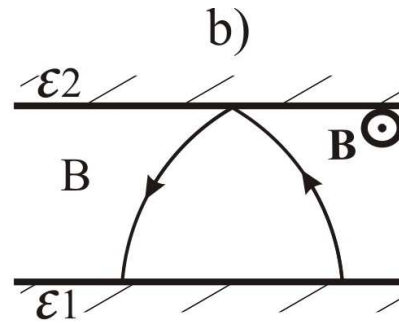
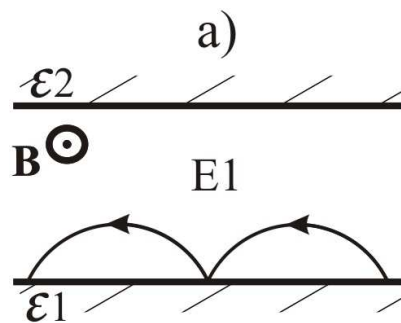
⇒ $\Lambda = 0$, azaz időtükrözésre invariáns peremfeltétel közelítés.

$$F(\tau) = \frac{S(\tau)}{\hbar},$$

⇒ Szabad elektront leíró izospin közelítés.

τ_{\pm} a fordulópontok

$(\Psi_K(\mathbf{r}), \Psi_{K'}(\mathbf{r}))$ síkhullámok

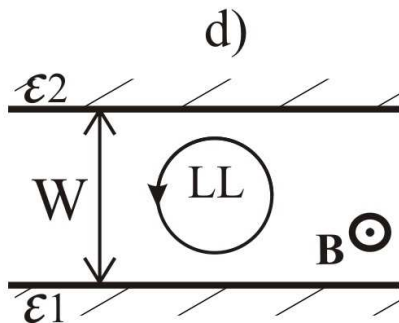
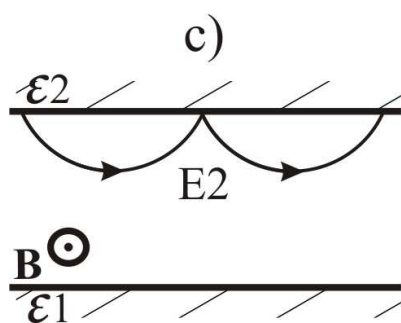


⇒ **E1 és E2 pályák:**

$$4(F(\tau_+) - F(\tau_-)) - \pi = 2n\pi$$

⇒ **B pályák:**

$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) \pm \frac{2}{3}\pi = 2n\pi$$

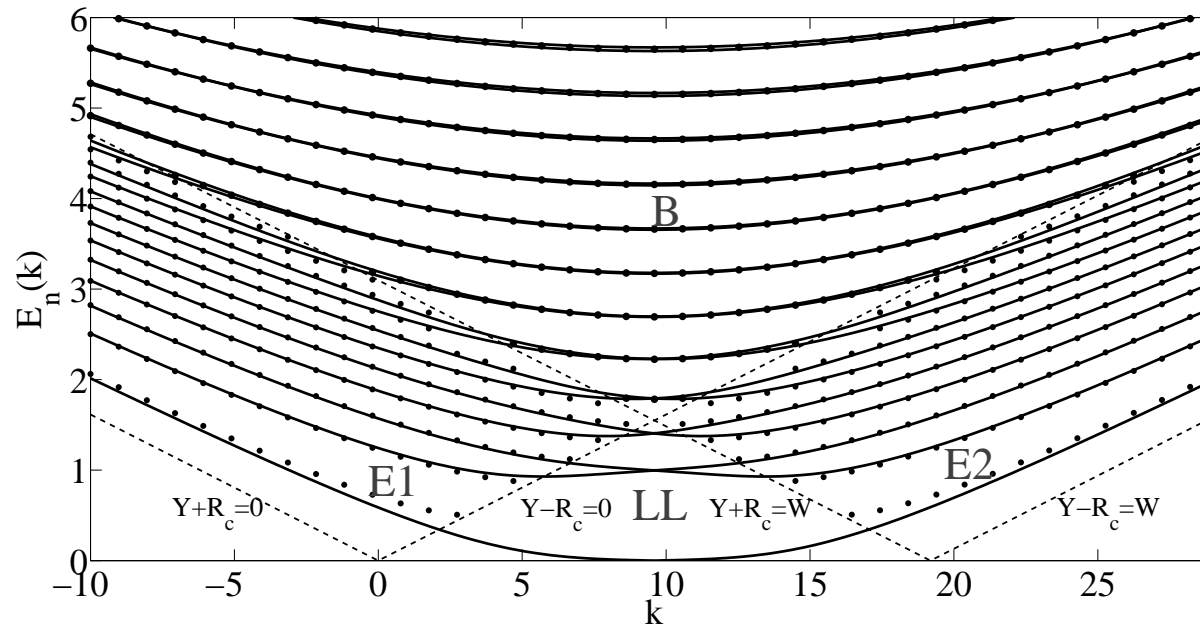


⇒ **LL pályák:**

$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) = 2n\pi$$

A reflexiók $\frac{2}{3}\pi$ fázisát nem lehet szétbontani az egyes peremek járulékaira.

Armchair cső spektruma gyenge mágneses mezőben



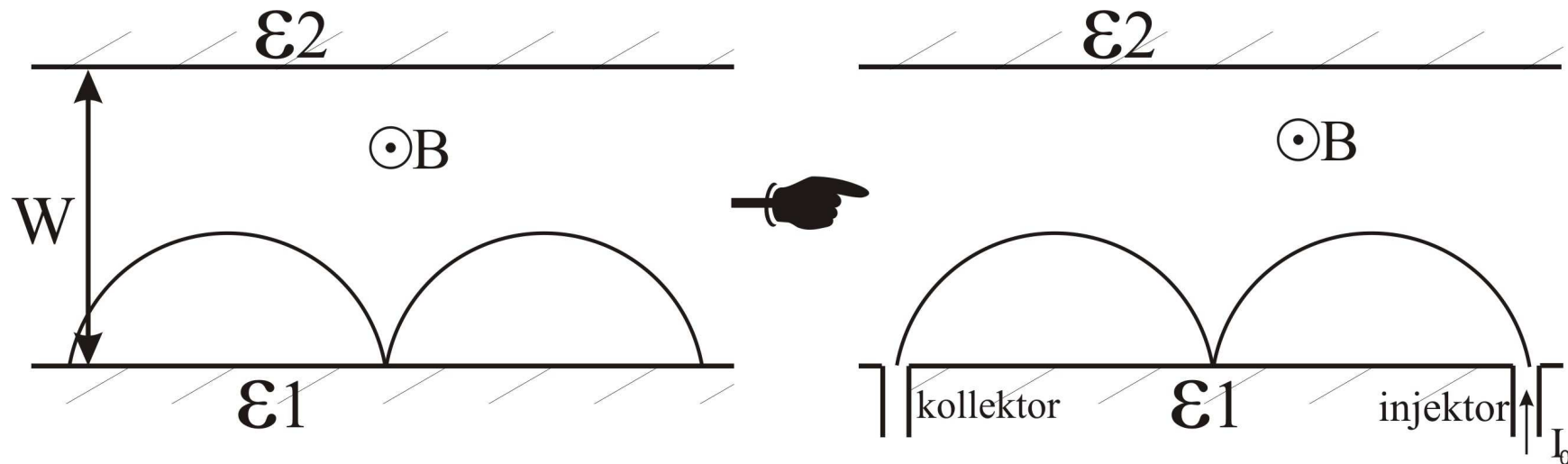
$$[k] = 1/W,$$

$$[E_n(k)] = \hbar\omega_c.$$

$E_n(k)$ -t és k -t a
 K pont értékeitől
mérjük.

vonal: TB modell spektruma,
pontok: szemiklasszikus spektrum.

Elektronfókuszálás

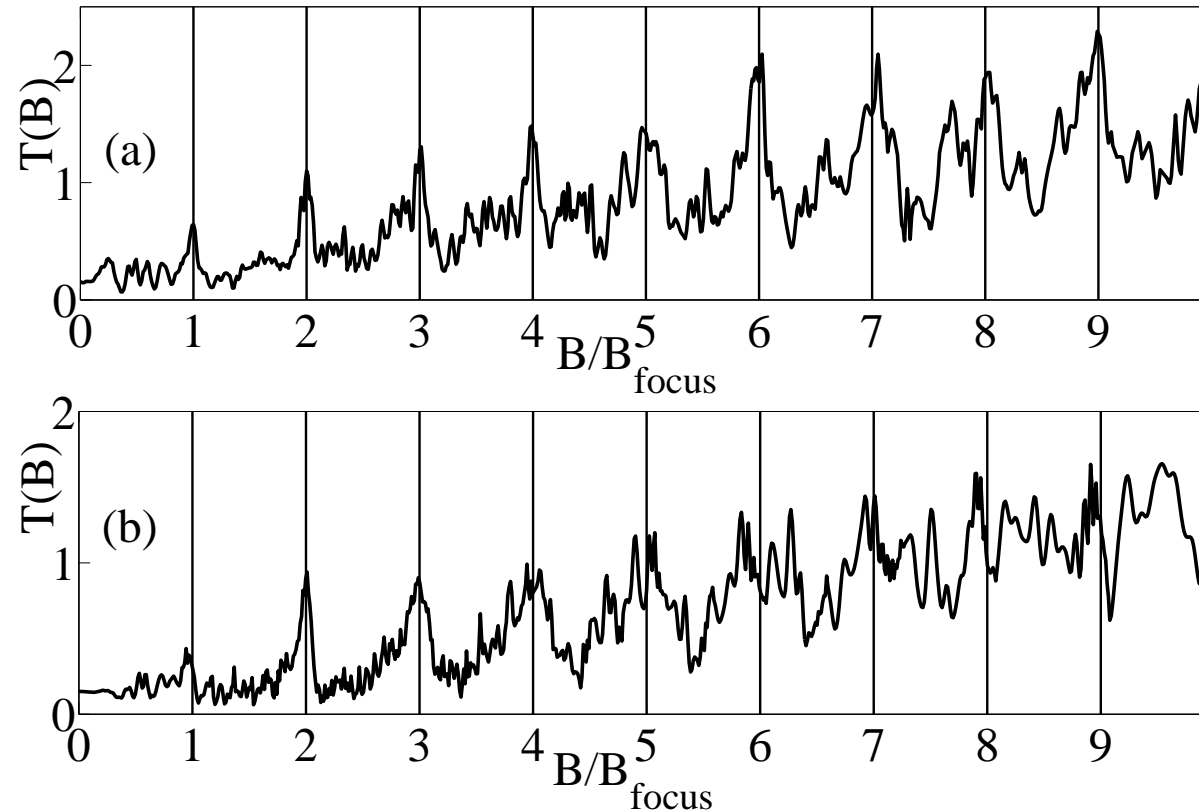


- ▣▣▣▣ C.W.J. Beenakker és munkatársainak 2DEG-ben végzett számolásai alapján grafénben is fókuszálási csúcsok. (PRB **39**, 12 (1989))
- ▣▣▣▣ A pontkontaktusok között a cső módusai szállítják az áramot.
- ▣▣▣▣ **Különbséget várunk cikk-cakk és armchair cső között.**

Elektronfókuszálás: konduktancia TB modellel számolva

Cikk-cakk cső esetében eltűnnek a magasabb rendű csúcsok.

armchair →
 függőlegesen:
 szemiklasszikus
 csúcsok
 cikk-cakk →



armchair: $\Delta\Phi_{\mathcal{E}}^{\pm} = \gamma_{\mathcal{E}} + \Delta\phi_{\mathcal{E}}^{\pm}$

peremek fázistolásai:

cikk-cakk: $\Delta\Phi_{\mathcal{E}}^{\pm} = \gamma_{\mathcal{E}} + \Delta\phi_{\mathcal{E}}^{\pm} \mp \xi_{mn}\alpha$

ξ_{mn} a cikk-cakk peremre jellemző adat.

Összefoglalás

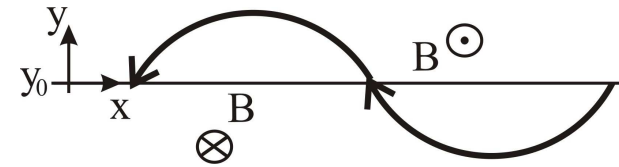
- Az **izospinhez szemléletes értelmezést** társítottunk.
- Kidolgoztuk az elemi gerjesztések **szemiklasszikus** leírására alkalmas **formalizmust**.
- C.W.J. Beenakker és munkatársai által megadott peremfeltétel mátrixot felhasználva leírtuk a **reflexiók klasszikus mechanizmusát**.
- Az eredmények lényegesek a peremekkel rendelkező grafén minta fizikai folyamatainak leírásához.

Peremállapotok erős mágneses mezőben

☛☛☛ Mennyire tér el a $\Lambda = 0$ -val közelített spektrum az egzakt spektrumtól?

Kígyó-állapotok:

☛☛☛ L. Oroszlány, P. Rakyta, A. Kormányos, C.J. Lambert, J. Cserti, Phys. Rev. B **77**, 081403(R) (2008).



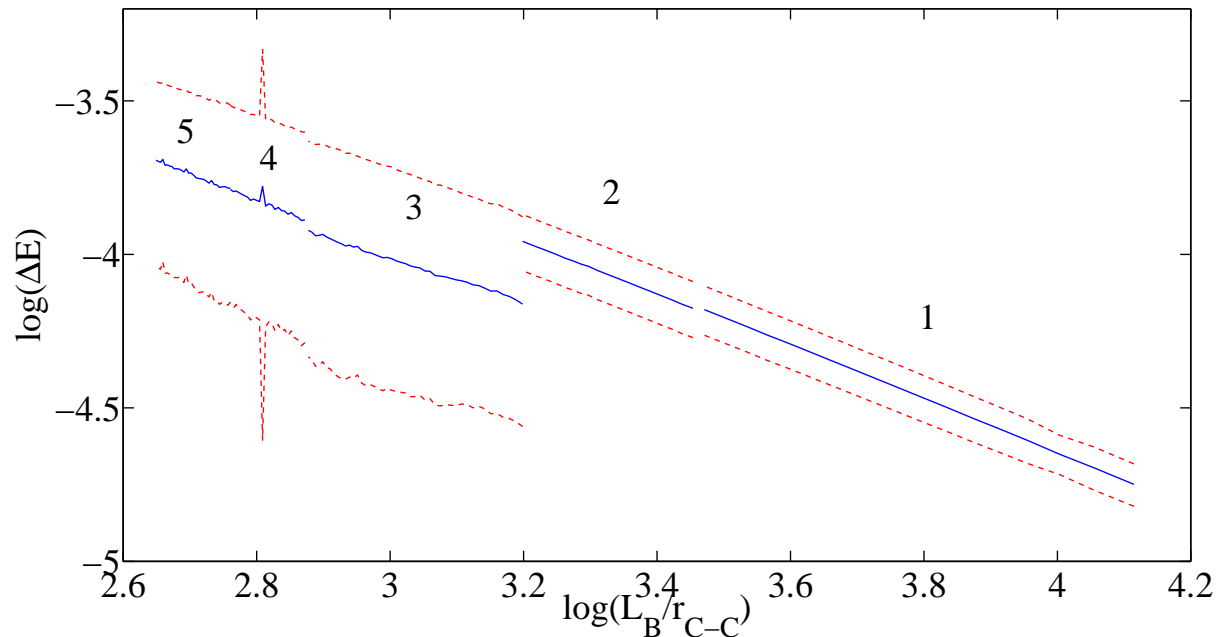
☛☛☛ **Kontinuum modellben a kígyó-állapotok spektruma megegyezik a $\Lambda = 0$ peremfeltétellel felírt peremállapotok spektrumával** egy kétszeres degeneráció erejéig $\implies TB_{\mathcal{E}}(B \gtrsim 0) \approx TB_{Snake}$.

$$K_{\mathcal{E}}(B \gtrsim 0) \cong K_{Snake} \approx TB_{Snake} \quad ? \approx ? \quad TB_{\mathcal{E}}(B > 0) \approx K_{\mathcal{E}}(B > 0)$$

K - kontinuum modell, TB - Tight Binding

\mathcal{E} - peremállapot (edge state), *Snake* - kígyó-állapot

A kígyó-állapotok és peremállapotok spektrumának átlagos eltérése



$$\frac{L_B}{r_{C-C}} \sim \frac{1}{B},$$

L_B a mágneses hossz.

1, 2, 3, 4, 5:
különböző
vastagságú csövek

A spektrumok átlagos eltérése:

$$\frac{\Delta E(L_B)}{\Delta E_0} = \left(\frac{L_B}{r_{C-C}} \right)^{-\nu}$$

$$\nu \approx 1.13, \quad \Delta E_0 \sim \mathcal{O}(0.1) \hbar \omega_c$$

$\Lambda = 0$ jó közelítés akár erős mágneses mezőben is ($B < 150$ T csak (1–2)% átlagos eltérés)