



ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΘΕΜΑ ΕΡΓΑΣΙΑΣ:

Ημικλασική μεταφορά σε υπερπλέγματα αντι-τελειών
στο γραφένιο παρουσία μαγνητικού πεδίου

Δατσέρης Γιώργος

ΑΜ: 201401

Τριμελής Επιτροπή

Γ.Π.Τριμπέρης, Καθηγητής (Κύριος Υπεύθυνος)

Theo Geisel, Professor Doctor
(Max Planck Institute for Dynamics and Self-Organization)

N. Σαρλής, Αναπλ. Καθηγητής

ΑΘΗΝΑ 2016

Περιεχόμενα

Εισαγωγή	5
1 Θεμελιώδεις Ιδιότητες του Γραφενίου	9
1.1 Σχέση Διασποράς	10
1.1.1 Το Πλέγμα της Κυψέλης	10
1.1.2 Η Προσέγγιση Ισχυρής Δέσμευσης	14
1.1.3 Πίνακες Χαμιλτονιανής, Επικάλυψης και Μεταπήδησης	16
1.1.4 Επίλυση με nn και nnn	18
1.1.5 Σχέση Διασποράς του Γραφενίου	20
1.2 Διεγέρσεις Χαμηλής Ενέργειας	21
1.2.1 Κοντά στα Σημεία Dirac - Συνεχής Περιγραφή	23
1.2.2 Άμαζα Ρελατιβιστικά Quasi-particles Διαστατικότητα $2+1$	25
1.2.3 Ψευδοσπίν και Ιδιοκαταστάσεις	26
1.3 Προσέγγιση Δεύτερης Τάξης	27
1.3.1 Τριγωνικό Περιτύλιγμα	29
1.4 Πυκνότητα Καταστάσεων	29
1.4.1 Γραμμική DOS	30
1.4.2 Ηλεκτρονική Πυκνότητα	31
1.4.3 Δυναμική ή Μάζα Κυκλοτρόνου	32
1.5 Η Χαμιλτονιανή Dirac	33
1.5.1 Προσέγγιση Μοναδικής Κοιλιάδας	34
1.5.2 Ιδιοκαταστάσεις Χαμιλτονιανής Weyl-Dirac	35
1.5.3 Νόμοι Διατήρησης	36
1.5.4 Διατήρηση του ψευδοσπίν και απώλεια οπισθοσκέδασης	36
1.6 Εγκάρσιοι Τρόποι	38
1.6.1 Τα Διαφορετικά Μοντέλα	38
1.6.2 Ζώνες μέσω Ισχυρής Δέσμευσης	39
1.6.3 Zigzag Νανοκορδέλες	42
1.6.4 Armchair Νανοκορδέλες	44

2	Βαλλιστική Μεταφορά στο Γραφένιο Παρουσία Μαγνητικού Πεδίου	47
2.1	Υπερπλέγματα Antidot σε 2DEG	48
2.1.1	2DEG σε Μαγνητικό Πεδίο	48
2.1.2	Επίδραση του Υπερπλέγματος Antidot	49
2.1.3	Κορυφές Ισομετρίας	51
2.2	Πειράματα με ADSL σε Γραφένιο	52
2.2.1	Τετράγωνο Υπερπλέγμα Antidot	53
2.2.2	Τιμές Σημαντικών Μεγεθών	53
2.2.3	Πείραμα Μαγνήτο-Μεταφοράς	55
2.3	Θεωρητικό Μοντέλο για Antidots	56
2.3.1	Κινητική Ενέργεια	57
2.3.2	Δυναμικό Antidot	58
2.4	Τροχιές στον Χώρο Φάσεων	59
2.4.1	Αδιάστατες Εξισώσεις	59
2.4.2	Λύσεις Εξισώσεων στο Τοπίο Δυναμικού	61
2.4.3	Τομές Poincaré	62
2.5	Στοιχεία Τανυστή Αγωγιμότητας	64
2.5.1	Διαδικασίες Σκέδασης και Καρφισωμένες Τροχιές	66
2.5.2	Αποτελέσματα	67
2.6	Μαγνήτο-Αντίσταση λόγω Μη Γραμμικών Συντονισμών	70
2.6.1	Χαοτικές Τροχιές και Stickiness	71
2.7	Αποσβησμένο ή Αρνητικό Φαινόμενο Hall	74
2.7.1	Καναλισμένες Τροχιές	74
2.7.2	Αρνητική Ουρά Συσχέτισης	74
2.7.3	Καναλισμένα Μήκη και Συσχετίσεις Μεγάλης-Εμβέλειας	76
3	Εφαρμογές του Μοντέλου μας	81
3.1	Σύγκριση Με Πείραμα	81
3.1.1	Μαγνήτο-Αντίσταση	82
3.1.2	Hall-Αντίσταση	84
3.2	Τυχαία Κατανομή Διαμέτρου Antidot	86
3.2.1	Αποτελέσματα και Συμπεράσματα	87
3.3	Νευτώνειο vs. Σχετικιστικό	89
3.3.1	Η Παραβολική Σχέση Διασποράς	89
3.3.2	Σύγκριση	90
4	Συμπεράσματα και Προοπτικές	93
4.1	Συμπεράσματα	93
4.2	Σκέδαση Πραγματικού-Χρόνου και Τραχιά Antidots	94
4.3	Δεύτερη Τάξη Προσέγγισης Διασποράς	94

4.4	Εξαγωνικό Υπερπλέγμα από Antidots	96
4.5	Σύγκριση με Υπολογισμούς Ισχυρής Δέσμευσης	97

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Εισαγωγή

Ένα από τα πιο συναρπαστικά φαινόμενα από την κατασκευή του δισδιάστατου ηλεκτρονικού αερίου (2DEG) στα ερευνητικά εργαστήρια γύρω στο 1985, ήταν η συμπεριφορά της μαγνήτο- και Hall-αντίστασης. Μέσα από την προσπάθεια πολλών ερευνητών τα παρατηρούμενα φαινόμενα έγιναν πλήρως κατανοητά. Καθώς ο τεχνολογικός εξοπλισμός των εργαστηρίων Φυσικής Στερεάς Κατάστασης γινόταν όλο και πιο προηγμένος, οι διατάξεις 2DEGs μπορούσαν να πραγματοποιηθούν με πολύ ενδιαφέροντα μοτίβα.

Ένα από τα μοτίβα ήταν η δημιουργία υπερπλέγματος άντι-τελείων (antidot super-lattice - ADSL). Το ADSL μπορεί να θεωρηθεί ως μια σειρά από περιοδικές τρύπες οι οποίες έχουν δημιουργηθεί με διάφορες πειραματικές τεχνικές, επάνω στην έτερο-δομή, η οποία φιλοξενεί το 2DEG. Επειδή οι τρύπες δρουν ως απωστικοί σκεδαστές για τους φορείς, η συμπεριφορά τους είναι η αντίθετη από τις γνωστές κβαντικές τελείες. Ως εκ τούτου, ονομάστηκαν antidots.

Το ADSL έχει μεγάλη επίδραση στη βαλλιστική μεταφορά των φορέων και ως εκ τούτου στην μαγνήτο- και Hall- αντίσταση. Πολυάριθμες δημοσιεύσεις που εμφανίστηκαν στο διάστημα από το 1990 μέχρι το 2000, ασχολήθηκαν αποκλειστικά με αυτό το σύστημα. Τα αποτελέσματα όλης αυτής της προσπάθειας οδήγησαν σε μια πολύ σαφή κατανόηση της συμπεριφοράς των φορέων σε ADSL, καθώς και τη δομή των καμπύλων των αντιστάσεων.

Πολύ πρόσφατα, ένα άλλο δισδιάστατο σύστημα δημιουργήθηκε σε προηγμένα εργαστήρια φυσικής, που ονομάζεται γραφένιο (ή ακριβέστερα : mono-layer γραφενίου). Αυτό το σύστημα αποτελείται αποκλειστικά από άτομα άνθρακα διατεταγμένα σε ένα εξαγωνικό πλέγμα και είναι η φύση του είναι αυστηρά δισδιάστατη. Η ανακάλυψη του γραφενίου οδήγησε την επιστήμη της Στερεάς Κατάστασης σε ένα εντελώς νέο επίπεδο, παρακινώντας ένα τεράστιο μέρος της επιστημονικής έρευνας και αποκαλύπτοντας εκπληκτικές ιδιότητες, οι περισσότερες εκ των οποίων θα ήταν αδιανόητες πριν από 50 χρόνια. Η κύρια διαφορά του γραφενίου σε σύγκριση με τα 2DEGs συστήματα είναι ότι η συνεχής περιγραφή του βασίζεται σε μια σχετικιστική εξίσωση αντί μιας Νευτώνειας.

Από την ανακάλυψή του το 2005, μεγάλη πρόοδος έχει σημειωθεί στον τομέα του γραφενίου, ο οποίος συνθέτει σήμερα ένα ξεχωριστό κεφάλαιο της έρευνας

της φυσικής στερεάς κατάστασης. Λόγω της ευαίσθητης φύσης του υλικού και της δυσκολία ανίχνευσης, μόνο πρόσφατα δημιουργήθηκαν διατάξεις με τέτοια υπερπλέγματα (ADSL). Στην πραγματικότητα, αποτελέσματα γραφενίου με ADSL δημοσιεύθηκαν τον Νοέμβριο του 2015. Στόχος αυτής της μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας είναι να ξεκινήσει την ανάπτυξη ενός κατάλληλου μοντέλου για την θεωρητική μελέτη των φαινομένων ισομετρίας (μη γραμμικών συντονισμών) που παρατηρούνται στα αντίστοιχα πειράματα.

Λόγω της μεγάλης κλίμακας της χωρικής απόστασης των antidots α , άμεση εφαρμογή του μοντέλου των ισχυρά δέσμιων ηλεκτρονίων φαίνεται να είναι λογικά μη εφαρμόσιμη. Ως εκ τούτου, στόχος είναι η μελέτη της ημικλασικής δυναμικής στο γραφένιο. Το πρώτο βήμα είναι η οικοδόμηση ενός μοντέλου με βάση την πρώτη τάξης συνεχούς περιγραφής της δυναμικής των ηλεκτρονίων και η σύγκριση των αποτελεσμάτων της με τα πειραματικά δεδομένα. Το δεύτερο βήμα είναι ο εντοπισμός πιθανών κατευθύνσεων στις οποίες μπορεί να επεκταθεί και να βελτιωθεί το προαναφερθέν ημικλασικό μοντέλο.

Για την επίτευξη αυτών των στόχων, θα ξεκινήσουμε αυτή την εργασία με μια σύνοψη των θεμελιωδών ιδιοτήτων του γραφενίου (πρώτο κεφάλαιο). Εκεί συναντάμε πολλά καταπληκτικά και νέα αποτελέσματα που είναι πολύ διαφορετικά από τα προηγούμενα συστήματα 2DEG. Στο δεύτερο κεφάλαιο της εργασίας θα δημιουργήσουμε ένα εξελιγμένο θεωρητικό μοντέλο για την βαλλιστική μεταφορά στο γραφένιο σε ADSL. Η δημιουργία του μοντέλου θα ενώσει δύο διαφορετικούς τομείς της φυσικής: Τα προηγούμενα μοντέλα που δημιουργήθηκαν με σκοπό να προσομοιώσουν 2DEGs σε ADSL, και τις θεμελιώδεις ιδιότητες του γραφενίου, οι οποίες αναλύονται στο πρώτο κεφάλαιο αυτής της εργασίας.

Δεδομένου ότι τα μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν για τα 2DEGs περίπου το 1990-1995 ήταν επιτυχή, είναι φυσικό να θέλουμε να τα χρησιμοποιήσουμε σαν σημείο εκκίνησης. Θα τα τροποποιήσουμε και επεκτείνουμε, έτσι ώστε να είναι ικανά να περιγράψουν το γραφένιο και τα πρόσφατα πειράματα. Το πρώτο μέρος του δεύτερου κεφαλαίου είναι αφιερωμένο στη δημιουργία του θεωρητικού μοντέλου. Το δεύτερο μέρος του κεφαλαίου αντιμετωπίζει τα αριθμητικά αποτελέσματα του μοντέλου. Αυτά τα αποτελέσματα είναι πολύ πλούσια σε διαφορετικά και συναρπαστικά μη γραμμικά φαινόμενα, καθένα από τα οποία θα εξηγηθεί με μια διεξοδική ανάλυση σε ένα ξεχωριστό εδάφιο.

Στο τρίτο κεφάλαιο θα συγκρίνουμε το μοντέλο μας με πραγματικά πειράματα και με βάση αυτή τη σύγκριση θα κάνουμε πολλές βελτιώσεις που ενσωματώνουν πραγματικές πειραματικές συνθήκες σε ένα θεωρητικό μοντέλο. Ορισμένες από αυτές τις βελτιώσεις δεν ελέγχθηκαν σε αυτή την εργασία λόγω χρονικών περιορισμών. Για τον λόγο αυτό, σας τα παρουσιάζουμε στις προοπτικές αυτής της διπλωματικής εργασίας, μαζί με τα συμπεράσματα.

Η παρούσα εργασία εκπονήθηκε κατά την εξαμηνιαία περίοδο του Αυγούστου 2015 έως τον Ιανουάριο 2016 και ήταν μία συνεργασία του Max Planck Institute

for Dynamics and Self-Organization και του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστήμιου της Αθήνας. Κάθε ίδρυμα υποστήριξε τον συγγραφέα με δύο επιβλέποντες: Prof. Dr. Theo Geisel και Dr. Ragnar Fleischmann από το Max Planck Institute και Καθ. Γεώργιος Π. Τριμπέρης και Αν. Καθ. Νικόλαος Σαρλής από το Πανεπιστήμιο της Αθήνας.

Κεφάλαιο 1

Θεμελιώδεις Ιδιότητες του Γραφενίου

Ο άνθρακας είναι το *materia prima* [6] για την ζωή και η βάση όλης της οργανικής χημείας. Εξ’ αιτίας της ευελιξίας του υβριδισμού του, υπάρχουν απεριόριστα συστήματα άνθρακα με διαφορετικές δομές και φυσικές ιδιότητες. Ανάμεσα σε αυτά τα συστήματα, θα μελετήσουμε το γραφένιο, μία διδιάστατη αλλοτροπική μορφή του άνθρακα. Το γραφένιο αποτελείται από άτομα άνθρακα κατανεμημένα σε πλέγμα κυψελίδας φτιαγμένο από εξάγωνα (βλ. σχ. 1.1).

Αυτό το διδιάστατο υλικό μόνο πολύ πρόσφατα (2005) “δημιουργήθηκε” σε εργαστήρια. Η πραγματική δυσκολία δεν ήταν η κατασκευή του αλλά η ανίχνευσή του [6]. Συγκεκριμένα, όταν κανείς χρησιμοποιεί μολύβι, χρησιμοποιεί γραφίτη (3D αλλοτροπική μορφή). Ο γραφίτης είναι επίπεδα από γραφένιο που συνδέονται ελαφρώς με δυνάμεις van der Waals. Έτσι, όποτε κανείς πιέζει ένα μολύβι έναντι χαρτιού, παράγει κομμάτια από γραφένιο, και ανάμεσα σε αυτά μπορεί να υπάρχουν επίπεδα με πάχος μόνο ένα άτομο [1, 2].

Το γραφένιο (πάντοτε αναφερόμαστε στο: mono-layer graphene) μπορεί να θεωρηθεί η “απόλυτη επιπεδοχώρα” [8], αφού είναι ένα υλικό με πάχος ακριβώς ένα άτομο, το λεπτότερο που μπορεί να υπάρξει στην φύση. Τα άτομα άνθρακα στο γραφένιο συγκρατούνται μέσω ομοιοπολικών δεσμών σ από τα υβριδικά τροχιακά sp^2 , σχηματίζοντας ένα 2D πλέγμα. Τα ηλεκτρόνια των υπολειπόμενων τροχιακών $2p_z$ δεν συμμετέχουν στους δεσμούς και σχηματίζουν τις ζώνες σθένους και αγωγιμότητας.

Η δημιουργία του γραφενίου είχε φοβερές επιπτώσεις στις επιστήμες συμπεκνωμένης ύλης, υλικών και χημείας. Από το 2005 υπάρχει (και συνεχίζεται μέχρι σήμερα) ένα τεράστιο ξέσπασμα επιστημονικής δραστηριότητας, με την εμφάνιση πάνω από 5000(!!!) δημοσιεύσεων που έχουν τον όρο “graphene” στον τίτλο τους μεταξύ του 2005 και 2009. Το θέμα έχει φτάσει πλέον ένα επίπεδο τόσο ογκώδες όπου κανένα βιβλίο δεν μπορεί το περιγράψει όλα τα φαινόμενα με λογικό τρόπο

[8].

Το πρώτο κεφάλαιο αυτής της Θέσης είναι αφιερωμένο σε μία πολύ μικρή και βασική περίληψη των θεμελιωδών ιδιοτήτων του γραφενίου, όπως η σχέση διασποράς (εν. 1.1), η πυκνότητα καταστάσεων (εν. 1.4) ή οι εγκάρσιοι τρόποι (εν. 1.6). Επιπλέον, παράγουμε αναλυτικά τη συνεχή περιγραφή (εξίσωση ενεργού μάζας) για το γραφένιο στις εν. 1.2 και 1.5. Στην φυσική συμπεκνωμένης ύλης, η συνεχής περιγραφή των υλικών δίνει ένα ελεύθερο ηλεκτρονικό αέριο με διαφορετική ενεργό μάζα. Το πρωτοφανές αποτέλεσμα των ενοτήτων που προαναφέραμε θα είναι ότι η συνεχής περιγραφή του γραφενίου βασίζεται σε *άμαζους σχετικιστικούς* φορείς. Η περιγραφή αυτών των σωματιδίων συνοψίζεται στην εν. 1.5. Τα ακόλουθα κεφάλαια θα βασιστούν σε αυτό το πρωτόγνωρο αποτέλεσμα.

1.1 Σχέση Διασποράς

Η ενεργειακή σχέση διασποράς του γραφενίου είχε υπολογιστεί πολλά, πολλά χρόνια πριν, εντός του πλαισίου λειτουργίας της προσέγγισης ισχυρής δέσμευσης (Tight Binding) έως και δεύτερους γείτονες (nnn) από τον Wallace [3] για τα π ηλεκτρόνια (που προέρχονται από τα τροχιακά $2p_z$). Τα σ ηλεκτρόνια που σχηματίζουν τους ομοιοπολικούς δεσμούς δεν θα εκτιμηθούν σε αυτή την προσέγγιση, αφού αποδεικνύεται ότι οι ενεργειακές ζώνες που σχηματίζουν βρίσκονται μακριά από την ενέργεια Fermi (μία διευκρίνιση για το τι ακριβώς είναι π και σ ηλεκτρόνια δίνεται παρακάτω). Αντί αυτού, αναφέρουμε στον ενδιαφερόμενο αναγνώστη ένα βιβλίο από τον Saito [4]. Στα ακόλουθα, θα υπολογίσουμε αναλυτικά την ενεργειακή σχέση διασποράς του γραφενίου έως και nnn εντός της αναπαράστασης θέσης.

1.1.1 Το Πλέγμα της Κυψέλης

Το γραφένιο είναι δομημένο στο επονομαζόμενο πλέγμα της “κυψέλης” όπου τα άτομα άνθρακα είναι πυκνά τοποθετημένα σε ένα εξαγωνικό μοτίβο. Στο σχ. 1.1(a) παρουσιάζουμε αυτό το πλέγμα με έναν συγκεκριμένο προσανατολισμό. Θα αναφερόμαστε σε αυτόν τον προσανατολισμό ως *zigzag*, επειδή οι πάνω και κάτω “άκρες” του πλέγματος σχηματίζουν ένα zigzag μοτίβο. Σε λίγες παραγράφους θα συζητήσουμε επίσης τον προσανατολισμό *πολυθρόνας* (armchair), με το πλέγμα να έχει περιστραφεί κατά 90° είτε δεξιόστροφα είτε αριστερόστροφα.

Προσανατολισμός Zigzag

Το πλέγμα κυψέλης δεν είναι πλέγμα κατά Bravais αλλά μπορεί να αναλυθεί ως ένα τριγωνικό πλέγμα κατά Bravais με βάση αποτελούμενη από δύο άτομα.

Ισοδύναμα, μπορούμε να το φανταστούμε ως δύο τριγωνικά υπό-πλέγματα A και B (σχ. 1.1). Η μέση απόσταση μεταξύ δύο κοντινών γειτόνων είναι $a \approx 1.42$ Å. Για τον προσανατολισμό zigzag κάθε τριγωνικό υπό-πλέγμα σχηματίζεται από δύο θεμελιώδης ανύσματα (σχ. 1.1(a)):

$$\mathbf{a}_1 = a\sqrt{3}(1, 0), \quad \mathbf{a}_2 = a\sqrt{3}\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right). \quad (\text{zigzag}) \quad (1.1)$$

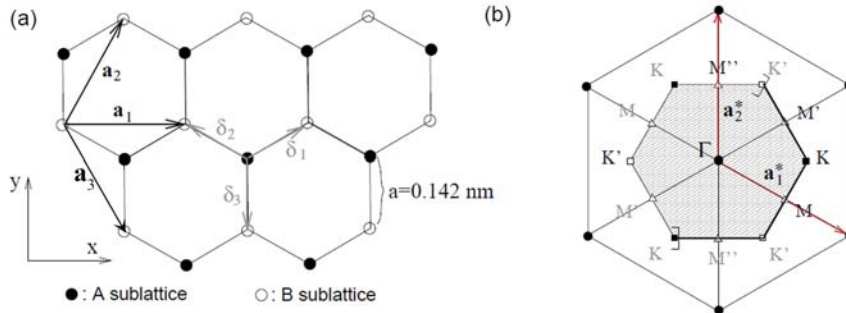
Παρατηρήστε ότι η σταθερά πλέγματος κατά Bravais δεν είναι η απόσταση άνθρακα-άνθρακα αλλά $a_0 = a\sqrt{3} \approx 2.24$ Å. Τα τρία ανύσματα που συνδέουν κοντινότερους γείτονες (nn), δηλαδή ένα άτομο του υπό-πλέγματος A με ένα του υπό-πλέγματος B είναι (σχ. 1.1(a)):

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1), \quad \delta_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1), \quad \delta_3 = a(0, -1) \quad (\text{zigzag}) \quad (1.2)$$

ενώ τα έξη ανύσματα που συνδέουν δεύτερους γείτονες (nnn), οι οποίοι πάντα ανήκουν στο ίδιο υπό-πλέγμα, είναι: $\delta'_1 = \pm\mathbf{a}_1$, $\delta'_2 = \pm\mathbf{a}_2$, $\delta'_3 = \pm(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) = \pm\mathbf{a}_3$.

Για να βρούμε το αντίστροφο πλέγμα, ανακαλούμε ότι η ανυσματική σχέση μεταξύ ευθέως και αντίστροφου πλέγματος είναι $\mathbf{a}_i \mathbf{a}_j^* = 2\pi\delta_{ij}$ οπότε μπορούμε να εξάγουμε τα θεμελιώδη ανύσματα του αντίστροφου πλέγματος ως:

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{4\pi}{3a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right), \quad \mathbf{a}_2^* = \frac{4\pi}{3a}(0, 1) \quad (\text{zigzag}). \quad (1.3)$$



Σχήμα 1.1: (a) Πλέγμα του γραφενίου (κυψέλης) με προσανατολισμό zigzag. (b) Αντίστοιχο αντίστροφο πλέγμα. Η σκιασμένη περιοχή αναλογεί στην πρώτη ζώνη Brillouin. Σημειώστε πως για την ζώνη Brillouin, οι μισές από τις άκρες του εξαγώνου ανήκουν εξ' ορισμού στην ζώνη. Για αυτό, μόνο οι μισές άκρες του εξαγώνου παρουσιάζονται με παχύ συμπαγές χρώμα. Σημειώνουμε επίσης τα ανισοδύναμα σημεία συμμετρίας K , K' τα οποία τονίζουν τις γωνίες της ζώνης Brillouin με μαύρα τετράγωνα, καθώς επίσης και τα κρυσταλλογραφικά σημεία M , M' , M'' (επίσης ανισοδύναμα) με άσπρα τρίγωνα. Σχήμα από αναφ. [11].

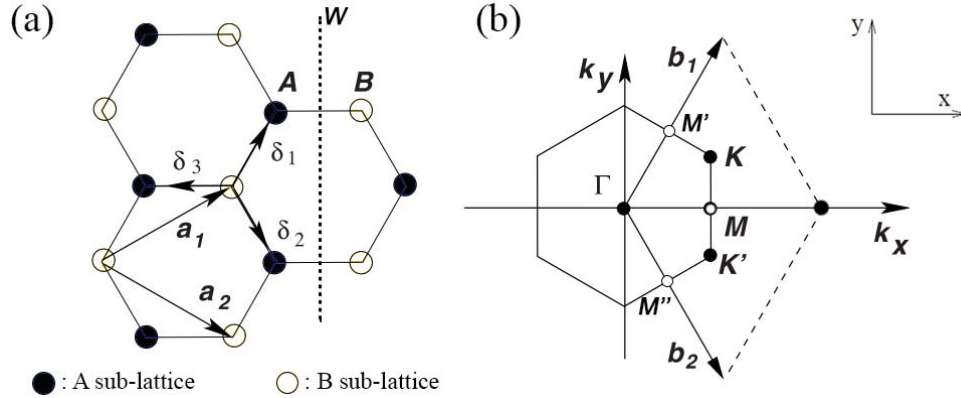
Στο σχ. 1.1(b) σχεδιάζουμε το αντίστροφο πλέγμα, το οποίο τυχαίνει και είναι και αυτό πλέγμα κυψέλης με σταθερά $a_0^* = 4\pi/3\sqrt{3}$. Η πρώτη ζώνη Brillouin (επίσης εξάγωνο) είναι περιστραμμένη 90° (σχ. 1.1(b)) αναφορικά με το ευθύ πλέγμα. Υπάρχουν δύο ανισοδύναμες γωνίες σημειωμένες ως σημεία $\mathbf{K}$ και $\mathbf{K}'$:

$$\mathbf{K}, \mathbf{K}' = \left(\pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right) \text{ or } \left(\pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right) \quad (\text{zigzag}) . \quad (1.4)$$

Όλες οι υπόλοιπες γωνίες της πρώτης ΖΒ συνδέονται με ένα μετασχηματισμό από τα θεμελιώδη ανύσματα του αντίστροφου πλέγματος.

Προσανατολισμός Πολυθρόνας

Ένας άλλος συχνός τρόπος για να παρουσιάσει κανείς το πλέγμα κυψελίδας, είναι με μία περιστροφή κατά 90° . Το αποτέλεσμα ονομάζεται προσανατολισμός πολυθρόνας (armchair), ξανά λόγω του σχήματος των πάνω και κάτω “άκρων”. Σε αυτόν τον προσανατολισμό, όλα τα ανύσματα και σημεία που αναφέραμε παραπάνω δίνονται από διαφορετικές σχέσεις. Επειδή μπορεί να είναι αρκετά δύσκολο χωρίς προηγούμενη εξήγηση, θα παρουσιάσουμε επίσης τα αποτελέσματα για τον προσανατολισμό πολυθρόνας. Το πλέγμα σε αυτόν τον προσανατολισμό βρίσκεται στο σχ. 1.2(a) καθώς και το αντίστοιχο αντίστροφο πλέγμα (σχ. 1.2(b)).



Σχήμα 1.2: (a) Πλέγμα γραφενίου (κυψέλης) με προσανατολισμό πολυθρόνας. Η κατακόρυφη διακεκομμένη γραμμή δείχνει τον άξονα ανάκλασης της πράξης W . (b) Αντίστοιχο αντίστροφο πλέγμα. Το εξάγωνο περικλείει την πρώτη ζώνη Brillouin (βλ. συζήτηση στο σχ. 1.1). Σημειώνουμε επίσης τα ανισοδύναμα σημεία συμμετρίας $\mathbf{K}$, $\mathbf{K}'$ τα οποία τονίζουν τις γωνίες της ζώνης Brillouin με μαύρο χρώμα, καθώς επίσης και τα κρυσταλλογραφικά σημεία $\mathbf{M}$, $\mathbf{M}'$, $\mathbf{M}''$ (επίσης ανισοδύναμα) με άσπρους κύκλους. Σχήμα από αναφ. [8].

Τα θεμελιώδης ανύσματα για τον προσανατολισμό πολυθρόνας είναι:

$$\mathbf{a}_1 = a\sqrt{3} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{a}_2 = a\sqrt{3} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) \quad (\text{armchair}) . \quad (1.5)$$

Τα τρία ανύσματα που φαίνονται στο σχ. 1.2 και συνδέουν nn είναι:

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = a(-1, 0) \quad (\text{armchair}) \quad (1.6)$$

ενώ τα έξι ανύσματα που συνδέουν nnn έχουν τον ίδιο ορισμό όπως και στον προσανατολισμό zigzag: $\boldsymbol{\delta}'_1 = \pm\mathbf{a}_1$, $\boldsymbol{\delta}'_2 = \pm\mathbf{a}_2$, $\boldsymbol{\delta}'_3 = \pm(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) = \pm\mathbf{a}_3$.

Το αντίστροφο πλέγμα, ορισμένο όπως και πριν, δίνεται τώρα από:

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{a}_2^* = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (\text{armchair}) \quad (1.7)$$

και οι γωνίες της ζώνης Brillouin δίνονται από:

$$\mathbf{K}, \mathbf{K}' = \left(0, \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \text{ or } \left(\frac{2\pi}{3a}, \pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \quad (\text{armchair}) . \quad (1.8)$$

Είναι εξαιρετικά σημαντικό για κάποιον να έχει ξεκάθαρη ιδέα του ποιος προσανατολισμός χρησιμοποιείται σε οποιαδήποτε εργασία. Ο λόγος για αυτό είναι ότι όλες οι ακόλουθες εξισώσεις (όπως για παράδειγμα η σχέση διασποράς ή η συνεχής περιγραφή δεύτερης τάξης) εξαρτώνται από τον προσανατολισμό, δηλαδή δεν είναι ισοτροπικές. Μπορούμε πάντα να εναλλάσσουμε από τον ένα προσανατολισμό στον άλλο είτε με εναλλαγή της x και y διεύθυνσης, περιστροφή κατά 30° ή 90° είτε αριστερόστροφα ($k_x \rightarrow k_y$, $k_y \rightarrow -k_x$) είτε δεξιόστροφα ($k_x \rightarrow -k_y$, $k_y \rightarrow k_x$).

Ομάδα Συμμετρίας του Γραφενίου

Εκτός από τις συμμετρίες μετάθεσης των ανυσμάτων $\mathbf{a}_1$ και $\mathbf{a}_2$, η ομάδα του γραφενίου περιέχει στοιχεία περιστροφής και ανάκλασης-περιστροφής (σημειακή ομάδα). Εάν συμπεριλάβουμε πράξεις που δεν επιτρέπουν την αντιμετάθεση ατόμων από διαφορετικά υπό-πλέγματα, η σημειακή ομάδα του γραφενίου είναι τάξης 12. Οι πράξεις της ομάδας είναι οι ακόλουθες (αριθμημένες κατά κλάσεις) [5]:

1. Η ταυτότητα E .
2. Η πράξη R και η αντίστροφή της R^{-1} οι οποίες είναι αντίστοιχα περιστροφές κατά 120° και 240° περί της αρχής.

3. Οι πράξεις Y_1, Y_2, Y_3 οι οποίες είναι ανακλάσεις περί των ευθειών που συνδέουν γειτονικά άτομα. Οι άξονες ανάκλασης δίνονται από τα ανύσματα δ_i , εξ. (1.2).
4. Η πράξη Z η οποία είναι ανάκλαση στο επίπεδο του γραφενίου ($z \rightarrow -z$).
5. Συνδυασμός της Z με R, R^{-1} και 6. Συνδυασμός της Z με τις Y_i .

Παρατηρήστε ότι αυτή η σημειακή ομάδα είναι απλά το ευθύ γινόμενο της ομάδας συμμετρίας του τριγώνου με την ανάκλαση στο επίπεδο, $C_{3v} \otimes Z$. Οι κυματοσυναρτήσεις ενός ηλεκτρονίου κατατάσσονται ανάλογα με την υπό-ομάδα (E, Z) : άρτιες καταστάσεις ονομάζονται σ και περιττές ονομάζονται π .

Βάση του γεγονότος ότι και τα δύο υπό-πλέγματα σχηματίζονται από ακριβώς τα ίδια άτομα άνθρακα, πρέπει να περιλάβουμε στην σημειακή ομάδα και πράξεις όπου διατηρούν το πλέγμα κυψέλης αλλά εναλλάσσουν τα υπό-πλέγματα A και B . Οι επιπλέον 12 πράξεις είναι συνδυασμοί της πράξης W , η οποία είναι ανάκλαση περί της ευθείας που συνδέει απέναντι άκρες (βλ. σχ. 1.2), με όλες τις προαναφερθείς πράξεις. Η παραγόμενη ομάδα συμμετρίας $G = C_{3v} \otimes Z \otimes W$ είναι τότε τάξης 24.

1.1.2 Η Προσέγγιση Ισχυρής Δέσμευσης

Εφόσον τα θεμελιώδη ανύσματα πλέγματος και οι χωρικές συμμετρίες έχουν καλώς ορισθεί, μπορούμε να συνεχίσουμε στην προσέγγιση ισχυρής δέσμευσης (tight binding, TB). Ο φορμαλισμός κάτω από τον οποίο κανείς μπορεί να δομήσει την μέθοδο αυτή διαφέρει από βιβλίο σε βιβλίο. Για παράδειγμα, είναι σύνηθες να εκφράζουμε τον φορμαλισμό με βάση την δεύτερη κβάντωση (τελεστές καταστροφής και δημιουργίας) ή μέσω της πρώτης κβάντωσης, με τον φορμαλισμό “bra-ket” του Dirac. Παραδείγματος χάρη:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger b_j + -t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} a_i^\dagger a_j + \text{H.c.} \quad \text{or} \quad H = \sum H_{ij} |i\rangle \langle j|.$$

Παρόλα αυτά δεν θα ακολουθήσουμε αυτούς τους δρόμους εδώ και αντ’αυτού θα διατυπώσουμε την λύση μας στην βασική αναπαράσταση θέσης. Μία παρόμοια προσέγγιση με την δικιά μας έχει δημοσιευτεί στην αν. [11].

Η TB βασίζεται στο γεγονός ότι παρότι υπάρχει ένα άπειρο πλέγμα ατόμων, ένα ηλεκτρόνιο επονομαζόμενο “ j ” μπορεί αρχικά να είναι δεσμευμένο σε ένα από τα άτομα του πλέγματος. Με αυτόν τον τρόπο μπορούμε να λάβουμε υπ’ όψη το κρυσταλλικό δυναμικό ως απλά μια διαταραχή στο ατομικό δυναμικό. Κανείς τότε μπορεί να κατασκευάσει δοκιμαστικές κυματοσυναρτήσεις βασιζόμενος στις ατομικές κυματοσυναρτήσεις των ατόμων του πλέγματος, $\Phi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ για τα ανύσματα

Bravais $\mathbf{R}_j = m_j \mathbf{a}_1 + n_j \mathbf{a}_2$. Κάθε άνυσμα Bravais $\mathbf{R}_j$ δείχνει σε ένα πλεγματοειδές σημείο επωνομαζόμενο “ j ”. Υποθέτουμε φυσικά ότι το πρόβλημα ιδιοτιμών για ένα απομονωμένο άτομο, δηλαδή:

$$\left[-\frac{\hbar}{2m} \nabla_j^2 + V_j(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_j) \right] \Phi_0(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_j) = E_0 \Phi_0(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_j) \quad (1.9)$$

έχει λυθεί και υπάρχει πλήρης γνώση του ζεύγους ιδιοσυναρτήσεων-ιδιοτιμών $\{\Phi_0, E_0\}$. Το πραγματικό πρόβλημα έχει το κρυσταλλικό δυναμικό $V_{lat}(\mathbf{r}) = \sum V_l(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$ αντί του απομονωμένου δυναμικού V_j . Στις περισσότερες περιπτώσεις, οι συναρτήσεις V_l είναι ίδιες για κάθε l . Αυτή είναι και η περίπτωση που πραγματευόμαστε εδώ, δηλαδή η περίπτωση μίας συνάρτησης βάσης ανά άτομο.

Το πραγματικό πρόβλημα γράφεται ως:

$$H = \sum_j^N H_j \quad ; \quad H_j = -\frac{\hbar}{2m} \nabla_j^2 + \sum_l^N V_l(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_l)$$

Μπορούμε λοιπόν να γράψουμε:

$$\begin{aligned} H_j &= -\frac{\hbar}{2m} \nabla_j^2 + V_j(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_j) + \sum_{l \neq j}^N V_l(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_l) \\ &= H_0 + \Delta V(\mathbf{r}_j) \end{aligned} \quad (1.10)$$

Όπου έχουμε ορίσει ως $\Delta V(\mathbf{r}_j)$ την διαφορά του ολικού (κρυσταλλικού) δυναμικού Coulomb από το ατομικό. Η Χαμιλτονιανή H_0 αναφέρεται στο γνωστό ζεύγος $\{\Phi_0, E_0\}$ και μπορούμε, κάτω από την προσέγγιση TB, να χειριστούμε τον όρο $\Delta V(\mathbf{r}_j)$ ως μία διαταραχή.

Αναζητούμε δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση βασιζόμενοι στις ατομικές κυματοσυναρτήσεις

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n^N C_n \Phi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad (1.11)$$

και πρέπει να συμπεριλάβουμε ότι στο θερμοδυναμικό όριο $N \rightarrow \infty$ η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\mathbf{r})$ πρέπει να ικανοποιεί την διακριτή συμμετρία μετατόπισης του πλέγματος. Ένας άλλος τρόπος για να διατυπώσουμε αυτό είναι ότι η κυματοσυνάρτηση πρέπει να ικανοποιεί το θεώρημα του Bloch, δηλαδή $\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} \Psi(\mathbf{r}) \forall \mathbf{R}_l$ στο πλέγμα Bravais. Λαμβάνοντας υπόψιν τη μορφή του τελεστή μετατόπισης:

$$\hat{T}_{\mathbf{R}_l} = e^{i\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{R}_l / \hbar}$$

μπορούμε εύκολα να καταλήξουμε στο ότι οι συντελεστές της (1.11) πρέπει να είναι

$$C_n = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \quad (1.12)$$

με n έναν ακέραιο που συμβολίζει το ζευγάρι ακεραίων m_j, n_j και $\mathbf{k}$ το κυματόνισμα που ανήκει στην πρώτη ΖΒ όπως αυτή ορίστηκε στην προηγούμενη ενότητα. Αυτό είναι αναγκαίο διότι οποιοδήποτε άλλο $\mathbf{k}$ που συνδέεται με ένα άνυσμα Bravais αντιστρόφου πλέγματος με ένα κυματόνισμα που ανήκει στην πρώτη ΖΒ, θα δώσει έναν παράγοντα $e^{2\pi(m_j m_j^* + n_j n_j^*)} = 1$ που φυσικά σημαίνει ότι η κυματοσυνάρτηση θα είναι απαράλλαχτη.

Ένα επιπλέον σχόλιο που πρέπει να ειπωθεί είναι όταν η βάση του πλέγματος Bravais αποτελείται από δύο άτομα αντί για ένα (όπως η περίπτωση του γραφενίου). Σε αυτό το ενδεχόμενο, πρέπει κανείς να γράψει την κυματοσυνάρτηση για κάθε υπό-πλέγμα ξεχωριστά ως:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \alpha(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}^{(A)}(\mathbf{r}) + \beta(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}^{(B)}(\mathbf{r}) \quad (1.13)$$

με:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(i)}(\mathbf{r}) = \sum_n^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \Phi_0^{(i)}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_i - \mathbf{R}_n) . \quad (1.14)$$

Εδώ, $i = A, B$ και $\boldsymbol{\delta}_i$ αντιπροσωπεύει το άνυσμα μετατόπισης κάθε ατόμου της βάσης από το πλέγμα Bravais. Είναι πάντα χρήσιμο ένα έκ των δύο υποπλεγμάτων να θέτουμε επάνω στο πλέγμα Bravais, ώστε το άνυσμα μετατόπισής του να είναι 0. Επομένως διαλέγουμε $\boldsymbol{\delta}_A = 0$ και το $\boldsymbol{\delta}_B$ να είναι ένα από τα τρία ανύσματα της εξίσωσης (1.2). Η επιλογή δεν κάνει καμία διαφορά στο τελικό αποτέλεσμα. Με αυτές τις δοκιμαστικές κυματοσυναρτήσεις μπορούμε τώρα να αναζητήσουμε τις ενεργειακές ζώνες μέσω της εξίσωσης Schrödinger.

1.1.3 Πίνακες Χαμιλτονιανής, Επικάλυψης και Μεταπήδησης

Η εξίσωση Schrödinger της κυματοσυνάρτησης (1.13) έχει ως:

$$H\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}}\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})H\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}}\Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow (\alpha_{\mathbf{k}}^*, \beta_{\mathbf{k}}^*)\hat{H}_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \beta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \epsilon_{\mathbf{k}}(\alpha_{\mathbf{k}}^*, \beta_{\mathbf{k}}^*)\hat{O}_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \beta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}$$

όπου έχουμε ορίσει τον πίνακα Χαμιλτονιανής:

$$\hat{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}}^{(A)*}\hat{H}\psi_{\mathbf{k}}^{(A)} & \psi_{\mathbf{k}}^{(A)*}\hat{H}\psi_{\mathbf{k}}^{(B)} \\ \psi_{\mathbf{k}}^{(B)*}\hat{H}\psi_{\mathbf{k}}^{(A)} & \psi_{\mathbf{k}}^{(B)*}\hat{H}\psi_{\mathbf{k}}^{(B)} \end{pmatrix} = \hat{H}_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (1.15)$$

και τον πίνακα επικάλυψης (overlap):

$$\hat{O}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}}^{(A)*}\psi_{\mathbf{k}}^{(A)} & \psi_{\mathbf{k}}^{(A)*}\psi_{\mathbf{k}}^{(B)} \\ \psi_{\mathbf{k}}^{(B)*}\psi_{\mathbf{k}}^{(A)} & \psi_{\mathbf{k}}^{(B)*}\psi_{\mathbf{k}}^{(B)} \end{pmatrix} = \hat{O}_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (1.16)$$

(χρησιμοποιούμε *καπέλα* $(\hat{H})$ για να αναπαραστήσουμε πίνακες 2×2). Σημειώστε ότι κάθε στοιχείο $\psi_{\mathbf{k}}^{(A)*} \hat{H} \psi_{\mathbf{k}}^{(A)}$ είναι ένα κβαντικό γινόμενο και συνεπώς, στην αναπαράσταση θέσης, αντιστοιχεί σε ένα ολοκλήρωμα σε άπειρο όγκο. Επίσης, είναι αρκετά σύνηθες η υπόθεση ότι ο πίνακας επικάλυψης ισούται με τον μοναδιαίο 2×2 πίνακα, δηλαδή: $\hat{O}_{\mathbf{k}} = \hat{I}_2$ [6].

Αυτή η 2×2 φύση της Χαμιλτονιανής (άμεσο αποτέλεσμα της ύπαρξης δύο υπό-πλεγμάτων) οδηγεί μονοσήμαντα στο ότι η κυματοσυνάρτηση είναι ένας σπίν-νορας 2 στοιχείων. Το πρώτο στοιχείο είναι το πλάτος της κυματοσυνάρτησης στο A υποπλέγμα, και το δεύτερο στο B . Είναι λοιπόν ξεκάθαρο ότι το “spin” του σπίν-νορα 2 στοιχείων δεν σχετίζεται με τον πραγματικό spin του ηλεκτρονίου, αλλά με ένα ψευδοσπίν που θα ονομάζουμε από εδώ και πέρα **ψευδοσπίν υποπλέγματος** σ . Αυτό εκφράζει το πλάτος πιθανότητας για να βρούμε το σωματίδιο σε ένα συγκεκριμένο υπό-πλέγμα.

Οι ενεργειακές ζώνες βρίσκονται από την λύση της εξίσωσης ιδιοτιμών:

$$\det [\hat{H}_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(\lambda)} \hat{O}_{\mathbf{k}}] = 0 \quad (1.17)$$

όπου το λ δηλώνει τον δείκτη της ενεργειακής ζώνης. Όπως είναι προφανές από την εξ. (1.15), υπάρχουν συνολικά 2 τιμές (ο αριθμός ιδιοτιμών ταυτίζεται με τον αριθμό ατόμων βάσης της θεμελιώδης κυψελίδας). Καθώς και οι κυματοσυναρτήσεις $\psi_{\mathbf{k}}^{(i)}$ είναι καλώς ορισμένες, ο υπολογισμός των στοιχείων πίνακα είναι σαφής:

$$H_{\mathbf{k}}[i,j] = \sum_l \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} \int d^2r \Phi^{(i)*}(\mathbf{r} + \delta_i - \mathbf{R}_m) H \Phi^{(j)}(\mathbf{r} + \delta_j - \mathbf{R}_l) . \quad (1.18)$$

Εδώ $i, j = A, B$, $\delta_A = 0$ και $\delta_B = \delta_3$. Σε αυτό το σημείο πρέπει σημειώσουμε ότι επειδή και τα δύο υπό-πλέγματα αποτελούνται από τα ίδια άτομα άνθρακα και επειδή και στις δύο περιπτώσεις τα ηλεκτρόνια προέρχονται από τα τροχιακά $2p_z$, οι ατομικές κυματοσυναρτήσεις είναι ολόιδιες. Επομένως παραλείπουμε τον εκθέτη $\Phi^{(A)} = \Phi^{(B)} = \Phi$ και εκμεταλλευόμαστε την ταυτότητα:

$$\sum_m^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} = N$$

θέτοντας $\mathbf{R}'_l = \mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m$ και $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{R}_m$ στην εξ. (1.18). Αυτό επιτρέπεται αφού η προσέγγιση TB υποθέτει ένα άπειρο σύστημα¹ και η Χαμιλτονιανή είναι αμετάβλητη υπό μεταθέσεις από ανύσματα Bravais. Η άθροιση σε όλα τα l είναι ανεξάρτητη από το αν ο δείκτης είναι l ή l' αφού όλα τα πλεγματικά σημεία θα καλυφτούν.

¹Είναι πολύ συχνό ότι αντί ενός άπειρου συστήματος, ένα πεπερασμένο σύστημα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες Born Von Karman υποτίθεται. Τότε το κυματόνισμα δεν είναι συνεχές αλλά χωρίζεται κατά διαστήματα $\frac{2\pi}{L_i}$ για συνολικό μήκος δείγματος L_i στη διεύθυνση i . Η σχέση διασποράς είναι απαράλλαχτη και αδιάφορη ως προς την επιλογή αυτή.

Αλλάζουμε λοιπόν μία άθροιση από l σε l' και χρησιμοποιούμε την προαναφερθείσα ταυτότητα. Έτσι, τα στοιχεία πίνακα γίνονται:

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{k}}[ij] &= N \sum_{l'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{l'}} \int d^2 r' \Phi^*(\mathbf{r}' + \boldsymbol{\delta}_i) [H_0 + \Delta V] \Phi(\mathbf{r}' + \boldsymbol{\delta}_j - \mathbf{R}_{l'}) \\ &= N (\epsilon_{2p_z} S_{\mathbf{k}}[ij] + T_{\mathbf{k}}[ij]) \end{aligned} \quad (1.19)$$

όπου ορίσαμε τον πίνακα επικάλυψης ατομικών συναρτήσεων ως $(r', l' \rightarrow r, l)$

$$S_{\mathbf{k}}[ij] = \sum_l e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} \int d^2 r \Phi^*(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_i) \Phi(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_j - \mathbf{R}_l) = O_{\mathbf{k}}[ij]/N \quad (1.20)$$

και τον πίνακα μεταπήδησης ως

$$T_{\mathbf{k}}[ij] = \sum_l e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} \int d^2 r \Phi^*(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_i) \Delta V \Phi(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_j - \mathbf{R}_l) . \quad (1.21)$$

Η εξίσωση ιδιοτιμών (1.17) επομένως γίνεται:

$$\det [\hat{T}_{\mathbf{k}} - (\epsilon_{\mathbf{k}}^{(\lambda)} - \epsilon_{2p_z}) \hat{S}_{\mathbf{k}}] = 0 \quad (1.22)$$

και φυσικά μπορούμε να παραλείψουμε την ενέργεια του τροχιακού ϵ_{2p_z} , θέτοντας την ως το σχετικό επίπεδο ενέργειας.

1.1.4 Επίλυση με nn και nnn

Σε αυτό το σημείο κάνουμε τις εξής υποθέσεις: μεταπήδηση μπορεί να συμβεί μόνον μεταξύ nn και nnn . Επιπροσθέτως, επικάλυψη υπάρχει μόνον μεταξύ nn και οι κυματικές συναρτήσεις είναι κανονικοποιημένες, δηλαδή

$$\int d^2 r \Phi^{(i)*}(\mathbf{r}) \Phi^{(j)}(\mathbf{r}) = 1 .$$

Ας ορίσουμε λοιπόν το ολοκλήρωμα μεταπήδησης μεταξύ nn ως:

$$-t := \int d^2 r \Phi^{(A)}(\mathbf{r}) \cdot \Delta V(\mathbf{r}) \cdot \Phi^{(B)}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_3) \quad (1.23)$$

ενώ μεταξύ nnn ως:

$$-t_{nnn} := \int d^2 r \Phi^{(A)}(\mathbf{r}) \cdot \Delta V(\mathbf{r}) \cdot \Phi^{(A)}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_1) \quad (1.24)$$

καθώς και την επικάλυψη μεταξύ nn ως:

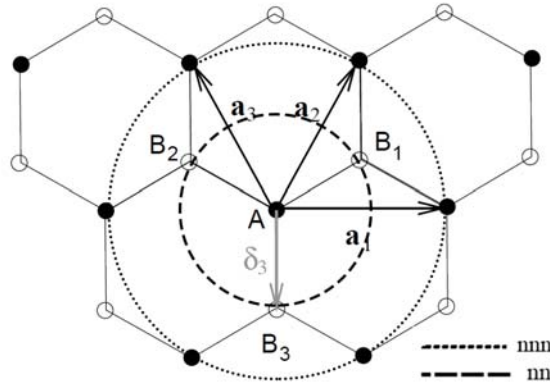
$$s := \int d^2r \Phi^{(A)}(\mathbf{r}) \cdot \Phi^{(B)}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_3) . \quad (1.25)$$

Τα ολοκληρώματα μεταπήδησης είναι εκ φύσεως αρνητικά και οπότε τα t , t_{nnn} είναι θετικώς ορισμένα. Στις εξ. (1.23)-(1.25) παρουσιάσαμε ξανά τους εκθέτες (A) , (B) μόνο για βοήθεια του αναγνώστη. Επιπλέον, στο σχ. 1.3 δείχνουμε τους nn και nnn ενός ατόμου του A υπό-πλέγματος. Επιλέγουμε τα ανύσματα $\mathbf{a}_1$ και $\boldsymbol{\delta}_3$ για τον ορισμό μας, αν και οποιαδήποτε άλλη επιλογή δεν έχει καμία επίπτωση στο τελικό αποτέλεσμα.

Μπορεί κανείς να καταλάβει ότι το ολοκλήρωμα μεταπήδησης t σχετίζεται με τα άντι-διαγώνια στοιχεία του πίνακα μεταπήδησης (εξ. (1.21)) ενώ το ολοκλήρωμα t_{nnn} αφού το κάθε ένα συνδέει άτομα από διαφορετικά και ίδια υπό-πλέγματα αντίστοιχα. Τα στοιχεία πίνακα προέρχονται από την κατάλληλη άθροιση των ανυσμάτων Bravais $\mathbf{R}_l$, που καταλήγει σε φάσεις της μορφής $e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l}$, πολλαπλασιασμένες με t ή t_{nnn} . Αυτό συμβαίνει επειδή οι ατομικές συναρτήσεις εξαρτώνται μόνο από το μέτρο του ανύσματος θέσης. Συνεπώς τα ολοκληρώματα (1.23) και (1.24) είναι τα ίδια για οποιοδήποτε ζευγάρι γειτόνων (ομοίως για την εξ. (1.25)).

Ακολουθώντας το σχ. 1.3 το σημείο B_3 είναι το μόνο που περιγράφεται με το ίδιο ανύσμα πλέγματος όπως το σημείο A , έχοντας φυσικά την επιπλέον μετατόπιση του $\boldsymbol{\delta}_3$. Τα άλλα δύο σημεία B_1 , B_2 χρειάζονται μία επιπλέον μετατόπιση από $\mathbf{R}_l = \mathbf{a}_2$ και $\mathbf{R}'_l = \mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1$ αντίστοιχα. Αυτό παράγει τους παράγοντες φάσης $e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}$ και $e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_3}$. Επομένως, τα άντι-διαγώνια στοιχεία του πίνακα μεταπήδησης είναι:

$$T_{\mathbf{k}}[AB] = -t \cdot \gamma_{\mathbf{k}}^* = T_{\mathbf{k}}^*[BA] \quad (1.26)$$



Σχήμα 1.3: Επανεξέταση του πλέγματος γραφενίου (κυψέλης) ώστε να υπάρχει μία καλύτερη απεικόνιση της σχέσης μεταξύ του ολοκληρώματος μεταπήδησης και των στοιχείων πίνακα. Με κύκλος σημειώνουμε τους nn και nnn γύρω από ένα άτομο του A υποπλέγματος.

ενώ του πίνακα επικάλυψης:

$$S_{\mathbf{k}}[AB] = s\gamma_{\mathbf{k}}^* = S_{\mathbf{k}}^*[BA] \quad (1.27)$$

με

$$\gamma_{\mathbf{k}} := 1 + e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_3} = e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_3} . \quad (1.28)$$

Εξ' ορισμού, $S_{\mathbf{k}}[AA] = S_{\mathbf{k}}[BB] = 1$ εφόσον επικάλυψη μεταξύ nnn παραλείπεται και οι ατομικές κυματοσυναρτήσεις είναι κανονικοποιημένες. Αφού υπάρχουν 6 nnn για κάθε πλεγματο σημείο, κάθε ένα από αυτά συνδέεται με τους nnn μέσω μετατόπισης από τα $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ ή τα αντίθετά τους (σχ. 1.3). Δεν υπάρχει μηδενικό άνυσμα για τους nnn αφού όλα τα πλεγματικά σημεία ανήκουν στο ίδιο υπό-πλέγμα. Έχουμε λοιπόν:

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{k}}[AA] &= T_{\mathbf{k}}[BB] \\ &= -t_{nnn} (e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_3} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_3}) \\ &= -2t_{nnn} (\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3)) \\ &= -t_{nnn} (|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 - 3) . \end{aligned} \quad (1.29)$$

Η εξ. (1.22) τώρα γίνεται:

$$\det \begin{bmatrix} -t_{nnn}(|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 - 3) - \epsilon_{\mathbf{k}} & -(t + s\epsilon_{\mathbf{k}})\gamma_{\mathbf{k}}^* \\ -(t + s\epsilon_{\mathbf{k}})\gamma_{\mathbf{k}} & -t_{nnn}(|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 - 3) - \epsilon_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} = 0 \quad (1.30)$$

όπου δίνει ιδιοτιμές για την ενέργεια:

$$\epsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) = \frac{-t_{nnn}(|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 - 3) - \lambda t |\gamma_{\mathbf{k}}|}{1 + \lambda s |\gamma_{\mathbf{k}}|} \quad \text{with } \lambda = \pm 1 . \quad (1.31)$$

1.1.5 Σχέση Διασποράς του Γραφενίου

Σε αυτό το σημείο η πιο κοινή προσέγγιση είναι να αναπτύσσουμε την έκφραση (1.31) υπό τις υποθέσεις $s \ll 1$ και $t_{nnn} \ll t$. Η κατά συνέπεια σχέση διασποράς είναι η πιο κοινή εξίσωση που δίνεται στην βιβλιογραφία [6]:

$$\epsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) = \lambda t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})} - t' f(\mathbf{k}) - 3t' \quad (1.32)$$

με την συνάρτηση $f(\mathbf{k})$ εκφραζόμενη στον προσανατολισμό zigzag ως:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &:= 2 \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) \\ &= 2 \cos(\sqrt{3}k_x a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_y a\right) . \end{aligned} \quad (1.33)$$

Σε αυτή την προσέγγιση, το t' είναι πλέον μια παράμετρος με τιμή $t' = t_{nnn} - st$ και δεν αποτελεί πλέον το ολοκλήρωμα επικάλυψης μεταξύ nnn (καθιερωμένη διαδικασία της προσέγγισης TB). Είναι λοιπόν ξεκάθαρο ότι οι μόνες διορθώσεις που προσφέρει η επικάλυψη nn στο σύστημα, είναι μία ανά-κανονικοποίηση του ολοκληρώματος μεταπήδησης μεταξύ nnn .

Στην εξ. (1.32) υπάρχει μία επιπλέον σταθερή ενέργεια $-3t'$. Θέτουμε λοιπόν την ενέργεια αναφοράς σε $\epsilon_{2p_z} - 3t'$. Η σχέση διασποράς σχεδιάζεται στο σχ. 1.4. Ο θετικός κλάδος $\lambda = +1$ της λύσης αντιστοιχεί στην ζώνη αγωγιμότητας (π^* - ηλεκτρόνια) και ο αρνητικός $\lambda = -1$ στην ζώνη σθένους (π - οπές).

Εφαρμόζοντας το αποτέλεσμα σε δεδομένα από αυτο-συνεπής υπολογισμούς από μελέτες συναρτησιακού πυκνότητας, κανείς βρίσκει $t \simeq 2.7 \sim 2.8$ eV και $t' = 0.1t$. Αυτή η διαδικασία δεν επιτρέπει διάκριση μεταξύ t_{nnn} και $t' = t_{nnn} - st$ και οπότε, λόγω της συμπερίληψης επικάλυψης nn , η τιμή του t' δεν είναι επακριβώς γνωστή. *Ab initio* υπολογισμοί δίνουν $0.02t \lesssim t' \lesssim 0.2t$ [6]. Μια άλλη ευρέως αποδεκτή τιμή για το t είναι 3.0 eV η οποία δίνει με μέγιστη ακρίβεια την ταχύτητα Fermi (βλ. παρακάτω), όπως αυτή μετριέται σε πειράματα. Ακόμη, μία εφαρμογή από tight-binding σε πειράματα συντονισμού κυκλοτρόνου (cyclotron resonance experiments) [6] δίνει $t \approx 0.1$ eV. Εκτός και αν αναφέρεται ρητά διαφορετικά, σε αυτή την Θέση θα χρησιμοποιούμε τις τιμές $t = 3$ eV και $t' = (1/30) \cdot t = 0.1$ eV.

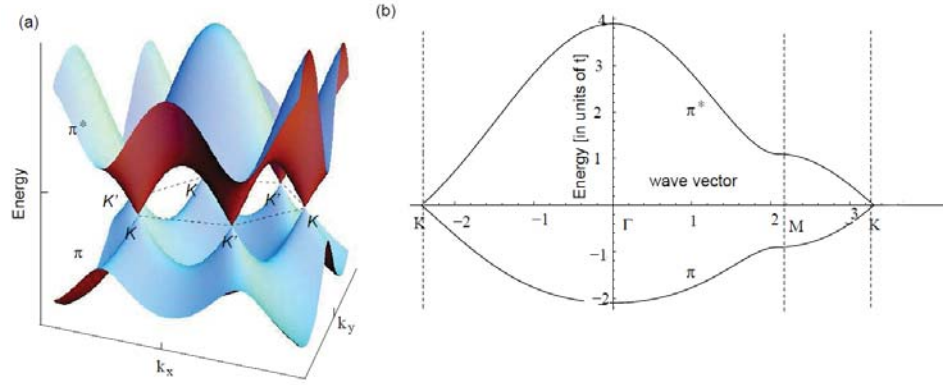
Καθώς κάθε άτομο άνθρακα συνεισφέρει ένα ηλεκτρόνιο και κάθε κατάσταση χωράει 2 ηλεκτρόνια (πάνω και κάτω spin), η ζώνη π είναι εντελώς γεμάτη ενώ η ζώνη π^* είναι εντελώς άδεια (σε 0 θερμοκρασία). Το επίπεδο Fermi είναι συνεπώς τοποθετημένο στα σημεία $\mathbf{K}, \mathbf{K}'$ όπου οι δύο ζώνες έρχονται σε επαφή. Επιπλέον, παρατηρήστε πως εάν το t' ήταν 0 (έτσι ώστε να υπήρχε μόνο μεταπήδηση μεταξύ nn), οι ενεργειακές ζώνες θα ήταν συμμετρικές ως προς ηλεκτρόνια και οπές. Αυτή η συμμετρία θα αναλυθεί εις βάθος σε επόμενες ενότητες.

Εις χάρη πληρότητας, παραθέτουμε την πλήρη ενεργειακή δομή του γραφενίου, υπολογισμένη περιλαμβάνοντας όλα τα τροχιακά του ατόμου του άνθρακα, μεταπήδηση τρίτων γειτόνων καθώς και σύζευξη spin-orbit, όπως έγινε στην αναφ. [9].

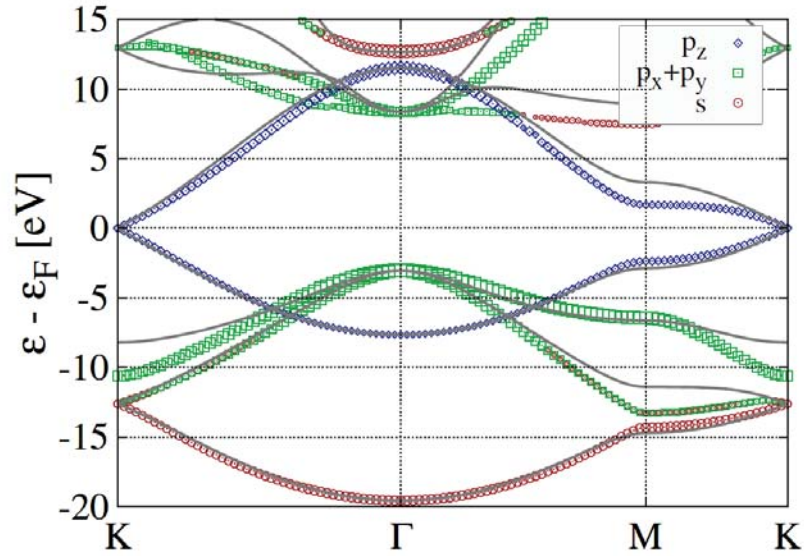
1.2 Διεγέρσεις Χαμηλής Ενέργειας

Τα δύο σημεία όπου οι ζώνες της σχέσης διασποράς (σχ. 1.4) συναντώνται συχνά ονομάζονται *Σημεία Dirac*. Αυτή η ονομασία είναι δικαιολογημένη, όπως θα δείξουμε παρακάτω. Τα σημεία αυτά είναι εξ' ορισμού εκεί όπου η ενέργεια είναι μηδέν, $\epsilon_\lambda(\mathbf{D}) = 0$. Αυτό είναι ισοδύναμο με $|\gamma_{\mathbf{D}}| = 0$ και άρα [11]:

$$\begin{aligned} \text{Re}(\gamma_{\mathbf{D}}) = 0 &\Rightarrow 1 + \cos(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a}_3) = 0 \\ \text{Im}(\gamma_{\mathbf{D}}) = 0 &\Rightarrow \sin(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a}_2) + \sin(\mathbf{D} \cdot \mathbf{a}_3) = 0 \end{aligned} \quad (1.34)$$



Σχήμα 1.4: (a) Ενεργειακή σχέση διασποράς γραφενίου (εξ. 1.32) σχεδιασμένη σε 3D. (b) Ίδια εξίσωση σε διευθύνσεις υψηλής συμμετρίας. Τα κυματανύσματα μετρούνται σε μονάδες $1/a$ και η ενέργεια σε μονάδες t . Με π συμβολίζουμε την ζώνη σθένους (οπές) και με π^* την ζώνη αγωγιμότητας (ηλεκτρόνια). Τα σχήματα έγιναν με τιμή παραμέτρου $t' = 0.1t$. Σχήμα από αναφ. [11].



Σχήμα 1.5: Υπολογισμένη ενεργειακή δομή γραφενίου από πρώτες αρχές (σύμβολα) και ισχυρή δέσμευση (συμπαγείς γραμμές). Για παραμέτρους και επιπλέον σχόλια, βλ. πίνακα III από [9]. Σχήμα από αναφ [9].

Οι λύσεις αυτών των εξισώσεων συμπίπτουν ακριβώς με τις γωνίες της πρώτης ζώνης Brillouin, δηλαδή $\mathbf{D}, \mathbf{D}' = \mathbf{K}, \mathbf{K}'$, εξ. (1.4)

Η ισότητα μεταξύ των σημείων Dirac και τις γωνίες της ZB δεν είναι εκ των προτέρων εγγυημένη. Εάν για παράδειγμα το ολοκλήρωμα μεταπήδησης δεν είναι το ίδιο στις διευθύνσεις π.χ. δ_1 και δ_2 λόγω μίας εξωτερικής δύναμης, τότε τα σημεία Dirac δεν θα είναι ισοδύναμα με τις γωνίες της ZB. Σημειώνουμε επίσης πως αφού υπάρχουν δύο ισοδύναμα σημεία Dirac, έχουμε διπλό εκφυλισμό “κοιλιάδας” ($g_v = 2$). Αυτό σημαίνει ότι το επίπεδο μηδενικής ενέργειας είναι τετραπλά εκφυλισμένο (δύο επιπλέον για το spin, $g_s = 2$).

1.2.1 Κοντά στα Σημεία Dirac - Συνεχής Περιγραφή

Για ρεαλιστικά dopings, οι διεγέρσεις βρίσκονται ενεργειακά πολύ κοντά στην ενέργεια Fermi: $|\epsilon| \ll t$. Λόγω της μορφής της σχέσης αυτές οι διεγέρσεις ανήκουν σε κώνους με κέντρο τα σημεία Dirac. Είναι χρήσιμο λοιπόν να αναπτύξουμε την σχέση διασποράς γύρω από αυτά τα σημεία, έτσι ώστε να παραγάγουμε μία ενεργή συνεχή περιγραφή. Έστω ότι $\mathbf{q} = \pm \mathbf{K} - \mathbf{k}$ είναι ένα κυματάνυσμα μετρούμενο σε σχέση με το σημείο Dirac έτσι ώστε $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{K}| \approx 1/a$. Τότε η παράμετρος για την ανάπτυξη είναι $|\mathbf{q}|a \ll 1$. Έστω επίσης ότι $\gamma^\pm(\mathbf{q}) := \gamma(\pm \mathbf{K} + \mathbf{q})$ και άρα από την εξ. (1.28) έχουμε (με βάση τον προσανατολισμό zigzag) [11]:

$$\begin{aligned} \gamma^\pm(\mathbf{q}) &= 1 + e^{\pm i\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2} \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{\pm i\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_3} \cdot e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_3} \\ &\approx 1 + e^{\pm i2\pi/3} \left[1 + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2 - \frac{1}{2}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2)^2 \right] + \\ &\quad e^{\mp i2\pi/3} \left[1 + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_3 - \frac{1}{2}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_3)^2 \right] \end{aligned} \quad (1.35)$$

Εισάγουμε τώρα την σημαντική έννοια του **ψευδοσπίν κοιλιάδας** και το συμβολίζουμε με Ξ με ιδιοτιμές $\xi = \pm 1$. $\xi = 1$ δείχνει την κοιλιάδα (ή κώνο) γύρω από το σημείο $\mathbf{K}$ και $\xi = -1$ δείχνει την κοιλιάδα (ή κώνο) γύρω από το σημείο $\mathbf{K}'$. Η ανάπτυξη του $\gamma^\pm(\mathbf{q}) \equiv \gamma^\xi(\mathbf{q})$ στην εξ. (1.35) μπορεί να γραφτεί ως:

$$\gamma^\xi(\mathbf{q}) \approx \gamma^\xi(\mathbf{q})^{(0)} + \gamma^\xi(\mathbf{q})^{(1)} + \gamma^\xi(\mathbf{q})^{(2)}$$

όπου ο εκθέτης σημειώνει την τάξη της ανάπτυξης. Εξ' ορισμού $\gamma^\xi(\mathbf{q})^{(0)} = \gamma(\pm \mathbf{K}) = 0$. Έπειτα από πράξεις βασικής άλγεβρας, η ανάπτυξη πρώτης τάξης γίνεται:

$$\gamma^\xi(\mathbf{q})^{(1)} = -\xi \frac{3a}{2} (q_x + i\xi q_y) . \quad (1.36)$$

Ακολουθώντας την εξ. (1.30), αυτό μας επιτρέπει να ορίσουμε μια ενεργή εξίσωση Schrö-dinger χαμηλής ενέργειας $\hat{H}_{eff}\Psi = E\Psi$ με Χαμιλτονιανή [7]:

$$\hat{H}_{eff}(\mathbf{q}; \xi) = \hbar v_F (\xi q_x \hat{\sigma}_x + q_y \hat{\sigma}_y) = \hbar v_F \mathbf{q} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_\xi \quad (1.37)$$

(έχουμε αντικαταστήσει το ξ^2 με 1) και με κυματοσυνάρτηση τον γνωστό σπίνορα που αναφέρθηκε στην υποενότητα 1.1.3. Ορίσαμε την ταχύτητα Fermi, ή όπως συχνά ονομάζεται “ενεργή ταχύτητα του φωτός” ως:

$$v_F = \frac{3ta}{2\hbar} \approx 10^6 \text{ m/s} = \frac{c}{300} \quad (1.38)$$

και με $\hat{\sigma}_\xi := (\xi \cdot \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y)$ χρησιμοποιούμε τους γνωστούς πίνακες Pauli δύο διαστάσεων:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Η σχέσης διασποράς αυτής της Χαμιλτονιανής βρίσκεται εύκολα να είναι:

$$\epsilon_\lambda(\mathbf{q}; \xi) = \lambda \hbar v_F |\mathbf{q}| \quad \text{with} \quad \lambda = \pm 1 \quad (1.39)$$

η οποία είναι ανεξάρτητη του ξ που σημαίνει (όπως συζητήθηκε πριν) ότι έχουμε διπλό εκφυλισμό κοιλάδας, $g_v = 2$. Επιπροσθέτως, είναι προφανές η ταχύτητα ομάδος των διεγέρσεων χαμηλής ενέργειας δεν μεγαλώνει γραμμικά με το k όπως είναι το σύνηθες με άλλα συστήματα ηλεκτρονίων δύο διαστάσεων. Εν αντιθέσει, η ταχύτητα είναι σταθερή και ίση με την ταχύτητα Fermi, $v = \frac{\partial E}{\partial \hbar k} = v_F$, το οποίο κάνει νύξεις ότι οι φορείς είναι ρελατιβιστικά σωματίδια.

Κοινός τόπος σε αυτό το σημείο είναι η ενσωμάτωση και των δύο κώνων Dirac σε μία Χαμιλτονιανή, η οποία εκφράζεται σαν πίνακας στην βάση υποπλέγματος ως:

$$\hat{H}_{eff}(\mathbf{q}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y & 0 & 0 \\ q_x + iq_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -q_x - iq_y \\ 0 & 0 & -q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \quad (1.40)$$

με κυματοσυνάρτηση τον αντίστοιχο σπίνορα 4 στοιχείων:

$$\mathcal{W}(\mathbf{q})^T = [\psi_{(A)}^+(\mathbf{q}), \psi_{(B)}^+(\mathbf{q}), \psi_{(A)}^-(\mathbf{q}), \psi_{(B)}^-(\mathbf{q})]. \quad (1.41)$$

Ο εκθέτης των στοιχείων δείχνει την τιμή του ψευδοσπιν κοιλάδας Ξ ενώ ο δείκτης την τιμή του ψευδοσπιν υπο-πλέγματος σ . Κάθε ένα από τα στοιχεία τις κυματοσυνάρτησης αντιστοιχεί σε πλάτος πιθανότητας ενός σωματιδίου να βρίσκεται σε ένα συγκεκριμένο κώνο Dirac και συγκεκριμένο υπό-πλέγμα. Η έκφραση (1.40) είναι για τον προσανατολισμό zigzag. Με τους κατάλληλους μετασχηματισμούς παίρνουμε την έκφραση για τον προσανατολισμό πολυθρόνας.

Η Χαμιλτονιανή (1.40) είναι σε block-diagonal μορφή. Το πάνω αριστερό block αντιστοιχεί στο $\mathbf{K}$ σημείο ενώ το κάτω δεξιά στο $\mathbf{K}'$ σημείο, ορισμένα από την εξ. (1.4). Σημειώστε ότι στην ανάλυσή μας, ορίσαμε ως $\mathbf{q}$ την διαφορά από τα σημεία $\mathbf{K}$ ($\mathbf{K}'$) για $\xi = +1$ (-1). Συνεπώς το κυματόνυσμα του πάνω block μετράται από το $\mathbf{K}$ ενώ για το κάτω block από το $\mathbf{K}'$ σημείο αντίστοιχα. Οι δύο κώνοι συνδέονται με ανάκλαση κατά τον y -άξονα, $x \rightarrow -x$.

Έκφραση στην Ισοτροπική Βάση Κοιλιάδας

Οι πίνακες Pauli, σ_x , σ_y περιγράφουν τον χώρο υπό-πλέγματος. Η έκφραση (1.40) είναι στην βάση υπό-πλέγματος. Έστω τ_0 , τ_x , τ_y , τ_z οι πίνακες Pauli στον χώρο κοιλάδας (με τ_0 να είναι ο μοναδιαίος πίνακας). Χρησιμοποιώντας αυτούς τους πίνακες μπορούμε να γράψουμε την Χαμιλτονιανή στην ονομαζόμενη ισοτροπική βάση κοιλάδας [25].

Για να συμβεί αυτό, ξεκινούμε από το να γράψουμε την κυματοσυνάρτηση (σπίνορα 4 στοιχείων) ως:

$$W_{iso}^T = \left[\psi_{(A)}^+, \psi_{(B)}^+, -\psi_{(B)}^-, \psi_{(A)}^- \right] . \quad (1.42)$$

Τότε, πολύ βολικά, η αναπαράσταση ισοτροπικής βάσης έχει ως [10, 25]:

$$\hat{H}_{iso} = \hbar v_F \hat{\tau}_0 \otimes (\mathbf{q} \cdot \hat{\sigma}) ; \quad \hat{\tau}_0 \otimes \hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma} \end{pmatrix} . \quad (1.43)$$

Εάν κάποιο εξωτερικό πεδίο δρα στον αντίστροφο χώρο, το πιο πιθανό είναι να δρα ισοτροπικά στις δύο ανισοδύναμες κοιλάδες, εξ' ου και η χρησιμότητα αυτής της αναπαράστασης.

1.2.2 Άμαζα Ρελατιβιστικά Quasi-particles Διαστατικότητα 2+1

Η Χαμιλτονιανή της μορφής $\hat{H} \sim \hat{\sigma} \cdot \mathbf{q}$ ονομάζεται **Χαμιλτονιανή Weyl-Dirac** περιγράφει *άμαζα ρελατιβιστικά φερμιόνια σε χώρο δύο διαστάσεων*. Έχει μελετηθεί εκτενώς για να περιγράψει π.χ. νετρίνα² και άλλα ρελατιβιστικά κβαντικά σωματίδια (βλ. π.χ. [12]). Αυτή είναι έγκυρη στο γραφένιο εφόσον οι ενέργειες που λαμβάνονται υπ' όψιν είναι πολύ μικρές σε σχέση με την σταθερά μεταπήδησης $|\epsilon| \ll t$. Αυτό το γεγονός είχε προβλεφτεί θεωρητικά [13, 14, 15] καθώς και έχει αποδειχτεί πειραματικά [16, 17] μετρώντας την εξαρτώμενη από ενέργεια μάζα κυκλοτρόνου στο γραφένιο. Η ιδέα ότι οι διεγέρσεις του γραφενίου είναι άμαζα ρελατιβιστικά quasi-particles είναι επομένως απολύτως έγκυρη (για μικρές ενέργειες).

Ωστόσο, υπάρχουν δύο τέτοιο κώνοι Dirac όπου τα quasi-particles συμπεριφέρονται ως άμαζα ρελατιβιστικά φερμιόνια. Παρόλο που το σύστημα είναι δισδιάστατο χωρικά, η συμπερίληψη και των δύο κώνων στην ενεργή Χαμιλτονιανή Dirac επιφέρει έναν πίνακα 4×4 και έναν σπίνορα 4 στοιχείων. Αυτή είναι η ίδια περίπτωση με την τρισδιάστατη Χαμιλτονιανή Dirac για “πραγματικά” φερμιόνια,

²Πρόσφατα ανακαλύφθηκε πως τα νετρίνα έχουν μάζα, αν και πολύ μικρή (Nobel Prize in Physics - 2015).

λόγω των δύο προβολών spin και τον βαθμό ελευθερίας του φορτίου [10]. Στην δική μας δισδιάστατη περίπτωση, το τελευταίο εξαρτάται από το πρώτο, αφού τα ηλεκτρόνια και οι οπές είναι απλά γραμμικοί συνδυασμοί καταστάσεων από τα δύο υπό-πλέγματα. Αυτός είναι ο λόγος που το επιπλέον συστατικό σπίνορα δεν περιγράφεται από τον πίνακα Pauli υπο-πλέγματος σ_z αλλά από τον πίνακα κοιλάδας τ_z . Τα quasi-particles χαμηλής ενέργειας του γραφενίου επομένως περιγράφονται από την “2+1 διαστάσεων κβαντική ηλεκτροδυναμική” [14, 18, 19, 20]. Κανείς μπορεί να βρει μία πλήρη περιγραφή αυτού του γεγονότος, καθώς και πληθάρημες πειραματικές επιβεβαιώσεις στο [18] και αναφορές επί τούτου.

Αυτή η υπερ-ρελατιβιστική ταυτότητα των φορέων πηγάζει από το γεγονός ότι η πρώτη τάξης προσέγγιση της σχέσης διασποράς είναι κωνική. Όταν αναπτύσσουμε έως και δεύτερη τάξη (βλ. εν. 1.3) η κωνική περιγραφή υποβιβάζεται καθώς η ενέργεια αυξάνεται, ακόμα και από $\epsilon \approx 0.2t$. Κανείς θα μπορούσε τότε να υποστηρίξει ότι η υπερ-ρελατιβιστική συμπεριφορά είναι απλά μία πολύ μικρή προσέγγιση και μπορεί να καταστραφεί πολύ εύκολα από οποιαδήποτε επιπλέον φαινόμενα που συμβαίνουν στο πραγματικό γραφένιο, όπως π.χ. η σύζευξη spin-orbit . Αυτό όμως δεν είναι αληθές, και η συμπεριφορά αυτή της Χαμιλτονιανής γύρω από τα σημεία Dirac δεν αλλάζει, ούτε εξαρτάται από την τάξη ανάπτυξης (αρκεί $|\epsilon| \ll t$). Βασικά, αυτή η συμπεριφορά προστατεύεται από τη συμμετρία και τη τοπολογία [10].

1.2.3 Ψευδοσπίν και Ιδιοκαταστάσεις

Οι ιδιοκαταστάσεις της (1.37) είναι σπίνορες. Στην αρχέτυπη Χαμιλτονιανή Dirac οι πίνακες Pauli σχετίζονται με το πραγματικό spin του ηλεκτρονίου $s = 1/2$. Εδώ, οι πίνακες σχετίζονται με το ψευδοσπίν υπο-πλέγματος και η κατάσταση σπίνορα δίνεται στον χώρο ορμής από την εξ. (1.41).

Κανείς πρέπει να έχει μία πολύ ξεκάθαρη ιδέα μεταξύ των δύο ψευδοσπίν. Το πρώτο είναι το **ψευδοσπίν υποπλέγματος** σ , το οποίο εκφράζεται από τους πίνακες Pauli της εξ. (1.37), $\hat{\sigma}_x$ and $\hat{\sigma}_y$. Spin “πάνω” αντιστοιχεί στο ηλεκτρόνιο/οπή να ανήκει στο υποπλέγμα A ενώ spin “κάτω” στο άλλο υποπλέγμα, B . Ο δείκτης ενεργειακής ζώνης λ αποδίδεται από μία περιστροφή της ομάδας $\text{SU}(2)$ του χώρου ψευδοσπίν υποπλέγματος και συνεπώς σχετίζεται άμεσα με το ψευδοσπίν υποπλέγματος [11]. Το άλλο ψευδοσπίν είναι το **ψευδοσπίν κοιλάδας** Ξ με ιδιοτιμές $\xi = \pm 1$ το οποίο περιγράφει είτε το $\mathbf{K}$ ή $\mathbf{K}'$ σημεία από τα οποία πηγάζουν οι δύο ανισοδύναμοι κώνοι Dirac (που γίνεται η ανάπτυξη της σχέσης διασποράς). Αυτό σχετίζεται μόνο έμμεσα με την ύπαρξη δύο υποπλεγμάτων.

Ιδιοκαταστάσεις

Η διδιάστατη Χαμιλτονιανή Dirac $\hbar v_F \mathbf{q} \cdot \hat{\sigma}$ διαγωνοποιείται με τον μοναδιακό μετασχηματισμό [10]:

$$\hat{D}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \mathbf{m}_{\mathbf{q}} \cdot \hat{\sigma}) \quad (1.44)$$

όπου $\mathbf{m}_{\mathbf{q}} = (\cos \theta_{\mathbf{q}}, -\sin \theta_{\mathbf{q}})$ και $\theta_{\mathbf{q}} = \arctan(q_y/q_x)$ είναι η γωνία του κυματανύσματος με τον x -άξονα (βλ. εξ. (1.48)). Παίρνοντας υπ' όψιν το ψευδοσπίν κοιλάδας, οι ιδιοκαταστάσεις την ενεργής Χαμιλτονιανής (1.40) σε βάση υποπλέγματος δίνονται από [6, 7, 8]:

$$\Psi_{\lambda}^{+}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\mathbf{q}}/2} \\ \lambda e^{+i\theta_{\mathbf{q}}/2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\lambda}^{-}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{+i\theta_{\mathbf{q}}/2} \\ \lambda e^{-i\theta_{\mathbf{q}}/2} \end{pmatrix} \quad (1.45)$$

ή ισοδύναμα, μετά από έναν μετασχηματισμό βαθμίδας:

$$\Psi_{\lambda}^{+}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{+i\theta_{\mathbf{q}}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\lambda}^{-}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -\lambda e^{-i\theta_{\mathbf{q}}} \end{pmatrix} \quad (1.46)$$

με ιδιοτιμές ενέργειας $\epsilon_{\lambda}(\mathbf{q}) = \lambda \hbar v_F |\mathbf{q}|$. Υπενθυμίζουμε στον αναγνώστη ότι για $\xi = +1$ το κυματάνυσμα $\mathbf{q}$ μετράται από το $\mathbf{K}$ και για $\xi = -1$ από το $\mathbf{K}'$. Για τον προσανατολισμό zigzag, εναλλαγή κοιλάδων σημαίνει ανάκλαση κατά τον y -άξονα, $x \rightarrow -x$. Σημειώστε πως ο δείκτης ζώνης λ μόνο αλλάζει το πρόσημο των στοιχείων του B υποπλέγματος. Αυτό είναι το αποτέλεσμα μίας συμμετρίας του συστήματος, η οποία ονομάζεται *chiral symmetry*.

Κλείνοντας, στην περιγραφή μας έχουμε ξεχάσει εντελώς το πραγματικό spin του ηλεκτρονίου s . Αυτό επιβάλει έναν επιπλέον τύπο σπίνορα στην κυματοσυνάρτηση, μετατρέποντάς την σε σπίνορα 8 στοιχείων. Παρόλα αυτά, επειδή η ταχύτητα Fermi είναι περίπου 300 φορές μικρότερη από την ταχύτητα του φωτός c , φαινόμενα αντιστρόφως ανάλογα με την c (ή με την λεπτή υφή, όπως αποτελέσματα βασιζόμενα σε αλληλεπίδραση πολλών σωματιδίων) καταστέλλονται σε μεγάλο βαθμό από φαινόμενα που σχετίζονται με τα quasi-particles Dirac (φαινόμενα σχετιζόμενα με το ψευδοσπίν υποπλέγματος).

1.3 Προσέγγιση Δεύτερης Τάξης

Για μία συνεχή περιγραφή, η προσέγγιση πρώτης τάξης είναι αρκετή. Όμως, η προσέγγιση δεύτερης τάξης της ενέργειας διασποράς στο γραφένιο εισάγει κάποια

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1. ΘΕΜΕΛΙΩΔΕΙΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ

καινούρια φαινόμενα άξια μελέτης. Η ενέργεια διασποράς έως και δεύτερη τάξη δίνεται από [6, 8, 11]:

$$\epsilon_\lambda(\mathbf{q}; \xi) = 3t' + \lambda \hbar v_F |\mathbf{q}| - |\mathbf{q}|^2 \left[\frac{9t'a^2}{4} + (\lambda \cdot \xi) \frac{3ta^2}{8} \cos(3\varphi_q) \right] \quad (1.47)$$

με

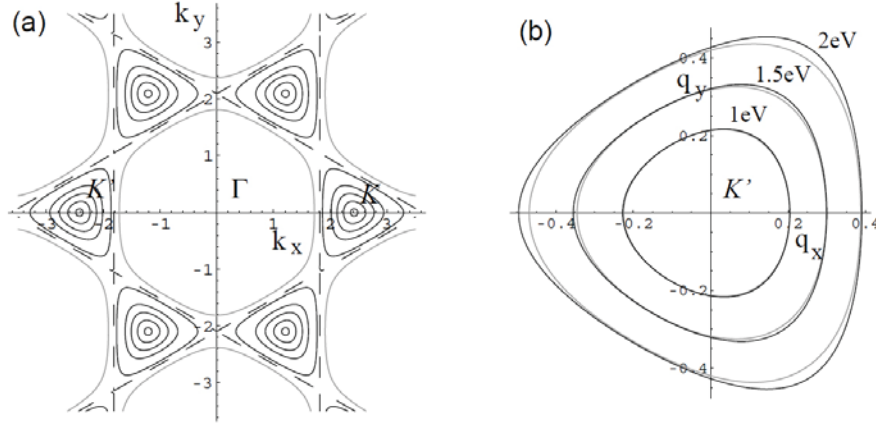
$$\varphi_q = \arctan(q_y/q_x). \quad (1.48)$$

Η προσέγγιση δεύτερης τάξης αλλάζει και τα διαγώνια και τα άντι-διαγώνια στοιχεία της ενεργής Χαμιλτονιανής. Τα διαγώνια στοιχεία πηγάζουν από μεταπηδήσεις nnn (άρα και αλληλοεπικαλύψεις nn):

$$t' |\gamma^\xi(\mathbf{q})|^2 \hat{I}_2 \approx -\frac{9a}{4} t' |\mathbf{q}|^2 \hat{I}_2 \quad (1.49)$$

Αυτές οι διορθώσεις σπάζουν την συμμετρία ηλεκτρονίων-οπών της πρώτης τάξης (η οποία υπάρχει μόνο με την υπόθεση $t' = 0$). Τα άντι-διαγώνια στοιχεία είναι, έως και τρίτη τάξη [11]:

$$t \gamma_q^\xi \approx \xi \hbar v_F \left[(q_x + i\xi q_y) - \xi \frac{a}{4} (q_x - i\xi q_y)^2 - \frac{a^2}{8} |\mathbf{q}|^2 (q_x + i\xi q_y) \right]. \quad (1.50)$$



Σχήμα 1.6: Προσέγγιση δεύτερης τάξης και εφέ τριγωνικού τυλίγματος. (a) Περιγράμματα θετικής ενέργειας σε χώρο κυματανύσματος, όπως δίνονται από την πλήρη σχέση διασποράς (1.32). Οι διακεκομμένες γραμμές αντιστοιχούν σε ενέργεια $\epsilon = t + t'$ η οποία ξεχωρίζει κλειστά περιγράμματα γύρω από τις κοιλάδες (μαύρες γραμμές, $\epsilon < t + t'$) από αυτά γύρω από τα σημεία Γ (γκρι γραμμές, $\epsilon > t + t'$). (b) Σύγκριση των περιγραμμάτων σε ενέργειες 1, 1.5 και 2 eV για $t = 3\text{eV}$, $t' = 0.1t$. Οι μαύρες γραμμές αντιστοιχούν σε ενέργειες υπολογισμένες από την πλήρη σχέση διασποράς (1.32) ενώ οι γκρι γραμμές αντιστοιχούν στην προσέγγιση δεύτερης τάξης (1.47). Σχήμα από αναφ. [11].

Τα διαγώνια στοιχεία είναι της τάξης (t'/t), και ως συνέπεια είναι πάντα μια τάξη μεγέθους μικρότερα από τα άντι-διαγώνια. Έτσι, εάν κανείς θέλει να πραγματοποιεί τους διαγώνιους όρους μέχρι δεύτερη τάξη, οι άντι-διαγώνιοι θα πρέπει να υπολογιστούν μέχρι τρίτη τάξη.

1.3.1 Τριγωνικό Περιτύλιγμα

Διορθώσεις δεύτερης τάξης μετατρέπουν τις επιφάνειες Fermi από κύκλους σε λεία τρίγωνα καθώς η ενέργεια μεγαλώνει, δίνοντας επίσης έναν ανισοτροπικό χαρακτήρα στην σχέση διασποράς: $\epsilon(\mathbf{q}) \neq \epsilon(-\mathbf{q})$. Η λόγος για αυτό είναι η τριπλή περίοδος, χάριν του $\cos(3\phi)$. Αυτός ο όρος είναι εν συνεχεία συζευγμένος με το ψευδοσπιν κοιλάδας. Η συμμετρία αντιστροφής χρόνο, ισοδύναμη με $\epsilon(\mathbf{q}) = \epsilon(-\mathbf{q})$ [10], δεν μπορεί πλέον να ικανοποιηθεί μέσα σε μία μόνο κοιλάδα. Όμως, όταν κανείς λαμβάνει υπ' όψιν και τις δύο κοιλάδες τότε η συμμετρία ισχύει διότι:

$$\epsilon(\mathbf{q} + \mathbf{K}) = \epsilon(-\mathbf{q} - \mathbf{K}) = \epsilon(\mathbf{K}' - \mathbf{q}) . \quad (1.51)$$

Ο τριπλασιασμός της περιόδου στην γωνία ϕ είναι αποτέλεσμα της συμμετρίας του πλέγματος και αναφέρεται στην βιβλιογραφία ως “*τριγωνικό περιτύλιγμα* (*trigonal warping*)” [11] (επιπλέον πληροφορίες στο σχ. 1.6). Οι ενέργειες όπου $\epsilon = \pm t + t'$ αντιστοιχούν σε σαμάρια στην πλήρη σχέση διασποράς (1.32), τα οποία δίνουν ανωμαλίες τύπου Van Hove οι οποίες θα συζητηθούν στην ενότητα 1.4.

Το σχ. 1.6(b) δείχνει ότι η προσέγγιση δεύτερης τάξης είναι ακριβής μέχρι και ενέργειες $2t/3 \approx 2\text{eV}$. Παρόλα αυτά, τα δείγματα γραφενίου του σήμερα επιτρέπουν ανίχνευση σε ενέργειες μόνον έως 0.1eV . Σε αυτή την κλίμακα η προσέγγιση Dirac είναι αρκετά ακριβής για την περιγραφή των φαινομένων.

1.4 Πυκνότητα Καταστάσεων

Η πυκνότητα καταστάσεων (DOS) $\rho(\epsilon)$ καταμετρά τον αριθμό κβαντικών καταστάσεων που υπάρχουν σε περιοχή γύρω από ενέργεια ϵ . Είναι ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο όταν κανείς θέλει να χαρακτηρίσει τη μεταφορά ηλεκτρονίων, και συνδέει την πυκνότητα ηλεκτρονίων με το ηλεκτροχημικό δυναμικό.

Συνηθισμένη άσκηση είναι ο υπολογισμός της DOS για το ηλεκτρονικό αέριο. Το αποτέλεσμα είναι ότι η DOS είναι μία εντελώς διαφορετική συνάρτηση, εξαρτώμενη από τις χωρικές διαστάσεις του συστήματος d . Για $d = 2$ κανείς βρίσκει ότι η DOS είναι σταθερή συνάρτηση, δηλαδή ανεξάρτητη από την ενέργεια. Όπως θα δείξουμε παρακάτω, η περίπτωση του γραφενίου είναι εντελώς διαφορετική.

Η πλήρης πυκνότητα καταστάσεων, στην προσέγγιση έλλειψης μεταπηδήσεων nnn , είχε υπολογιστεί από τους Hobson and Nierenberger το 1953 [33] με αναλυ-

τικό τρόπο. Ο υπολογισμός αυτός χρειάζεται πολύπλοκα μαθηματικά που ξεπερνούν την έκταση αυτής της Θέσης (όπως για παράδειγμα ελλειπτικά ολοκληρώματα). Έτσι λοιπόν, παραλείπουμε τους υπολογισμούς. Η έκφραση της DOS ανά μοναδιαία κυψελίδα είναι [33, 6]:

$$\rho(\epsilon) = \frac{4}{\pi^2 t^2} \frac{|\epsilon|}{\sqrt{Z_0}} \mathcal{L} \left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{Z_1}{Z_0}} \right) \quad (1.52)$$

με

$$\begin{aligned} Z_0 &= \begin{cases} \left(1 + \left|\frac{\epsilon}{t}\right|\right)^2 - \frac{[(\epsilon/t)^2 - 1]^2}{4} & , |\epsilon| \in [0, t] \\ 4 \left|\frac{\epsilon}{t}\right| & , |\epsilon| \in [t, 3t] \end{cases} \\ Z_1 &= \begin{cases} 4 \left|\frac{\epsilon}{t}\right| & , |\epsilon| \in [0, t] \\ \left(1 + \left|\frac{\epsilon}{t}\right|\right)^2 - \frac{[(\epsilon/t)^2 - 1]^2}{4} & , |\epsilon| \in [t, 3t] \end{cases} \end{aligned} \quad (1.53)$$

όπου η συνάρτηση $\mathcal{L} \left(\frac{\pi}{2}, x \right)$ εκφράζει το ελλειπτικό ολοκλήρωμα πρώτης τάξης του x . Η DOS (1.52) σχεδιάζεται στο σχ. 1.7. Δυστυχώς, δεν είναι δυνατόν να βρεθεί μία αναλυτική έκφραση για την DOS στην περίπτωση όπου $t' \neq 0$. Στο σχ. 1.7 παραθέτουμε αριθμητικά υπολογισμένη πυκνότητα καταστάσεων με $t' = 0.2t$.

Οι αιχμηρές κορυφές στα διαγράμματα της DOS είναι γνωστές ανωμαλίες Van Hove (όπου η απόκλιση της σχέσης διασποράς είναι 0). Αυτές οι ανωμαλίες συμβαίνουν στα κρυσταλλογραφικά σημεία. Ο τύπος της ανωμαλίας είναι πάντα της μορφής $\delta\rho(\epsilon) \sim -\ln|\epsilon - E_M|$ [10].

1.4.1 Γραμμική DOS

Κοντά στα σημεία Dirac η σχέση διασποράς προσεγγίζεται από την γραμμική ως προς $|\mathbf{k}|$ εξίσωση (1.39): $\epsilon = \pm \hbar v_F k$ με $k := |\mathbf{k}|$. Για να υπολογίσουμε την προσεγγιστική DOS αρκεί να λύσουμε την εξίσωση (υπολογίζουμε πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας μόνο):

$$\rho(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{\Omega} N_d(k) d^d k \quad (1.54)$$

όπου $N_d(k)$ είναι ο αριθμός διαθέσιμων κυματανυσμάτων, $d^d k$ το διαφορικό k -χώρου και Ω ο όγκος του συστήματος, όλα εξαρτώμενα από τον αριθμό χωρικών διαστάσεων, d . Η σχέση διασποράς εισέρχεται στην εξίσωση μέσω του $d\epsilon$. Όπως είναι γνωστό, για διδιάστατο ισотροπικό χώρο $N_2(k) d^2 k = (\Omega/(2\pi)^2) \cdot g \cdot 2\pi k dk$ με g να είναι ο παράγοντας εκφυλισμού του συστήματος. Για το γραφένιο υπάρχει τετραπλός εκφυλισμός, $g = g_v g_s$, σύμφωνα με το σπιν και την κοιλάδα. Τελικά, από την εξ. (1.39) έχουμε $|\epsilon| d\epsilon = (\hbar v_F)^2 k dk$ (και για τις δύο περιπτώσεις $\pm$).

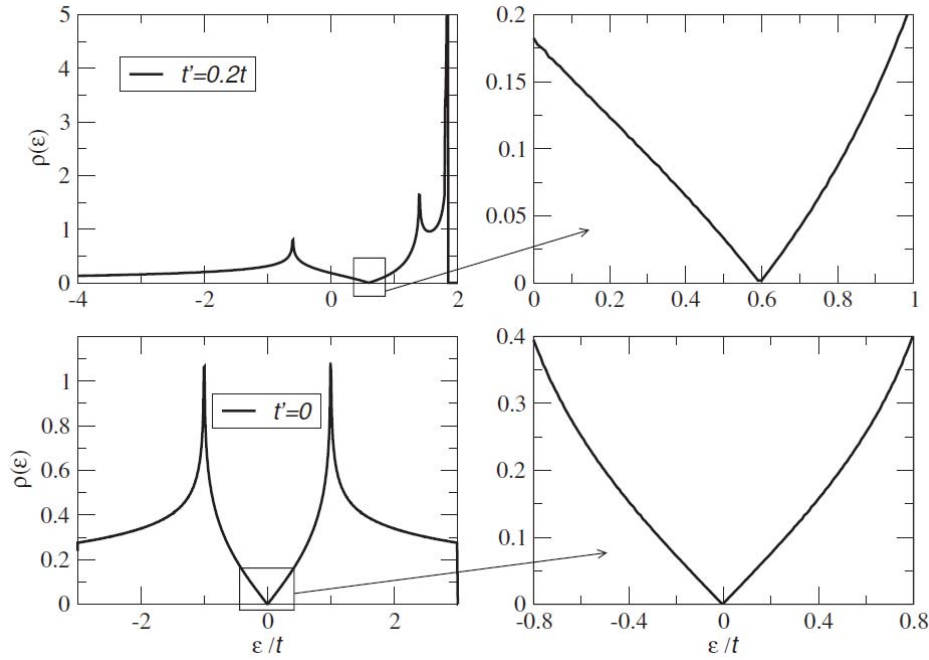
Συνδυάζοντας τα πάντα πίσω στην εξ. (1.54) καταλήγουμε στην αναλυτική προσέγγιση για την DOS χαμηλών ενεργειών του γραφενίου:

$$\rho(\epsilon \ll t) \approx \frac{g_v g_s}{2\pi} \frac{|\epsilon|}{(\hbar v_F)^2}. \quad (1.55)$$

Αυτή η προσέγγιση δίνει σωστά αποτελέσματα για ενέργειες μέχρι και ως $0.2 - 0.3t$ (σχ. 1.7).

1.4.2 Ηλεκτρονιακή Πυκνότητα

Η ηλεκτρονιακή πυκνότητα σχετίζεται με την DOS. Εάν υπάρχει κάποιο δυναμικό πύλης (gate voltage) το οποίο μπορεί να “ελέγξει” την ενέργεια Fermi, τότε η ηλεκτρονιακή πυκνότητα, στα πλαίσια της γραμμικής προσέγγισης, δίνεται από



Σχήμα 1.7: Πυκνότητα καταστάσεων ανά μοναδιαία κυψελίδα ως συνάρτηση της ενέργειας, σε μονάδες του t . Αριστερά διαγράμματα: (πάνω) αριθμητικά υπολογισμένη μέσω της σχέσης διασποράς (1.32) για $t' = 0.2t$, (κάτω) αναλυτικά υπολογισμένη. Δεξιά διαγράμματα: αντίστοιχες μεγεθύνσεις γύρω από το σημείο ουδετερότητας. Και στις δύο περιπτώσεις η προσέγγιση $\rho(\epsilon) \sim |\epsilon|$ είναι προφανής για μικρές ενέργειες. Σχήμα από αναφ. [6].

(θεωρούμε θερμοκρασία 0):

$$n_s = \int_0^{E_F} \rho(\epsilon) d\epsilon = \frac{g_v g_s}{4\pi} \frac{E_F^2}{(\hbar v_F)^2} . \quad (1.56)$$

Το κυματάνυσμα Fermi συνδέεται με την ενέργεια Fermi ως $E_F = \hbar v_F k_F$. Συνεπώς, σε μία πειραματική διάταξη, μπορεί κανείς να μετρήσει την ηλεκτρονιακή πυκνότητα και έτσι μέσω αυτής να εξάγει το κυματάνυσμα ή την ενέργεια Fermi ως ($g_s g_v = 4$):

$$q_F = \sqrt{\pi n_s} . \quad (1.57)$$

1.4.3 Δυναμική ή Μάζα Κυκλοτρόνου

Όπως αποδείξαμε, οι διεγέρσεις χαμηλής ενέργειας του γραφενίου συμπεριφέρονται ως άμαζα ρελατιβιστικά σωματίδια που κινούνται σε σταθερή ταχύτητα v_F . Συνεπώς, η μάζα των φορέων μπορεί να θεωρηθεί 0 σε αυτή την περίπτωση. Υπάρχει όμως και άλλος τρόπος ώστε να ορίσει κανείς ενεργή μάζα, από την συνηθισμένη ισοδυναμία ορμής και ταχύτητας, δηλαδή: $m^* v_F = p_F$ στην ενέργεια Fermi. Οπότε, η ποσότητα m^* ονομάζεται συχνά *δυναμική ενεργή μάζα*. Χρησιμοποιώντας την εξ. (1.57) καταλήγουμε σε:

$$m^* = \frac{\hbar \sqrt{\pi n_s}}{v_F} \quad (1.58)$$

το οποίο είναι ένα καινούριο αποτέλεσμα που δείχνει ότι η ενεργός μάζα εξαρτάται από την ηλεκτρονιακή πυκνότητα σε αντίθεση με τα 2DEG.

Ένας άλλος ορισμός ενεργού μάζας είναι η μάζα *κυκλοτρόνου*. Συνήθως, ο τρόπος που η δυναμική μάζα μετράται σε πειράματα είναι μέσω πειραμάτων συντονισμού κυκλοτρόνου. Αυτό συμβαίνει επειδή για ένα ισοτροπικό δισδιάστατο σύστημα η ενεργός μάζα ορμής είναι ισοδύναμη με την μάζα κυκλοτρόνου, η οποία δίνεται (ημικλασσικά) από $m_c^* = (1/2\pi)(\partial A/\partial \epsilon)$ με A το εμβαδόν στον $\mathbf{k}$ -χώρο που περικλείεται από μία τροχιά ενέργειας ϵ . Στην προσέγγιση πρώτης τάξης, μπορεί κανείς εύκολα να δει ότι οι δύο εκφράσεις ταυτίζονται.

Η ακτίνα κυκλοτρόνου υπολογίζεται εύκολα από αυτά τα αποτελέσματα. Ημικλασσικά, η ακτίνα είναι $r_c = (m_c^* v_F)/(eB) = p_F/(eB)$ για ένα σωματίδιο κινούμενο στην ενέργεια Fermi, μέσα σε μαγνητικό πεδίο B κάθετο στο επίπεδο. Μέσω της εξ. (1.58) έχουμε:

$$r_c = \frac{\hbar q_F}{eB} = \frac{\hbar \sqrt{\pi n_s}}{eB} . \quad (1.59)$$

1.5 Η Χαμιλτονιανή Dirac

Το μη-ντοπαρισμένο γραφένιο έχει ενέργεια Fermi που ταυτίζεται με την ενέργεια ουδετερότητας των κώνων Dirac, $\epsilon_D = \epsilon(\pm \mathbf{K}) = 0$ (βλ. εν. 1.1.5). Για οποιοδήποτε ρεαλιστικό ντόπινγκ σε ένα πείραμα, η ενέργεια Fermi θα είναι πολύ κοντά στο σημείο ουδετερότητας $\epsilon_F \ll t$. Όπως έχει ήδη συζητηθεί, σε αυτά τα επίπεδα ενέργειας η σχέση διασποράς προσεγγίζεται με μεγάλη ακρίβεια από την εξίσωση Weyl-Dirac που ονομάζεται επίσης “2D massless Dirac Hamiltonian”. Σε αυτήν την ενότητα σκοπεύουμε να δώσουμε μια μικρή περίληψη για την εξίσωση του Dirac και τις ιδιότητές της.

Η εξίσωση αυτή περιγράφει σχετικιστικά κβαντικά σωματίδια. Δημιουργήθηκε από τον Dirac περίπου το 1928 ως μία εναλλακτική στην σχετικιστική εξίσωση Klein-Gordon. Η κύρια διαφορά που εφάρμοσε ο Dirac στην δική του εξίσωση, ήταν ότι έπρεπε να είναι γραμμική με το άνωσμα της ορμής έτσι ώστε η ενέργεια (δηλαδή η χρονική παράγωγος) να ήταν σε πρώτη τάξη. Για δύο διαστάσεις, αυτό οδήγησε σε [43]:

$$\hat{H}_{2D} = c\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} + mc^2\hat{\sigma}_z \quad (1.60)$$

με c να είναι φυσικά η ταχύτητα του φωτός και $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y)$, σ_z είναι οι γνωστοί δισδιάστατοι πίνακες Pauli:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Το τετράγωνο του τελεστή $\hat{H}_{2D}$ δίνει την αναμενόμενη έκφραση για την κινητική ενέργεια ενός σχετικιστικού ελεύθερου σωματιδίου: $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$.

Η εξίσωση του Dirac έχει μία μεγάλη ιστορία για την παραγωγή της, που αρχικά προτάθηκε για να αντιμετωπίσει τα προβλήματα της εξ. Klein-Gordon, όπως η αρνητική πυκνότητα πιθανότητας. Για μια ανασκόπηση όλων αυτών, κανείς μπορεί να δει τις αναφ. [43, 44, 45].

Η άμαξη ($m = 0$) Χαμιλτονιανή της εξ. (1.60) είναι η ίδια όπως και η ενεργή Χαμιλτονιανή χαμηλών ενεργειών για το γραφένιο, εξ. (1.37) (βλ. εν. 1.2.1) με την ταχύτητα Fermi v_F αντί της ταχύτητας του φωτός. Αντικαθιστώντας την ορμή με τον κατάλληλο τελεστή $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ έχουμε:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \nabla) \quad (1.61)$$

Αυτή αντιστοιχεί στην ακόλουθη σχέση διασποράς:

$$\epsilon = v_F|\mathbf{p}| = \hbar v_F|\mathbf{q}|. \quad (1.62)$$

Έχουμε παραλείψει το ψευδοσπιν κοιλάδας ξ στην (1.61). Φυσικά, υπάρχουν δύο τέτοιες εξισώσεις Dirac, μία για κάθε κοιλάδα $\mathbf{K}, \mathbf{K}'$ (όπως φαίνεται ξεκάθαρα

στην εξ. (1.37) και όλη την περαιτέρω ανάλυση εκεί). Ανάλογα με τον επιλεγμένο κώνο, τα κυματανύσματα $\mathbf{q}$ μετρούνται ως προς το αντίστοιχο σημείο κοιλάδας. Στην ακόλουθη συζήτηση παρόλα αυτά, θα θεωρήσουμε μόνο έναν κώνο Dirac, σαν να μπορούμε να ξεχωρίσουμε τις δυο κοιλάδες, μετατρέποντας έτσι τις 2+1 διαστάσεις της εξίσωσης σε καθαρά 2. Το πότε αυτή η προσέγγιση είναι καλή, αναλύεται στην εν. 1.5.1.

Ιδιοκαταστάσεις σε Σταθερό Κατά Μέρη Δυναμικό

Ακολουθούμε μία γενικευμένη προσέγγιση, στην οποία δεν μας ενδιαφέρει από που μετράται το κυματόνυσμα $\mathbf{k}$. Μπορεί να είναι από το $\mathbf{K}$ ή $\mathbf{K}'$ σημείο εντός της προσέγγισης μοναδικής κοιλάδας (βλ. παρακάτω) αλλά για χάρη της γενικότητας ορίζουμε την αρχή ως $(0, 0)$.

Η Χαμιλτονιανή της (1.61) είναι η κινητική ενέργεια ενός σωματιδίου. Προσθέτουμε ένα σταθερό δυναμικό που απλά αλλάζει το επίπεδο μηδενικής ενέργειας. Σε αναπαράσταση πίνακα, η Χαμιλτονιανή δίνεται από:

$$\hat{H} = \hat{H}_{kin} + V_0 \hat{I} = \begin{pmatrix} V_0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & V_0 \end{pmatrix} \quad (1.63)$$

όπου έχουμε τους όρους ολικής, κινητικής και δυναμικής ενέργειας αντίστοιχα. Επιπλέον, υποθέσαμε μονάδες μέτρησης όπου $v_F = \hbar = 1$ για απλότητα.

1.5.1 Προσέγγιση Μοναδικής Κοιλάδας

Σε οποιαδήποτε προσέγγιση, είτε κανείς μελετά φράγματα δυναμικού, είτε ομαλά και συνεχή δυναμικά, ισχύει ότι $V = V(\mathbf{r})$ (και ίσως σταθερό κατά μέρος). Είναι λοιπόν σημαντικό να μελετήσουμε υπό ποιες προϋποθέσεις, η Χαμιλτονιανή με έναν μόνο κώνο (δηλαδή η πρωτότυπη Χαμιλτονιανή Dirac) περιγράφει το σύστημα του γραφενίου με ακρίβεια. Ας καλέσουμε ℓ την χαρακτηριστική κλίμακα μήκους στην οποία αλλάζει το δυναμικό. Για να μην υπάρχει σκέδαση μεταξύ κοιλάδων, το δυναμικό πρέπει να είναι ομαλό στην κλίμακα του πλέγματος, δηλαδή $\ell \gg a_0 \approx 0.2nm$. Αυτή είναι μία απαραίτητη προϋπόθεση διότι η απόσταση των κοιλάδων σε αντίστροφο χώρο είναι $|\mathbf{K} - \mathbf{K}'| \approx 1/a_0$ και ο μετασχηματισμός Fourier του δυναμικού αυτού $\hat{V}(\mathbf{q})$ θα είναι μη-μηδενικός μόνο για $q \approx 1/\ell \ll 1/a_0$.

Για τέτοια δυναμικά οι κοιλάδες είναι ξεχωρισμένες και ηλεκτρόνια/οπές μπορούν να περιγραφούν από την άμαξη 2D Χαμιλτονιανή Dirac για έναν κώνο, $\hat{H} = \hat{H}_{kin} + \hat{V}(x, y)$ [46]. Επιπλέον, μιας και το δυναμικό αλλάζει ελάχιστα μετά από απόσταση δύο γειτονικών ατόμων (A και B υποπλέγματα) ο πίνακας του δυναμικού $\hat{V}$ μπορεί να θεωρηθεί διαγώνιος στον χώρο υποπλέγματος, $\hat{V}(x, y) =$

$V(x, y)\hat{I}$. Θα αναφερόμαστε στις παραπάνω προσεγγίσεις ως *προσέγγιση μοναδικής κοιλάδας*.

1.5.2 Ιδιοκαταστάσεις Χαμιλτονιανής Weyl-Dirac

Ας μελετήσουμε τώρα τις ιδιοκαταστάσεις της εξ. (1.63), $|\psi\rangle := |\mathbf{k}, \lambda\rangle$ με λ τον δείκτη ζώνης, όταν τα σωματίδια κινούνται μέσω σταθερών κατά μέρη δυναμικών. Αυτές είναι 2-σπίνορες επιπέδων κυμάτων όπου ικανοποιούν την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}_{kin}|\mathbf{k}, \lambda\rangle = E_{kin}|\mathbf{k}, \lambda\rangle$ με $E_{kin} = E - V_0$. Σε αυτή την σύντομη ανάλυση ακολουθούμε την αναφ. [37] και γράφουμε τις ιδιοκαταστάσεις ως:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}, \lambda \rangle \quad (1.64)$$

με u, v να είναι τα μιγαδικά πλάτη των A και B υποπλεγμάτων αντίστοιχα. Η κινητική ενέργεια βρίσκεται από την εξίσωση $\hat{H}_{kin}\Psi = E_{kin}\Psi$ να είναι $E_{kin}^2 = k_x^2 + k_y^2$.

Στην ανάλυσή μας θα θεωρούμε ότι το k_y είναι θετικό και πραγματικό (δηλαδή επίπεδο κύμα που διαδίδεται από τα αρνητικά προς τα θετικά y). Όμως, το k_x^2 μπορεί να είναι θετικό ή αρνητικό, με βάση τις τιμές των k_y, V_0 και συνεπώς το k_x μπορεί να είναι πραγματικό ή καθαρά φανταστικό. Πραγματική τιμή k_x δίνει ταλαντούμενο κύμα ενώ φανταστική δίνει εκθετικά μειούμενο.

Επίπεδα Κύματα

Εάν το k_x είναι πραγματικό τότε $E_{kin}^2 > k_y^2$. Η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση ταλαντώνεται χωρίς απόσβεση:

$$\psi(\mathbf{r}; \lambda) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (1.65)$$

όπου $\lambda = \text{sign}(E - V_0) = \pm 1$ δείχνει την ζώνη σθένους ή αγωγιμότητας, $\phi = \arctan(k_y/k_x)$ και $E_{kin} = \lambda\sqrt{k_x^2 + k_y^2} = E - V_0$. Αυτή η έκφραση είναι η ίδια με την εξ. (1.46) και αντιστοιχεί σε λύσεις επιπέδων κυμάτων.

Evanescent Κύματα

Στην περίπτωση όπου το k_x^2 είναι αρνητικό τότε $k_x = \pm i\kappa$ με κ ένα θετικό αριθμό. Ξεχωρίζουμε δύο περιπτώσεις, ανάλογα με την τιμή της E_{kin} . Για $E_{kin} \neq 0$ έχουμε τις υποπεριπτώσεις:

$$\psi = e^{ik_y y} e^{\mp \kappa x} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda i \sqrt{\frac{k_y \pm \kappa}{k_y \mp \kappa}} \end{pmatrix}. \quad (1.66)$$

Εδώ, $E_{kin} = \lambda \sqrt{k_y^2 - \kappa^2}$ με $k_y^2 - \kappa^2 > 0$ και $\lambda = \text{sign}(E - V_0)$. Από αυτές τις δύο υποπεριπτώσεις, η μία είναι κύμα που φθίνει προς τα θετικά και η άλλη προς τα αρνητικά x .

Η τελευταία περίπτωση είναι όταν έχουμε μηδέν κινητική ενέργεια, δηλαδή $k_x^2 + k_y^2 = 0$ και άρα $k_x = \pm i k_y$. Τότε έχουμε τις δύο υποπεριπτώσεις:

$$\psi = e^{ik_y y} e^{-k_y x} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{or} \quad \psi = e^{ik_y y} e^{+k_y x} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.67)$$

όπου είναι ξανά κύματα που φθίνουν σε θετικά ή αρνητικά x .

1.5.3 Νόμοι Διατήρησης

Υπάρχουν τρεις και ένας νόμοι διατήρησης για την περίπτωση που έχουμε σωματίδια που προσπίπτουν σε ένα φράγμα δυναμικού. Θεωρούμε ένα δυναμικό αναλλοίωτο κατά την y διεύθυνση, $\hat{V}(x, y) = V(x)\hat{I}$.

- Η διατήρηση της ενέργειας E είναι αποτέλεσμα του αναλλοίωτου της Χαμιλτονιανής σε χρονικές μετατοπίσεις.
- Η προβολή του κυματανύσματος k_y διατηρείται ως αποτέλεσμα του αναλλοίωτου της μετάθεσης κατά τον y άξονα.
- Αφού το σύστημα είναι ανεξάρτητο του χρόνου, έχουμε για το ρεύμα πιθανότητας $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ και αφού δεν υπάρχει εξάρτηση από το y πρέπει να $\mathbf{J}(x, y) = \mathbf{J}(x)$. Επομένως, αυτό το μονοδιάστατο ρεύμα διατηρείται

$$\mathbf{J}(x, y) = j_x \tilde{\mathbf{x}}; \quad j_x = \text{const.} \quad (1.68)$$

Ο τελευταίος και πιο καινοτόμος νόμος διατήρησης είναι αυτός του ψευδοσπίν υποπλέγματος, τον οποίο μελετάμε ξεχωριστά στην επόμενη υποενότητα.

1.5.4 Διατήρηση του ψευδοσπίν και απώλεια οπισθοσκέδασης

Σε αυτή την υποενότητα θα δείξουμε ότι σωματίδια που περιγράφονται από την την άμαξη 2D εξίσωση Dirac δεν μπορούν να οπισθοσκεδαστούν από ένα ηλεκτροστατικό δυναμικό. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την ύπαρξη του “Klein tunnel”.

Οι πίνακες Pauli αναφέρονται στο ψευδοσπίν σ που σχετίζεται με την ελευθερία του ηλεκτρονίου/οπής να βρίσκεται στο A ή B υποπλέγμα. Αυτό το γεγονός περιέχεται στην κυματοσυνάρτηση του η οποία είναι ένας 2-σπινόρας που ικανοποιεί την 2×2 Χαμιλτονιανή $H_{kin} \sim (\mathbf{k} \cdot \hat{\sigma})$. Για δυναμικά που δεν δρουν ξεχωριστά στον χώρο υποπλέγματος (δηλαδή είναι διαγώνιοι πίνακες), το σ διατηρείται.

Ο τελεστής *chirality* (όχι *chiral*), που είναι γνωστός και ως τελεστής ελικότητας, ορίζεται ως η προβολή του ψευδοσπίν στην διεύθυνση της ορμής [37]:

$$\hat{C} := \frac{\mathbf{k} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}}{k} . \quad (1.69)$$

Οι ιδιοτιμές του τελεστή ελικότητας (1.69) είναι $C = \pm 1$ και αν το δυναμικό είναι διαγώνιο στον χώρο υποπλέγματος, ο τελεστής μετατίθεται με την Χαμιλτονιανή και η αντίστοιχη ποσότητα διατηρείται. Σε αυτή την περίπτωση, η ελικότητα είναι απλά ο δείκτης ζώνης, $C = \lambda$. Εάν κανείς συμπεριλάβει και τους δύο κώνους στην κβαντική κατάσταση του συστήματος (βλ. εν. 1.2.1), τότε η ιδιοκατάσταση είναι $|\mathbf{k}, \lambda, \xi\rangle$ και η ελικότητα δίνεται από $C = \lambda \cdot \xi$.

Μία σημαντική συνέπεια της διατήρησης αυτής ευρέθηκε πρώτα από τον Ando στην μελέτη νανο-σωλήνων άνθρακα [47, 48]. Έστω ότι ένα άμαζο σωματίδιο Dirac προσπίπτει σε ένα δυναμικό ατέλειας το οποίο όμως είναι ομαλό στην κλίμακα του πλέγματος. Η πιθανότητα σκέδασης σύμφωνα με την πρώτη προσέγγιση Born είναι [37]:

$$P(\mathbf{k}, \lambda) \sim |\langle \mathbf{k}', \lambda' | U(\mathbf{r}) \hat{1} | \mathbf{k}, \lambda \rangle|^2 \quad (1.70)$$

με ' να σημειώνει την τελική κατάσταση και θ να είναι η γωνία μεταξύ αρχικού και τελικού κυματάνυσματος. Για ελαστικές σκεδάσεις, $k' = k$ και $\lambda' = \lambda$, και η μόνη ελευθερία υπάρχει στην γωνία θ . Υπολογίζοντας το στοιχείο πίνακα καταλήγουμε σε [37]:

$$P(\theta) \sim |\tilde{U}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|^2 \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) . \quad (1.71)$$

Ο πρώτος παράγοντας $\tilde{U}$ είναι μετασχηματισμός Fourier του δυναμικού, το οποίο είναι καθιερωμένο αποτέλεσμα της προσέγγισης Born. Ο δεύτερος παράγοντας $\cos^2(\theta/2)$ ονομάζεται *chirality factor* και υπάρχει λόγω του ψευδοσπίν. Προέρχεται από το εσωτερικό γινόμενο εισερχόμενων και εξερχόμενων σπινωρών της εξ. (1.65). Το αποτέλεσμα του *chirality factor* είναι σημαντικό διότι δίνει μηδέν πιθανότητα στην οπισθοσκέδαση, $P(\theta = \pi) \sim |\hat{U}(2\mathbf{k})|^2 \cos^2(\pi/2) = 0$.

Μπορούμε να κατανοήσουμε αυτό το αποτέλεσμα ποιοτικά. Όπως έχει προαναφερθεί, εντός της προσέγγισης μοναδικής κοιλάδας, η ελικότητα διατηρείται και άρα η προβολή του ψευδοσπίν στο κυματάνυσμα διατηρείται, μακριά από το δυναμικό σκέδασης. Για να οπισθοσκεδαστεί ένα σωματίδιο πρέπει να αντιστρέψει το κυματάνυσμα του, $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$. Τότε όμως, μακριά από την ατέλεια όπου $\hat{H} = \hat{H}_{kin}$, θα πρέπει να έχει αντεστραμμένο ψευδοσπίν $\boldsymbol{\sigma} \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}$ αφού πρέπει να είναι παράλληλο με το κυματάνυσμα (διατήρηση ελικότητας). Όμως, το δυναμικό είναι διαγώνιο στον χώρο υποπλέγματος και συνεπώς δεν μπορεί να αντιστρέψει το ψευδοσπίν και άρα, η οπισθοσκέδαση είναι αδύνατη. Αυτό έχει σημαντικές συνέπειες στην κβαντική μεταφορά, όπως “weak anti-localization”

[49, 50, 51]. Ένα τελευταίο επιχείρημα για την απώλεια οπισθοσκέδασης που επικαλείται υπερ-συμμετρία βρίσκεται στην αναφ. [52].

Το φαινόμενο της ανυπαρξίας της οπισθοσκέδασης αναφέρεται συχνά στην βιβλιογραφία ως “Klein Tunnel Effect” εις μνήμην του παραδόξου του Klein [35, 36, 37, 34].

1.6 Εγκάρσιοι Τρόποι

Μία πολύ σημαντική έννοια για την μελέτη κβαντικής μεταφοράς ενός υλικού είναι οι εγκάρσιοι τρόποι (transverse modes), δηλαδή οι ενεργειακές ζώνες (ή σχέση διασποράς) όταν το σύστημα είναι περιορισμένο στην μία διεύθυνση αλλά άπειρο στην άλλη. Σε αυτή την ενότητα επομένως θα μελετήσουμε κβαντικά καλώδια γραφενίου, ή όπως αναφέρονται στην βιβλιογραφία, *νάνο-κορδέλες γραφενίου* (graphene nanoribbons) [63, 64]. Μία νάνο-κορδέλα είναι ουσιαστικά μία αρκετά μακριά κορδέλα ώστε να μπορούμε να υποθέσουμε το αναλλοίωτο μετάθεσης στην μία διεύθυνση. Επιπλέον, τα nanoribbons προβλέπονται να χρησιμοποιηθούν ως σύνδεσμοι μεταξύ ηλεκτρονικών νανο-δομών βασισμένων στον άνθρακα. Φυσικά, οι νανο-κορδέλες μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν καλώδια για την προσέγγιση Landauer-Büttiker, όπου οδηγούν κύματα ηλεκτρονίων μέσα και έξω από ένα πεπερασμένο σύστημα (το οποίο συχνά ονομάζεται “περιοχή σκέδασης”).

Είναι γνωστό ότι οι ηλεκτρονικές ιδιότητες του γραφενίου εξαρτώνται σημαντικά από το σχήμα και το μέγεθός του [4, 65]. Η γεωμετρική ιδιότητα με την μεγαλύτερη επιρροή στις ενεργειακές ζώνες είναι ο προσανατολισμός της νανο-κορδέλας, δηλαδή τι είδους άκρες έχει παράλληλες στην αναλλοίωτη διεύθυνση. Αυτή η γεωμετρική εξάρτηση πηγάζει από τον χαρακτήρα του πλέγματος του γραφενίου, το οποίο αποτελείται από δύο ισοδύναμα υπό-πλέγματα. Η επίδραση αυτού του παράγοντα είναι τόσο ακραία που το σύστημα μπορεί να είναι είτε ημιαγώγιμο (ή μονωτικό) είτε μεταλλικό (ή ημιμεταλλικό).

1.6.1 Τα Διαφορετικά Μοντέλα

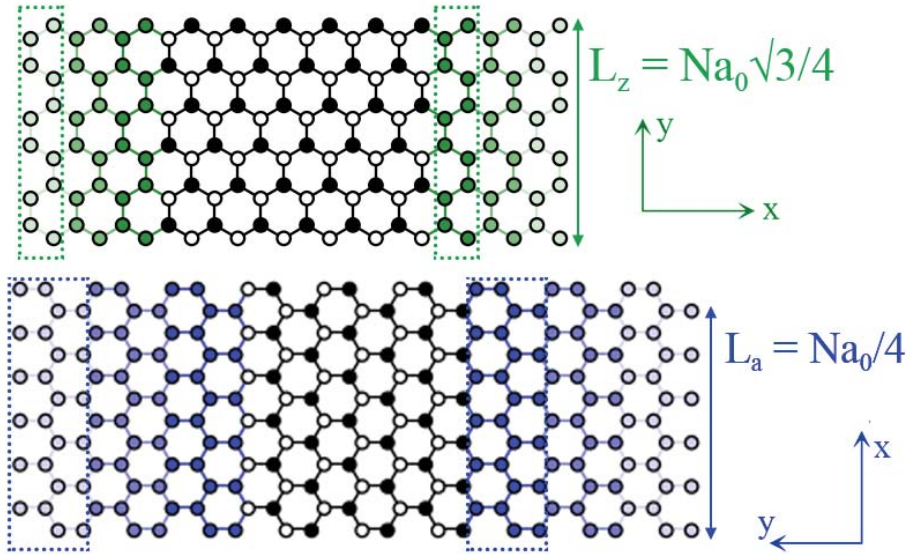
Θα μελετήσουμε δύο διαφορετικές νανο-κορδέλες με την χρήση της εξίσωσης Weyl-Dirac, η μία με zigzag άκρες και η άλλη με άκρες πολυθρόνας. Παρουσιάζουμε και τα δύο συστήματα στο σχ. 1.8 μαζί με της μοναδιαίες κυψελίδες τους που χρησιμοποιήθηκαν για αριθμητικούς υπολογισμούς ισχυρής δέσμευσης. Οι άκρες zigzag (πάνω μέρος του σχ. 1.8) έχουν την ενδιαφέρουσα ιδιότητα ότι τα άτομα κάθε μεριάς ανήκουν στο ίδιο υποπλέγμα. Από την άλλη, οι άκρες πολυθρόνας (κάτω μέρος του σχ. 1.8) περιέχουν εναλλασσόμενα άτομα και από τα δύο υποπλέγματα.

Ας συζητήσουμε πρώτα την μορφή των ενεργειακών ζωνών (transverse modes) για τα δύο συστήματα. Τα αποτελέσματα των αριθμητικών υπολογισμών, βασισμένα στις προαναφερθείσες μοναδιαίες κυψελίδες του σχ. 1.8, βρίσκονται στο σχ. 1.9. Αυτοί υπολογισμοί έγιναν μέσω του Kwant [92, 93, 94], ενός προγραμματιστικού πακέτου εστιασμένου σε φαινόμενα κβαντικής μεταφοράς.

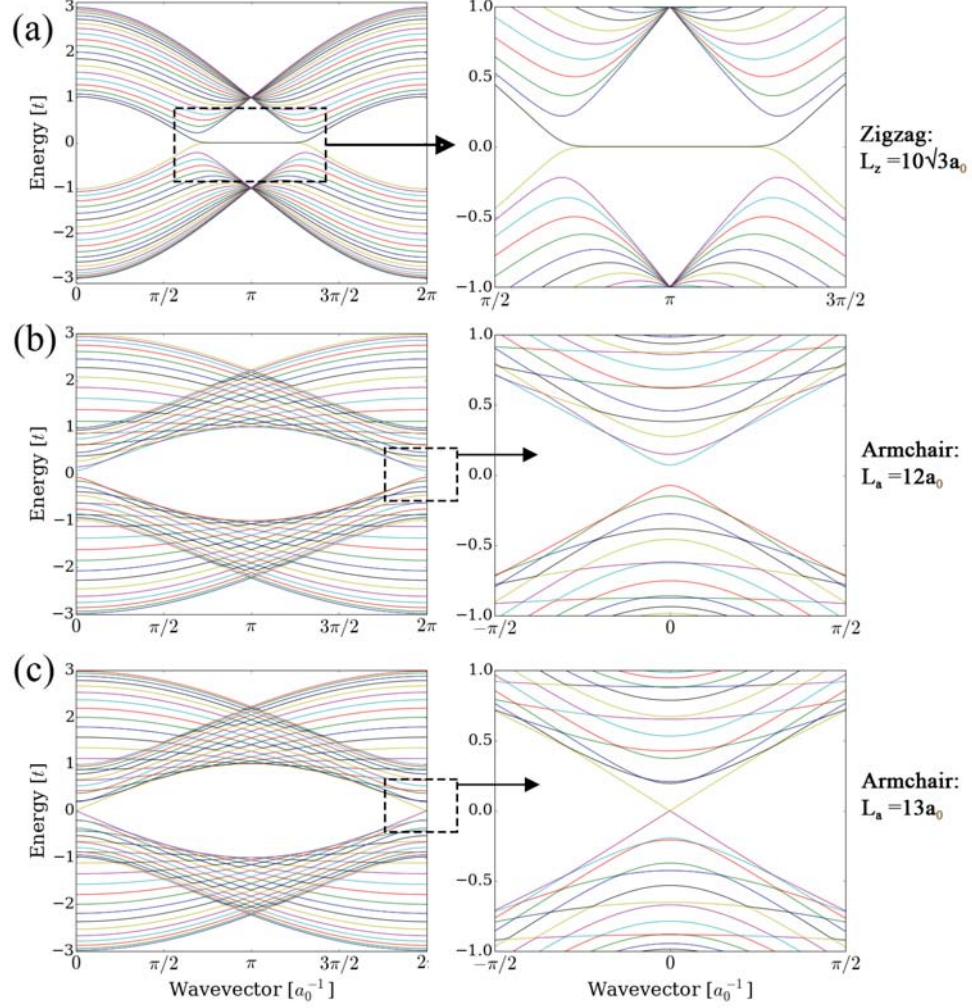
Η χαμηλότερη ενεργειακή ζώνη (εννοώντας αυτήν που είναι πιο κοντά στο 0) για το σύστημα zigzag (σχ. 1.9(a)) αντιστοιχεί σε καταστάσεις που είναι γνωστές ως καταστάσεις επιφάνειας (surface states) [66, 67, 68, 69, 70]. Αυτές οι καταστάσεις είναι γραμμικός συνδυασμός καταστάσεων άκρης, οι οποίες είναι εντοπισμένες (localized) στην πάνω και κάτω άκρη της νανοκορδέλας.

1.6.2 Ζώνες μέσω Ισχυρής Δέσμευσης

Χρειάζεται μια πιο εις βάθος ανάλυση για τις καταστάσεις επιφάνειας. Θεωρείστε ένα ήμι-άπειρο επίπεδο από γραφένιο (ώστε να έχει μόνο μία άκρη) και



Σχήμα 1.8: Διαφορετικοί τερματισμοί νανοκορδέλων γραφενίου. Το πάνω (κάτω) σχήμα αντιστοιχεί σε zigzag (πολυθρόνα) νανοκορδέλα, χρωματισμένη με πράσινο (μπλε) χρώμα. Ένα πράσινο (μπλε) διακεκομμένο παραλληλόγραμμο περικλείνει την μοναδιαία κυψελίδα για το σύστημα zigzag (πολυθρόνας). Δίπλα από κάθε μοναδιαία κυψελίδα σημειώνουμε, με το ίδιο χρώμα, το μήκος της L σε σχέση με τον αριθμό ατόμων που περιέχει. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα έχουμε $L_z = 3\sqrt{3}a_0$ για zigzag και $L_a = 6a_0$ για πολυθρόνα, με N να μετρά τον αριθμό ατόμων στην μοναδιαία κυψελίδα. Σχήματα δημιουργημένα μέσω του Kwant [92, 93, 94].



Σχήμα 1.9: Ενεργειακές ζώνες (εγκάρσιοι τρόποι) για διαφορετικές νανοκορδέλες γραφενίου, σε μονάδες του t , όπως υπολογίστηκαν μέσω μοντέλων ισχυρής δέσμησης. Το κυματόνισμα είναι αυτό παράλληλο στις άκρες της νανοκορδέλας, μετρούμενο σε μονάδες του $1/a_0$. Στο κείμενο αναφέρεται ως k_x (k_y) για τις άκρες zigzag (πολυθρόνας). (a) Νανοκορδέλα zigzag με $L_z = 10\sqrt{3}a_0$. (b), (c) Νανοκορδέλα πολυθρόνας με $L_a = 12a_0$ και $L_a = 13a_0$ αντίστοιχα. Οι εικόνες στα δεξιά είναι μεγεθύνσεις, σημειωμένες από διακεκομμένο παραλληλόγραμμο στις εικόνες της αριστερής στήλης. Σημειώστε πως στην μεγένθυση του (a) η “οριζόντια” γραμμή είναι ίση με το μηδέν μόνο στο $k_x a_0 = \pi$. Καθώς απομακρυνόμαστε από το π , η ζώνη απομακρύνεται ελάχιστα από το 0. Το σχήμα δημιουργήθηκε μέσω του Kwant [92, 93, 94]. Για τον υπολογισμό αυτόν, υποθέσαμε $t' = 0$.

έστω ότι αυτή η άκρη είναι zigzag. Μέσω υπολογισμών ισχυρής δέσμευσης [6] μπορεί κανείς να δείξει ότι υπάρχουν εντοπισμένες καταστάσεις γύρω από την άκρη zigzag για διαδιδόμενα κυματάνυσμα k_x στο όριο $2\pi/3 < k_x a_0 < 4\pi/3$ που είναι το $1/3$ των διαθέσιμων τιμών. Αυτές οι καταστάσεις (edge states) έχουν μηδέν ιδιοενέργεια. Το μήκος διεύθυνσης των καταστάσεων άκρης, το οποίο είναι συνάρτηση του k_x , αποκλίνει όταν το $k_x a_0$ πλησιάζει το $2\pi/3$ από τα δεξιά και το $4\pi/3$ από τα αριστερά (τότε η κατάσταση άκρης δεν είναι πλέον εντοπισμένη).

Οι ιδιοκαταστάσεις της νανοκορδέλας zigzag (αναλύονται στην επόμενη υποενότητα) είναι γραμμικός συνδυασμός καταστάσεων άκρης από την πάνω και κάτω άκρη. Αυτές οι καταστάσεις αλληλοκαλύπτονται και οι δέσμιες και αντι-δέσμιες συναρτήσεις μεταξύ των δύο καταστάσεων άκρης θα είναι πλέον οι ιδιοκαταστάσεις της νανοκορδέλας (ονομαζόμενες καταστάσεις επιφάνειας (surface states)). Αφού αυτός ο συνδυασμός καταλλήγει σε ενεργειακό χάσμα [6], η ζώνη μηδέν ενέργειας που ήταν flat για τις καταστάσεις άκρης, πλέον θα έχει διασπορά ανάλογα με το πλάτος της νανοκορδέλας L_z . Η αλληλοεπικάλυψη μεταξύ των δύο καταστάσεων άκρης μεγαλώνει καθώς το $k_x a_0$ προσεγγίζει τα $2\pi/3$ και $4\pi/3$. Αυτό σημαίνει ότι οι αποκλίσεις από την flat ζώνη μηδέν ενέργειας θα είναι μεγαλύτερες κοντά σε αυτά τα σημεία (βλ. σχ. 1.9). Όλες οι υπόλοιπες ζώνες της νανοκορδέλας zigzag που φαίνονται στο σχ. 1.9 αντιστοιχούν σε περιορισμένους τρόπους (confined modes - καταστάσεις κβαντικού πηγαδιού).

Σε αυτό το σημείο θέλουμε να τονίζουμε τις διαφορές κλειδιά μεταξύ ενός κβαντικού σύρματος από γραφένιο (με άκρες zigzag), το οποίο προσεγγίζεται σε χαμηλές ενέργειας από την άμαξη ρελατιβιστική Χαμιλτονιανή, και ενός βαντικού σύρματος από τετράγωνο πλέγμα, το οποίο προσεγγίζεται από την καθιερωμένη παραβολική σχέση. Η πρώτη διαφορά είναι ότι κάθε ενεργειακή ζώνη του τετράγωνου πλέγματος έχει μόνο ένα ελάχιστο, σε σύγκριση με την zigzag νανοκορδέλα που (εκτός της χαμηλότερης ζώνης) έχει πάντα 2 ελάχιστα. Επιπλέον, οι ενεργειακές ζώνες του γραφενίου δεν είναι συμμετρικές γύρω από τα ελάχιστα τους, σε αντίθεση με του τετράγωνου πλέγματος. Όταν κανείς μελετά τις ιδιοσυναρτήσεις της νανοκορδέλας zigzag που αντιστοιχούν σε θετικές ταχύτητες ομάδος, πάντα έχει ζεύγη από “σχεδόν ίδιες” συναρτήσεις, καθώς και μία χωρίς ζεύγος λόγω του μηδενικού τρόπου.

Για τον προσανατολισμό πολυθρόνας δεν υπάρχουν καταστάσεις επιφάνειας (ή εν γένει καταστάσεις άκρων) και οι κοιλάδες του γραφενίου είναι πάντα αναμεμιγμένες. Κάτι όμως που είναι πολύ ενδιαφέρον είναι ότι, το πλάτος της νανοκορδέλας έχει τόσο βαθιά συνέπεια όπου το σύστημα μπορεί να είναι είτε μονωτικό (σχ. 1.9(b)) είτε μεταλλικό (σχ. 1.9(c)). Στην τελευταία περίπτωση, μία κατάσταση 0 ενέργειας υπάρχει για διαδόμενο κυματάνυσμα ίσο με μηδέν.

Μοντέλο Χαμιλτονιανής

Θα προσπαθήσουμε να καταλάβουμε ποιοτικά τα αποτελέσματα των αριθμητικά υπολογισμένων ζωνών χρησιμοποιώντας κβαντικές ιδιοκαταστάσεις της εξίσωσης Dirac με κατάλληλες συνοριακές συνθήκες για κάθε σύστημα. Καθώς αναλύουμε καταστάσεις ήμι-πεπερασμένων συστημάτων πρέπει να συμπεριλάβουμε και τους δύο κώνους Dirac από τα σημεία $\mathbf{K} = \left(+\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right)$ και $\mathbf{K}' = \left(-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right)$.

Για αυτή την περιγραφή θα βασιστούμε στην προσέγγιση που αναφέρεται στην εν. 1.2.1. Η Χαμιλτονιανή είναι (από την εξ. (1.40)):

$$H(\mathbf{k}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y & 0 & 0 \\ k_x + ik_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -k_x - ik_y \\ 0 & 0 & -k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} \quad (1.72)$$

Βρισκόμαστε πάντα στον προσανατολισμό zigzag όσον αφορά τα ανύσματα. Ο 4-σπίνορας δίνεται από τη εξ. (1.41) και γράφεται στην αναπαράσταση θέσης ως:

$$\mathcal{W}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\psi_{(A)}^+(\mathbf{r}) \\ e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\psi_{(B)}^+(\mathbf{r}) \\ e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}}\psi_{(A)}^-(\mathbf{r}) \\ e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}}\psi_{(B)}^-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (1.73)$$

Μιας και οι γωνίες της ZB συνδέονται από ανάκλαση κατά τον y -άξονα, μπορούμε εύκολα να βρούμε τις λύσεις των ψ^- από τις ψ^+ μέσω του μετασχηματισμού $x \rightarrow -x$. Μία αναλυτική περιγραφή των εγκάρσιων τρόπων του γραφενίου δίνεται επίσης στο [6], στο οποίο έχουμε εν μέρει βασίσει την περιγραφή μας.

1.6.3 Zigzag Νανοκορδέλες

Η μοναδιαία κυψελίδα για αυτό το σύστημα παρουσιάζεται στο σχ. 1.8. Εάν η κυψελίδα περιέχει $N/2$ άτομα από το A υποπλέγμα και $N/2$ άτομα από το B , τότε το πάχος της δίνεται από $L_z = \frac{N}{4}\sqrt{3}a_0$ με $a_0 = a\sqrt{3}$ η σταθερά πλέγματος κατά Bravais. Το N τότε δίνει και τον αριθμό των ενεργειακών ζωνών που θα βρίσκονται στην αντίστοιχη σχέση διασποράς.

Το zigzag σύστημα έχει αναλλοίωτο μετατόπισης κατά τον x -άξονα. Αυτό εγγυάται ότι η κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφτεί ως (σημειώστε πως το $\mathbf{K}'$ δεν έχει y -μέρος):

$$\mathcal{W}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} e^{iKx} \times e^{ik_x x} \times \Phi_{(A)}^+(y) \\ e^{iKx} \times e^{ik_x x} \times \Phi_{(B)}^+(y) \\ e^{-iKx} \times e^{ik_x x} \times \Phi_{(A)}^-(y) \\ e^{-iKx} \times e^{ik_x x} \times \Phi_{(B)}^-(y) \end{pmatrix}. \quad (1.74)$$

Η κυματοσυνάρτηση $\Psi_{(A)}$ ή $\Psi_{(B)}$ για το σωματίδιο να βρίσκεται στο A ή B υποπλέγμα αποτελείται από την άθροιση του 1ου και 3ου όρου ή του 2ου και 4ου όρου αντίστοιχα.

Οι συνοριακές συνθήκες αναλύονται εις βάθος στα [59, 60] και αποφασίσαμε να μην δώσουμε μία περίληψη εδώ. Οι άκρες είναι τοποθετημένες στις θέσεις $y = 0, y = L_z$ και οπότε έχουμε:

$$\begin{aligned} \psi_{(A)}^+(y = L_z) &= \psi_{(A)}^-(y = L_z) = 0 \\ \text{and } \psi_{(B)}^+(y = 0) &= \psi_{(B)}^-(y = 0) = 0. \end{aligned} \quad (1.75)$$

Οι παραπάνω συνοριακές συνθήκες ικανοποιούνται για όλα τα x με την επιλογή:

$$\Phi_{(A)}^+(L_z) = \Phi_{(A)}^-(L_z) = \Phi_{(B)}^+(0) = \Phi_{(B)}^-(0) = 0 \quad (1.76)$$

που σημαίνει ότι οι συγκεκριμένες συνοριακές συνθήκες κρατούν τα Φ^+ και Φ^- ξεχωριστά. Αυτό φαίνεται ξεκάθαρα και από τις ενεργειακές ζώνες της tight binding. Ζώνες που πηγάζουν από το $\mathbf{K}$ σημείο δεν αναμιγνύονται από αυτές του $\mathbf{K}'$ σημείου.

Για να βρούμε την μορφή των περιβάλλοντων συναρτήσεων δρούμε με την Χαμιλτονιανή H , ύστερα από την αντικατάσταση $k_y \rightarrow -i\partial_y$. Το αποτέλεσμα είναι:

$$\begin{aligned} (k_x - \partial_y)\Phi_{(B)}^+ &= \varepsilon\Phi_{(A)}^+ \\ (k_x + \partial_y)\Phi_{(A)}^+ &= \varepsilon\Phi_{(B)}^+ \end{aligned} \quad (1.77)$$

όπου ορίσαμε ως $\varepsilon = \epsilon/\hbar v_F$ με ϵ την ιδιοτιμή της ενέργειας. Δρώντας με τον τελεστή $(k_x + \partial_y)$ στην πρώτη εκ των εξ. 1.77 έχουμε:

$$(-\partial_y^2 + k_x^2)\Phi_{(B)}^+ = \varepsilon^2\Phi_{(B)}^+ \quad (1.78)$$

και το $\Phi_{(A)}^+$ να δίνεται από την πρώτη εκ των εξ. (1.77). Η γενική λύση της εξ. (1.78) έχει την μορφή:

$$\Phi_{(B)}^+ = Ae^{zy} + Be^{-zy}$$

με $z := \sqrt{k_x^2 - \varepsilon^2}$ που αντιστοιχεί σε ιδιοενέργεια $\varepsilon^2 = k_x^2 - z^2$. Είναι προφανές ότι το z μπορεί να είναι είτε πραγματικό είτε καθαρά μιγαδικό.

Οι παραπάνω συνοριακές συνθήκες $\Phi_{(B)}^+(y = 0) = 0$ και $\Phi_{(A)}^+(y = L_z) = 0$ οδηγούν σε:

$$\begin{aligned} A+B &= 0 \\ (k_x - z)Ae^{zL_z} + (k_x + z)Be^{-zL_z} &= 0 \end{aligned}$$

το οποίο οδηγεί στην υπερβατική εξίσωση:

$$e^{-2zL_z} = \frac{k_x - z}{k_x + z}. \quad (1.79)$$

Η εξίσωση (1.79) επιτρέπει πραγματικές λύσεις για το z όποτε $k_x > 1/L_z$ (πέραν της τετριμμένης λύσης $z = 0$). Αυτές οι λύσεις αντιστοιχούν στις καταστάσεις επιφάνειας (surface states) που συζητήσαμε στην προηγούμενη υποενότητα. Στο διάστημα $0 < k_x < 1/L_z$ οι καταστάσεις αναμειγνύονται τόσο πολύ που είναι αδιαχώριστες από τους περιορισμένους τρόπους (confined modes) [63].

Η εξ. (1.79) επιτρέπει και μιγαδικές λύσεις. Γράφοντας $z = ik_n$, έχουμε:

$$k_x = \frac{k_n}{\tan(k_n L)}. \quad (1.80)$$

Αυτές οι λύσεις, προφανώς, αντιστοιχούν στους περιορισμένους τρόπους και ονομάζονται και αλλιώς στάσιμα κύματα. Για κάθε διακριτή λύση k_n υπάρχουν δύο στάσιμα κύματα με ιδιοενέργεια $\varepsilon = \pm \sqrt{k_n^2 + k_x^2}$.

Μπορούμε να ακολουθήσουμε την ίδια διαδικασία για την εξίσωση Dirac και τις περιβάλλουσες συναρτήσεις του $\mathbf{K}'$ σημείου. Όμως, εφόσον τα $\mathbf{K}'$ και $\mathbf{K}$ σχετίζονται μέσω ανάκλασης περί του y -άξονα, μπορούμε να εφαρμόσουμε τα πάντα από το $\mathbf{K}$ σημείο απλά με την μετατροπή $k_x \rightarrow -k_x$. Συνεπώς, οι εξισώσεις ιδιοτιμών είναι:

$$e^{-2z'L} = \frac{k_x + z'}{k_x - z'} \quad \text{and} \quad -k_x = \frac{k'_n}{\tan(k'_n L)} \quad (1.81)$$

Πραγματικές λύσεις τώρα επιτρέπονται για αρνητικές τιμές του k_x . Συνεπώς, για κυματανύσματα γύρω από το $\mathbf{K}'$ έχουμε καταστάσεις άκρης με αρνητικό k_x . Αυτό σημαίνει ότι καταστάσεις άκρης από κάθε κοιλάδα διαδίδονται προς μία συγκεκριμένη διεύθυνση μόνον.

Όπως και πριν, στάσιμα κύματα επιτρέπονται με ιδιοενέργειες που δίνονται από την δεύτερη των εξ. (1.81). Για τους παραπάνω λόγους, μπορούμε να επιχειρηματολογήσουμε ότι διαδόμενοι τρόποι με θετικό k_x προέρχονται από την $\mathbf{K}$ κοιλάδα, ενώ τρόποι με αρνητικό k_x από την $\mathbf{K}'$ κοιλάδα.

1.6.4 Armchair Νανοκορδέλες

Η γεωμετρία των νανοκορδέλων πολυθρόνας δείχνεται στο σχ. 1.8 με μπλε χρώμα. Το πάχος τους είναι $L_a = Na_0/4$ όταν ένα σύνολο από N άτομα περιέχονται, μισά από κάθε υποπλέγμα. Για αυτό το σύστημα, το αναλλοίωτο μετατόπισης είναι κατά τον y -άξον. Οι περιβάλλουσες συναρτήσεις $\Phi(x)$ είναι συνεπώς συναρτήσεις του x και οι συνοριακές συνθήκες είναι στα $x = 0$ και $x = L_a + a_0/2$. Οι όροι της κυματοσυνάρτησης $\mathcal{W}(\mathbf{r})$ έχουν τώρα παράγοντες $e^{\pm iKx} e^{ik_y y}$.

Συνεχίζοντας όπως και πριν, σημειώνουμε πως τώρα η κυματοσυνάρτηση πρέπει να μηδενίζεται και στα δύο υποπλέγματα και στις δύο άκρες της νανοκορδέλας, μιας και για την περίπτωση πολυθρόνας και οι δύο άκρες έχουν άτομα και από τα δύο υποπλέγματα. Αυτό σημαίνει πως (θέτοντας $L'_a = L_a + a_0/2$):

$$\Psi_{(A)}(x=0) = \Psi_{(B)}(x=0) = \Psi_{(A)}(x=L'_a) = \Psi_{(B)}(x=L'_a) = 0. \quad (1.82)$$

Η μετατόπιση από $+a_0/2$ στο πάχος L_a είναι αναγκαία διότι τα δύο άτομα στην μία άκρη της μοναδιαίας κυψελίδας απέχουν $L_a + a_0/2$ από αυτά στην άλλη άκρη (βλ. σχ. 1.8). Χρησιμοποιώντας τις συνοριακές συνθήκες για την πολυθρόνα, οι οποίες έχουν παραχθεί στα [59, 60] (δεν δίνεται περίληψη σε αυτή την εργασία) καταλήγουμε στις ακόλουθες εξισώσεις για τις περιβάλλουσες συναρτήσεις:

$$\begin{aligned} 0 &= e^{iky} \Phi_{(A)}^+(0) + e^{iky} \Phi_{(A)}^-(0) \\ 0 &= e^{iky} \Phi_{(B)}^+(0) + e^{iky} \Phi_{(B)}^-(0) \\ 0 &= e^{iKL'_a} e^{iky} \Phi_{(A)}^+(L'_a) + e^{-iKL'_a} e^{iky} \Phi_{(A)}^-(L'_a) \\ 0 &= e^{iKL'_a} e^{iky} \Phi_{(B)}^+(L'_a) + e^{-iKL'_a} e^{iky} \Phi_{(B)}^-(L'_a). \end{aligned}$$

Αυτές οι συνοριακές συνθήκες ικανοποιούνται για όλα τα y εάν

$$\Phi_{(i)}^+(0) = -\Phi_{(i)}^-(0) \quad \text{and} \quad e^{iKL'_a} \Phi_{(i)}^+(L'_a) = -e^{-iKL'_a} \Phi_{(i)}^-(L'_a) \quad (1.83)$$

για $i = A, B$. Είναι ξεκάθαρο ότι αυτές οι συνοριακές συνθήκες αναμιγνύουν καταστάσεις και από τους δύο κώνους Dirac. Αυτό ανακλάται και στα αποτελέσματα ισχυρής δέσμωσης (σχ. 1.9(b) και (c)) αφού όπως βλέπουμε υπάρχει μία ξεκάθαρη ανάμιξη ζωνών γύρω από το 0.

Οι ιδιοκαταστάσεις ικανοποιούν την ίδια δευτεροβάθμια εξίσωση (1.77)-(1.78) (με y να αντικαθιστεί το x). Λαμβάνοντας υπ' όψιν τις από πάνω συνοριακές συνθήκες (1.83), οι λύσεις έχουν τώρα την μορφή:

$$\begin{aligned} \Phi_{(B)}^+(x) &= Ae^{iw_n x} + Be^{-iw_n x} \\ \Phi_{(B)}^-(x) &= Ce^{iw_n x} + De^{-iw_n x} \end{aligned}$$

με $w_n = \sqrt{\varepsilon^2 - k_y^2}$ (υποθέτουμε το w_n να είναι πραγματικό εκ των προτέρων, αλλά αυτό θα είναι ξεκάθαρο όταν έχουμε παραθέσει την πλήρη λύση). Εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες (1.83), έχουμε:

$$A + B + C + D = 0,$$

$$Ae^{i(w_n+K)L'_a} + De^{-i(w_n+K)L'_a} + Be^{-i(w_n+K)L'_a} + Ce^{i(w_n-K)L'_a} = 0.$$

Οι λύσεις για τα w_n έχουν ως:

$$e^{2iw_n L'_a} = e^{iKL'_a} \Rightarrow \left(w_n - \frac{K}{2}\right) (2L_a + a_0) = 2\pi n$$

και συνεπώς

$$w_n = \frac{2\pi n}{2L_a + a_0} + \frac{2\pi}{3a_0} \quad (1.84)$$

με ιδιοενέργειες $\varepsilon^2 = k_y^2 + w_n^2$ και n οποιοσδήποτε ακέραιος.

Σύμφωνα με την παραπάνω ανάλυση, δεν υπάρχουν καταστάσεις επιφάνειας για την νανοκορδέλα πολυθρόνας αφού το w_n δέχεται μόνο πραγματικές τιμές. Επιπλέον, τα εγκάρσια κυματανύσματα w_n δεν εξαρτώνται από το διάμηκες κυματάνυσμα k_y σε αντίθεση με την περίπτωση zigzag.

Υπάρχει παρόλα αυτά κάτι αξιοσημείωτο στην έκφραση του w_n . Για $L_a = (3M + 1)a_0$ με M κάποιον (θετικό) ακέραιο, μία κατάσταση 0 ενέργειας υπάρχει όταν $k_y \rightarrow 0$. Αυτή η συνθήκη για το L_a είναι ισοδύναμη με το να υπάρχουν πολλαπλάσια του 3 εξάγωνα από το πλέγμα στην εγκάρσια διεύθυνση. Σε αυτή την περίπτωση το σύστημα είναι μεταλλικό. Σε όλες τις άλλες περιπτώσεις για το L_a , δεν υπάρχει κατάσταση μηδέν ενέργειας στο όριο $k_y \rightarrow 0$ και επομένως το σύστημα είναι ημιαγώγιμο. Τα ίδια παρατηρούμε και στα γραφήματα με τα αποτελέσματα της ισχυρής δέσμησης, σχ. 1.9(b) και (c).

Ακρίβεια της Συνεχούς Περιγραφής

Σε πραγματικές νανοκορδέλες είναι πιθανό ότι οι δεσμοί στις άκρες θα είναι ελαφρώς διαφορετικοί από αυτούς στο εσωτερικό. Το κύριο αποτέλεσμα που θα μπορούσε να έχει αυτό, είναι να επανακανονικοποιήσει τα στοιχεία μεταπήδησης κοντά στις άκρες. Αυτό μπορεί να συνυπολογιστεί στην ισχυρή δέσμηση με ένα χωρικά εξαρτώμενο πίνακα μεταπήδησης. Μπορεί επίσης να υπάρχουν μικρές αλλαγές στις ενέργειες των πλεγματικών θέσεων. Στην αναφ. [68] έχει δειχθεί ότι αυτά τα φαινόμενα είναι μικρά και μπορούν να θεωρηθούν διαταραχές. Στην ίδια αναφορά υπάρχει μία πιο εις βάθος περιγραφή των νανοκορδέλων άνθρακα.

Κεφάλαιο 2

Βαλλιστική Μεταφορά στο Γραφένιο Παρουσία Μαγνητικού Πεδίου

Μέχρι τώρα, είδαμε πόσο διαφορετικό είναι το γραφένιο από άλλα δισδιάστατα υλικά που δημιουργήθηκαν μέχρι και 3 δεκαετίες νωρίτερα. Η πιο εμφανής διαφορά μεταξύ τους είναι η ρελατιβιστική σχέση διασποράς του γραφενίου κοντά στην ενέργεια Fermi. Είναι μόνον φυσικό, βλέποντας όλες αυτές τις διαφορές, να αναρωτηθεί κανείς εάν φαινόμενα καλώς θεμελιωμένα και κατανοητά στα συστήματα διδιάστατων αερίων ηλεκτρονίων - 2DEG (σαν αυτά που παρουσιάζουμε στην εν. 2.1.1) θα λαμβάνουν χώρα και στο γραφένιο. Αυτά τα φαινόμενα εστιάζονται γύρω από βαλλιστική μαγνήτο-μεταφορά, που σημαίνει ότι η κίνηση των φορέων υπαγορεύεται κυρίως από την κλασσική δυναμική παρουσία μαγνητικού πεδίου.

Τέτοια φαινόμενα είναι για παράδειγμα η συμπεριφορά της μαγνήτο-αντίστασης και της Hall-αντίστασης σε ένα υπερπλέγμα από antidots (antidot super-lattice - ADSL). Το ADSL δημιουργείται συνήθως με την δημιουργία τρυπών με διάφορες τεχνικές (βλ. εν. 2.2) επάνω στο πλέγμα του γραφενίου (ή την ετερο-δομή για το σύστημα του 2DEG). Οι δομή των αντιστάσεων έχει κατανοηθεί πλήρως για την περίπτωση του 2DEG και θα την παρουσιάσουμε στην εν. 2.1.1.

Έπειτα (εν. 2.2), θα δώσουμε μία περίληψη κάποιων πολύ πρόσφατων (Νοέμβριος 2015) πειραμάτων στο γραφένιο τα οποία ξεκάθαρα επιδεικνύουν τα φαινόμενα που έλαβαν χώρα στα 2DEG με μία παρόμοια μορφή. Βασισμένοι σε αυτό το γεγονός, θα αναπτύξουμε ένα εκλεπτυσμένο μοντέλο το οποίο μπορεί να προσομοιάσει με ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα (εν. 2.3). Για να εκπονήσουμε αυτό έργο, θα βασιστούμε σε προηγούμενα μοντέλα που είχαν επιτυχία στην περίπτωση των 2DEGs, αλλά θα τα τροποποιήσουμε σε συμφωνία με τα αποτελέσματα του πρώτου κεφαλαίου.

Οι τελευταίες ενότητες αυτό του κεφαλαίου είναι αφιερωμένες σε μία διεξοδική θεωρητική ανάλυση των αποτελεσμάτων του μοντέλου μας. Θα μελετήσουμε τροχιές στον χώρο φάσεων και τομές Poincaré (εν. 2.4). Επιπροσθέτως, θα εξηγήσουμε πολλά ενδιαφέροντα φαινόμενα, όπως οι κορυφές ισομετρίας (commensurability peaks, εν. 2.6) ή το αρνητικό φαινόμενο Hall (εν. 2.7).

2.1 Υπερπλέγματα Antidot σε 2DEG

Αν και το κύριο αντικείμενο αυτής της εργασίας είναι το γραφένιο, αυτή η ενότητα χρησιμεύει ως μία περίληψη φαινομένων που μελετήθηκαν κατά το 1988-1993 και εν μέρη ενέπνευσαν αυτή την εργασία. Αυτά τα φαινόμενα έχουν να κάνουν με μεταφορά και αγωγιμότητα σε δισδιάστατο ηλεκτρονιακό αέριο (2DEG) με επιπλέον υπερπλέγμα, το οποίο δρα ως ένα περιοδικό δυναμικό.

2DEGs υπάρχουν π.χ. σε έτερο-επαφές ημιαγωγών μεταξύ GaAs and AlGaAs καθώς επίσης και οξειδία τύπου Silicon-Oxides και άλλα συστήματα [72]. Εμάς μας ενδιαφέρει η συμπεριφορά των στοιχείων του ταχυστή της ειδικής αντίστασης σε μαγνητικό πεδίο καθώς και υπερπλέγμα από antidots (antidot super-lattice - ADSL), τα οποία ονομάστηκαν έτσι διότι είναι τα αντίθετα των γνωστών quantum dots. Θεωρητικά, το ADSL μπορεί να θεωρηθεί ως μία περιοδική διάταξη από κέντρα σκέδασης. Για πληροφορίες για την κατασκευή του ADSL, βλ. αναφ. [73].

2.1.1 2DEG σε Μαγνητικό Πεδίο

Μία από τις πιο συναρπαστικές ανακαλύψεις μετά από την κατασκευή 2DEG ήταν η δομή της μαγνήτο- και Hall-αντίστασης, κοινά ονόματα που αποδίδονται στα διαγώνια και άντι-διαγώνια στοιχεία του ταχυστή της αντίστασης, όταν εφαρμόζεται μαγνητικό πεδίο κάθετο στο επίπεδο του αερίου. Αποδεικνύεται ότι η εικόνα του Drude, όπου μαθαίνει κανείς σε εισαγωγικά μαθήματα στην φυσική ημιαγωγών, είναι σωστή μόνο για πολύ χαμηλά πεδία.

Σύμφωνα με τον Drude, η μαγνήτο-αντίσταση μένει ανεπηρέαστη από το μαγνητικό πεδίο, ενώ η Hall-αντίσταση έχει γραμμική εξάρτηση από αυτό, δηλαδή:

$$\rho_{xx}^{(D)}(B) = \frac{m}{|e|^2 n_s t_m} \quad , \quad \rho_{xy}^{(D)}(B) = \frac{B}{|e| n_s} \quad (2.1)$$

με m να είναι η (ενεργός) μάζα, t_m ο χρόνος εφησυχασμού ορμής και n_s η πυκνότητα των φορέων. Μέτρηση αυτών των ποσοτήτων σε πείραμα, φαίνονται στο σχ. 2.1.

Σε χαμηλά πεδία η ρ_{xx} είναι σταθερή ενώ η ρ_{xy} αυξάνεται γραμμικά με το B σε συμφωνία με τις προβλέψεις του Drude. Παρόλα αυτά, σε υψηλότερα πεδία η ρ_{xx} δείχνει έντονη ταλαντούμενη συμπεριφορά και η ρ_{xy} διέπεται από πλατό που

αντιστοιχούν στα ελάχιστα της ρ_{xx} . Αυτά τα χαρακτηριστικά είναι συνήθως απών σε μεγάλες θερμοκρασίες (> 70 K) αλλά εμφανή σε κρυογενικές θερμοκρασίες των 4 K. Τα φαινόμενα έχουν ονομαστεί *Quantum Hall Effect* (QHE) για την ρ_{xy} και *Shubnikov-de Haas oscillations* (SdH) για την ρ_{xx} . Η εξήγηση αυτών των φαινομένων είναι έξω από το αντικείμενο της εργασίας μας και έχει να κάνει με τα επίπεδα Landau [72]. Η ανακάλυψη του κβαντικού φαινομένου Hall οδήγησε σε ένα βραβείο Νόμπελ για τον Klaus von Klitzing το 1985 [74].

2.1.2 Επίδραση του Υπερπλέγματος Antidot

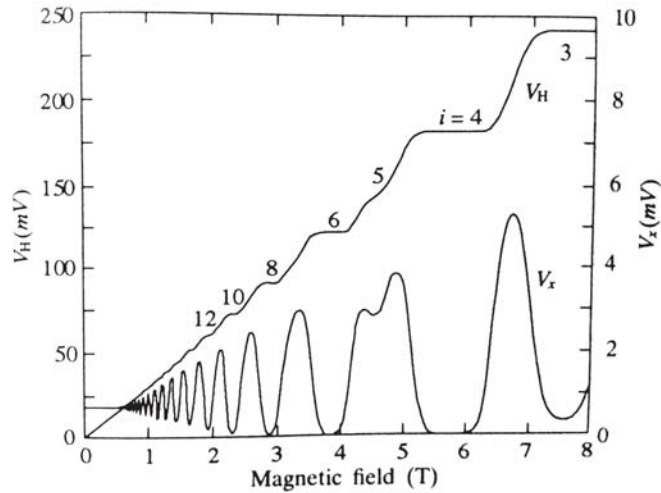
Το ADSL αποτελείται από μία περιοδική διάταξη από τρύπες μεγέθους νανομέτρων. Τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας κινούνται με σταθερή ενέργεια E_F μεταξύ των περιοδικών δυναμικών λόφων. Σε αυτά τα συστήματα η μέση διαδρομή των ηλεκτρονίων l_m είναι πολύ μεγάλη σε σχέση με την περίοδο του υπερπλέγματος, α η οποία είναι της τάξης 10-100 νανόμετρων, ώστε να επιτρέπεται η βαλλιστική μεταφορά. Το σύστημα παρουσιάζεται στο σχ. 2.2.

Οι ποσότητες ρ_{xx} και ρ_{xy} που ορίστηκαν στην ενότητα 2.1.1 μετρήθηκαν σε δείγματα με και χωρίς ADSL. Τα αποτελέσματα βρίσκονται στο σχ. 2.3. Για μία πειραματική προσέγγιση του πώς μετρούνται αυτές οι ποσότητες, κανείς μπορεί να δει [73].

Είναι κατευθείαν προφανές πως το ADSL έχει μεγάλη επίδραση στους συντελεστές μαγνήτο-μεταφοράς. Επιπλέον οι πιο σημαντικές διαφορές βρίσκονται στα χαμηλά πεδία, εκεί όπου το δείγμα χωρίς ADSL ακολουθεί την εικόνα του Drude.

Μία δομή κορυφών ισομετρίας στην ρ_{xx} αναδύεται για τιμές του B όπου η

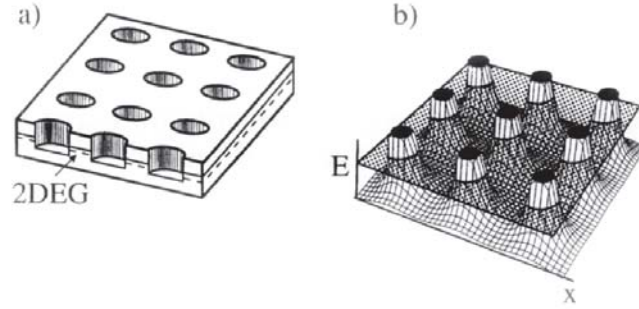
Σχήμα 2.1: Μαγνήτο- και Hall-αντίσταση μετρημένες σε ένα πείραμα με 2DEG. Η τάση V_x είναι ευθέως ανάλογη στην μαγνήτο-αντίσταση ρ_{xx} ενώ η τάση V_H είναι ανάλογη της ρ_{xy} . Σχήμα από αναφ. [72].



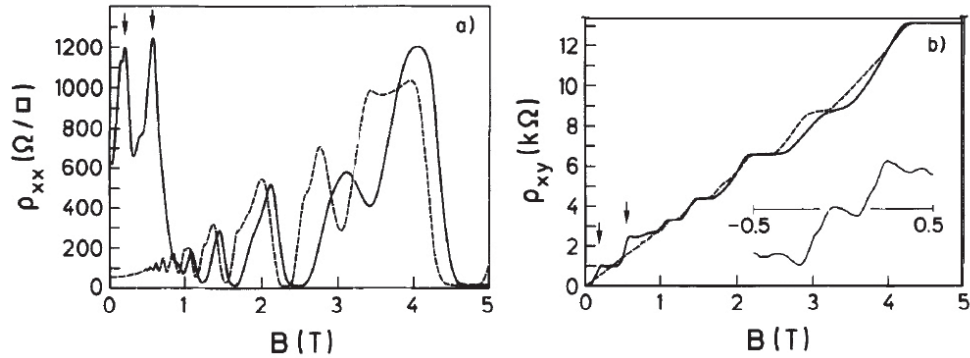
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2. ΒΑΛΛΙΣΤΙΚΗ ΜΑΓΝΗΤΟΜΕΤΑΦΟΡΑ ΣΤΟ ΓΡΑΦΕΝΙΟ

κλασική ακτίνα κυκλοτρόνου στην ενέργεια Φέρμι $R_c = \hbar\sqrt{2\pi n_s}/eB$ ισούται για παράδειγμα με $\sim 0.5\alpha$ και $\sim 1.5\alpha$. Οι κορυφές της ρ_{xx} συνοδεύονται από μη-κβαντισμένα βήματα στην Hall-αντίσταση όπως φαίνεται στο σχ. 2.3(b). Σε μεγαλύτερα μαγνητικά πεδία όπου η ακτίνα κυκλοτρόνου γίνεται μικρότερη από την περίοδο α του ADSL η ρ_{xx} πέφτει γρήγορα και μετά αρχίζουν οι ταλαντώσεις SdH, όπως ακριβώς στο δείγμα χωρίς ADSL. Σε αυτό διάστημα η ρ_{xy} επίσης δείχνει τα κβαντισμένα πλατό Hall. Οι ομοιότητες των καμπυλών σε υψηλά μαγνητικά πεδία δείχνει ότι η κινητικότητα (mobility) των φορέων είναι υψηλή ακόμη και μετά την δημιουργία του υπερπλέγματος.

Σε χαμηλά πεδία όμως, η κινητικότητα περιορίζεται από συνεχείς σκεδάσεις



Σχήμα 2.2: a) Σκίτσο διάταξης antidot η οποία αποτελείται από περιοδικές τρύπες χαραγμένες στην ετερο-δομή. b) Το αντίστοιχο δυναμικό που νιώθουν οι φορείς (βλ. εν. 2.3). Τα ηλεκτρόνια που κινούνται στην ενέργεια Φέρμι, σχεδιασμένη με ημι-διαφανές επίπεδο, είναι υπεύθυνα για τα φαινόμενα ισομετρίας. Σχήμα από αναφ. [73].



Σχήμα 2.3: a) Μαγνήτο-αντίσταση ρ_{xx} και b) Hall-αντίσταση σε δείγμα με (solid line) και χωρίς (dashed line) ADSL στους 1.5 K. Τα βέλη σημειώνουν θέσεις μαγνητικού πεδίου όπου $R_c/a \sim 0.5$ και 1.5. Το κάτω ένθετο στο b) δείχνει μια μεγέθυνση του αρνητικού φαινομένου Hall στην ρ_{xy} γύρω από το $B = 0$. Σχήμα από αναφ. [73].

στα antidots και η αντίστοιχη μέση απόσταση γίνεται συγκρίσιμη με την σταθερά του ADSL, α . Μία επιπλέον ανωμαλία στην ρ_{xy} είναι η αρνητική Hall-αντίσταση κοντά στο $B = 0$ όπως φαίνεται στο ένθετο του σχ. 2.3(b). Αρνητική αντίσταση Hall σημαίνει ότι τα ηλεκτρόνια κινούνται, κατά μέσο όρο, αντίθετα από την δύναμη Lorentz.

Ο αριθμός των κορυφών και βημάτων που φαίνονται σε χαμηλά πεδία εξαρτάται καθοριστικά από την ενεργό διάμετρο d και την περίοδο α του δυναμικού antidot. Όσο μεγαλύτερος ο λόγος d/α τόσο λιγότερες κορυφές φαίνονται στην αντίσταση. Στο σχ. 2.4 συγκρίνουμε 3 διαφορετικά δείγματα με διάφορες ενεργές διαμέτρους.

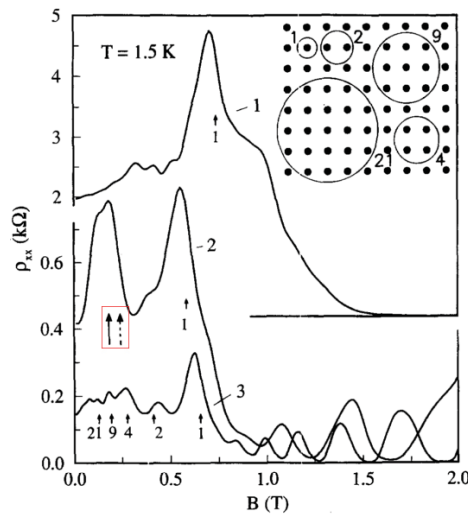
2.1.3 Κορυφές Ισομετρίας

Κάθε κορυφή που αναλύεται στην μαγνήτο-αντίσταση μπορεί να αντιστοιχηθεί με μία ισομετρική τροχιά ακτίνας r_c που περικλείει έναν συγκεκριμένο αριθμό από antidots, όπως σκιαγραφείται στο ένθετο του σχ. 2.4. Αυτή η αντιστοίχιση έρχεται από την κλασσική εικόνα ότι ένα ηλεκτρόνιο κινούμενο με ορμή p_F σε ένα κάθετο μαγνητικό πεδίο B , εκτελεί κυκλική κίνηση με ακτίνα r_c σύμφωνα με την φόρμουλα:

$$r_c = \frac{p_F}{eB} . \quad (2.2)$$

Ο αριθμός των περικυκλωμένων antidots μπορεί να είναι 1, 2, 4, 9 ή 21. Αυτό υπονοεί ότι εκτός από την χαοτική φύση του συστήματος, υπάρχουν κάποια χαρακτηριστικά γνωρίσματα που ανακλώνται στα πειράματα και ότι σίγουρα, οι ακτίνες κυκλοτρόνου των ηλεκτρονίων παίζουν σημαντικό ρόλο.

Σχήμα 2.4: Κορυφές χαμηλού πεδίου για τρία διαφορετικά δείγματα, παρμένα από την αναφ. [73]. Το δείγμα 1 έχει το μικρότερο κλάσμα d/α ενώ το δείγμα 3 το μεγαλύτερο. Οι κορυφές του δείγματος 3 μπορούν να αντιστοιχιστούν σε ισομετρικές τροχιές γύρω από 1, 2, 4, 9 και 21 antidots, όπως φαίνεται στο ένθετο. Μέσα σε ένα κόκκινο κουτί υπάρχουν δύο βέλη. Αυτό με τις τελείες αντιστοιχεί σε έναν κύκλο γύρω από 4 antidots ενώ αυτό χωρίς τελείες σε έναν (μεγαλύτερο) κύκλο παραμορφωμένο από το συνεχές δυναμικό (βλ. εν. 2.3 και [77]). Σχήμα από αναφ. [73].



Η επιτυχία αυτής της απλοϊκής μελέτης με κυκλικές τροχιές οδήγησε στην δημιουργία ενός μοντέλου φλίπερ (pinball) το οποίο βασιζόταν στην εικόνα του Drude [76]. Η κεντρική ιδέα του μοντέλου ήταν ότι τα ηλεκτρόνια είναι μη - αλληλεπιδρούσες σφαίρες που σκεδάζονται από περιοδική διάταξη κυλινδρικών πυλών άπειρου ύψους. Ένα τέτοιο σύστημα είναι προφανώς χαστικό και συνδέεται με το ονομαζόμενο μπιλιάρδο κατά Sinai [75].

Σε συγκεκριμένες ισομετρικές τιμές του μαγνητικού πεδίου, η κίνηση κυκλοτρόνου δεν διακόπτεται από σκέδαση από τα antidots, όπως τα παραδείγματα που δίνονται στο ένθετο του σχ. 2.4. Αυτό οδηγεί σε έναν τύπο μη γραμμικού συντονισμού των χαστικών τροχιών, όπου τα ηλεκτρόνια “κολλάνε” σε αυτή την κίνηση κυκλοτρόνου για πολύ ώρα, δίνοντας μια χαρακτηριστική κορυφή στην αντίσταση. Θα αναλύσουμε αυτά τα φαινόμενα εις βάθος, με το δικό μας μοντέλο, στις εν. 2.3 έως 2.7.

Συνεχές Μοντέλο FGK

Το μοντέλο φλίπερ που προτάθηκε στο [76] είχε κάποιες αδυναμίες στο να εξηγήσει συγκεκριμένες πλευρές των πειραμάτων με antidot, κυρίως την σωστή περιγραφή της κορυφής που περικλύει 4 antidot (βλ. σχ. 2.4). Οι λόγοι για αυτές τις αντιφάσεις ήταν ότι η περιγραφή βασιζόταν σε δυναμικά άπειρης δύναμης (ασυνεχή). Σαν αποτέλεσμα, η κίνηση των φορέων μπορεί να περιγραφεί μόνο βάση του νόμου ανάκλασης.

Αυτή η προσέγγιση είναι καλή αρκεί το δυναμικό να είναι πολύ απότομο, το οποίο δεν συμβαίνει πάντα στα πειράματα. Για να υπερνικήσουν αυτήν την αδυναμία οι Fleischmann, Geisel και Ketzmerick πρότειναν ένα συνεχές δυναμικό για να μοντελοποιήσουν το ADSL που αναφέρεται ως FGK model [77]. Σε αυτό το μοντέλο θα βασίσουμε τον δικό μας φορμαλισμό για Antidots στο γραφένιο, και θα το συζητήσουμε εις βάθος σε ανερχόμενες ενότητες.

2.2 Πειράματα με ADSL σε Γραφένιο

Πολύ πρόσφατα (Νοέμβριος 2015) δύο πειράματα δημοσιεύτηκαν τα οποία μέτρησαν μαγνήτο- και Hall-αντίσταση σε βαλλιστικά ADSL γραφενίου. Το ένα χρησιμοποίησε τετράγωνο πλέγμα από antidots [78] ενώ το άλλο τριγωνικό (ή εξαγωνικό) [79].

Η διαδικασία δημιουργίας που δίνεται με λεπτομέρεια στα [78, 79] δεν έχει καθόλου πληροφορίες για την ομαλότητα του δυναμικού. Πληροφορίες για τον τύπο των άκρων που έχουν οι τρύπες είναι επίσης απύσες.

2.2.1 Τετράγωνο Υπερπλέγμα Antidot

Ένα δείγμα γραφενίου δημιουργήθηκε στο [78] προετοιμάζοντας στοίβες hBN / graphene / hBN (hBN: hexagonal Boron-Nitride) μέσω της τεχνικής dry etching. Στο σχ. 2.5 δείχνουμε ένα τελειωμένο δείγμα.

Η σταθερά υπερπλέγματος α κυμαίνεται από 50 έως 250 nm. Η διάμετρος antidot d_α ήταν λιθογραφικά ορισμένη περίπου 40 nm, όμως λόγω του conical etching profile, η πραγματική διάμετρος στο επίπεδο του γραφενίου είναι μικρότερη. Μέσω επισκόπησης SEM, εκτιμήθηκε στην [78] περίπου 25 - 30 nm. Αυτό ξεκάθαρα δείχνει ότι υπάρχει σίγουρα μία ανακρίβεια στην διάμετρο και ότι ίσως δεν έχουν όλες οι τρύπες την ίδια διάμετρο. Συγκρινόμενες με την σταθερά πλέγματος του γραφενίου $a_0 = 0.224nm$ έχουμε $\alpha \approx 223 - 1,116 a_0$ και $d_\alpha \approx 111 - 133 a_0$ το οποίο καθιστά αδύνατη οποιαδήποτε περιγραφή με μοντέλα ισχυρής δέσμησης.

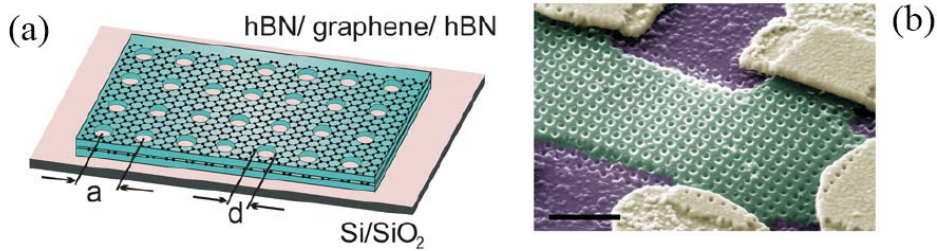
2.2.2 Τιμές Σημαντικών Μεγεθών

Στο σχ. 2.5 δείχνουμε δεδομένα από ένα δείγμα με περίοδο $\alpha = 200$ nm. Από την απόκριση πύλης της αγωγιμότητας σε μηδέν πεδίο $B = 0$ (σχ. 2.6(a)) κανείς μπορεί να μετρήσει μία *φαινόμενη ευκινήσια πεδίου* μ σύμφωνα με την φόρμουλα:

$$\sigma = n_s e \mu \quad (2.3)$$

όπου n_s είναι η (πειραματική) πυκνότητα φορέων. Μία γραμμική προσαρμογή δίνει την τιμή $\mu = 35,000 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$.

Στο απλούστερο μοντέλο, η ευκινήσια μπορεί να συνδεθεί με την *φαινόμενη μέση ελεύθερη διαδρομή* ως $\ell_m = \frac{v_F m^*}{e} \mu$ με v_F την ταχύτητα των φορέων και



Σχήμα 2.5: (a) Σκίτσο του πλέγματος των antidots σε μία ετερο-δομή hBN/graphene/hBN. Το πλέγμα antidots έχει περίοδο α από 50 έως 250 nm, και διάμετρο antidot d_α περίπου 25–30 nm. (b) False-color scanning electron micro-graph ενός δείγματος με $\alpha = 100$ nm. Εδώ, η ετερο-δομή είναι με πράσινο, οι επαφές Cr/Au με κίτρινο-γκρι, και το υπόστρωμα Si/SiO₂ με μωβ. Κλίμακα μήκους: 500 nm. Σχήμα από αναφ. [78].

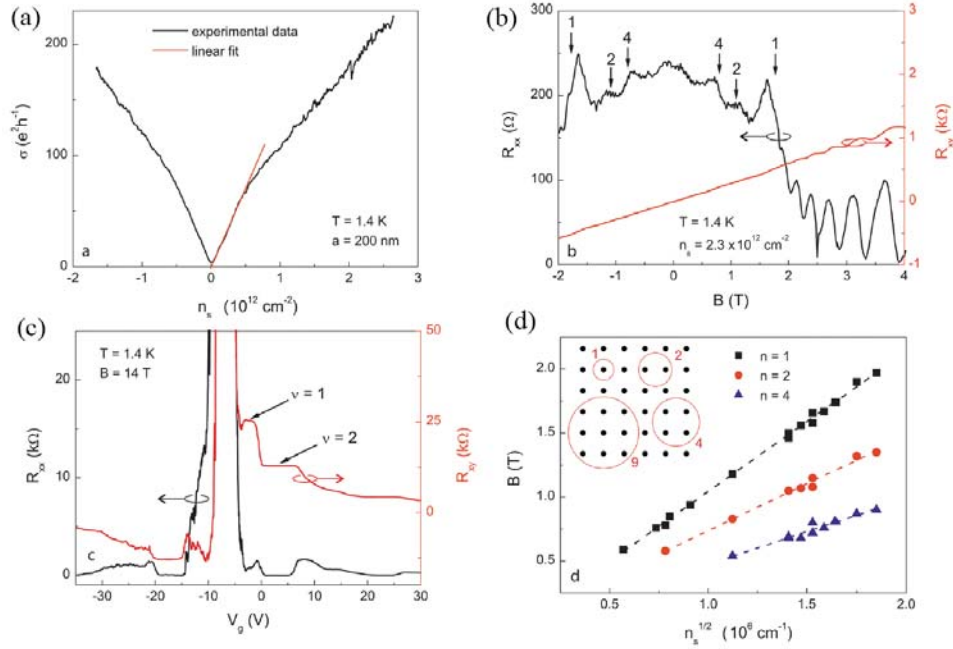
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2. ΒΑΛΛΙΣΤΙΚΗ ΜΑΓΝΗΤΟΜΕΤΑΦΟΡΑ ΣΤΟ ΓΡΑΦΕΝΙΟ

m^* την ενεργό μάζα. Υποτίθεται ότι μετά από κάθε συμβάν σκέδασης η ταχύτητα του ηλεκτρονίου είναι τυχαία έτσι ώστε $\langle \vec{v} \rangle = 0$ ακριβώς μετά από το συμβάν. Έπειτα, το ηλεκτρόνιο επιταχύνεται ομογενώς από το ηλεκτρικό πεδίο έως το επόμενο συμβάν σκέδασης. Για το γραφένιο, στην προσέγγιση Dirac, η ενεργός μάζα m^* δίνεται από την εξ. 1.58 και οπότε η μέση διαδρομή είναι:

$$\ell_m = \frac{\hbar}{e} \sqrt{\pi n_s \mu} . \quad (2.4)$$

Για συγκέντρωση $n_s = 2.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ αυτό αντιστοιχεί σε μέση ελεύθερη διαδρομή $\ell_m = 620 \text{ nm}$.

Για την έρευνά μας, σημαντική είναι η ενδογενής μέση ελεύθερη διαδρομή ℓ_i ,



Σχήμα 2.6: (a) Εξάρτηση πύλης της ειδικής αγωγιμότητας του επιπέδου του δείγματος με $a = 200 \text{ nm}$. Το γραμμικό φिट δίνει μια εμφανής κινητικότητα $\mu = 35,000 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$. (b) Μαγνήτο- και Hall-αντίσταση. Τα βέλη δείχνουν τιμές μαγνητικού πεδίου που αναμένονται κορυφές ισομετρίας, σαν αυτές που αναφέρθηκαν στην εν. 2.1.3. Η λεπτή υφή στην R_{xx} δεν είναι θόρυβος αλλά ταλαντώσεις φάσεις (phase-coherent oscillations) [78] που εξαφανίζονται σε υψηλές θερμοκρασίες. (c) Εξάρτηση πύλης των R_{xx} και R_{xy} σε $B = 14 \text{ T}$, δείχνοντας ξεκάθαρα $\nu = 1$ κβαντικά πλατό Hall, το οποίο φαίνεται μόνο σε δείγματα υψηλής κινητικότητας. (d) Τιμές μαγνητικού πεδίου των τριών κορυφών ισομετρίας οι οποίες αυξάνονται με την ρίζα της πυκνότητας φορέων, επιβεβαιώνοντας την κλασσική τους φύση. Σχήμα από αναφ. [78].

δηλαδή η ελεύθερη διαδρομή του δείγματος χωρίς να υπήρχε το ADSL. Μία μέθοδος για τον υπολογισμό της έχει αναπτυχθεί από τους Ishizaka και Ando στα [80, 81, 82]. Για τετραγωνικό υπερπλέγμα, η ελεύθερη διαδρομή μπορεί να υπολογιστεί υποθέτοντας antidots σκληρών τοίχων (άπειρα απότομα). Σε μαγνητικό πεδίο $B = 0$ μπορούμε να υπολογίσουμε την μέση ελεύθερη διαδρομή μόνο λόγω του ADSL ως:

$$\ell_\alpha = \frac{3\alpha^2}{d_\alpha} . \quad (2.5)$$

Με τον κανόνα του Matthiessen, το φαινόμενο (συνολικό) mean free path (MFP) συνδέεται με τα άλλα δύο ως:

$$\frac{1}{\ell_m} = \frac{1}{\ell_i} + \frac{1}{\ell_\alpha} . \quad (2.6)$$

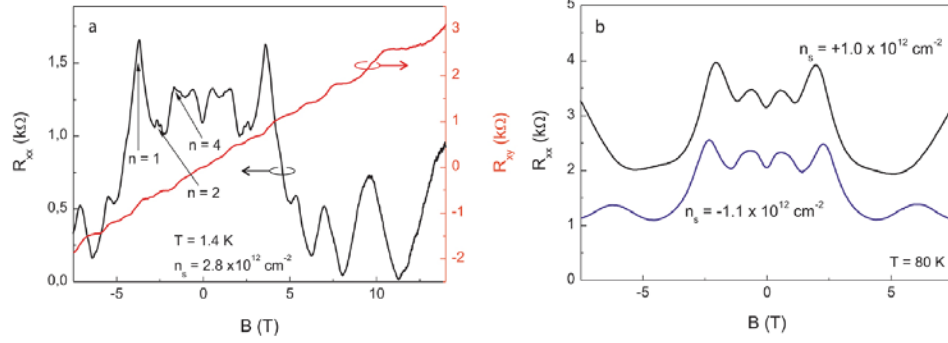
Για το δείγμα του σχ. 2.6 όπου $\alpha = 200$ nm και $d_\alpha \approx 25 - 30$ nm, υπολογίζουμε $\ell_i = 1400$ nm. Σημειώστε πως για να δει κανείς κορυφές ισομετρίας που περικλείουν 4 ή παραπάνω antidots, ένα ενδογενές MFP που καλύπτει αρκετές σταθερές υπερπλέγματος είναι απαραίτητο. Συγκρίνοντας διάφορα πειράματα με μοντέλα (με Νευτώνεια μηχανική), οι συγγραφείς του [78] καταλήγουν ότι το ενδογενές MFP των δειγμάτων τους πρέπει να είναι τουλάχιστον 4-7 σταθερές υπερπλέγματος.

Η υψηλή ποιότητα του δείγματος επιβεβαιώνεται περαιτέρω στο σχ. 2.6(d) όπου υπάρχει ποσοτική επιβεβαίωση της σχετικιστικής προσέγγισης Dirac. Οι κορυφές της μαγνήτο-αντίστασης σχεδιάζονται έναντι της πυκνότητας φορέων. Όχι μόνον είναι ξεκάθαρο ότι η σχετικιστική προσέγγιση είναι σωστή και ότι η ορμή (βλ εξ. (2.2)) είναι ανάλογη της ρίζας της συγκέντρωσης, αλλά ποσοτικοί υπολογισμοί δείχνουν ότι η φόρμουλα περιέχει σωστά τον εκφυλισμό λόγο σπιν και λόγο κοιλάδας [78].

2.2.3 Πείραμα Μαγνήτο-Μεταφοράς

Στο σχ. 2.7 δείχνουμε μία άλλη μέτρηση που έγινε στο [78]. Σε αυτό το σετ, οι κορυφές της μαγνήτο-αντίστασης είναι πολύ πιο προφανείς. Το δείγμα είχε $\alpha = 100$ nm και $n_s = 2.8 \times 10^{12}$ cm⁻². Δεδομένου ότι υπάρχουν οι προφανείς κορυφές για $n = 1$, $n = 2$ και $n = 4$ antidots και με σύγκριση με προηγούμενως αποτελέσματα για τα 2DEGs οι συγγραφείς καταλήγουν ότι ενδογενής μέση ελεύθερη διαδρομή πρέπει να είναι τουλάχιστον 340 - 400nm για το συγκεκριμένο δείγμα [78, 81, 82].

Η καλή ανάλυση της $n = 2$ κορυφής επιβεβαιώνει το εκτιμώμενο κλάσμα $d_\alpha/\alpha \leq 0.3$ επειδή αυτή η κορυφή φαίνεται μόνο για μικρές τιμές της (ενεργής) διαμέτρου antidot. Η δομή της αντίστασης Hall σε μαγνητικά πεδία κοντά στο 0 είναι πολύ λιγότερο έντονη σε σχέση με τα πειράματα 2DEG. Στο κεφ. 3 θα



Σχήμα 2.7: (α) Μαγνήτο- και Hall- αντίσταση από δείγμα με $\alpha = 100$ nm. Οι τρεις καλώς ορισμένες κορυφές αντιστοιχούν σε τροχιές γύρω από 1, 2, και 4 antidots. (β) R_{xx} σε παρόμοια πυκνότητα ηλεκτρονίων και οπών. Εδώ, $T = 80$ K ώστε να φαίνονται τα κλασσικά χαρακτηριστικά καλύτερα. Δεν υπάρχει σχεδόν καμία διαφορά μεταξύ αυτών των γραφισμάτων, αποδεικνύοντας ότι το δυναμικό προφίλ είναι το ίδιο για οπές και ηλεκτρόνια. Σχήμα από αναφ. [78].

επιχειρηματολογήσουμε ότι αυτή η διαφορά ίσως οφείλεται σε φαινόμενα edge roughness.

2.3 Θεωρητικό Μοντέλο για Antidots

Ο σκοπός αυτής της εργασίας είναι η δημιουργία ενός φυσικού μοντέλου που μπορεί να προσομοιώσει τα πειράματα με ακρίβεια. Βασισμένοι σε αυτό το μοντέλο μπορούμε έπειτα να επεκτείνουμε την γνώση μας για την βαλλιστική μεταφορά στο γραφένιο και να κάνουμε προβλέψεις για παραμέτρους και καταστάσεις που δεν έχουν ακόμη εξερευνηθεί σε πειράματα.

Το μοντέλο μας θα βασιστεί στη κλασσική μηχανική, λόγω της επιτυχίας του μοντέλου FGK για την περίπτωση του 2DEG. Αυτό θα είναι το σημείο εκκίνησης. Φυσικά, πολλές περαιτέρω προσαρμογές θα γίνει αποκλειστικά για το γραφένιο, σε συμφωνία με τα αποτελέσματα του κεφ. 1. Επιπλέον, θα κάνουμε ακόμη περισσότερες προσαρμογές οι οποίες ανεβάζουν την πολυπλοκότητα του μοντέλου, βασισμένοι στην συγκεκριμένη πειραματική φύση των antidots σε γραφένιο.

Χαμιλτονιανή

Η ποιο γενική μορφή της Χαμιλτονιανής που θα χρησιμοποιήσουμε για να παράξουμε κλασσικές τροχιές, είναι η δισδιάστατη μορφή:

$$\mathcal{H}(x, y, P_x, P_y) = \mathcal{K}(P_x, P_y) + \mathcal{U}(x, y) \quad (2.7)$$

όπου $\mathbf{P}$ είναι η γενικευμένη ορμή, $\mathcal{K}$ η κινητική ενέργεια και $\mathcal{U}$ η δυναμική ενέργεια του σωματιδίου. Η τελευταία θα περιλαμβάνει το δυναμικών των antidots, καθώς και οποιοδήποτε άλλο δυναμικό θελήσουμε, όπως για παράδειγμα τοιχώματα μπιλιάρδου, εντοπισμένες καταστάσεις άκρων κ.α..

2.3.1 Κινητική Ενέργεια

Η κινητική ενέργεια της Χαμιλτονιανής πρέπει να ανακλά ξεκάθαρα την σχέση διασποράς για τιμές της ενέργειας Φέρμι κοντά σε αυτές που χρησιμοποιούνται στα πειράματα. Όπως συζητήσαμε αναλυτικά στο κεφ. 1, για μικρές τιμές της ενέργειας Φέρμι (ή ισοδύναμα, μικρές συγκεντρώσεις φορέων), η σχέση διασποράς προσεγγίζεται με μεγάλη ακρίβεια από $\epsilon(\mathbf{k}) = \hbar v_F |\mathbf{k}|$. Επομένως, είναι σαφές ότι για την κλασσική δυναμική, η κινητική ενέργεια πρέπει να είναι αυτή ενός υπερ-σχετικιστικού σωματιδίου, δηλαδή:

$$\mathcal{K}_r = \sqrt{v_F^2 (P_x^2 + P_y^2)} . \quad (2.8)$$

Στην εξ. (2.8) δεν υπάρχει κανένας όρος μάζας m . Σε κάποιες θεωρητικές (κβαντικές) προσεγγίσεις, ο όρος της μάζας είναι μηδέν στο γραφένιο και τείνει στο άπειρο ακριβώς έξω από τις άκρες του υλικού.

Προσπαθούμε να μοντελοποιήσουμε τα antidots, τα οποία είναι τρύπες που έχουν χαραχθεί στο επίπεδο του γραφενίου. Προφανώς, το πραγματικό σύστημα έχει πάρα πολλές άκρες στις οποίες τα ηλεκτρόνια αλληλεπιδρούν και κβαντικά φαινόμενα λαμβάνουν χώρα. Παρόλα αυτά, δεν θα συμπεριλάβουμε κάποιον όρο μάζας στο μοντέλο μας. Έναντι αυτού, θα υποθέσουμε ότι το ενεργό μας δυναμικό μπορεί να καλύψει κάποια από αυτά τα φαινόμενα, τουλάχιστον στην περιοχή της βαλλιστικής μεταφοράς.

Όταν κάναμε την ανάπτυξη της σχέσης διασποράς (εν. 1.2.1) για να καταλήξουμε στην ενεργή σχετικιστική Χαμιλτονιανή, αναφέραμε ότι το κυματόνιο $\mathbf{k}$ μετράται από το $\xi \cdot \mathbf{K}$ σημείο, ανάλογα την κοιλάδα που έγινε η ανάπτυξη (με ξ να είναι το ψευδοσπιν κοιλάδας). Θα προσπαθήσουμε να συμπεριλάβουμε αυτό το γεγονός στο μοντέλο μας, έτσι ώστε να αφήσουμε χώρο για μελλοντικές βελτιώσεις. Σύμφωνα με τον προσανατολισμό zigzag και απουσία μαγνητικού πεδίου έχουμε:

$$P_x = \hbar q_x + \xi \hbar K , \quad P_y = \hbar q_y \quad (2.9)$$

με $K = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$ όπως ορίστηκε στο κεφ. 1 (a είναι η απόσταση άνθρακα-άνθρακα, $a \approx 1.42 \text{ \AA}$).

Ανυσματικό Δυναμικό

Θεωρούμε μαγνητικό πεδίο σταθερό και κάθετο στο επίπεδο του γραφενίου, $\mathbf{B} = B\hat{z}$. Η κατάλληλη βαθμίδα για το ανυσματικό δυναμικό είναι η αναλλοίωτη στις περιστροφές, που δίνεται από:

$$\mathbf{A} = -\frac{\mathbf{r} \times \mathbf{B}}{2} = \frac{1}{2}(-yB, xB, 0) . \quad (2.10)$$

Όταν υπάρχει μαγνητικό πεδίο, η γενικευμένη ορμή $\mathbf{P}$ συνδέεται με την κανονική ορμή $\mathbf{p}$ ως:

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} - e\mathbf{A} \quad (2.11)$$

με e το φορτίο του ηλεκτρονίου. Η γενικευμένη ορμή συνδέεται άμεσα με την ταχύτητα του σωματιδίου. Για ένα υπερ-σχετικιστικό σωματίδιο, η ταχύτητα έχει διεύθυνση πάντα ίδια με την γενικευμένη ορμή, και μέτρο ίσο με την “ενεργός ταχύτητα του φωτός” που για το γραφένιο είναι η ταχύτητα Φέρμι.

Συμπεριλαμβάνοντας όλα αυτά τα χαρακτηριστικά, η κινητική ενέργεια γίνεται:

$$\mathcal{K}_r = v_F \sqrt{\left(p_x + \xi \hbar K + \frac{eyB}{2}\right)^2 + \left(p_y - \frac{exB}{2}\right)^2} . \quad (2.12)$$

Το ψευδοσπιν κοιλάδας ξ μπορεί να χρησιμοποιηθεί ώστε να συμπεριλαμβάνει φαινόμενα σκέδασης μεταξύ κοιλάδων. Στην παρούσα φάση της εργασίας αυτής, δεν θα συμπεριλάβουμε αυτά τα φαινόμενα. Επομένως θέτουμε $K = 0$ για όλη την υπόλοιπη ανάλυση που γίνεται σε αυτό και στο επόμενο κεφάλαιο. Προτείνουμε παρόλα αυτά κάποιες τροποποιήσεις οι οποίες λαμβάνουν υπ’ όψιν τις κοιλάδες στις προοπτικές (κεφ. 4).

2.3.2 Δυναμικό Antidot

Για την δυναμική ενέργεια θα συμπεριλάβουμε το συνεχές δυναμικό που προτάθηκε στην αναφ. [77], το οποίο αναφέρεται και ως FGK model στην βιβλιογραφία [73]. Για τετράγωνο πλέγμα από antidots, έχει την μορφή:

$$\mathcal{U}(x, y) = U \left[\cos\left(\frac{\pi x}{\alpha}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{\alpha}\right) \right]^\beta \quad (2.13)$$

όπου α είναι η σταθερά του υπερπλέγματος, β είναι ένας άρτιος ακέραιος (παράμετρος “ομαλότητας”) και U το πλάτος του δυναμικού. Για δεδομένη ομαλότητα, το πλάτος του δυναμικού προσδιορίζεται έτσι ώστε η ενεργός διάμετρος των antidots d_α στην ενέργεια Φέρμι να είναι όση είναι και στην πειραματική διάταξη. Επομένως, ο παράγοντας του δυναμικού υπολογίζεται ως:

$$\frac{U}{E_F} = \frac{1}{\cos^\beta\left(\frac{\pi d_\alpha}{2\alpha}\right)} . \quad (2.14)$$

Η ομαλότητα του δυναμικού μπορεί να μεταβληθεί πολύ. Από $\beta = 4$ που αντιστοιχεί σε πολύ ομαλό προφίλ δυναμικού, μέχρι και $\beta = 64$ το οποίο είναι το όριο του μοντέλου φλίπερ. Στην αναφ. [78] οι συγγραφείς των πειραμάτων υποστηρίζουν ότι το δυναμικό πρέπει να είναι πολύ απότομο.

Στις προσομοιώσεις μας (κεφ. 3) βρίσκουμε καλύτερη αντιστοίχιση για ενδιάμεσες τιμές β . Αυτό μπορεί να αποδοθεί στην ύπαρξη εντοπισμένων καταστάσεων άκρης γύρω από τα antidots, που μόνο πρόσφατα μελετήθηκαν θεωρητικά στο [71]. Θα λάβουμε υπ' όψιν αυτό το γεγονός και θα περιορίσουμε την παράμετρο ομαλότητας ως $\beta \in [8, 16]$. Με αυτόν τον τρόπο θα έχουμε ένα αρκετά απότομο δυναμικό όμως πάντα θα υπάρχει μία ομαλότητα λόγω των εντοπισμένων ρευμάτων ηλεκτρονίων τα οποία δρουν σαν “ελαφριοί σκεδαστές” γύρω από τα antidots.

2.4 Τροχιές στον Χώρο Φάσεων

Η ειδική σχετικότητα επιτάσσει ότι άμαζα σωματίδια πρέπει να κινούνται πάντοτε με σταθερή ταχύτητα, την ταχύτητα του φωτός. Στην περίπτωση μας, η c αντικαταστέεται από την ενεργή ταχύτητα Φέρμι, που είναι περίπου 300 φορές μικρότερη. Πρωτού υπολογίσουμε ειδικές αντιστάσεις, θα ήταν σοφό να μελετήσουμε την εξέλιξη του συστήματος στον χρόνο.

2.4.1 Αδιάστατες Εξισώσεις

Ξεκάθαρα το σύστημα υπό εξέταση είναι χαοτικό και δεν μπορεί να λυθεί αναλυτικά. Θα λύσουμε το σύστημα αριθμητικά, βασισμένοι στον αλγόριθμο Dormer Prince Runge Kutta πέμπτης τάξης [89]. Για να λύσει κανείς ένα πρόβλημα αριθμητικά σε υπολογιστικό cluster, πρέπει να έχει ορίσει αδιάστατες μεταβλητές. Η Χαμιλτονιανή του συστήματος είναι η άθροιση των εξ. (2.12) και (2.13).

Αυτή η Χαμιλτονιανή έχει ήδη τρεις ενδογενείς μονάδες μέτρησης. Η πρώτη είναι η ενέργεια Φέρμι E_F η οποία είναι η (σχεδόν σταθερή) ενέργεια με την οποία κινούνται οι φορείς κατά την πραγματοποίηση του πειράματος. Αυτή σχετίζεται με την πυκνότητα των φορέων (εν. 1.4) και θέτει την μονάδα μέτρησης την ενέργειας. Η δεύτερη μονάδα μέτρησης είναι η ταχύτητα Φέρμι v_F και θέτει τις μονάδες της ταχύτητας. Η τελευταία ποσότητα είναι η απόσταση διάταξης των antidots α και θέτει τις μονάδες μέτρησης της θέσης.

Ορίζοντας τις παραπάνω τρεις μονάδες, έχουμε ορίσει αυτομάτως μονάδα μέτρησης για την ορμή: $p_F = E_F/v_F$ που ονομάζουμε Φέρμι ορμή. Επιπλέον έχουμε ορίσει μονάδα χρόνου, $t_\alpha = \alpha/v_F$ η οποία αντιστοιχεί στον χρόνο που χρειάζεται στα σωματίδια να διανύσουν απόσταση μεταξύ δύο antidots και την ονομάζουμε ενδογενής χρόνος. Το μόνο που μένει να ορίσουμε είναι μία κατάλληλη μονάδα

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2. ΒΑΛΛΙΣΤΙΚΗ ΜΑΓΝΗΤΟΜΕΤΑΦΟΡΑ ΣΤΟ ΓΡΑΦΕΝΙΟ

για τον μαγνητικό πεδίο. Με αυτό τον σκοπό ορίζουμε:

$$B_0 = \frac{2p_F}{e\alpha} \approx 19.5 \left(\frac{E_F}{1\text{eV}} \right) \left(\frac{100\text{nm}}{\alpha} \right) \text{ Tesla} \quad (2.15)$$

το οποίο είναι το μαγνητικό πεδίο που αντιστοιχεί σε ακτίνα κυκλοτρόνου $\alpha/2$ για έναν φορέα που κινείται με ορμή p_F . Σε μία κλασσική τροχιά αυτό το μαγνητικό πεδίο εσωκλείνει τέλεια ένα μοναδικό antidot. Στον ακόλουθο πίνακα συνοψίζουμε τις μονάδες μέτρησης και δίνουμε σε κάθε μία, μία χαρακτηριστική τιμή σύμφωνα με το S.I., βασισμένοι σε πειραματικά δεδομένα.

Πίνακας 2.1: Μονάδες μέτρησης του σχετικιστικού συστήματος.

Quantity	Unit of Measurement	Formula and Value
Position	Antidot spacing	$\alpha \approx 10^{-7} \text{ m}$
Velocity	Fermi velocity	$v_F := 3ta/2\hbar \approx 10^6 \text{ m/s}$
Energy	Fermi energy	$E_F \approx \hbar v_F \sqrt{\pi n_s} \approx 0.2 \text{ eV}$
Momentum	Fermi momentum	$p_F := E_F/v_F \approx 7.5 \cdot 10^{-25} \frac{\text{kg}\cdot\text{m}}{\text{s}}$
Time	Intrinsic timescale	$t_\alpha := \alpha/v_F \approx 10^{-13} \text{ s}$
Magnetic Field	1 Antidot Cyclotron	$B_0 := 2p_F/e\alpha \approx 4 \text{ Tesla}$

Θεωρώντας ότι οι φορείς κινούνται με σταθερή ενέργεια, από αυτό το σημείο και έπειτα θα χρησιμοποιούμε πάντοτε αυτές τις μονάδες μέτρησης. Με βάση αυτό, η (τώρα αδιάστατη) Χαμιλτονιανή του συστήματος είναι¹:

$$\mathcal{H} = \sqrt{(p_x + yB)^2 + (p_y - xB)^2} + U [\cos(\pi x) \cos(\pi y)]^\beta \quad (2.16)$$

με το πλάτος του δυναμικού U να μετράται σε σχέση με την ενέργεια Φέρμι. Αυτή συνδέεται με την διάμετρο των antidots d_a (η οποία μετράται σε μονάδες του α) ως:

$$U = \frac{1}{\cos^\beta\left(\frac{\pi d_a}{2}\right)}. \quad (2.17)$$

Λύνοντας το σύστημα αριθμητικά, η υπολογισμένη τιμή της $\mathcal{H}$ πρέπει να είναι πάντα κοντά στην μονάδα. Αυτό θα εξυπηρετήσει και ως έλεγχος ακρίβειας του αριθμητικού ολοκληρωτή.

¹Χρησιμοποιούμε τα ίδια σύμβολα, δλδ. x, p_y κτλ. αλλά όλα αναφέρονται σε αδιάστατες μεταβλητές που μετρούνται ως προς τις αντίστοιχες μονάδες μέτρησης.

Εξισώσεις Κίνησης

Από την εξ. (2.16) οι εξισώσεις κίνησης είναι:

$$\dot{x} = \frac{p_x + yB}{\sqrt{(p_x + yB)^2 + (p_y - xB)^2}} := v_x \quad (2.18)$$

$$\dot{y} = \frac{p_y - xB}{\sqrt{(p_x + yB)^2 + (p_y - xB)^2}} := v_y \quad (2.19)$$

$$\dot{p}_x = \frac{B(p_y - xB)}{\sqrt{(p_x + yB)^2 + (p_y - xB)^2}} + U\beta\pi \sin(\pi x) [\cos(\pi x) \cos(\pi y)]^{\beta-1} \quad (2.20)$$

$$\dot{p}_y = \frac{-B(p_x + yB)}{\sqrt{(p_x + yB)^2 + (p_y - xB)^2}} + U\beta\pi \sin(\pi y) [\cos(\pi x) \cos(\pi y)]^{\beta-1} \quad (2.21)$$

όπου έχουμε ορίσει τις συνιστώσες ταχύτητας του σωματιδίου ως v_x και v_y αντίστοιχα. Όπως προαναφέρθηκε, δεν θα συμπεριλάβουμε τα ξ και K στις ακόλουθες προσομοιώσεις (περισσότερα στις προοπτικές).

2.4.2 Λύσεις Εξισώσεων στο Τοπίο Δυναμικού

Λύνοντας αριθμητικά τις εξ. (2.18) - (2.21) μπορούμε να δούμε την τροχιά του συστήματος στο επίπεδο $x - y$. Μία τέτοια τροχιά δείχνεται στο σχ. 2.8. Για να παραγάγουμε μια τροχιά που ανήκει σωστά στο αδιάστατο σύστημα, πρέπει να επιλέξουμε κατάλληλα τις αρχικές συνθήκες. Για αυτόν τον λόγο, πρέπει να δώσουμε στον αριθμητικό ολοκληρωτή 4 αριθμούς, που αντιστοιχούν στις μεταβλητές των εξ. (2.18) - (2.21). Όμως, οι αρχικές συνθήκες πρέπει να είναι τέτοιες ώστε η τιμή της Χαμιλτονιανής (2.16) να είναι ακριβώς 1.

Για να είμαστε σίγουροι ότι η παραπάνω συνθήκη ικανοποιείται πάντοτε, παρέρχουμε στον λύτη τρεις τυχαίους αριθμούς: x_0 , y_0 και θ_0 . Οι πρώτοι δύο είναι η αρχική θέση του σωματιδίου, επιλεγμένοι ώστε η αντίστοιχη δυναμική ενέργεια να είναι $\mathcal{U}(x_0, y_0) < 1$. Ο τελευταίος αριθμός $\theta_0 \in [-\pi, \pi]$ αντιστοιχεί στην αρχική γωνία του γενικευμένου ανύσματος ορμής $\mathbf{P}$ (και όχι της κανονικής ορμής $\mathbf{p}$). Για το σχετικιστικό μας σύστημα, αυτή η γωνία ταυτίζεται με την αρχική γωνία ταχύτητας. Οι τιμές $p_{x,0}$ και $p_{y,0}$ καθορίζονται μονοσήμαντα με βάση τα θ_0 και (x_0, y_0) . Στα σχ. 2.8 και 2.9 δείχνουμε δύο τροχιές που έχουν εξελιχθεί για διαφορετικές τιμές του B .

Τροχιές Ισομετρίας

Το δυναμικό τοπίο της εξ. (2.13) που φαίνεται στο σχ. 2.8 μπορεί να φιλοξενήσει κάποιες ισομετρικές τροχιές σε συγκεκριμένα μαγνητικά πεδία. Αυτές παρου-

σιάζονται στο σχ. 2.10. Τα μαγνητικά πεδία που αυτές εμφανίζονται συνδέονται με τις ακτίνες τους r_n οι οποίες εσωκλείουν n antidots ως:

$$B_n = (B_0) \frac{r_n}{r_0}, \quad r_0 := 0.5. \quad (2.22)$$

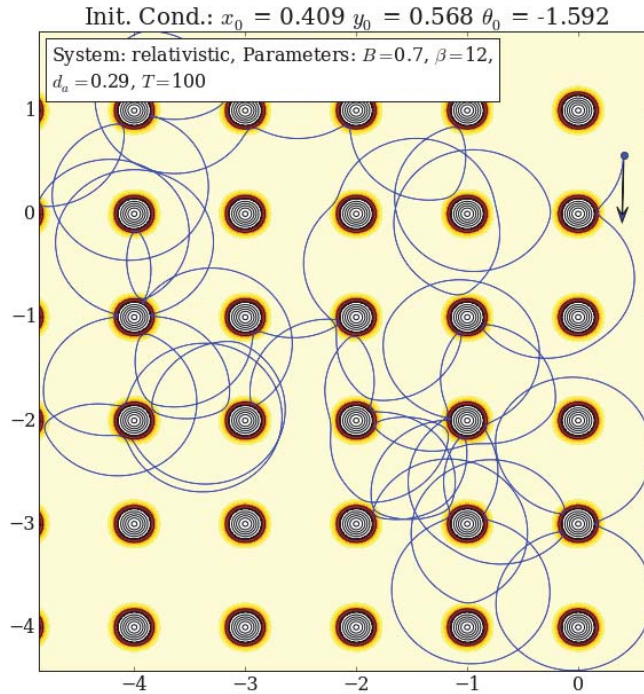
Θα δούμε από τις προσομοιώσεις μας πως αυτά τα μαγνητικά σημεία παίζουν σημαντικό ρόλο στις καμπύλες των ειδικών αντιστάσεων.

Όσο πιο ομαλό είναι το δυναμικό ($\beta \leq 8$) τόσο πιο δύσκολο είναι για τροχιές κυκλοτρόνου με $n \geq 9$ να υπάρξουν. Για αυτές τις τιμές β , μόνο $n = 1, 4$ και με δυσκολία $n = 2$ κορυφές φαίνονται στα πειράματα και στις προσομοιώσεις.

2.4.3 Τομές Poincaré

Ένα από τα καλύτερα εργαλεία για την ανάλυση του χώρου φάσεων είναι οι τομές Poincaré (Poincaré Surfaces of Section - PSOS). Φτιάχνοντας μία PSOS μπορούμε να μελετήσουμε τις περιοδικές και σχεδόν-περιοδικές τροχιές, εάν υπάρχουν, την χαοτική κίνηση καθώς και φαινόμενα stickiness που μπορεί να την διέπουν.

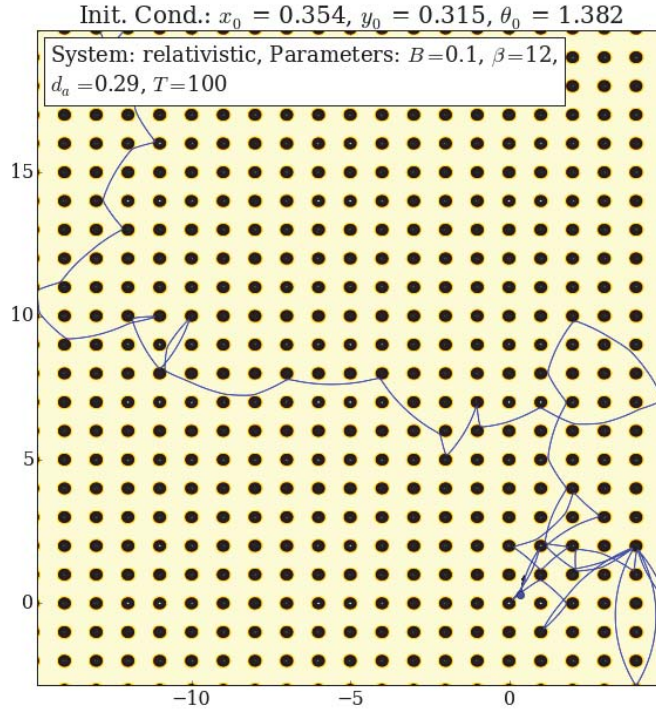
Οι PSOS θα βρίσκονται στο επίπεδο $y - v_y$. Για να τις δημιουργήσουμε λαμβάνουμε τις τιμές των y και v_y σε θέσεις x που ορίζονται ως $[x = 0(\text{mod } 1)]$ and



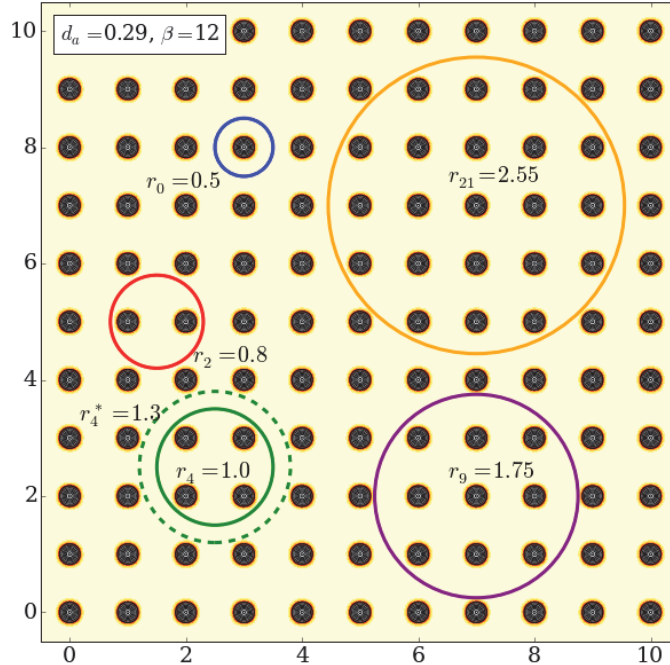
Σχήμα 2.8: Μία τυπική χαοτική τροχιά που έχει εξελιχθεί για $T = 100$ μονάδες χρόνου, για τιμές παραμέτρων όπως φαίνονται στο ένθετο του σχήματος. Οι αρχικές συνθήκες της τροχιάς φαίνονται στον τίτλο της εικόνας, εντός 3 δεκαδικών ψηφίων. Το βέλος (αυθαίρετο μέγεθος) δείχνει την αρχική διεύθυνση της ταχύτητας του σωματιδίου.

2.4. ΤΡΟΧΙΕΣ ΣΤΟΝ ΧΩΡΟ ΦΑΣΕΩΝ

Σχήμα 2.9: Μία τυπική χαοτική τροχιά που έχει εξελιχθεί για $T = 100$ μονάδες χρόνου, για τιμές παραμέτρων όπως φαίνονται στο ένθετο του σχήματος. Οι αρχικές συνθήκες της τροχιάς φαίνονται στον τίτλο της εικόνας, εντός 3 δεκαδικών ψηφίων. Το βέλος (αυθαίρετο μέγεθος) δείχνει την αρχική διεύθυνση της ταχύτητας του σωματιδίου.



Σχήμα 2.10: Τροχιές κυκλοτρόνου που εσωκλείουν $n = 1, 2, 4, 9$, ή 21 antidots, κάθε μία με ακτίνα r_n .



$v_x > 0$]. Αυτές οι θέσεις αντιστοιχούν σε διαβάσεις από την κάθετη γραμμή που συνδέει τα antidots. Η τιμή της v_x προσδιορίζεται μονοσήμαντα από τις άλλες 3 ποσότητες και δεν χρειάζεται να την υπολογίσουμε. Για να βελτιώσουμε περαιτέρω την PSOS, η μεταβλητή y λαμβάνεται και αυτή με mod 1, λόγω της χωρικής περιοδικότητας της δυναμικής του συστήματος.

Στο σχ. 2.11 παρουσιάζουμε 2 PSOS δημιουργημένες με την διάδοση N τροχιών για T μονάδες χρόνου. Η πρώτη (σχ. 2.11(a)) είναι σε μαγνητικό πεδίο μακριά από ένα ισομετρικό. Η δεύτερη είναι στην κύρια ισομετρική κορυφή με $B = 1$. Στην πρώτη περίπτωση, μόνο χαοτική κίνηση μπορεί να επιλυθεί. Εν αντιθέσει, στην δεύτερη περίπτωση υπάρχει μία τεράστια νησίδα σταθερότητας.

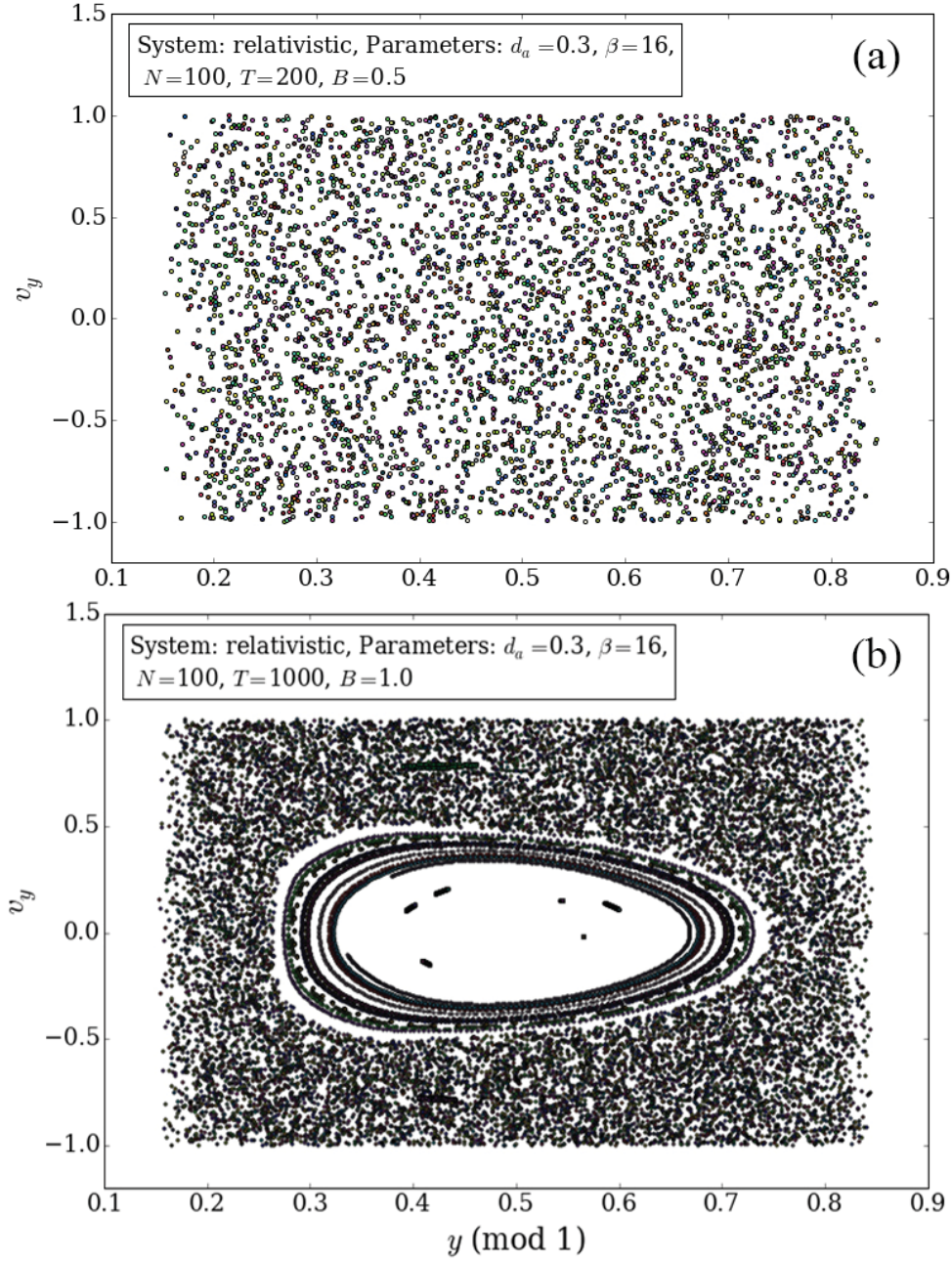
Το σχ. 2.11(b) είναι μία τυπική PSOS σε μαγνητικό πεδίο $B = 1$. Εκθέτει μία θάλασσα από χαοτική κίνηση γύρω από μία νησίδα κανονικής κίνησης με ένα ελλειπτικό σημείο ισορροπίας στο κέντρο της ($y = 0.5, v_y = 0$). Αυτό το σημείο αντιπροσωπεύει μία κίνηση κυκλοτρόνου ακτίνας $r = 1/2$ περιστρεφόμενο τέλεια γύρω από ένα μοναδικό antidot. Άλλες αδιατάραχτες τροχιές κυκλοτρόνου για διαφορετικά αρχικά (y, v_y) έχουν εξελιχθεί σε κίνηση πάνω σε αναλλοίωτους τόρους KAM [83, 84]. Αυτό είναι αποτέλεσμα μη γραμμικών συντονισμών μεταξύ των βαθμών ελευθερίας και είναι σύνηθες φαινόμενο σε Χαμιλτονιανά μη γραμμικά συστήματα [84]. Αυτές οι τροχιές, καλούμενες “οιονεί-περιοδικές” είναι κύκλοι που έχουν παραμορφωθεί ελαφρά από τα ομαλά τοίχοι του δυναμικού. Με αυτόν τον τρόπο μπορούν να συνεχίζουν να περιστρέφονται γύρω από ένα μοναδικό antidot για πάντα, χωρίς ποτέ να φεύγουν από την περιφέρειά του. Στην ακόλουθη ενότητα (2.5) θα δείξουμε ότι η πηγή των κορυφών της μαγνήτο-αντίστασης είναι το φαινόμενο “stickiness” των χαοτικών τροχιών γύρω από νησίδες σταθερότητας.

Μειώνοντας το B οδηγεί μία σειρά συντονισμών (νησίδων σταθερότητας) που ανήκουν σε τροχιές κυκλοτρόνου που περιστρέφονται γύρω από 1, 2, 4, 9 και 21 antidots. Οι αντίστοιχες νησίδες (δεν τις δείχνουμε εδώ) είναι μικρότερες από την κύρια στο $B = 1$.

2.5 Στοιχεία Τανυστή Αγωγιμότητας

Για να υπολογίσουμε τα στοιχεία του τανυστή ειδικής αγωγιμότητας, βασίζομαστε στον φορμαλισμό κατά Kubo [90] (ο οποίος είναι μία θεωρία γραμμικής απόκρισης). Θεωρώντας πολύ ασθενή ηλεκτρικά πεδία, η αγωγιμότητα ενός Χαμιλτονιανού συστήματος που εξελίσσεται στον χρόνο συνδέεται με την συνάρτηση συσχέτισης της ταχύτητας, παρόμοια με “θεώρημα” fluctuation-dissipation. Τα στοιχεία του τανυστή ειδικής αγωγιμότητας δίνονται από [80, 81]:

$$\sigma_{ij} \sim \int_0^\infty dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \int_0^\infty dt \int_{\Gamma(E)} d\Gamma \langle v_i(t) v_j(0) \rangle . \quad (2.23)$$



Σχήμα 2.11: (a) PSOS for non-commensurate magnetic field value. Only chaotic sea exists. (b) PSOS for commensurate magnetic field value. The integration of $T = 1000$ units of time is not sufficient to resolve the structure at the innermost quasi-periodic orbits of the PSOS.

Η πράξη $\int_{\Gamma} \langle \dots \rangle d\Gamma$ υποδεικνύει εξαγωγή μέσου όρου στον χώρο φάσεων. Το σύνολο $\Gamma(E)$ είναι μια 3D επιφάνεια ενσωματωμένη στον 4D χώρο φάσεων του συστήματος, και αντιστοιχεί σε ένα κέλυφος σταθερής ενέργειας $\mathcal{H} = E$. Η συνάρτηση $v_i(t)v_j(0)$ είναι η συνάρτηση συσχέτισης ταχύτητας-ταχύτητας. Όταν $i = j$ καλείται αυτο-συσχέτιση και έτερο-συσχέτιση αλλιώς. Η συνάρτηση $f(E)$ στο ολοκλήρωμα της ενέργειας είναι φυσικά η συνάρτηση κατανομής Φέρμι του συστήματος. Θεωρούμε ότι είμαστε σε 0 θερμοκρασία, μετατρέποντας την παράγωγο της κατανομής Φέρμι σε δ κατανομή. Κάτω από αυτήν την υπόθεση όλες οι ποσότητες αρκεί να υπολογιστούν μόνο στην ενέργεια Φέρμι².

Στην εξ. 2.23, οι ταχύτητες υπολογίζονται ολοκληρώνοντας μία δοσμένη Χαμιλτονιανή. Αυτή η $\mathcal{H}$ πρέπει να ανακλά με την μέγιστη δυνατή ακρίβεια την βαλλιστική δυναμική της πραγματικής συσκευής. Εφόσον ο φορμαλισμός κατά Kubo βασίζεται σε θεωρία γραμμικής απόκρισης, η Χαμιλτονιανή δεν περιλαμβάνει το ηλεκτρικό πεδίο.

2.5.1 Διαδικασίες Σκέδασης και Καρφισωμένες Τροχιές

Υπάρχουν δύο διορθώσεις που πρέπει να γίνουν στην έκφραση (2.23). Όπως είναι, η φόρμουλα περιγράφει βαλλιστική κίνηση απουσία προσμείξεων στην συσκευή. Φυσικά, αυτό δεν έρχεται ούτε καν κοντά στην πραγματικότητα, ιδίως για τα πειράματα με γραφένιο που έχουν πολύ μικρή ευκινησία. Στην πραγματικότητα υπάρχουν πολλές προσμείξεις και ακαθαρσίες οι οποίες προκαλούν μη-βαλλιστικές σκεδάσεις. Υποθέτοντας στατιστική ανεξαρτησία των γεγονότων σκέδασης, μπορούμε να τα θεωρήσουμε μία διαδικασία Poisson. Επομένως, η πιθανότητα να μην υπάρξει σκέδαση έως χρόνο t είναι $P(t) = \exp(-t/\tau)$ με τ να είναι ο μέσος χαρακτηριστικός χρόνος σκέδασης λόγω ατελειών. Αυτή η κλίμακα χρόνου προέρχεται από τα πειράματα μέσω της μέσης ελεύθερης διαδρομής ως $\tau = \ell_m/v_F$. Εφόσον ένα συμβάν σκέδασης καταστρέφει οποιαδήποτε συσχέτιση, το χρονικό ολοκλήρωμα της συνάρτησης συσχέτισης πρέπει να σταθμιστεί με αυτόν τον εκθετικό παράγοντα. Σταθμίζοντας με τον τρόπο αυτόν, καταλήγουμε στην ακόλουθη έκφραση για τα στοιχεία του ταυστή ειδικής αγωγιμότητας:

$$\sigma_{ij} \sim \int_0^\infty dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \int_0^\infty dt e^{-t/\tau} \int_{\Gamma(E)} d\Gamma \langle v_i(t)v_j(0) \rangle. \quad (2.24)$$

Χρειάζεται μία ακόμη τροποποίηση. Όταν μελετήσαμε τις PSOS είδαμε ότι κοντά σε ισομετρικά μαγνητικά πεδία, υπάρχουν μεγάλες νησίδες σταθερότητας.

²Τα πειράματα γίνονται σε θερμοκρασία 1.4 Kelvin. Σε αυτήν, η προσέγγιση βήματος είναι πάρα πολύ καλή. Εάν δεν κάναμε αυτή την προσέγγιση, ο χρόνος που θα χρειαζόταν για να παράξουμε ένα αποτέλεσμα θα μεγάλωνε τουλάχιστον 2 τάξεις μεγέθους, και θα ήταν αδύνατο να πραγματοποιηθεί ρεαλιστικά. Η παραγωγή ενός ζεύγους ειδικής αντίστασης χρειάζεται περίπου 1 ημέρα με την προσέγγιση βήματος.

Οι Fleischmann, Geisel and Ketzmerick έχουν αποδείξει στο [77] ότι τροχιές με αρχικές συνθήκες εντός της νησίδας σταθερότητας παραμένουν καρφίτσωμένες ακόμη και με την εφαρμογή μικρού εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου.

Εάν θεωρήσουμε το μοντέλο φλίπερ ($\beta \rightarrow \infty$), μία ισομετρική τροχιά κυκλοτρόνου, θα κινείται σαν βίδα, παράλληλα στο ηλεκτρικό πεδίο, έως ότου χτυπήσει ένα antidot (hard wall). Τότε θα ανακλαστεί και θα γίνει χαοτική. Αυτό όμως δεν συμβαίνει σε ομαλά δυναμικά ($\beta \leq 16$). Τροχιές που ξεκινούν μέσα σε νησίδες σταθερότητας, θα μείνουν καρφίτσωμένες σε αυτές λόγω της συνεχούς και ομαλής καμπύλωσης του δυναμικού, εφόσον το εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο είναι αρκούτως χαμηλό.

Ως συνέπεια, όταν γίνεται μέσος όρος στον χώρο φάσεων, μόνο χαοτικές τροχιές πρέπει να υπολογισθούν, διότι μόνο αυτές είναι υπεύθυνες για την αγωγιμότητα (οι καρφίτσωμένες τροχιές δεν μεταφέρουν ρεύμα). Εάν οι χαοτικές τροχιές που απαρτίζουν το σύνολο Γ_c καταλαμβάνουν ένα τμήμα g_c του ολικού χώρου φάσεων (σύνολο Γ), τότε η αγωγιμότητα θα είναι $\sigma = g_c \sigma_c$. Η συμπεριφορά του $1 - g_c$ έναντι του μαγνητικού πεδίου είναι πολύ απλή (δεν την δείχνουμε εδώ). Σε ισομετρικά μαγνητικά πεδία έχει μικρές κορυφές και είναι 0 για τις υπόλοιπες τιμές του B .

Με αυτήν την τροποποίηση και με την προσέγγιση 0 θερμοκρασίας, η τελική φόρμουλα για την αγωγιμότητα είναι:

$$\sigma_{ij} \sim g_c(B) \int_0^\infty dt e^{-t/\tau} \int_{\Gamma_c(E_F)} d\Gamma_c \langle v_i(t) v_j(0) \rangle. \quad (2.25)$$

2.5.2 Αποτελέσματα

Εφόσον τα στοιχεία του τανυστή της ειδικής αγωγιμότητας έχουν υπολογιστεί, είναι τετριμμένο να επιλύσουμε για τον τανυστή ειδικής αντίστασης, ο οποίος είναι ο αντίστροφος τανυστής της αγωγιμότητας: $(R_{ij})^{-1} = \sigma_{ij}$. Δεχόμενοι $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ και $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$, τα οποία είναι η υπόθεση ισοτροπικού συστήματος, έχουμε

$$R_{XX} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad R_{XY} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \quad (2.26)$$

Διαδικασία Εκτίμησης

Δίνουμε τώρα μία σύντομη περίληψη της διαδικασίας εκτίμησης που ακολουθείται για την παραγωγή των καμπύλων ειδικής αντίστασης. Αυτό γίνεται ώστε να δώσουμε την δυνατότητα αναπαραγωγής των αποτελεσμάτων μας από άλλους ερευνητές.

1. Ξεκινούμε με το να ορίσουμε τις αδιάστατες εξισώσεις του συστήματος (2.18)-(2.21) σε ένα προγραμματιστικό περιβάλλον (επιλέξαμε Python) συνοδευόμενες από έναν κατάλληλο αριθμητικό ολοκληρωτή. Επιλέξαμε τον Dormer-Prince 5th order Runge Kutta [89] με παραμέτρους τέτοιες ώστε το σφάλμα της ενέργειας να είναι μικρό: $\langle |\mathcal{H} - 1| \rangle \leq 10^{-3}$.
2. Ολοκληρώνουμε πολλές αρχικές συνθήκες που ικανοποιούν την $\mathcal{H} = 1$. Από αυτές, ελέγχουμε και κρατούμε μόνον αυτές που καταλήγουν σε χαοτικές τροχιές. Για τον έλεγχο αυτό μετράμε την μέγιστη απόσταση κάθε τροχιάς από το αρχικό της σημείο. Εάν αυτή είναι μεγαλύτερη από 2.5 φορές την ακτίνα κυκλοτρόνου, η τροχιά θεωρείται χαοτική (εφόσον δεν μπορούν να υπάρξουν οριακοί κύκλοι στα Χαμιλτονιανά συστήματα). Σε αυτό το σημείο μετρούμε επίσης τον αριθμό $1 - g_c$ που είναι οι καρφισωμένες τροχιές.
3. Υπολογίζουμε N χρονοσειρές ταχυτήτων ολοκληρώνοντας τις εξισώσεις κίνησης για T μονάδες το χρόνου σε συγκεκριμένες τιμές παραμέτρων.
4. Υπολογίζουμε τις συναρτήσεις συσχέτισης ταχύτητας με την χρήση του μετασχηματισμού Fourier. Όπως είναι γνωστό οι μετασχηματισμός Fourier της συσχέτισης είναι το γινόμενο των μετασχηματισμών Fourier των χρονοσειρών,

$$\mathcal{F}[C_{ij}] = \mathcal{F}[v_i]^* \cdot \mathcal{F}[v_j] \quad (2.27)$$

με $\mathcal{F}$ τον μετασχηματισμό Fourier και $*$ το μιγαδικό συζυγές. Εφόσον σε αυτό το σημείο χρησιμοποιούμε διακριτό μετασχηματισμό Fourier σε κάτι που είναι “κανονικά” μία συνεχής χρονοσειρά, πρέπει να είμαστε πολύ προσεκτικοί ώστε να ικανοποιούμε το θεώρημα Nyquist-Shannon Sampling Theorem και να είμαστε σίγουροι ότι τα προβλήματα του Bandwidth Limiting και Spectral Leakage είναι καλά ελεγχόμενα. Μετά από αυτόν τον υπολογισμό αναστρέφουμε τον μετ. Fourier και παίρνουμε τις χρονοσειρές των συσχετίσεων. Αυτή η διαδικασία είναι πολύ ταχύτερη από υπολογισμούς συσχέτισης βασιζόμενοι σε παραδοσιακούς ορισμούς. Έπειτα, παίρνουμε τον μέσο όρο των N συναρτήσεων συσχέτισης.

5. Υπολογίζουμε τα ολοκληρώματα των συσχετίσεων βεβαρημένα με $\exp(-t/\tau)$ για συγκεκριμένο τ , όπως υπαγορεύεται από την εξ. (2.25). Υπολογίσαμε αποτελέσματα για ευρύ φάσμα μέσων χρόνων σκέδασης, από τιμές κοντά στις πειραματικές έως και πολύ μεγαλύτερες.
6. Τα παραπάνω ολοκληρώματα (επί το g_c) χρησιμοποιούνται για να υπολογίσουμε τις ειδικές αντιστάσεις, σύμφωνα με τις εξ. (2.26). Σε αυτό το βήμα

υποθέτουμε ότι το σύστημα είναι ιστροπικό (το οποίο μπορεί να μην είναι αληθές για κάποιο πραγματικό πείραμα).

7. Επαναλαμβάνουμε όλα τα παραπάνω βήματα για μεγάλο εύρος τιμών του μαγνητικού πεδίου. Επιλέξαμε βήματα $0.01B_0$ από το 0 έως το 1.20. Έπειτα, εάν θέλουμε μπορούμε να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα με τα πειραματικά δεδομένα ώστε να πάρουμε μία τιμή για τον σταθερό παράγοντα κανονικοποίησης (βλ. παρακάτω).

Στα ακόλουθα 3 σχήματα (2.12 - 2.14) δείχνουμε τα αποτελέσματα του μοντέλου μας. Κατακόρυφες διακεκομμένες γραμμές έχουν σχεδιαστεί σε μαγνητικά πεδία που δίνονται από την εξ. (2.22) για ακτίνες r_n που φαίνονται στο σχ. 2.10. Συγκεκριμένα, οι τιμές του μαγνητικού πεδίου είναι: $B_0 = 1$, $B_2 = 0.67$, $B_4 = 0.3846$, $B_6 = 0.2857$ και $B_{21} = 0.196$ και θεωρούνται εκτιμήσεις των προσεγγιστικών θέσεων που περιμένουμε να δούμε ισομετρικές κορυφές.

Οι καμπύλες της ειδικής αντίστασης ορίζονται ως προς έναν σταθερό παράγοντα που μπορεί να υπολογιστεί από δαπανηρούς αυτο-συνεπείς υπολογισμούς χρησιμοποιώντας αναλυτικά μοντέλα αταξίας. Για να αποφύγουμε αυτούς τους υπολογισμούς χρησιμοποιούμε τον σταθερό παράγοντα ως μία ρυθμιζόμενη παράμετρος που θα υπολογιστεί από μία προσαρμογή σε πειραματικά δεδομένα. Στα γραφήματα που παρουσιάζονται σε αυτή την ενότητα, και οι δύο καμπύλες ειδικής αγωγιμότητας έχουν κανονικοποιηθεί με βάση την αντίστοιχη μέγιστη τιμή τους.

Τα κύρια χαρακτηριστικά των καμπυλών είναι παρόμοια με αυτά που περιγράψαμε στην ενότητα 2.1.2. Το πιο εμφανές χαρακτηριστικό είναι η δομή κορυφών-συντονισμών της μαγνήτο-αντίστασης. Σε ισομετρικές τιμές B η R_{XX} παρουσιάζει κορυφές, ακριβώς όπως αυτές των πειραμάτων και παρόμοιες με αυτές που έχουν παρατηρηθεί στα 2DEG. Οι κατακόρυφες διακεκομμένες γραμμές-οδηγοί ορίστηκαν γεωμετρικά μόνον με την εφαρμογή κύκλων στο τοπίο δυναμικού. Είναι αξιοσημείωτο το γεγονός ότι οι κορυφές της μαγνήτο-(ειδικής)αντίστασης “πέφτουν” τόσο καλά επάνω σε αυτές χωρίς επιπλέον τροποποιήσεις.

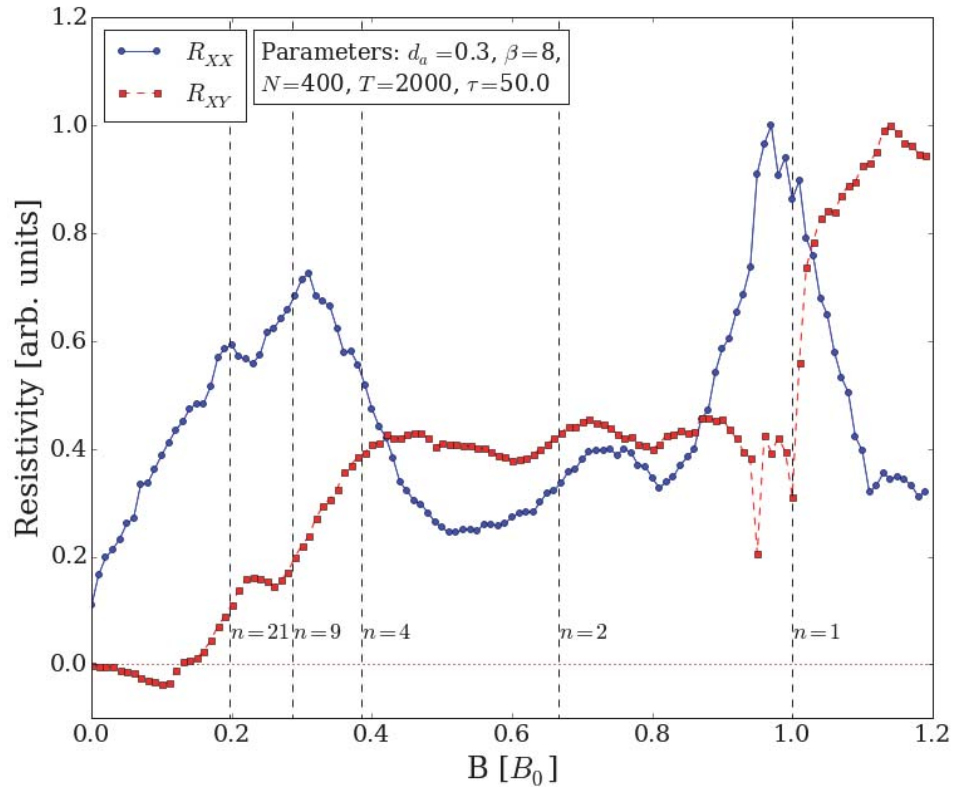
Πρέπει να τονίσουμε βέβαια ότι το μαγνητικό πεδίο που αντιστοιχεί στην κορυφή $n = 4$ είναι αυτό με ακτίνα r_4^* αντί για r_4 (βλ. σχ. 2.10), γιατί οι τροχιές του πρώτου είναι πιο “σταθερές” από του δεύτερου (για ομαλά δυναμικά μόνον). Επιπλέον, για μαγνητικά πεδία $B > B_0$ η μαγνήτο-αντίσταση μειώνεται ραγδαία, δίνοντας σήμα στην εκκίνηση των ταλαντώσεων SdH (οι οποίες δεν μπορούν να περιγραφούν από ένα ημικλασσικό μοντέλο).

Η Hall-(ειδική) αντίσταση επίσης παρουσιάζει τα μη-κβαντισμένα βήματα που αμέσως ακολουθούν τις κορυφές της R_{XX} σε ισομετρικά μαγνητικά πεδία. Επιπλέον, το φαινόμενο της αρνητικής αντίστασης Hall κοντά στο $B = 0$ μπορεί να αναλυθεί, δεδομένου ότι ο χαρακτηριστικός χρόνος σκέδασης είναι αρκετά μεγάλος, $\tau \geq 15$. Το μόνο γράφημα που δεν παρουσιάζει αυτό το φαινόμενο είναι αυτό του σχ. 2.13 διότι έχει εξαιρετικά μικρό τ .

Ο αριθμός των κορυφών της R_{XX} εξαρτάται από τον συνδυασμό της διαμέτρου antidot και της ομαλότητας του δυναμικού. Συγκρίνοντας τα σχ. 2.12 και 2.14 βλέπουμε μια μεγάλη διαφορά σε χαμηλά μαγνητικά πεδία $B < 0.4$. Αφού στην πρώτη περίπτωση $\beta = 8$ και επομένως το δυναμικό είναι πιο ομαλό, είναι λογικό η καμπύλη της μαγνήτο-αντίστασης να είναι λιγότερο “peaky”.

2.6 Μαγνήτο-Αντίσταση λόγω Μη Γραμμικών Συντονισμών

Μπορούμε τώρα να κατανοήσουμε πολύ καλά την ύπαρξη των κορυφών ισομετρίας που υπάρχουν στα πειραματικά δεδομένα (εν. 2.2). Δεν προκαλούνται από τον μεταβαλλόμενο αριθμό g_c ή τις καρφίτισωμένες τροχιές, αλλά από συσχετίσεις



Σχήμα 2.12: Μαγνήτο- και Hall- ειδικές αντιστάσεις έναντι του μαγνητικού πεδίου, δημιουργημένες για τις τιμές παραμέτρων που φαίνονται στο ένθετο της εικόνας. Και οι δύο καμπύλες έχουν κανονικοποιηθεί ως προς την μέγιστη τιμή τους.

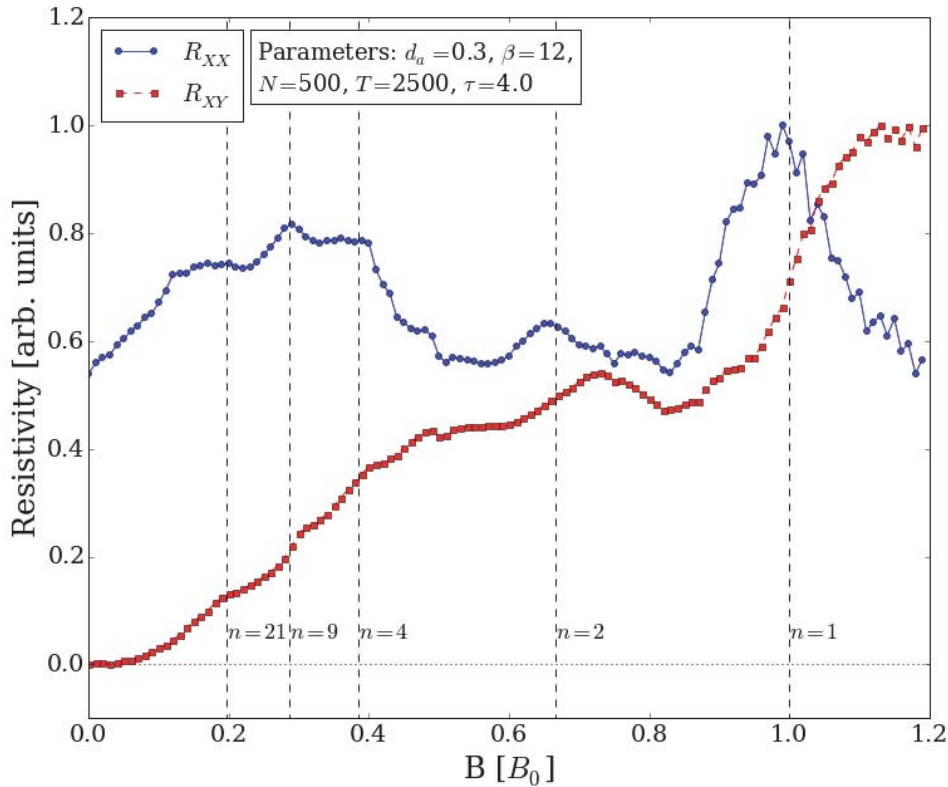
2.6. ΜΑΓΝΗΤΟ-ΑΝΤΙΣΤΑΣΗ ΛΟΓΟ ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΩΝ

στην χαοτική θάλασσα. Αυτές οι συσχετίσεις αναδύονται μέσω των μη γραμμικών συντονισμών που αναλύουμε στην επόμενη ενότητα.

2.6.1 Χαοτικές Τροχιές και Stickiness

Σε συγκεκριμένα μαγνητικά πεδία, υπάρχουν νησίδες σταθερότητας στις PSOS. Τα ηλεκτρόνια εντός των νησίδων είναι “καρφιτωμένα” και δεν συμμετέχουν στην μεταφορά. Οι κορυφές της μαγνήτο-αντίστασης παρόλα αυτά δεν υπάρχουν λόγω των καρφιτωμένων ηλεκτρονίων αλλά λόγω των χαοτικών. Ο κύριος μηχανισμός είναι το φαινόμενο “stickiness” το οποίο δείχνουμε στο σχ. 2.15. Εκεί δείχνουμε δύο χαρακτηριστικές τροχιές, και οι δύο χαοτικές αλλά με πολύ διαφορετική ποιοτική συμπεριφορά.

Παρότι η πρώτη τροχιά είναι εντελώς χαοτική και δεν υπάρχουν σημάδια συγκεκριμένου μοτίβου που μοιράζεται με άλλες τροχιές στις ίδιες παραμέτρους,



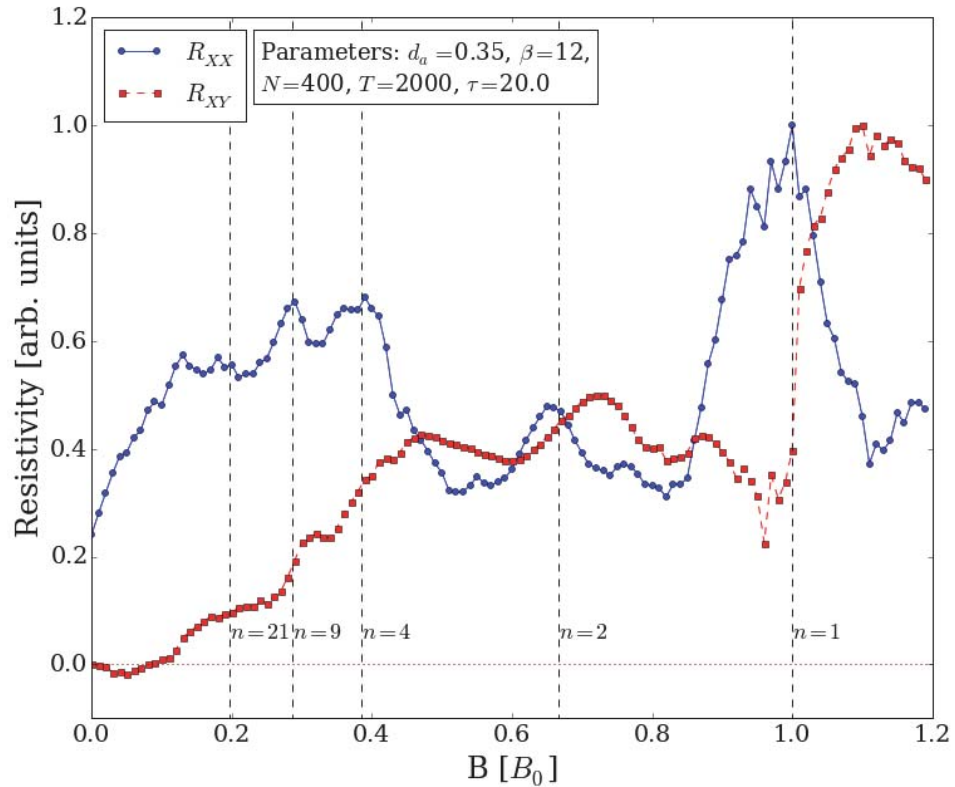
Σχήμα 2.13: Μαγνήτο- και Hall- ειδικές αντιστάσεις έναντι του μαγνητικού πεδίου, δημιουργημένες για τις τιμές παραμέτρων που φαίνονται στο ένθετο της εικόνας. Και οι δύο καμπύλες έχουν κανονικοποιηθεί ως προς την μέγιστη τιμή τους.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2. ΒΑΛΛΙΣΤΙΚΗ ΜΑΓΝΗΤΟΜΕΤΑΦΟΡΑ ΣΤΟ ΓΡΑΦΕΝΙΟ

η δεύτερη τροχιά είναι διαφορετική. Για τροχιές σε ισομετρικά μαγνητικά πεδία συμβαίνει το φαινόμενο *stickiness*. Το σωματίδιο ακολουθεί ένα χαοτικό μονοπάτι, αλλά για μεγάλα τμήματα της τροχιάς του περιστρέφεται γύρω από ένα μοναδικό antidot. Εάν ακολουθούσαμε αυτή την τροχιά στην τομή Poincaré, αρχικά θα βλέπαμε τυχαία διάσπαρτα σημεία. Την στιγμή που η τροχιά “κολλάει” γύρω από ένα antidot, η PSOS δείχνει το γνωστό χαοτικό φαινόμενο του *stickiness* γύρω από την νησίδα σταθερότητας. Λόγω της άπειρης ιεραρχίας φραγμών μεταφοράς στον χώρο φάσεων, ονομαζόμενοι και *cantori*³, τα σωματίδια κολλούν στις νησίδες σταθερότητας για πολύ χρόνο, μέχρι τελικώς να ξεφύγουν από την περιοχή τους.

Αυτή η συγκεκριμένη κίνηση των φορέων δημιουργεί συσχετίσεις οι οποίες

³Η ονομασία αυτή προέρχεται από την ένωση των λέξεων Cantor και torus, διότι αυτή η ιεραρχία είναι ένα σύνολο Cantor από τόρους.



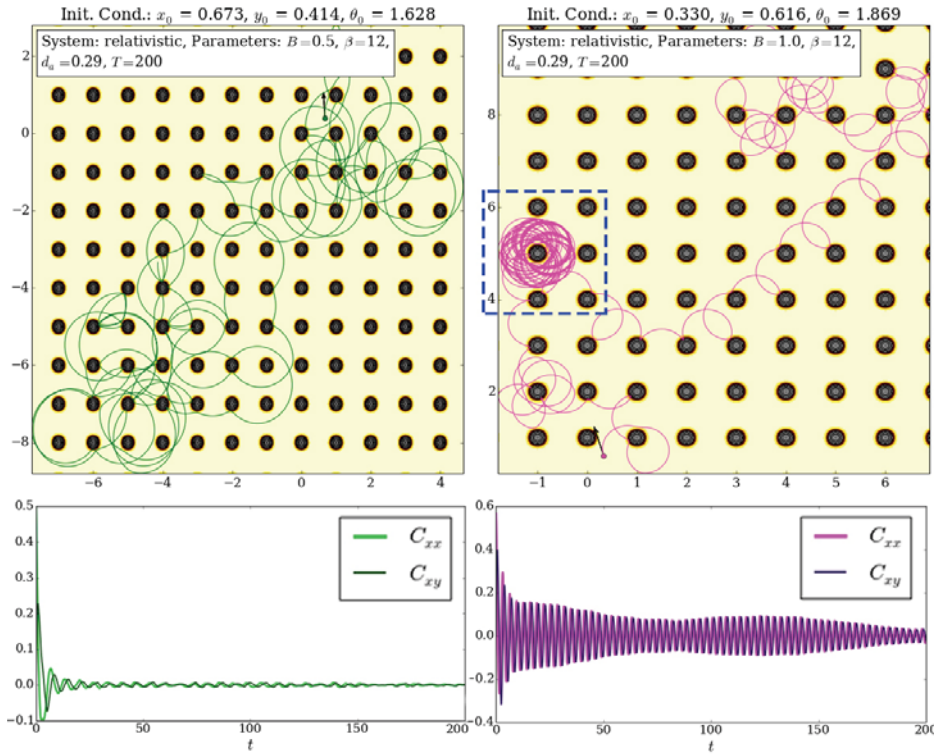
Σχήμα 2.14: Μαγνήτο- και Hall- ειδικές αντιστάσεις έναντι του μαγνητικού πεδίου, δημιουργημένες για τις τιμές παραμέτρων που φαίνονται στο ένθετο της εικόνας. Και οι δύο καμπύλες έχουν κανονικοποιηθεί ως προς την μέγιστη τιμή τους.

2.6. ΜΑΓΝΗΤΟ-ΑΝΤΙΣΤΑΣΗ ΛΟΓΟ ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΩΝ

αυξάνουν την υπολογιζόμενη αντίσταση του δείγματος και δημιουργούν εμφανείς κορυφές στο αντίστοιχο γράφημα της μαγνήτο-αντίστασης (σχ. 2.4 και 2.12 - 2.14). Στο κάτω μέρος του σχ. 2.15 σχεδιάζουμε επίσης τις συναρτήσεις συσχέτισης (χωρίς την εκθετική επιβάρυνση) οι οποίες ορίζονται ως:

$$C_{ij}(t) = \int_{\Gamma_c(E_F)} \langle v_i(t) v_j(0) \rangle d\Gamma_c \quad (2.28)$$

και έχουν υπολογισθεί αριθμητικά για N χαοτικές τροχιές, όπου η κάθε μία έχει εξελιχθεί για T μονάδες του χρόνου. Για την πρώτη τροχιά, οι συσχετίσεις ταλαντώνονται και μειώνονται εκθετικά, το οποίο είναι η τυπική συμπεριφορά για καθαρά χαοτικά συστήματα. Στην δεύτερη περίπτωση, είναι ξεκάθαρο ότι οι συσχετίσεις έχουν έναν χαρακτήρα μεγάλης-εμβέλειας ο οποίος παίζει σημαντικό



Σχήμα 2.15: Left: Chaotic orbit at non-commensurate magnetic field value. Right: Chaotic orbit at commensurate magnetic field value. A nonlinear resonance is indicated by the blue dash-lined box. Bellow each orbit are also plotted the average velocity correlation functions as defined in eq. (2.28). The correlations are the average of $N = 100$ trajectories, each evolved for $T = 1000$ units of time.

ρόλο στις τιμές της ειδικής αγωγιμότητας.

2.7 Αποσβησμένο ή Αρνητικό Φαινόμενο Hall

Αναλύοντας την δομή της (ειδικής) αντίστασης Hall κοντά στο $B = 0$ (βλ. σχ. 2.12 έως 2.14) μπορούμε να καταλήξουμε στο ότι ένα από τα ακόλουθα δύο φαινόμενα συμβαίνει πάντοτε. Είτε η Hall-αντίσταση είναι αρνητική για $0 < B < 0.1$ (τα ακριβή όρια εξαρτώνται από τις ακριβείς τιμές παραμέτρων) ή είναι αποσβησμένη⁴.

Πράγματι, αυτό συμβαίνει πάντα για ρεαλιστικές τιμές των παραμέτρων της προσομοίωσης. Το ποιο από τα δύο φαινόμενα λαμβάνει χώρα στο τελικό αποτέλεσμα εξαρτάται μονοσήμαντα από την τιμή του τ (βλ. παρακάτω).

2.7.1 Καναλισμένες Τροχιές

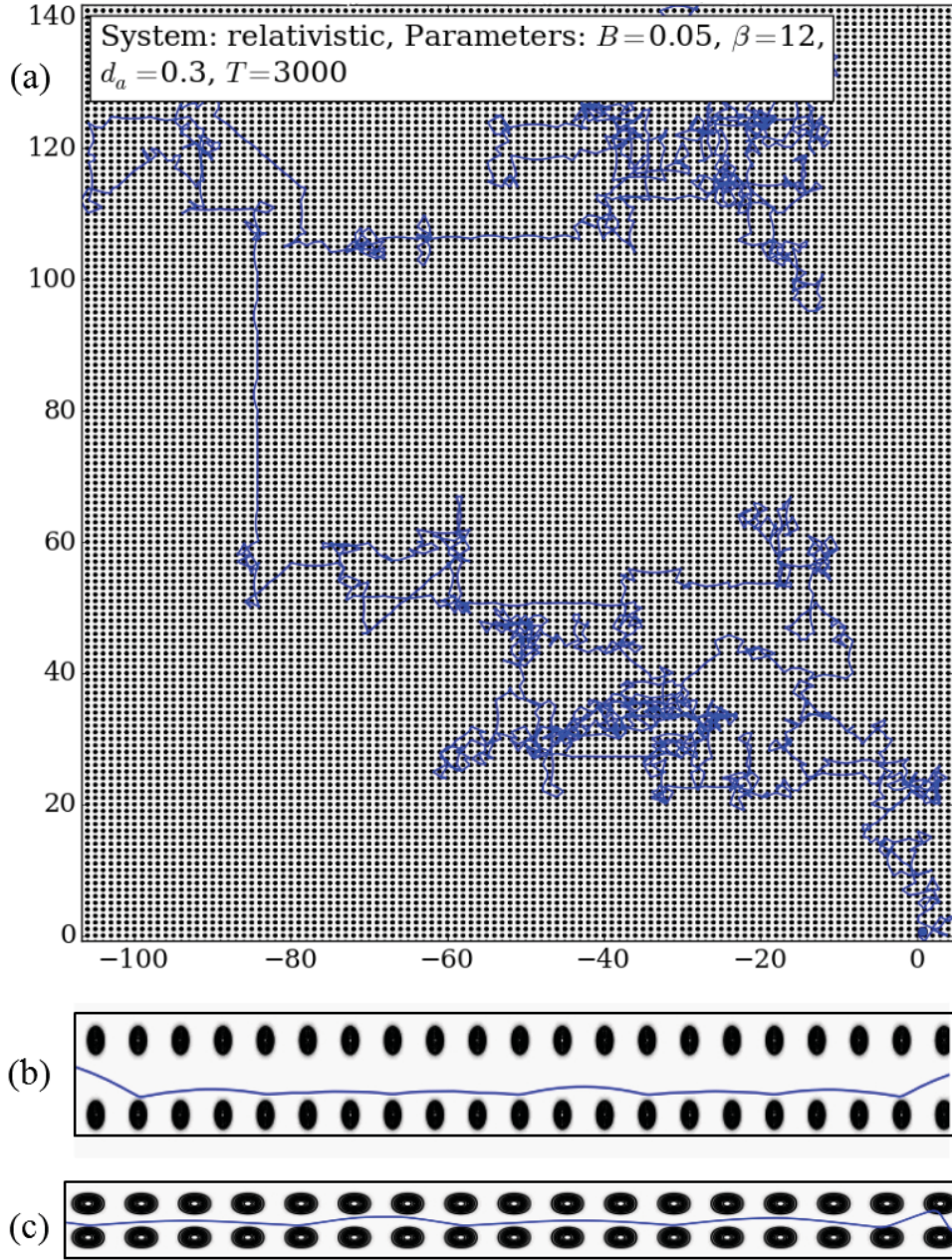
Ο λόγος πίσω από αυτήν την ιδιομορφία στηρίζεται στην ονομαζόμενες *channeling* ή καναλισμένες τροχιές [85]. Αυτές οι τροχιές τείνουν να ακολουθούν για πολύ χρόνο ένα συγκεκριμένο “κανάλι” από antidots (το οποίο ορίζεται ως ο χώρος μεταξύ δύο παράλληλων σειρών από antidots) και υπάρχουν για μικρές τιμές μαγνητικού πεδίου, $0 < B < 0.1$. Παραδείγματα τέτοιων τροχιών υπάρχουν στο σχ. 2.16.

Για μικρά μαγνητικά πεδία, τα χαοτικά ηλεκτρόνια πραγματοποιούν μία κίνηση παρόμοια με περίπατο Levý. Λόγο της παγίδευσης των τροχιών σε μη γραμμικούς συντονισμούς [85], μία καναλισμένη κίνηση (η επεισόδιο) αναδύεται για πεπερασμένα τμήματα. Τα καναλισμένα επεισόδια υπάρχουν μέσω της συνεχούς ανάκλασης από το υπερπλέγμα των antidots, στην διεύθυνση της δύναμης Lorentz (σχ. 2.16(b) και (c)). Φυσικά, όσο πιο ομαλό είναι το δυναμικό, τόσο πιο εύκολο είναι για τέτοιες τροχιές να υπάρχουν. Αυτός είναι ο λόγος που για χαμηλότερες τιμές του β , οι τροχιές έχουν μεγαλύτερα καναλισμένα επεισόδια. Από την άλλη μεριά, καναλισμένες τροχιές δεν υπάρχουν καθόλου για πολύ χαμηλές τιμές του β , οι οποίες μετατρέπουν του σύστημα σε μπιλιάρδο κατά Sinai.

2.7.2 Αρνητική Ουρά Συσχέτισης

Το πρόσημο της Hall-(ειδικής) αντίστασης δίνεται από το πρόσημο του σ_{xy} , όπως φαίνεται στην εξ. 2.26. Το πρόσημο του σ_{xy} με την σειρά του καθορίζεται μονοσήμαντα από την συμπεριφορά της συνάρτησης έτερο-συσχέτισης της ταχύτητας $C_{xy}(t)$ καθώς και την τιμή του χρόνου σκέδασης τ . Για μια αρνητική

⁴Ως αποσβησμένη αντίσταση Hall ονομάζεται αυτή που η κλίση της κοντά στο 0 είναι πολύ μικρότερη από την αναμενόμενη κατά Drude τιμή, $1/en_s$.



Σχήμα 2.16: (a) Μία χαοτική τροχιά που επιδεικνύει (κατά μέρη) καναλισμένες τροχιές διάφορων μηκών. (b) Μια καναλισμένη τροχιά για $\beta = 12$. (c) Μια καναλισμένη τροχιά για $\beta = 4$. Έχετε υπ' όψιν ότι οι τροχιές μπορούν να διαδίδονται προς οποιαδήποτε x ή y διεύθυνση.

Hall-αντίσταση, το ολοκλήρωμα της $C_{xy}(t)$ επί την $\exp(-t/\tau)$ πρέπει να είναι αρνητικό.

Στο σχ. 2.17(a) δείχνουμε την συνάρτηση έτερο-συσχέτισης για $B = 0.08$, μία “επιβαρυνμένη” για $\tau = 4.0$ και μία πρωτότυπη. Η χαρακτηριστική συμπεριφορά της συσχέτισης γύρω από αυτά τα μαγνητικά πεδία είναι ότι, μετά από κάποια αρχική αύξηση, μία δυνατή αρνητική κορυφή δημιουργείται η οποία ακολουθείται από μία μακριά αρνητική ουρά. Η ουρά έχει σημαντική τιμή ακόμη και έως χρόνους $t = 30$ (σχ. 2.17(a)). Για μεγαλύτερους χρόνους η ουρά ταλαντώνεται ασήμαντα γύρω από το μηδέν.

Η ουρά συσχέτισης έχει αλγεβρική δομή και επομένως μπορεί να θεωρηθεί μακράς-εμβέλειας. Φυσικά, αυτή η ουρά είναι και ο λόγος για τον αρνητικό φαινόμενο Hall κοντά στο $B = 0$, καθώς υπερτερεί των θετικών κομματιών της συσχέτισης λόγω της μακράς της εμβέλειας. Καθώς αυξάνουμε το μαγνητικό πεδίο, η C_{xy} έχει όλο και περισσότερη ταλαντούμενη συμπεριφορά. Η αρνητική ουρά εξαλείφεται σε αυτό το σημείο και τα θετικά κομμάτια υπερτερούν των αρνητικών.

Εφαρμόζοντας αλγεβρικές ουρές της μορφής $c \cdot t^{-r}$ (c : σταθερά κανονικοποίησης) στα δεδομένα της έτερο-συσχέτισης, βρίσκουμε ότι υπάρχει πολύ καλή συμφωνία, με τον εκθέτη r να ταλαντώνεται γύρω από το 3. Μία προσαρμογή φαίνεται στο σχ. 2.17(a). Οι έτερο-συσχετίσεις μακράς-εμβέλειας φαίνεται να είναι τυπικές για χαοτικά Χαμιλτονιανά συστήματα και πιστεύεται ότι σχετίζονται σε ιεραρχίες cantori και φαινόμενα stickiness (βλ. π.χ. [86, 87]) καθώς και φαινόμενα σποραδικότητας (intermittency) [88] αλλά η ακριβής προέλευσή τους δεν είναι ακόμη πλήρως κατανοητή.

Η διαφορά μεταξύ του απεσβησμένου και του αρνητικού φαινομένου Hall είναι πλέον ξεκάθαρη. Το θετικό μέρος της C_{xy} βρίσκεται στο πρώτο μέρος της χρονοσειράς (προσεγγιστικά από $t = 0$ έως $t = 5$) ενώ η αρνητική ουρά λαμβάνει χώρα μετά από αυτό. Εάν επιβαρύνουμε την C_{xy} με εκθετική μείωση $\exp(-t/\tau)$ τότε το θετικό μέρος θα μείνει σχεδόν απaráλλακτο. Το αρνητικό μέρος όμως θα μειωθεί σημαντικά (σχ. 2.17). Αυτό οδηγεί στην αντίσταση Hall να είναι αρνητική για υψηλά τ και αποσβησμένη για μικρότερα.

2.7.3 Καναλισμένα Μήκη και Συσχετίσεις Μεγάλης-Εμβέλειας

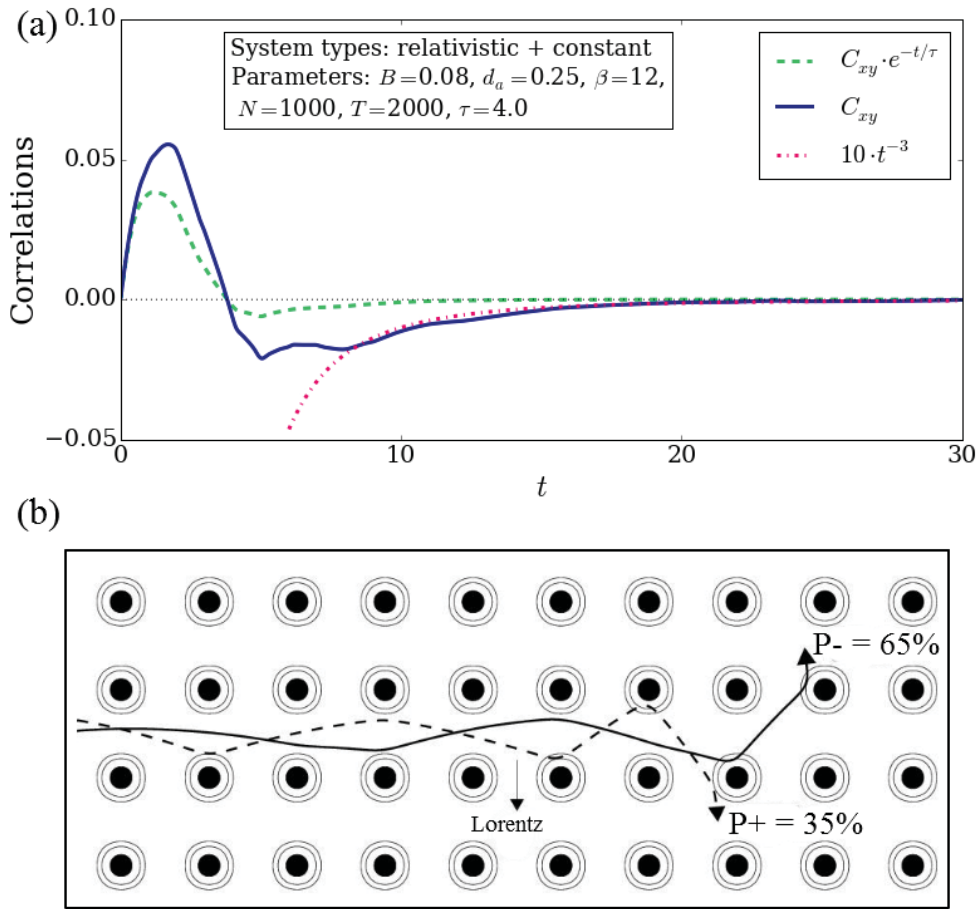
Οι καναλισμένες τροχιές είναι υπεύθυνες για την αρνητική ουρά συσχέτισης όπως αναφέραμε και όπως ανακαλύφθηκε πρώτα στο [85] αναλύοντας τον χώρο φάσεων και τις τροχιές σε αυτόν. Οι καναλισμένες τροχιές είναι κομμάτια μιας ολικής τροχιάς και έχουν κυμαινόμενα μήκη⁵. Μπορούμε να ορίσουμε με συνέ-

⁵Το “μήκος” μπορεί να αναφέρεται είτε σε χρονικό ή χωρικό μήκος. Οι συσχετίσεις είναι συναρτήσεις του χρόνου και επομένως οι ουρές αναφέρονται σε χρονικό μήκος. Παρόλα αυτά, επειδή

2.7. ΑΠΟΣΒΗΣΜΕΝΟ Η ΑΡΝΗΤΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ HALL

πεια μία καναλισμένη τροχιά ως μία τροχιά που ταξιδεύει μεταξύ δύο σειρών από antidots για τουλάχιστον 3 μονάδες μήκους (3 antidots). Μετά από κυμαινόμενη ποσότητα χρόνου, το σωματίδιο φεύγει από το κανάλι, δίνοντας ένα πεπερασμένο και ακριβές τέλος στο καναλισμένο μήκος ℓ . Κανείς μπορεί τότε να ορίσει και να υπολογίσει την κατανομή καναλισμένων μηκών $\psi(\ell)$.

εντός του καναλιού το χρονικό και χωρικό μήκος είναι σχεδόν ίδιο, μπορούμε να τα μεταχειριστούμε ως το ίδιο πράγμα.



Σχήμα 2.17: (a) Έτερο-συσχέτιση $C_{xy}(t)$ εναντίων χρόνου. Η σκούρα μπλε παχιά γραμμή είναι η πρωτότυπη, ενώ η κυανή διακεκομμένη είναι πολλαπλασιασμένη με $\exp(-t/\tau)$. Επιπλέον, η ροζ dash-dotted καμπύλη είναι η αλγεβρική συνάρτηση $f(t) = 10 \cdot t^{-3}$. (b) Δύο καναλισμένες τροχιές, μία ανακλασμένη προς την δύναμη Lorentz και μία στην αντίθετη κατεύθυνση. Σημειώνουμε επίσης τις μέσες πιθανότητες για αυτά τα δύο γεγονότα.

Η κατανομή $\psi(\ell)$ φθίνει αλγεβρικά [85], $\psi(\ell) \sim \ell^{-r}$, με r να ταλαντώνεται γύρω από το $r = 3$. Αυτός εκθέτης ταυτίζεται με τον εκθέτη της ουράς της συνάρτησης έτερο-συσχέτισης. Αυτό το αποτέλεσμα το βρίσκουμε αριθμητικά προσαρμόζοντας καμπύλες στα δεδομένα της έτερο-συσχέτισης (σχ. 2.17(a)). Η ερμηνεία αυτού του γεγονότος οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η αρνητική ουρά της C_{xy} πηγάζει ευθέως από την φύση των καναλισμένων τροχιών.

Καθαρά χαοτικές τροχιές δεν μπορούν να έχουν συσχετίσεις μεγάλης-εμβέλειας. Οι καναλισμένες τροχιές εν αντιθέσει μπορούν να επιδείξουν τέτοιο φαινόμενο αφού ακολουθούν παρόμοια κίνηση για μεγάλους χρόνους. Το μήκος του χρόνου συσχέτισης συνδέεται άμεσα με τον χρόνο που ξοδεύει μια χαοτική τροχιά μέσα σε ένα κανάλι (αφού μόνο εκεί υπάρχουν συσχετίσεις μεγάλης-εμβέλειας). Αφού το σωματίδιο φύγει από το κανάλι, οποιαδήποτε συσχέτιση μεγάλης-εμβέλειας εξαφανίζεται ραγδαία. Επιπλέον, μέσα στο κανάλι $\text{χρόνος} \approx \text{μήκος}$ λόγω της φύσης της κίνησης. Εν κατακλείδι, η κατανομή των καναλισμένων μηκών και η ουρά της συνάρτησης συσχέτισης είναι πολύ στενά συνδεδεμένες.

Η έξοδος από το κανάλι μπορεί να συμβεί είτε κατά την διεύθυνση της δύναμης Lorentz, είτε αντίθετα. Στην πρώτη περίπτωση η τροχιά αποχωρεί από το κανάλι λόγω της δύναμης Lorentz ενώ στην δεύτερη λόγω των ανακλάσεων από τα antidots (σχ. 2.17(b)).

Ας ορίσουμε ως $P_+(\ell)$ την πιθανότητα μια καναλισμένη τροχιά μήκους ℓ να φύγει από το κανάλι στην διεύθυνση της δύναμης και $P_-(\ell)$ την πιθανότητα να φύγει με αντίθετη διεύθυνση. Εφόσον το σύστημα είναι πλήρως χαοτικό από την φύση του, κανείς θα μπορούσε να υποθέσει ότι το από που θα φύγει το σωματίδιο είναι εντελώς τυχαίο. Και άρα, τα δύο συμβάντα είναι ισοπίθανα, $P_+(\ell) = P_-(\ell)$.

Αντι-διαισθητικά αποδεικνύεται ότι αυτές οι δύο πιθανότητες δεν είναι ίσες. Συγκεκριμένα, εάν αναλύσουμε την κίνηση των φορέων σε αυτές τις τιμές μαγνητικού πεδίου, το αποτέλεσμα δεν είναι και τόσο αντι-διαισθητικό. Το αντηχών (resonant) νησί που είναι υπεύθυνο για την παγίδευση των σωματιδίων στην καναλισμένη κίνηση είναι μετατοπισμένο μακριά από το κέντρο του π.χ. $y = 0.5$, στην διεύθυνση της δύναμης Lorentz (βλ. σχ. 2.17(b)). Ως αποτέλεσμα, αυτό σπάει την συμμετρία της πιθανότητας εξόδου, η οποία είναι 50-50 στην περίπτωση του $B = 0$.

Για παράδειγμα στο $B = 0.08$ η πλειοψηφία των σωματιδίων φεύγουν από τα κανάλια αντίθετα από την δύναμη Lorentz, αφού εύκολα υπολογίζεται αριθμητικά ότι $P_-(\ell) \approx 65\%$ και $P_+(\ell) \approx 35\%$. Επιπλέον, τα $P_{\pm}(\ell)$ δεν έχουν κάποια εμφανής εξάρτηση από το ℓ , το οποίο επιβεβαιώνει την intermittent δυναμική του φαινομένου.

Λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι η ουρά συσχέτισης είναι αρνητική, το παραπάνω αποτέλεσμα ($P_+ \neq P_-$) είναι πλέον πλήρως κατανοητό. Για $0 < B < 0.1$ μπορούμε να φανταστούμε διαισθητικά την πειραματική κατάσταση ως ένα εφαρμοσμένο ρεύμα που μεταφέρεται κυρίως από καναλισμένα ηλεκτρόνια που κινού-

2.7. ΑΠΟΣΒΗΣΜΕΝΟ Η ΑΡΝΗΤΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ HALL

νται π.χ. στην θετική x -διεύθυνση. Εφόσον τείνουν να φεύγουν από το κανάλι σε αρνητική (ως προς την δύναμη Lorentz) y -διεύθυνση, δίνουν αρνητική τάση Hall.

Κεφάλαιο 3

Εφαρμογές του Μοντέλου μας

Στο προηγούμενο κεφάλαιο εισαγάγαμε ένα θεωρητικό μοντέλο έτσι ώστε να μπορούμε να υπολογίζουμε την μαγνήτο- και Hall- ειδική αντίσταση μίας μεσοσκοπικής αγωγίμης συσκευής με υπερπλέγμα από antidots σε μαγνητικό πεδίο. Επιπλέον, σε μία σύντομη περιγραφή παρουσιάσαμε κάποια πειράματα με ADSLs σε γραφένιο (βλ. εν. 2.2). Σε αυτό το κεφάλαιο σκοπεύουμε να εξερευνήσουμε περαιτέρω και να συγκρίνουμε τα αριθμητικά αποτελέσματα του μοντέλου μας με δεδομένα είτε από πειράματα είτε από άλλα μοντέλα.

Το πρώτο βήμα θα είναι μία σύγκριση με τα δεδομένα των πειραμάτων. Αυτά μας δόθηκαν γενναιόδωρα από τον Δρ. Jonathan Eroms [78] μέσω ιδιωτικής επικοινωνίας. Αυτή η σύγκριση θα δια φωτίσει σημαντικά τα χαρακτηριστικά των ADSLs στο γραφένιο. Θα μπορέσουμε να εξάγουμε κάποια σημαντικά συμπεράσματα για την φύση των τρυπών και την αλληλεπίδραση των φορέων με αυτές.

Αυτά τα συμπεράσματα θα οδηγήσουν σε διάφορες προτάσεις για την βελτιστοποίηση του μοντέλου μας (π.χ. εν. 3.2). Φυσικά, λόγω του πεπερασμένου χρόνου που έχει διατεθεί για αυτή την εργασία, δεν μπορούμε να ελέγξουμε όλες αυτές τις προτάσεις. Οι υπόλοιπες από αυτές, παρουσιάζονται στις Προοπτικές (κεφ. 4) και είναι σχέδια για μελλοντικές μελέτες. Εν τέλει, θα συγκρίνουμε το μοντέλο μας, το οποίο έχει πραγματοποιηθεί για σχετικιστικό σύστημα, με ένα Νευτώνειο, δεδομένου ότι όλα τα 2DEG συστήματα που έχουμε ήδη σχολιάσει βασίζονται σε Νευτώνειο αέριο (εν. 3.3).

3.1 Σύγκριση Με Πείραμα

Θα συγκρίνουμε τα αποτελέσματά μας με τα δεδομένα του σχ. 2.7(a). Προφανώς, θέλουμε τις καμπύλες αντίστασης μόνο για θετικά μαγνητικά πεδία και πριν αρχίσουν οι ταλαντώσεις SdH. Οι συγγραφείς του πειραματικού άρθρου δίνουν ηλεκτρονιακή πυκνότητα $n_s = 2.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ για αυτό το πείραμα, η οποία

έχει υπολογισθεί με βάση τις ταλαντώσεις SdH. Η απόσταση των antidots ήταν $\alpha = 100$ nm. Χρησιμοποιούμε αυτές τις ποσότητες για να βρούμε την προσεγγιστική τιμή του μαγνητικού πεδίου ακτίνας κυκλοτρόνου $\alpha/2$ βασισμένοι στις εξ. (1.59) και (2.15). Έχουμε λοιπόν:

$$B_0 = \frac{2\hbar\sqrt{\pi n_s}}{e\alpha} \approx 3.9 \text{ Tesla} . \quad (3.1)$$

Αυτή η προσέγγιση όμως δεν είναι πολύ καλή, και θα δούμε πως η κορυφή του $n = 1$ βρίσκεται σε μικρότερη τιμή.

Στην εν. 2.2.3 επιχειρηματολογήσαμε ότι το μήκος σκέδασης πρέπει να είναι τουλάχιστον 400 nm. Για τις ενδογενείς μονάδες μέτρησής μας, και εφόσον $\alpha = 100$ nm, έχουμε για τον χρόνο σκέδασης $\tau \approx 4 - 7$.

3.1.1 Μαγνήτο-Αντίσταση

Στο σχ. 3.1 παρουσιάζουμε αποτελέσματα προσομοίωσης υπολογισμένα για τρεις διαφορετικούς χρόνους τ , μαζί με τα δεδομένα του πειράματος του σχ. 2.7(a). Όπως ήταν αναμενόμενο, η πειραματική καμπύλη είναι πιο λεία σε σύγκριση με την δικιά μας. Αυτό είναι προφανές αποτέλεσμα αφού χρησιμοποιήσαμε μόνο πεπερασμένους αριθμούς για την εξαγωγή μέσων όρων. Ο συμβιβασμός όμως ήταν η δυνατότητα να μπορούμε να παράξουμε τέτοιες καμπύλες για πολλές διαφορετικές τιμές παραμέτρων σε σχετικά μικρό χρόνο. Απλά διπλασιάζοντας την παράμετρο μέσου όρου N τα αποτελέσματα είναι πολύ πιο λεία (βλ. π.χ. σχ. 3.3)).

Ο άξων του μαγνητικού πεδίου είναι σε μονάδες B_0 . Με μία σύντομη εκτίμηση υπολογίσαμε $B_0 \approx 3.9$ Tesla. Όμως, η καλύτερη προσαρμογή δίνεται για $B_0 \approx 3.65$ Tesla (σε αυτή την τιμή το πείραμα έχει την κύρια κορυφή). Αυτό το γεγονός μπορούμε να το εξηγήσουμε με διάφορους τρόπους. Ένας λόγος μπορεί να είναι το ότι η πειραματικά δοσμένη τιμή της ηλεκτρονιακής πυκνότητας είναι ανακριβής. Μπορεί επίσης, η ίδια η προσέγγιση Dirac (στην οποία βασιστήκαμε για να εξάγουμε το μαγνητικό πεδίο) να μην είναι ακριβής σε αυτές τις συγκεντρώσεις φορέων.

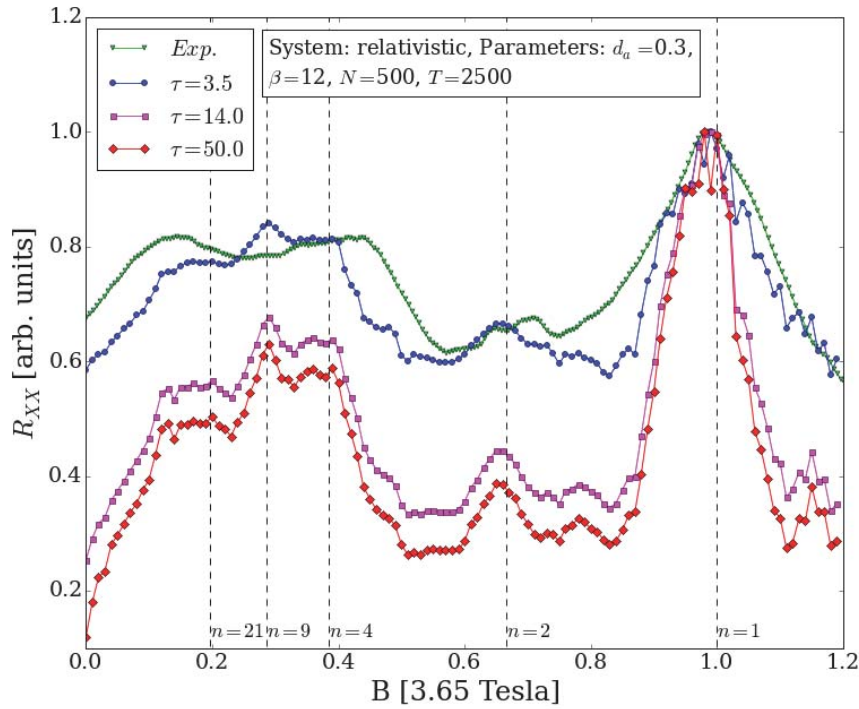
Ξέρουμε εκ των προτέρων ότι πρέπει να έχουμε καλή συμφωνία στην κορυφή $n = 1$. Αυτό το γεγονός έχει επιβεβαιωθεί πολλές φορές στα προηγούμενα κεφάλαια. Πρώτο, τα αποτελέσματα από τα 2DEG δείχνουν ότι οποτεδήποτε υπάρχει ADSL τα σχεδόν ελεύθερα ηλεκτρόνια (μικρές συγκεντρώσεις φορέων) πάντα έχουν κορυφή μαγνήτο-αντίστασης γύρω από μαγνητικό πεδίο που αντιστοιχεί σε ακτίνα κυκλοτρόνου $\alpha/2$. Δεύτερον, τα δύο πρόσφατα πειράματα στο γραφένιο [78, 79] επιβεβαιώνουν περαιτέρω αυτό το γεγονός. Οι παραπάνω παρατηρήσεις μας οδηγούν στο ότι ο πιο λογικός λόγος για την ασυμφωνία της πειραματικής τιμής $B_0 = 3.65$ και της θεωρητικής τιμής $B_0 = 3.9$ είναι η ανακρίβεια της μέ-

3.1. ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΕ ΠΕΙΡΑΜΑ

τρησης της ηλεκτρονιακής πυκνότητας, η οποία γίνεται βάση των ταλαντώσεων SdH.

Ένα τελευταίο σχόλιο που θέλουμε να τονίσουμε είναι το γεγονός ότι το μοντέλο μας έχει ισχυρή ασυμφωνία με το πείραμα σε μαγνητικά πεδία γύρω από $B \approx 0.15$. Αυτό υπονοεί ότι η κορυφή που βλέπουμε στο πείραμα δεν είναι κορυφή ισομετρίας αλλά κάποιος άλλος μηχανισμός (βλ. επόμενη ενότητα στην Hall-αντίσταση).

Τώρα στρεφόμαστε στην εξέταση του μέσου χρόνου σκέδασης (ή χρόνου εφυσασμού ορμής). Από το σχ. 3.1 βλέπουμε πως αυτός δεν έχει επιρροή στην οριζόντια τοποθεσία των κορυφών ισομετρίας. Παρόλα αυτά επηρεάζει το μέγεθος των κορυφών και κυρίως της κύριας κορυφής γύρω από $B = 1.0$.



Σχήμα 3.1: Σύγκριση της μαγνήτο-αντίστασης του μοντέλου μας με τα πειραματικά δεδομένα (*Exp.*). Οι παράμετροι που χρησιμοποιήσαμε φαίνονται στο ένθετο του σχήματος και οι κατακόρυφες διακεκομμένες γραμμές είναι τιμές μαγνητικού πεδίου που αναμένεται ισομετρική κορυφή. Όλες οι καμπύλες είναι κανονικοποιημένες με βάση την μέγιστη τιμή τους. Η πρώτη καμπύλη ($\tau = 3.5$) φαίνεται να είναι το καλύτερο φिट που μπορούμε να παράξουμε με το παρόν μοντέλο.

3.1.2 Hall-Αντίσταση

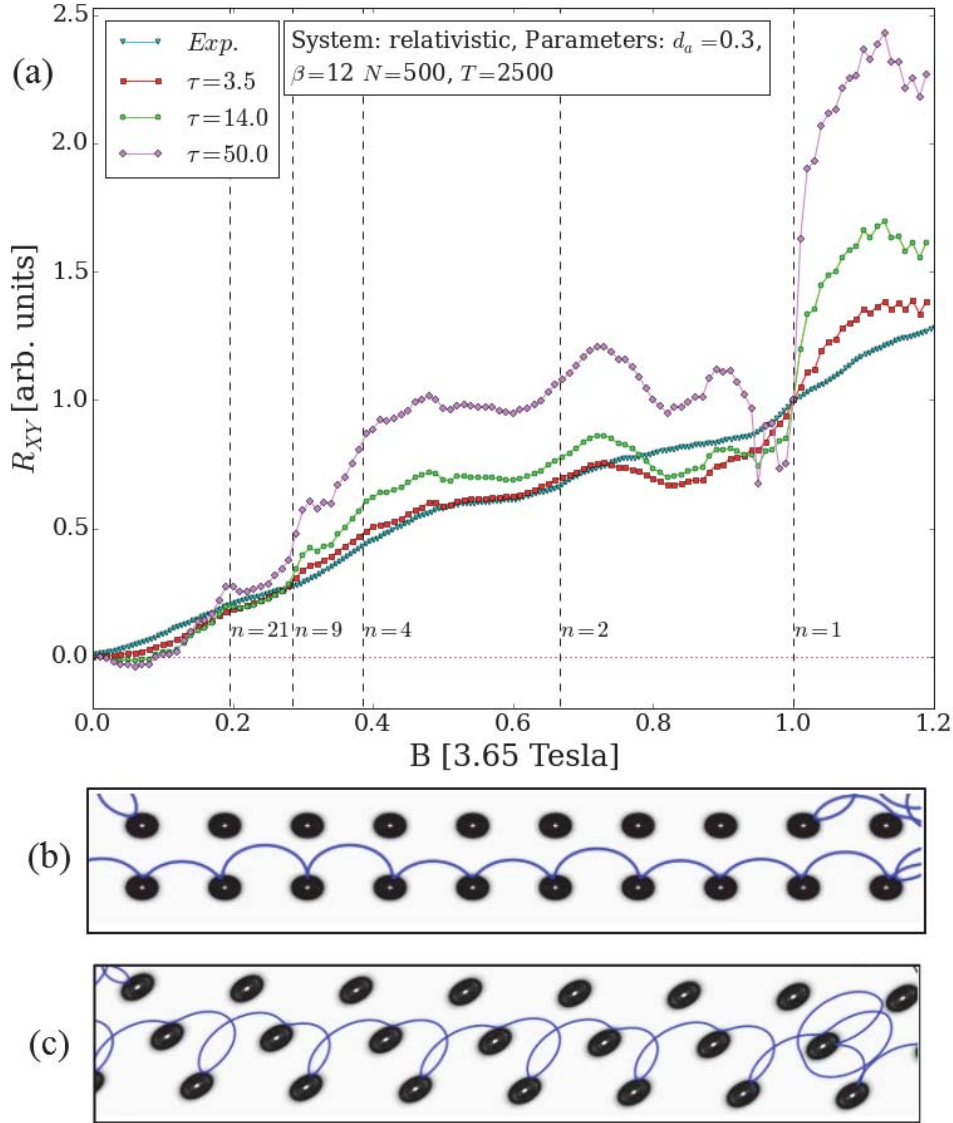
Στο σχ. 3.2(a) παρουσιάζουμε την σύγκριση του μοντέλου μας με τα πειραματικά δεδομένα της Hall-αντίστασης. Σημειώστε πως είτε για την μαγνήτο- είτε για την Hall-αντίσταση, δεν υπάρχει κάποιο νόημα στο να δώσουμε τιμές στους κατακόρυφους άξονες. Τα πειραματικά δεδομένα είναι σε αντίσταση, ενώ το μοντέλο μας παράγει ειδική αντίσταση. Για να περάσουμε από το ένα στο άλλο χρειαζόμαστε τις διαστάσεις του υλικού, οι οποίες είναι άγνωστες σε εμάς. Φυσικά, ακόμη και να είχαμε τις διαστάσεις του υλικού πάλι μία αριθμητική σύγκριση δεν είναι απαραίτητη, εφόσον το μοντέλο μας έχει μία πολλαπλασιαστική σταθερά η οποία υπολογίζεται από την σύγκριση με το πείραμα (και επομένως η τιμή της ταυτίζεται με την π.χ. μέγιστη τιμή της δοσμένης αντίστασης).

Τα πειραματικά δεδομένα δείχνουν ομαλά βήματα στα ισομετρικά μαγνητικά πεδία, όπως και το μοντέλο μας. Η αύξηση του χρόνου σκέδασης κάνει τα βήματα πιο απότομα. Η κύρια και μη-αναμενόμενη διαφορά βρίσκεται γύρω από το $B = 0$. Εκεί, η αντίσταση Hall δεν παρουσιάζει καμία απολύτως απόσβεση, σε ξεκάθαρη αντίθεση με (1) τα πειράματα με 2DEG και (2) το θεωρητικό μας μοντέλο.

Άλλη μία επίμονη διαφορά μεταξύ της προσομοίωσής μας και τα πειραματικά δεδομένα είναι η βύθιση πριν το μαγνητικό πεδίο $B = 1.0$, η οποία υπάρχει στο μοντέλο μας για όλες τις τιμές του τ . Το εφέ αυτό είναι απόν στο πείραμα και η αντίσταση Hall αυξάνεται σχεδόν γραμμικά. Η μόνη καμπύλη που προσεγγίζει αυτό το φαινόμενο είναι αυτή $\tau = 3.5$, η οποία είναι και η καλύτερη προσαρμογή που μπορέσαμε να παράξουμε με το μοντέλο μας.

Αλλαγές στον χρόνο σκέδασης τ έχουν εμφανή αποτελέσματα στην περιοχή $0 < B < 0.1$ όπως αναλύσαμε διεξοδικά στην εν. 2.7. Μπορούμε να δούμε άλλη μια περιοχή που αλλαγές στο τ έχουν πολύ έντονα αποτελέσματα, συγκεκριμένα $0.95 < B < 1.05$. Όταν συζητήσαμε την επίδραση του τ στην εν. 2.7 είδαμε ότι υπάρχουν κάποιες έτερο-συσχετίσεις μεγάλης-εμβέλειας που λαμβάνουν χώρα, λόγο ενός συγκεκριμένου τύπου τροχιών που ονομάζουμε *channeling*. Γύρω από την δεύτερη περιοχή μαγνητικών πεδίων, $0.95 < B < 1.05$ υπάρχουν δύο άλλα είδη τροχιών που δημιουργούν συσχετίσεις μακράς εμβέλειας. Το πρώτο είναι οι τροχιές κυκλοτρόνου, οι οποίες ευθύνονται για αυτο-συσχετίσεις (οι οποίες οδηγούν σε σημαντικές διαφορές στην κύρια κορυφή ισομετρίας με αλλαγές του τ – σχ. 3.1).

Το άλλο είδος τροχιάς που είναι υπεύθυνο για έτερο-συσχετίσεις μεγάλης-εμβέλειας ονομάζεται *skipping*. Παραδείγματα αυτών των τροχιών υπάρχουν στα σχ. 3.2(b) και (c). Οι δύο τροχιές (*channeling* και *skipping*) παρουσιάζουν έτερο-συσχετίσεις μεγάλης εμβέλειας. Και τα δύο είδη είναι πολύ ευαίσθητα σε αταξία (*disorder*). Αυτός είναι και ο λόγος που σε αυτές τις περιοχές μαγνητικών πεδίων αλλαγές στον χρόνο σκέδασης τ έχουν τις μεγαλύτερες επιπτώσεις.



Σχήμα 3.2: (a) Σύγκριση της Hall-αντίστασης του μοντέλου μας με τα πειραματικά δεδομένα (*Exp.*). Οι παράμετροι που χρησιμοποιήσαμε φαίνονται στο ένθετο του σχήματος και οι κατακόρυφες διακεκομμένες γραμμές είναι τιμές μαγνητικού πεδίου που αναμένεται ισομετρική κορυφή. Όλες οι καμπύλες είναι κανονικοποιημένες με βάση την τιμή του στο πεδίο $B = 1.0$. Η πρώτη καμπύλη ($\tau = 3.5$) φαίνεται να είναι το καλύτερο φिट που μπορούμε να παράξουμε με το παρόν μοντέλο. (b) και (c) Χαρακτηριστικές *skipping* τροχιές. Παρακαλώ σημειώστε ότι η τροχιά του (c) κινείται διαγώνια στο επίπεδο $x - y$ και έχει σχεδιαστεί έτσι μόνο για ευκολία.

Αυτή η συμπεριφορά δεν φαίνεται στα πειραματικά δεδομένα, όπου τα χαρακτηριστικά της αντίστασης Hall καταστέλλονται ακόμη πιο πολύ. Καταλήγουμε πως πρέπει να υπάρχει κάποιος επιπλέον μηχανισμός σκέδασης για τις τροχιές channeling και skipping (λόγω της έλλειψης της βύθισης ακριβώς πριν το $B = 1.0$). Μία βελτίωση του μοντέλου μας προτείνεται στην ακόλουθη ενότητα, βασισμένη σε αυτήν την παρατήρηση.

3.2 Τυχαία Κατανομή Διαμέτρου Antidot

Εξετάζοντας τις προσομοιώσεις και τα πειραματικά δεδομένα (σχ. 3.1 και 3.2), παρατηρήσαμε ότι οι κορυφές της μαγνήτο-αντίστασης του πειράματος είναι πολύ πιο ευρείες από αυτές των προσομοιώσεων. Επιπλέον, πρέπει να υπάρχει κάποιος επιπλέον μηχανισμός σκέδασης που καταστέλλει τις τροχιές skipping και channeling. Αυτό οδήγησε στην πρόταση της ιδέας ότι τα παραπάνω φαινόμενα οφείλονται στις διακυμάνσεις της διαμέτρου των antidots οι οποίες ξεκάθαρα υπάρχουν στα πειράματα (στο [78] οι συγγραφείς προτείνουν ότι η διάμετρος είναι 25 με 30 nm). Αυτό σημαίνει ότι κάθε antidot μπορεί να έχει διαφορετική ενεργή διάμετρο.

Για να το συμπεριλάβουμε αυτό στο μοντέλο μας, πρέπει να αλλάξουμε το τοπίο δυναμικού με αντίστοιχο τρόπο. Καθώς δεν γνωρίζουμε την πραγματική κατανομή διαμέτρων, είναι λογικό να θεωρήσουμε ότι ακολουθούν Gaussian κατανομή με μέσο μεταξύ 0.25 και 0.30. Η διασπορά της κατανομής μπορεί να έχει ευρύ φάσμα, $\sigma_d \in [0.005, 0.08]$.

Για να το εφαρμόσουμε αυτό σε προγραμματιστικό περιβάλλον, προ-δημιουργούμε μία Gaussian κατανομή με 10^6 μέλη, και την συμβολίζουμε ως $G(i, j)$ με i, j ακέραιους από το 0 έως το 999. Κάθε μέλος αντιστοιχεί σε μία συγκεκριμένη περιοχή γύρω από το σημείο του επιπέδου (x, y) , όπου το ακέραιο μέρος του x ή y να είναι i ή j αντίστοιχα. Εάν το x ή y είναι μεγαλύτερο του 10^3 ή μικρότερο του 0, χρησιμοποιούμε την ίδια κατανομή επαναλαμβανόμενη μέσω της χρήσης του modulo(1000).

Σαν αποτέλεσμα, η ενεργή διάμετρος antidot d_α είναι τώρα μία συνάρτηση των x και y . Όμως, δεν είναι συνεχής συνάρτηση αλλά διακριτή (κάθε περιοχή γύρω από ακέραια περιοχή (x, y) αντιστοιχεί σε antidot σταθερής διαμέτρου). Επομένως μπορούμε να σκεφτούμε ότι το d_α εξαρτάται μόνο από την συνάρτηση ακέραιου μέρους των x και y . Το πλάτος του δυναμικού U (εξ. (2.17)) δεν είναι πλέον σταθερό. Υπολογίζεται ως:

$$U(x, y) = \cos\left(\frac{\pi \cdot d_\alpha(x, y)}{2}\right)^{-\beta} \quad (3.2)$$

με

$$d_\alpha(x, y) = G(\lfloor x \rfloor \% 1000, \lfloor y \rfloor \% 1000) \quad (3.3)$$

όπου το σύμβολο % είναι η πράξη modulo και $\lfloor x \rfloor$ η είναι η συνάρτηση ακέραιου μέρους του x . Η συνάρτηση του δυναμικού $\mathcal{U}(x, y)$ παραμένει συνεχής.

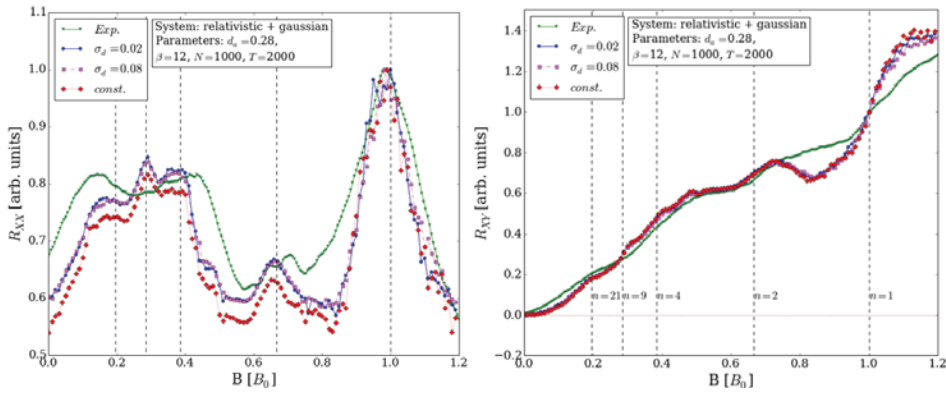
3.2.1 Αποτελέσματα και Συμπεράσματα

Στο σχήμα 3.3 δείχνουμε τα αποτελέσματα του μοντέλου με μια τυχαία, Gaussian κατανομή διαμέτρων antidots τα οποία συγκρίνουμε με το πείραμα καθώς και με προσομοίωση σταθερής διαμέτρου.

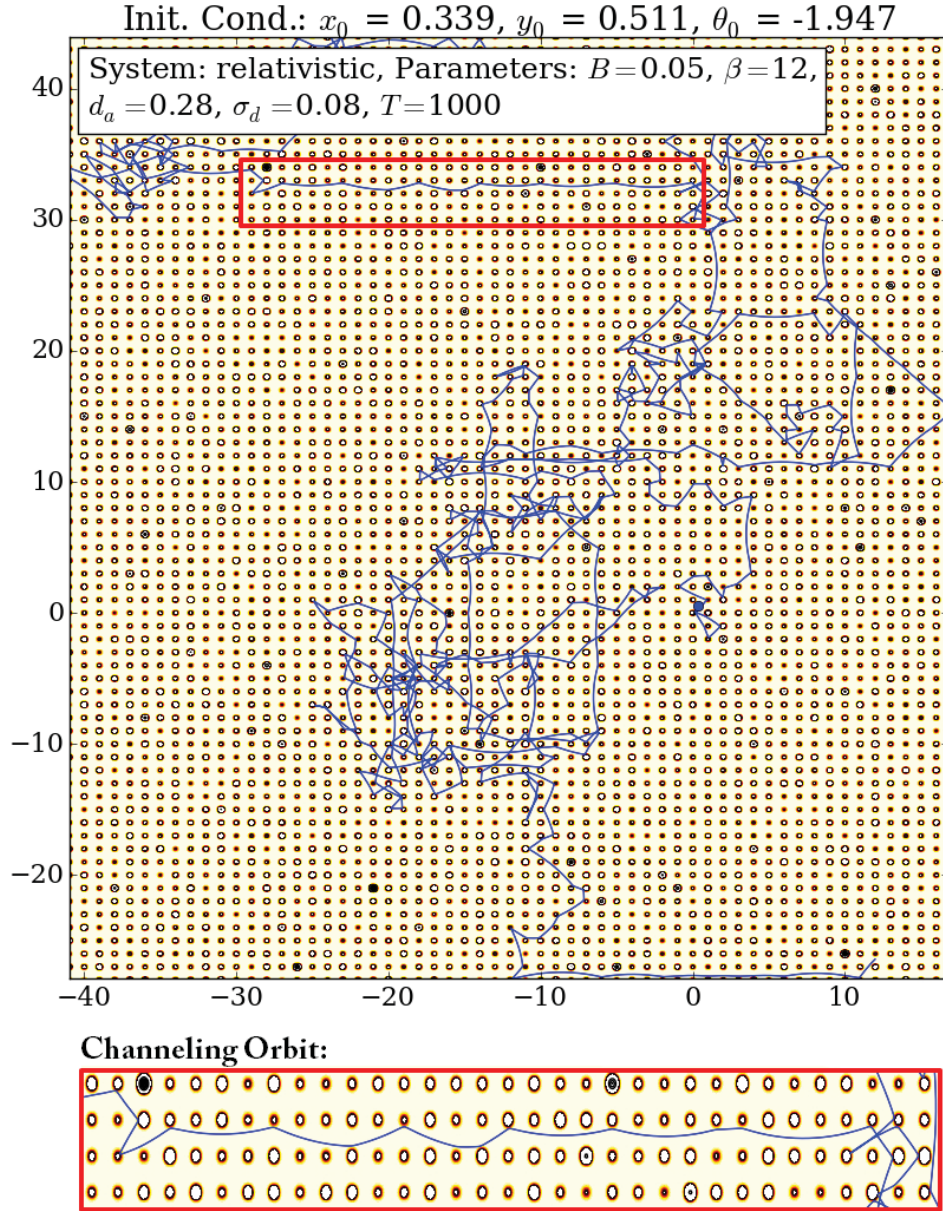
Δυστυχώς αυτή η προσέγγιση δεν απέδωσε καρπούς, καθώς δεν υπάρχουν καθόλου διαφορές μεταξύ των προσομοιώσεων. Στο σχ. 3.4 σχεδιάζουμε μια τροχιά επάνω από το δυναμικό με Gaussian κατανομή διαμέτρων. Η σημαντική παρατήρηση είναι ότι καναλισμένες τροχιές υπάρχουν ακόμη και στην μη-ρεαλιστική τιμή διασποράς $\sigma_d = 0.08$.

Ακόμη και στην περίπτωση με $\sigma_d = 0.08$ και $\tau = 4.0$ έχουμε απόσβεση του φαινομένου Hall (σχ. 3.3) το οποίο δεν υπάρχει στα πειράματα. Επιβεβαιώνουμε επίσης στο σχ. 3.4 ότι καναλισμένες τροχιές επιζούν ακόμη και με την υπερβολική τιμή του $\sigma_d = 0.08$. Αυτό οδηγεί στο συμπέρασμα ότι υπάρχει σίγουρα ένας επιπλέον μηχανισμός ο οποίος καταστέλλει τις καναλισμένες τροχιές στο πείραμα.

Στις Προοπτικές (κεφ. 4) προτείνουμε μία περαιτέρω αναβάθμιση του μοντέλου βασισμένη σε “τραχιά” (rough) antidots. Το γεγονός ότι χρησιμοποιούμε προφίλ δυναμικού το οποίο είναι ομαλό για κάθε συγκεκριμένο antidot επιτρέπει πάντοτε καναλισμένες τροχιές. Έτσι, θα χρειαστούμε μία επιπλέον μορφή αταξίας για να τις καταβάλλει.



Σχήμα 3.3: Αριστερά: Προσομοίωση μαγνήτο-αντίστασης βάση Gaussian κατανεμημένες διαμέτρους antidots με διασπορά σ_d και μέσο $d_\alpha = 0.28$. Δείχνουμε επίσης τα πειραματικά δεδομένα (Exp.) και προσομοίωση με σταθερή διάμετρο $d_\alpha = 0.3$ (const.). Όλες οι προσομοιώσεις έχουν γίνει για $\tau = 4.0$ ενώ οι υπόλοιπες παράμετροι φαίνονται στο ένθετο. Δεξιά: Ίδια γραφήματα για την Hall-αντίσταση.



Σχήμα 3.4: Μία τροχιά επάνω από το τοπίο δυναμικού για μία Gaussian κατανομή από διαμέτρους antidots. Οι παράμετροι της προσομοίωσης δίνονται στο ένθετο. Το κάτω μέρος του σχήματος δείχνει μία καναλισμένη τροχιά, η οποία αντιστοιχεί σε μία μεγέθυνση (κόκκινο κουτί) του πάνω γραφήματος (το σωματίδιο διαδίδεται προς τα αριστερά).

Φυσικά είναι αξιοσημείωτο το γεγονός ότι τα μη γραμμικά φαινόμενα που συζητήθηκαν στο κεφ. 2 επιμένουν ακόμη και με μια Gaussian κατανομή διαμέτρων. Αυτό το καταπληκτικό αποτέλεσμα δεν μπορεί παρά να δείξει ότι οι μη γραμμικοί συντονισμοί του συστήματος είναι τόσο βαθιοί που ούτε μια τόσο ισχυρή αταξία δεν τους καταστρέφει.

3.3 Νευτώνειο vs. Σχετικιστικό

Συχνά σε αυτή την εργασία αναφέραμε αποτελέσματα τα οποία πραγματευόταν το σύστημα 2DEG. Με το μοντέλο μας μπορούμε εύκολα να συγκρίνουμε τα δύο συστήματα (αριθμητικά) απλά αλλάζοντας την μορφή της κινητικής ενέργειας των σωματιδίων (βλ. εν. 2.3).

3.3.1 Η Παραβολική Σχέση Διασποράς

Όπως είναι ευρέως γνωστό, η σχέση διασποράς του ελεύθερου κβαντικού φερμιονικού αερίου δίνεται από:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m}.$$

Στην φυσική στερεάς κατάστασης, οι φορείς σε πολλά υλικά (συμπεριλαμβανομένου του 2DEG σε έτερο-επαφές ημιαγωγών) περιγράφονται προσεγγιστικά από αυτή την σχέση διασποράς με μία διαφορετική ενεργό μάζα m^* .

Ήμι-κλασσικά, αυτό αντιστοιχεί στο Νευτώνειο ελεύθερο σωματίο. Η κινητική ενέργεια αυτού είναι η γνωστή:

$$\mathcal{K}_N = \frac{|\mathbf{P}|^2}{2m^*} \quad (3.4)$$

με $\mathbf{P}$ το άνυσμα της ορμής. Σημειώστε πως σε αυτή την Νευτώνεια περίπτωση, η ταχύτητα είναι ευθέως ανάλογη με το άνυσμα της ορμής. Στην σχετικιστική περίπτωση η ταχύτητα ήταν πάντα σταθερή (κατά μέτρο) και μόνο η διεύθυνσή της άλλαζε σύμφωνα με την γενικευμένη ορμή (βλ. εν. 2.3).

Για να υπολογίσουμε τις καμπύλες ειδικής αντίστασης για τα Νευτώνια σωματίδια, θα ακολουθήσουμε ίδια διαδικασία όπως και στο κεφ. 2. Πρέπει όμως πρώτα να κάνουμε αυτή την κινητική ενέργεια αδιάστατη. Ξανά υποθέτουμε ότι οι φορείς κινούνται στην σταθερή ενέργεια Φέρμι.

Κάποιες από τις ενδογενείς μονάδες μέτρησης αλλάζουν. Η θέση όπως πάντα μετράται ως προς την απόσταση α μεταξύ των antidots και η ενέργεια ως προς την ενέργεια Φέρμι E_F . Η ορμή σε αυτή την ενέργεια τώρα δίνεται από $p_F = \sqrt{2m^*E_F}$ και την ορίζουμε ως την μονάδα μέτρησης ορμής. Το μαγνητικό πεδίο κρατά την ίδια μονάδα μέτρησης, δηλαδή το πεδίο που αντιστοιχεί

σε ακτίνα κυκλοτρόνου $\alpha/2$. Η φόρμουλα για αυτό είναι στην συγκεκριμένη περίπτωση: $B_0 = \sqrt{2m^*E_F}/e\alpha$. Η ταχύτητα και ο χρόνος τώρα μετρούνται σε $v_F = \sqrt{2E_F/m^*}$ και $t_\alpha = \alpha/v_F$ αντίστοιχα. Οι εξισώσεις κίνησης (δεν τις γράφουμε) αλλάζουν αντίστοιχα.

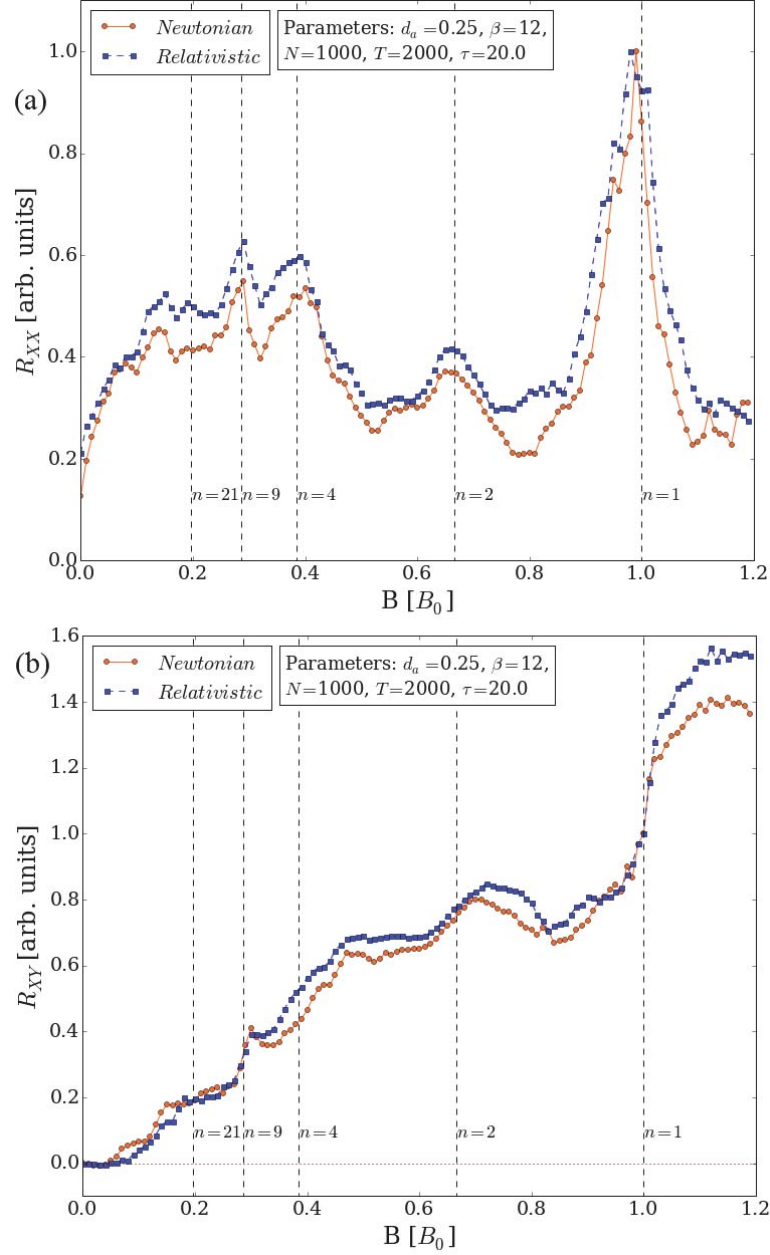
3.3.2 Σύγκριση

Πριν καν ακόμη κάνουμε υπολογισμούς, μπορούμε να υποθέσουμε ότι δεν θα υπάρχουν σημαντικές διαφορές μεταξύ των δύο συστημάτων. Αυτή η υπόθεση πηγάζει από δύο γεγονότα: Πρώτο, τα πειράματα με γραφένιο και με 2DEG έχουν πολύ παρόμοια ποιοτική δομή. Δεύτερο, προσομοιώσεις με 2DEG με δυναμικό τύπου cosine έχουν γίνει στο παρελθόν [77] και έχουν (έως κάποιο βαθμό) παρόμοια συμπεριφορά με το μοντέλο μας. Με το εκλεπτυσμένο μοντέλο μας μπορούμε να εξερευνήσουμε τις διαφορές (εάν υπάρχουν) μεταξύ των δύο συστημάτων. Δείχνουμε τα αποτελέσματα στο σχ. 3.5.

Όπως αναμέναμε δεν υπάρχουν ουσιαστικές διαφορές μεταξύ των δύο συστημάτων. Το ότι η Νευτώνεια καμπύλη φαίνεται να είναι συνεχώς κάτω από την ρελατιβιστική το αποδίδουμε στην κανονικοποίηση μας. Κάθε καμπύλη μετράται με βάση την μέγιστη τιμή της, όμως μικρές ανακρίβειες στην κύρια κορυφή ισομετρίας (λόγω πεπερασμένων μέσων όρων) μπορούν να “ανεβοκατεβάσουν” ελάχιστα ολόκληρη την υπόλοιπη καμπύλη.

Θα ήταν ενδιαφέρον να δούμε διαφορές σε πειράματα μεταξύ έτερο-δομών 2DEG και γραφενίου. Για αυτό τον σκοπό, προτείνουμε ότι η ενέργεια Φέρμι των φορέων πρέπει να αυξηθεί. Για περισσότερα παροτρύνουμε τον ενδιαφερόμενο αναγνώστη να δει τις Προοπτικές (κεφ. 4).

3.3. ΝΕΥΤΩΝΕΙΟ VS. ΣΧΕΤΙΚΙΣΤΙΚΟ



Σχήμα 3.5: Σύγκριση των προσομοιώσεων μας χρησιμοποιώντας σχετικιστική (2.12) και Νευτώνεια (3.4) κινητική ενέργεια. (a) Μαγνήτο-αντίσταση, κανονικοποιημένη από την μέγιστη τιμή της, (b) Hall-αντίσταση, κανονικοποιημένη από την τιμή της στο $B = 1.0$.

Κεφάλαιο 4

Συμπεράσματα και Προοπτικές

4.1 Συμπεράσματα

Σε πρόσφατα πειράματα κατασκευάστηκαν δείγματα με υπερπλέγματα antidot σε γραφένιο, τα οποία για πρώτη φορά έδειχναν φαινόμενα ισομετρίας και βαλλιστική μαγνήτο-μεταφορά. Τα δείγματα σε αυτά τα πειράματα είχαν διάμετρο antidot της τάξης των 100 πλεγματικών σταθερών γραφενίου και απόσταση πλέγματος antidot της τάξης των 1000 πλεγματικών σταθερών γραφενίου. Για να προσομοιώσουμε τέτοιο σύστημα με καθιερωμένες μεθόδους ισχυρής δέσμευσης, θα χρειαζόμασταν ένα σύστημα με τουλάχιστον 10^8 πλεγματικές θέσης ατόμων άνθρακα. Αυτό δεν είναι δυνατό με τον υπάρχοντα εξοπλισμό υπολογιστικής δύναμης.

Έναντι αυτού, για να μελετήσουμε βαλλιστική μεταφορά στο γραφένιο, στρέψαμε την προσοχή μας σε ένα quasi-κλασσικό μοντέλο που βασίζεται στην προσέγγιση μονής κοιλάδας. Αυτό το μοντέλο, ήταν επέκταση προηγούμενων μοντέλων που δημιουργήθηκαν για την μελέτη διδιάστατων ηλεκτρονιακών αερίων. Συμπεριλάβαμε επιπλέον αρκετές τροποποιήσεις και επεκτάσεις βασισμένοι στις μοναδικές ιδιότητες του γραφενίου και τις συγκεκριμένες πειραματικές καταστάσεις.

Μελετήσαμε το μοντέλο μας και εξηγήσαμε διεξοδικά πολλά αξιοθαύμαστα μη γραμμικά φαινόμενα. Παραδείγματα αυτών είναι οι ισομετρικές κορυφές της μαγνήτο-αντίστασης λόγω μη γραμμικών συντονισμών και ιεραρχίες cantor ή το αρνητικό φαινόμενο Hall λόγω αρνητικών ουρών έτερο-συσχετίσεων των καναλισμένων τροχιών. Χρησιμοποιήσαμε πολλές τεχνικές για αυτά τα αποτελέσματα, όπως Τομές Poincaré, ανάλυση τροχιών, συναρτήσεις συσχέτισης κ.α..

Συγκρίνοντας το μοντέλο μας με πειράματα βρήκαμε καλή συμφωνία και ποιοτικά αλλά και ποσοτικά. Κορυφές που πηγάζουν από μη γραμμικούς συντονισμούς επιβεβαιώθηκαν στην δομή της μαγνήτο-αντίστασης. Το ίδιο έγινε και για μη-

κβαντισμένα βήματα που υπάρχουν στην Hall-αντίσταση. Απρόσμενα, ένα το ενδιαφέρον φαινόμενο της αρνητικής αντίστασης Hall δεν επιβεβαιώθηκε στο πείραμα.

Αυτή η διαφορά κλειδί μεταξύ του πειράματος και του μοντέλου μας, μας οδήγησε σε ένα σημαντικό συμπέρασμα για την πραγματική κίνηση των φορέων στο πείραμα. Λόγω κάποιων άγνωστων μηχανισμών (δίνουμε προτάσεις στις ακόλουθες ενότητες), οι καναλισμένες και skipping τροχιές καταπνίγονται. Αυτές οι τροχιές παίζουν σημαντικό ρόλο σε φαινόμενα που δεν εμφανίζονται στα πειράματα.

Όλες οι παραπάνω παρατηρήσεις και αποτελέσματα θα αποτελέσουν σημεία εκκίνησης για μελλοντικές μελέτες, κάποιες από τις οποίες σχολιάζονται στις επόμενες ενότητες οι οποίες αποτελούν τις Προοπτικές αυτής της εργασίας.

4.2 Σκέδαση Πραγματικού-Χρόνου και Τραχιά Antidots

Όπως σχολιάσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, η προσέγγιση της σκέδασης κατά Poisson φαίνεται να μην είναι αρκετά ακριβής για το σύστημα του γραφενίου. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στην πειραματική μέθοδος για την χάραξη τρυπών, την φύση του πλέγματος του γραφενίου το οποίο είναι γεμάτο από φαινόμενα άκρων, ή άλλους λόγους.

Για να προσεγγίσουμε την κίνηση των φορέων σε τέτοιο σύστημα, θα συμπεριλάβουμε δύο επιπλέον μηχανισμούς. Ο πρώτος ο θα είναι μία ενίσχυση της σκέδασης Poisson με μία μέθοδο “σκέδασης πραγματικού-χρόνου”, κατά την οποία η πιθανότητα σκέδασης επηρεάζεται από την ηλεκτρονική πυκνότητα. Όσο υψηλότερη είναι η πυκνότητα, τόσο λιγότερο πιθανό είναι για να συμβεί σκέδαση, λόγω φαινομένων screening. Όπως ξέρουμε, η πυκνότητα μειώνεται κοντά στα antidots, λόγω των quasi-εντοπισμένων καταστάσεων άκρης [71] και άλλων φαινομένων.

Ο δεύτερος μηχανισμός θα είναι να ενσωματώσουμε “τραχιά antidots” τα οποία σκοπεύουν να προσομοιάσουν την τραχύτητα των άκρων που δημιουργείται λόγω της πειραματικής διαδικασίας. Σαν πρώτο βήμα, η τραχύτητα θα αναπαραχθεί με ένα επιπλέον τυχαίο δυναμικό μαζί με το δυναμικό των antidots. Αυτό το τυχαίο δυναμικό μπορεί να είναι συσχετισμένο, μπορεί και όχι.

4.3 Δεύτερη Τάξη Προσέγγισης Διασποράς

Για να έχουμε μία αναπαράσταση της κινητικής ενέργειας των φορέων, χρησιμοποιήσαμε την προσέγγιση πρώτης τάξης της σχέσης διασποράς του γραφενίου. Πολύ βολικά, η κλασική μετάφρασή της φόρμουλας αυτής (αντικατάσταση του

4.3. ΔΕΥΤΕΡΗ ΤΑΞΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗΣ ΔΙΑΣΠΟΡΑΣ

κυματάνυσματος με την γενικευμένη ορμή) συμπίπτει επακριβώς με την κινητική ενέργεια ενός υπερ-σχετικιστικού σωματιδίου.

Τι θα συνέβαινε εάν, αντί για την πρώτη τάξη, κανείς χρησιμοποιούσε την δεύτερη τάξη προσέγγισης (1.47):

$$\epsilon_\lambda(\mathbf{q}; \xi) = 3t' + \lambda \hbar v_F |\mathbf{q}| - |\mathbf{q}|^2 \left[\frac{9t'^2 a^2}{4} + (\lambda \cdot \xi) \frac{3ta^2}{8} \cos(3\varphi_q) \right] ? \quad (4.1)$$

Η παραπάνω εξίσωση εισαγάγει τρεις καινούργιες έννοιες: το ψευδοσπίν κοιλάδας, ανισοτροπία και εξάρτηση από την ενέργεια Φέρμι. Το τελευταίο σημαίνει ότι η ίδια η μορφή της σχέσης διασποράς αλλάζει καθώς η ενέργεια μεγαλώνει (αντί για να έχουμε πάντα ιστροπικούς κύκλους αυξανόμενης ακτίνας).

Αυτή η σχέση διασποράς μπορεί να ερμηνευτεί κλασσικά με την αντικατάσταση $\mathbf{P} = \hbar \mathbf{q} = \hbar(\mathbf{k} - \xi \mathbf{K})$. Για να κάνουμε την έκφραση αδιάστατη, χρησιμοποιούμε τις ίδιες μονάδες μέτρησης όπως και για το σχετικιστικό σύστημα (E_F, v_F, α) . Η κινητική ενέργεια που λαμβάνουμε είναι:

$$\mathcal{K} = |\mathbf{P}| - |\mathbf{P}|^2 \left(\frac{E_F}{t} \right) \left[\left(\frac{t'}{t} \right) + \frac{\xi}{6} \cos(3\phi_{\mathbf{P}} + \omega) \right] \quad (4.2)$$

με

$$P_x = (p_x + \xi K_0 + yB) , \quad P_y = (p_y - xB) \quad (4.3)$$

(τα πάντα είναι αδιάστατα, βλ. εν. 2.4.1), με E_F/t να είναι η τιμή της ενέργειας Φέρμι σε σχέση με την σταθερά μεταπήδησης κοντινών γειτόνων και t' να είναι η (ενεργός) σταθερά μεταπήδησης δευτέρων γειτόνων. Το ψευδοσπίν κοιλάδας ξ μπορεί να μεταχειριστεί ώστε να συμπεριλαμβάνει φαινόμενα σκέδασης από κοιλάδα σε κοιλάδα. Η γωνία ω υποδεικνύει την σχετική περιστροφή του πλέγματος της κυψέλης ως προς το υπερθετιμένο υπερπλέγμα. Αναλυτικά, είναι εξ' ορισμού η γωνία του ανύσματος $\mathbf{a}_1$ με π.χ. τον x -άξον του τετραγωνικού υπερπλέγματος.

Η παράμετρος K_0 είναι επίσης αδιάστατη, και συνδέεται με το K ως:

$$K_0 = \frac{\hbar K v_F}{E_F} = \frac{4\pi \hbar v_F}{3a_0 E_F} = \frac{71.2}{E_F} \text{eV} \quad E_F=0.2\text{eV} \approx 356 \quad (4.4)$$

η οποία είναι μία τεράστια τιμή συγκρινόμενη με το μέτρο της γενικευμένης ορμής, το οποίο έχει αριθμητική τιμή της τάξης της μονάδας. Αυτό είναι σε συμφωνία με την υπόθεση της προσέγγισης μονής κοιλάδας (βλ. εν. 1.5.1) αφού το κυματάνυσμα της σχέσης διασποράς πρέπει να είναι πολύ μικρότερο από το κυματάνυσμα της κοιλάδας.

Εάν συμπεριλάβουμε αυτή την κινητική ενέργεια στο μοντέλο μας, συμβαίνουν κάποια πολύ ενδιαφέροντα φαινόμενα. Φυσικά, η κινητική ενέργεια δεν είναι “ισοτροπική” αλλά υπάρχουν τρεις “προτιμητέες” διευθύνσεις για δοσμένο μέτρο

ανύσματος ορμής. Το σχ. 4.1 δείχνει τροχιές που έχουν υπολογιστεί αριθμητικά με βάση αυτή την κινητική ενέργεια σε μαγνητικό πεδίο, για διάφορες τιμές της ενέργειας Φέρμι (χωρίς δυναμικό antidots). Οι τροχιές κυκλοτρόνου παραμορφώνονται σταδιακά σε τρίγωνα καθώς αυξάνουμε την ενέργεια Φέρμι.

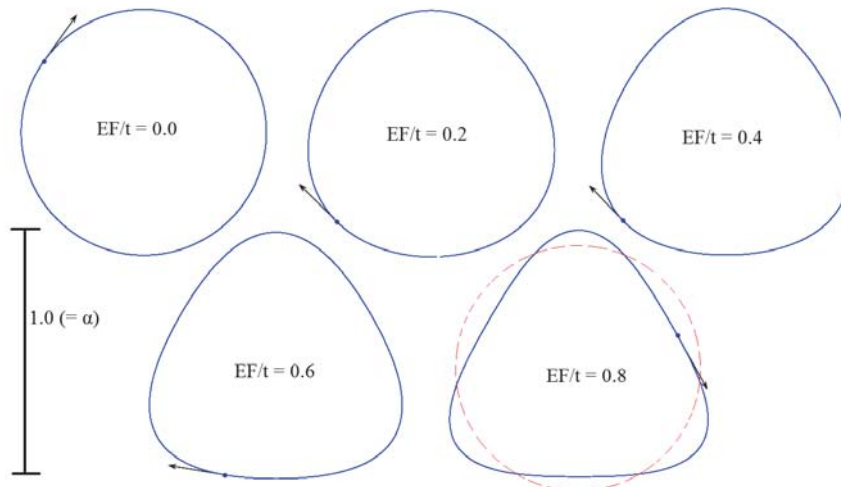
Η πρώτη επίδραση αυτού του αποτελέσματος που αμέσως μπορεί κανείς να σκεφτεί, είναι η αλληλεπίδραση με το τριγωνικό υπερπλέγμα από antidots. Μία τέτοια τροχιά θα μπορούσε να έχει πάντα ισομετρικές κορυφές για όλους τους τριγωνικούς¹ αριθμούς από antidots. Σαφώς, υπάρχουν πολλά άλλα επιπλέον φαινόμενα που χρειάζονται προσοχή, και αυτή η προσοχή θα τους δοθεί σε μελλοντική μελέτη.

4.4 Εξαγωνικό Υπερπλέγμα από Antidots

Λόγω του τριγωνικού σχήματος των τροχιών κυκλοτρόνου, μπορεί να είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρον να μελετήσει κανείς φαινόμενα ισομετρίας σε εξαγωνικά ADSLs [79].

Δυστυχώς, αυτά τα πειράματα είχαν πολύ μικρότερη κινητικότητα στα δείγματα τους, και δύσκολα έδειχναν φαινόμενα βαλλιστικής μεταφοράς, όπως κο-

¹Τριγωνικοί αριθμοί είναι αυτοί που εξ' ορισμού μετρούν τα αντικείμενα που φτιάχνουν ισόπλευρα τρίγωνα, όπως 3, 6, 10 κ.τ.λ..



Σχήμα 4.1: Παραμόρφωση τροχιών “κυκλοτρόνου” όταν αυτές υπακούν την κινητική ενέργεια της εξ. (4.2). Όλα τα γραφήματα είναι στην ίδια κλίμακα, η οποία δίνεται στο αριστερό μέρος της εικόνας. Για διαύγεια, σχεδιάζουμε ένα αντίγραφο της πρώτης εικόνας πάνω από την τελευταία.

ρυφές ισομετρίας πέραν της κύριας $n = 1$. Επομένως, προσομοιώσεις μπορεί να είναι ένα καλό σημείο εκκίνησης για την μελέτη βαλλιστικής μεταφοράς σε εξάγωνικά ADSLs γραφενίου.

4.5 Σύγκριση με Υπολογισμούς Ισχυρής Δέσμης

Για να επιβεβαιώσουμε την ημικλασική προσέγγιση της πρώτης και δεύτερης τάξης της σχέσης διασποράς, και πιθανώς για να καταστρώσουμε νέες επεκτάσεις στην quasi-κλασική θεωρία (όπως π.χ. σκέδαση μεταξύ των κοιλάδων), σκοπεύουμε να συγκρίνουμε ημικλασικές προσομοιώσεις με υπολογισμούς ισχυρής δέσμης (στην εικόνα μοναδικού ηλεκτρονίου).

Ένα μοντέλο ισχυρής δέσμης του γραφενίου έχει ήδη φτιαχτεί και εφαρμοστεί σε αυτή την εργασία, με την χρήση του προγραμματιστικού πακέτου Kwant [92, 93, 94]. Χρησιμοποιήθηκε λόγω χάρη για τον υπολογισμό της σχέσης διασποράς νανοκορδέλων γραφενίου που φαίνεται στην εν. 1.6. Με το Kwant μπορεί κανείς εύκολα να φτιάξει ένα σύστημα ισχυρής δέσμης αυθαίρετου σχήματος, και με την ίδια ευκολία να τρυπήσει τρύπες σε αυτό.

Λόγω του μεγάλου διαχωρισμού της κλίμακας των πειραμάτων, π.χ. το μέγεθος ενός μόνο antidot περιέχει χιλιάδες πλεγματικές θέσεις, μία ευθείς σύγκριση του μοντέλου ισχυρής δέσμης και του πειράματος είναι αδύνατη στο παρόν. Συνεπώς, σχεδιάζουμε να συγκρίνουμε μεταφορά σε μικρότερα συστήματα, με μόνο λίγα antidots μεταξύ των μοντέλων ισχυρής δέσμης και quasi-classical.

Η προσέγγισή μας θα χρησιμοποιήσει τον φορμαλισμό κατά Landauer-Büttiker, όπου ο υπολογισμός της πιθανότητας μετάβασης από μία επαφή σε όλες τις άλλες επιτρέπει τον καθορισμό της μαγνήτο- και Hall- αντίστασης σε μικρό δείγμα. Αυτοί οι υπολογισμοί μπορούν να γίνουν είτε με την επίλυση των εξισώσεων ισχυρής δέσμης με ημιάπειρες επαφές συνημμένες στο δείγμα, ή μετρώντας πόσες τροχιές μπορούν να βγουν από τις επαφές στο ημικλασικό μοντέλο.

Η δεύτερη προσέγγιση θα είναι η σύγκριση πυκνοτήτων ρεύματος μέσα στο δείγμα, χρησιμοποιώντας κλασική πυκνότητα χώρου φάσεων που μοιάζει προσεγγιστικά με την κβαντική κυματοσυνάρτηση που εκτινάσσεται από την επαφή. Αυτό θα πραγματοποιηθεί με την χρήση της προβολής Husimi [95, 96]:

$$\text{Hu}[\mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma; \psi(\{\mathbf{r}_i\})] = |\langle \psi | \mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma \rangle|^2 \quad (4.5)$$

με

$$\langle \psi | \mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma \rangle := \left(\frac{1}{\sigma \sqrt{\pi/2}} \right) \sum_i \psi(\mathbf{r}_i) \exp \left[-\left(\frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0}{4\sigma^2} + i\mathbf{r}_0 \mathbf{k}_0 \right) \right] \quad (4.6)$$

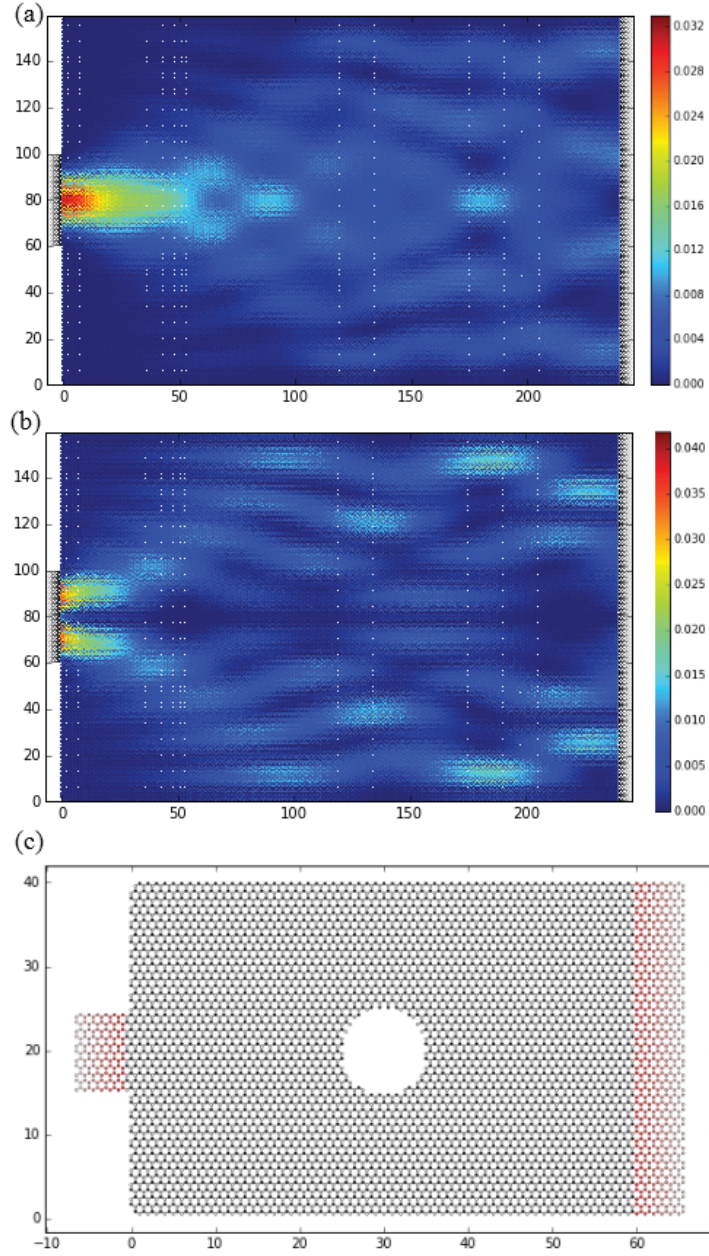
η οποία είναι η προβολή της κυματοσυνάρτησης ισχυρής δέσμης στις ονομαζόμενες “coherent states” (σύμφωνες καταστάσεις). Θα την χρησιμοποιήσουμε

σε μία περιοχή κοντά στην επαφή ώστε να λάβουμε μία αρχική κατανομή χώρου φάσεων για τις ημικλασσικές προσομοιώσεις.

Στα σχ. 4.2(a) και (b) δείχνουμε τις πρώτες δύο κυματοσυναρτήσεις σκέδασης ενός quantum point contact γραφενίου, όπως τις υπολογίσαμε με το Kwant. Το σύστημα είναι πεπερασμένο στην y διεύθυνση καθώς και την αρνητική x αλλά άπειρο στην θετική x .

Οι κυματοσυναρτήσεις σκέδασης πηγάζουν από εισερχόμενες ιδιοσυναρτήσεις της επαφής/καλωδίου zigzag που έχει προσαρτηθεί στο αριστερό μέρος του συστήματος. Αυτές υπολογίζονται σε συγκεκριμένη ενέργεια και κατατάσσονται κατά ταχύτητα ομάδας (κρατάμε μόνο θετικές ταχύτητες ομάδος). Η σχέση διασποράς του καλωδίου/επαφής zigzag υπάρχει στο σχ. 1.8. Επιπλέον, δείχνουμε ένα μικρότερο σύστημα γραφενίου (για διαύγεια) στο οποίο έχουμε ανοίξει μία τρύπα(σχ. 4.2(c)).

4.5. ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΕ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥΣ ΙΣΧΥΡΗΣ ΔΕΣΜΕΥΣΗΣ



Σχήμα 4.2: (a) Πρώτα και (b) δεύτερα πλάτη σκεδαζόμενης κυματοσυνάρτησης για ενέργεια $\epsilon = 0.2$ (σε μονάδες σταθεράς μεταπήδησης $\eta\eta$). (c) Μικρότερο δείγμα γραφενίου με *antidot*. Οι άξονες σε όλα τα σχήματα μετρώνται σε σταθερές του πλέγματος κυψέλης a_0 (βλ. κεφ. 1).

Βιβλιογραφία

- [1] Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Gregorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004)
- [2] K. Novoselov *et al.*, *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, *Nature* **438** (7065) pp: 197-200 (2005)
- [3] P. R. Wallace, *The band theory of graphite*, *Phys. Rev.* **71**, 622-634 (1947)
- [4] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press (1998)
- [5] W. M. Lomer, *The valence bands in two-dimensional graphite*, *Proc. Royal Soc.* (1954)
- [6] A. H. Castro Neto *et al.*, *The electronic properties of graphene*, *Reviews of Modern Physics* **81**, 109 (2009)
- [7] T. Ando, *Theory of Electronic States and Transport in Carbon Nanotubes*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 777 (2005)
- [8] S. Das Sarma, A. Shaffique, E. H. Hwang, E. Rossi, *Electronic transport in two-dimensional graphene*, *Reviews of Modern Physics* **83**, 407 (2011)
- [9] S. Konschuh *et al.* "Tight-binding theory of the spin-orbit coupling in graphene", *Phys. Rev. B* **82**, 245412 (2010)
- [10] M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge University Press (2012)
- [11] M. Goerbig, *Electronic Properties of Graphene in a Strong Magnetic Field*, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1193 (2011)
- [12] Berry, M. V., Mondragon, R. J., *Neutrino Billiards: Time-Reversal Symmetry-Breaking Without Magnetic Fields*, *Proceedings of the Royal Society A*, **412**, 53 (1987)

- [13] J. C. Slonczewski, P. R. Weiss, *Band structure of graphite*, Phys. Rev. **109**, 272 (1958)
 - [14] G. W. Semenoff, *Condensed matter simulation of a three dimensional anomaly*, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449-2452 (1984)
 - [15] F. D. Haldane, *Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed matter realization of the ‘parity anomaly’*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015-2018 (1988)
 - [16] K. S. Novoselov *et al.*, *Two dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, Nature **438**, 197-200 (2005)
 - [17] Y. Zhang *et al.*, *Experimental observation of the quantum hall effect and Berry’s phase in graphene*, Nature **438**, 201-204 (2005)
 - [18] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, J. P. Carbotte, *AC Conductivity of Graphene: From Tight-Binding Model to 2+1-Dimensional Quantum Electrodynamics*, Int. J. Mod. Phys. **21**, 4611 (2007)
 - [19] F. D. M. Haldane, *Model for a quantum Hall effect without Landau levels: condensed-matter realization of the “parity anomaly”*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988)
 - [20] Y. Zheng, T. Ando, *Hall conductivity of a two-dimensional graphite system*, Phys. Rev. B **65**, 245420 (2002)
 - [21] D. P. DiVincenzo, E. J. Mele, Phys. Rev. B **29**, 1685 (1984)
 - [22] M. A. H. Vozmediano *et al.*, Phys. Rev. B **72**, 155121 (2006)
 - [23] S. Ryu and Y. Hatsugai, Phys. Rev. Lett. **89**, 077002 (2002)
 - [24] H. Aoki, M. Dresselhaus, *Physics of Graphene - Chapter 7*, Springer, ISBN: 978-3-319-02632-9 (2014)
 - [25] C. W. J. Beenakker, *Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene*, Rev. Mod. Phys. **80**, 1337 (2008)
 - [26] S. Y. Zhou *et al.*, Nat. Phys. **2**, 595 (2006)
 - [27] S. V. Morozov *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 016801 (2006)
 - [28] A. F Morpurgo, F. Guinea, Phys. Rev. Lett. **97**, 196804 (2006)
 - [29] H. Suuzura, T. Ando, Phys. Rev. Lett. **98**, 016802 (2002)
-

-
- [30] McCann *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 146805 (2006)
 - [31] C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **97**, 067007 (2006)
 - [32] H. B. Heersche *et al.*, Nature **446**, 56 (2007)
 - [33] J. P. Hobson and W. A. Nierenberg, *The Statistics of a Two-Dimensional, Hexagonal Net*, Phys. Rev. **89**, 662 (1953)
 - [34] O. Klein, *Die reflexion von elektronen an einem potentialsprung nach der relativischen dynamik von Dirac*, Z. Phys. **53**, 157 (1927).
 - [35] A. Calogeracos, N. Dombey, Contemp. Phys. **40**, 313 (1999)
 - [36] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *Chiral Tunneling and the Klein paradox in graphene*, Nature Articles VOL. 2 (2006)
 - [37] P. E. Allain, J. Fuchs, *Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons*, Eur. Phys. J. B **83**, 301-317 (2011)
 - [38] V. Cheianov, V. Falko, *Selective transmission of Dirac electrons and ballistic magnetoresistance of n-p junctions in graphene*, Phys. Rev. B **74**, 041403 (2006)
 - [39] A.F. Young, P. Kim, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **2**, 101 (2011)
 - [40] R. K. Su, X. Chou, *Barrier penetration and Klein paradox*, J. Phys. A **26**, 1001-1005 (1993)
 - [41] N. Dombey, A. Calogeracos, *Seventy years of the Klein paradox*, PHys. Rep. **315**, 41-58 (1999)
 - [42] A. Calogeracos, N. Dombey, *History and physics of the Klein paradox*, Contemp. Phys. **40**, 313-321 (1999)
 - [43] T. R. Robinson, *On Klein tunneling in graphene*, American Association of Physics Teachers (2011)
 - [44] J. Fuchs, M. O. Goerbig, *Introduction to the physical properties of Graphene*, Lecture Notes 2008
 - [45] B. Thaller, *The Dirac Equation*, Springer-Verlag (1992)
 - [46] N. H. Shon, T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn **67**, 2421 (1998)
 - [47] T. Ando, T. Nakanishi, **67**, 1704 (1998)
-

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [48] T. Ando, T. Nakanishi, R. Saito, J. Phys. Soc. Jpn **67**, 2857 (1998)
- [49] E. McCann *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 146805 (2006)
- [50] J. H. Bardarson *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99** 106801 (2007)
- [51] K. Nomura, M. Koshino, S. Ryu, Phys. Rev. Lett. **99**, 14806 (2007)
- [52] V. Jakubsky, L. M. Nieto, M. S. Plyushchay, Phys. Rev. D **83**, 047702 (2011)
- [53] X. Chen, J. W. Tao, Appl. Phys. Lett. **94**, 262102 (2009)
- [54] M. I. Katsnelson, *Zitterbewegung, chirality, and minimal conductivity in graphene*, Eur. Phys. J. B **51**, 157 (2006)
- [55] M. I. Katsnelson, *Aharonov-Bohm effect in undoped graphene: Magnetotransport via evanescent waves*, EPL, **89**, 17001 (2010)
- [56] J. Tworzydło *et al.*, *Sub-Poissonian Shot Noise in Graphene*, Phys. Rev. Lett. **96**, 246802 (2006)
- [57] A. F. Young, P. Kim, *Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions*, Nat. Phys. **5**, 222 (2009)
- [58] Lee, P. A., Altshuler, B. L., Webb, R. A. (*Mesoscopic Phenomena in Solids* North-Holland, Amsterdam (1991))
- [59] A. R. Akhmerov, C. W. J. Beenakker, *Boundary conditions for Dirac fermions on a terminated honeycomb lattice*, Phys. Rev. B **77**, 085423 (2008)
- [60] E. McCann, V. I. Fal'ko, *Symmetry of boundary conditions of the Dirac equation for electrons in carbon nanotubes*, J. Phys.: Condens. Matter **16**, 2371 (2004)
- [61] A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker, *Detection of Valley Polarization in Graphene by a Superconducting Contact*, Phys. Rev. Lett. **98**, 157003 (2007)
- [62] C. E. Porter, *Statistical theories of spectra: fluctuations.*, New York: Academic Press (1965)
- [63] L. Brey, H. A. Fertig, *Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation*, Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006)

-
- [64] L. Brey, H. A. Fertig, *Edge states and the quantized hall effect in graphene*, Phys. Rev. B **73**, 19 (2006)
 - [65] L. Chico, M. P López Sancho, M. C. Muñoz, Phys. Rev. Lett. **81**, 1278 (1998)
 - [66] M. Fujita *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1920 (1996)
 - [67] K. Wakabayashi, *Carbon Bases Magnetism*, Elsevier, New York, Chapter 12 (2006)
 - [68] E. Ezawa, *Peculiar width dependence of the electronic properties of carbon nanoribbons*, Phys. Rev. B **73**, 045432 (2006)
 - [69] N. M. R. Peres, F. Guinea, A. H. Castro-Neto, Phys. Rev. B **73**, 125411 (2006)
 - [70] M. A. H. Vozmediano *et al.*, Phys. Rev. B **72**, 155121 (2005)
 - [71] . I. V. Zagorodnev, Zh. A. Devizorova and V. V. Enaldiev, *Resonant electron scattering by a graphene antidot*, Phys. Rev. B **92**, 195413 (2015)
 - [72] Supriyo Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University press, ISBN: 052159943 (1995)
 - [73] D. Weiss, G. Lutjering, K. Richter, *Chaotic Electron Motion in Macroscopic and Mesoscopic Antidot Lattices*, Chaos, Solitons and Fractals **8**, 1337-1357 (1997)
 - [74] Klaus von Klitzing, *25 Years of Quantum Hall Effect (QHE)*, S'eminare Poincar'e **2**, 1 – 16 (2004)
 - [75] M. V. Berry, Ann. Phys. (N.Y.), **131**, 163 (1981)
 - [76] D. Weiss *et al.*, Phys. Rev. Lett. **66**, 2790 (1991).
 - [77] R. Fleischmann, T. Geisel, R. Ketzmerick, *Magnetoresistance Due to Chaos and Nonlinear Resonances in Lateral Surface Superlattices*, Phys. Rev. Lett. **68**, 9 (1992)
 - [78] A. Sandner *et al.*, *Ballistic Transport in Graphene Antidot Lattices*, Nano Lett., **2015**, 15 (12), pp 8402–8406 (2015)
 - [79] R. Yagi *et al.*, *Ballistic transport in graphene antidot lattices*, Phys. Rev. B **92**, 195406 (2015)
-

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [80] S. Ishizaka, T. Ando, Phys. Low-Dim. Struct. 5/6, 5-12 (1999)
- [81] S. Ishizaka, T. Ando, Phys. Rev B **55**, 16331 (1997)
- [82] S. Ishizaka, T. Ando, Phys. Rev B **55**, 15195 (1997)
- [83] T. Geisel *et al.*, Phys. Rev. B **45**, 4372 (1992)
- [84] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer, New York (1989)
- [85] R. Fleischmann, T. Geisel, R. Ketzmerick, *Quenched and Negative Hall Effect in Periodic Media: Application to Antidot Superlattices*, Europhys. Lett., **25**, 219-224 (1994)
- [86] T. Geisel, A. Zacherl, G. Radons, Phys. Rev. Lett. **59**, 2503 (1987)
- [87] J. D. Meiss, E. Ott, Rev. Lett. **55**, 2741 (1985); Physica D **20**, 387 (1986)
- [88] G. Datseris, F. K. Diakonov, P. Schmelcher, *Effective intermittency and cross correlations in the standard map*, Phys. Rev. E **92**, 012914 (2015)
- [89] W. Press, *Numerical recipes: the art of scientific computing*, Cambridge University Press, ISBN: 0521431085
- [90] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570 (1957)
- [91] E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems*, New York: Cambridge University Press, pp. 18-19, 1993.
- [92] www.kwant-project.org
- [93] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, X. Waintal, *Kwant: a software package for quantum transport*, New J. Phys. **16**, 063065 (2014).
- [94] P. R. Amestoy, I. S. Duff, J. S. Koster, J. Y. L'Excellent, SIAM. J. Matrix Anal. & Appl. **23** (1), 15 (2001).
- [95] D. Mason, M. Borunda, E. Heller, *Quantum flux and reverse engineering of quantum wave functions*, EPL **60005**, 1 (2013)
- [96] D. Mason, M. Borunda, E. Heller, *Semiclassical deconstruction of quantum states in graphene*, Phys. Rev. B, **88**, 16 (2013)