

Przewodnictwo elektryczne dwuwarstwy grafenowej

Grzegorz Rut



Wydział Fizyki, Astronomii
i Informatyki Stosowanej
Uniwersytet Jagielloński

Opiekun

dr hab. Adam Rycerz

Praca magisterska wykonana w Zakładzie Teorii Materii
Skondensowanej i Nanofizyki

Wydział Fizyki, Astronomii
i Informatyki Stosowanej
Uniwersytet Jagielloński

Oświadczenie

Ja niżej podpisany Grzegorz Rut (nr indeksu: 1015903), student Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego kierunku fizyka, oświadczam, że przedłożona przeze mnie praca magisterska pt. PRZEWODNICTWO ELEKTRYCZNE DWUWARSTWY GRAFENOWEJ przedstawia wyniki badań wykonanych przeze mnie osobiście, pod kierunkiem dr hab. Adama Rycerza. Pracę napisałem samodzielnie. Oświadczam, że moja praca dyplomowa została opracowana zgodnie z Ustawą o prawie autorskim i prawach pokrewnych z dnia 4 lutego 1994 r. (Dziennik Ustaw 1994 nr 24 poz. 83 wraz z późniejszymi zmianami). Jestem świadom, że niezgodność niniejszego oświadczenia z prawdą ujawniona w dowolnym czasie, niezależnie od skutków prawnych wynikających z ww. ustawy, może spowodować unieważnienie tytułu nabytego na podstawie tej pracy.

Kraków, dnia podpis studentki/studenta

Dziękuję serdecznie mojemu opiekunowi naukowemu, dr. hab. Adamowi Rycerzowi, za cenne uwagi, poświęcony czas i wyrozumiałość. Jestem również wdzięczny dr. Andrzejowi Odrzywołkowi za pomoc w opanowaniu narzędzi wykorzystywanych do obliczeń numerycznych. Dziękuję Kolegom z $\langle N | \hat{K} | F \rangle$ za przyjemną atmosferę pracy i wartościowe dyskusje. W szczególności chciałbym podziękować Karolowi Dąbrowskiemu i Dawidowi Dulowi, którzy pomogli mi w zredagowaniu niniejszego tekstu.

Streszczenie

Praca dotyczy grupy zagadnień związanych z transportem ładunku elektrycznego przez podwójną warstwę nowoodkrytej odmiany alotropowej węgla (grafenu) w obecności pól elektromagnetycznych. Przedstawiono teoretyczny opis dynamiki elektronu w monowarstwie i dwuwarstwie grafenowej w oparciu o równanie Diraca. Przeprowadzono analityczne wyprowadzenie funkcji falowych nośników ładunku elektrycznego w dwuwymiarowych układach w zewnętrznym polu magnetycznym. W oparciu o wyznaczone położenie poziomów Landaua w grafenie przedyskutowano możliwość detekcji kwantowego efektu Halla w temperaturze pokojowej. Przedstawiono podstawy kwantowego opisu przewodnictwa elektrycznego; w szczególności przybliżono wzór Landauera- Büttikera (L-B) łączący przewodnictwo z prawdopodobieństwem przejścia elektronu przez układ. Zreferowano wyniki dotychczasowych prac na temat przewodnictwa monowarstwy w polu magnetycznym i dwuwarstwy w zerowym polu. W oparciu o wzór L-B sformułowano zagadnienie rozpraszania w dwuwarstwowym grafenie w prostopadłym polu magnetycznym. Potwierdzono, że przewodnictwo w punkcie Diraca wynosi $G = 8 e^2 W / (\pi h L)$ i nie zależy od pola. Wyznaczono położenie rezonansów transmisji dla silnych pól magnetycznych i sprawdzono, że odpowiadają one poziomom Landaua. W wyniku numerycznych obliczeń oszacowano wartość przewodnictwa w układzie o niezerowym wypełnieniu na poziomach Landaua. Jest ona dwukrotnie niższa niż w punkcie Diraca.

Spis treści

Spis najczęściej używanych oznaczeń	3
1. Wprowadzenie	4
2. Podstawy kwantowego opisu grafenu	6
2.1. Struktura krystaliczna	6
2.2. Hamiltonian układów grafenowych	7
3. Układy dwuwymiarowe w polu magnetycznym. Poziomy Landaua	11
3.1. Dwuwymiarowy gaz elektronów nierelatywistycznych w zewnętrznym polu magnetycznym	11
3.2. Monowarstwowy grafen w polu magnetycznym	12
3.3. Dwuwarstwowy grafen w polu magnetycznym	14
3.4. Rozszczepienie zeemanowskie	18
4. Kwantowy opis przewodnictwa elektrycznego. Wzór Landauera-Büttikera	20
4.1. Przewodnictwo elektryczne jako zagadnienie rozpraszania	20
4.2. Wyprowadzenie wzoru Landauera-Büttikera	22
5. Magnetoprzewodnictwo grafenu monowarstwowego	24
5.1. Schemat układu i jego hamiltonian	24
5.2. Zagadnienie rozpraszania	25
6. Przewodnictwo elektryczne grafenu dwuwarstwowego	29
6.1. Równanie Diraca i masa efektywna	29
6.2. Funkcje falowe	31
6.3. Zagadnienie rozpraszania	32
7. Magnetoprzewodnictwo w dwuwarstwowym grafenie	35
7.1. Zagadnienie rozpraszania	35
7.1.1. Zerowe wypełnienie pasma	35
7.1.2. Niezerowe wypełnienie pasma	38
8. Podsumowanie	40
Dodatek A Symetria względem transformacji cechowania	41
Dodatek B Jawne sformułowanie zagadnienia rozpraszania dla $E - E_p \neq 0$	43
B.1 Magnetoprzewodnictwo w monowarstwowym grafenie	43
B.2 Przewodnictwo elektryczne grafenu dwuwarstwowego	43

B.3 Magnetoprzewodnictwo grafenu dwuwarstwowego	44
Bibliografia	45

Spis najczęściej używanych oznaczeń

\vec{a}_i	wektory sieci rzeczywistej
\vec{a}_i^*	wektory sieci odwrotnej
\vec{A}	potencjał wektorowy
B	wartość indukcji pola magnetycznego
χ	potencjał skalarny
$-e$	ładunek elektronu
G	przewodnictwo elektryczne, $G = I/U$, $G_0 = 4 e^2/h$
g_s	współczynnik degeneracji spinowej
g_v	współczynnik generacji dolinowej
h	stała Plancka, $\hbar = h/(2\pi)$
I	natężenie prądu
l_B	długość magnetyczna, $l_B = \sqrt{\hbar/(e B)}$
m_e	masa spoczynkowa elektronu
m^*	masa efektywna elektronu
μ	potencjał elektrochemiczny
ν_F	prędkość Fermiego
p_\perp	pęd elektronu prostopadły do pola magnetycznego
r_c	promień cyklotronowy, $r_c = p_\perp/(e B)$
ω_c	częstość cyklotronowa, $\omega_c = e B/m^*$
U	napięcie elektryczne
V	różnica pomiędzy energiami potencjalnymi elektronu w poszczególnych warstwach dwu-warstwowej grafenowej

1. Wprowadzenie

W 2004 roku Konstanty Nowosiołow i Andre Geim ze współpracownikami otrzymali nową krystaliczną odmianę alotropową węgla- grafen [1, 2]. Materiał ten wzbudził szczególnie duże zainteresowanie ze względu na zachowanie nośników ładunku elektrycznego.

W standardowych układach krystalicznych do opisu ruchu nośników wykorzystuje się równanie Schrödingera, w którym masę elektronu m_e zastępuje na ogół od niej różna masa efektywna m^* (np. dla arsenku galu $m^* \approx 0.067 m_e$). Badania grafenu wykazały, iż ruch elektronów w tym materiale można opisać równaniem Diraca, w dodatku z zerową masą efektywną [3], co przewidziano teoretycznie już w 1984 roku [4, 5]. Eksperymentalna i teoretyczna analiza ujawniły dalsze wyjątkowe właściwości grafenu: bardzo wysoką wytrzymałość mechaniczną, niską rezystancję czy wysoką przezroczystość dla światła widzialnego [6, 7]. Te jak i inne jego parametry fizyczne zapewniły mu tytuł materiału XXI wieku. Obecnie w ośrodkach naukowych na całym świecie poszukuje się sposobu na otrzymanie go w skali przemysłowej oraz bada się jego potencjalne zastosowania praktyczne. Istotnym wyzwaniem jest także opracowanie technologii umożliwiającej wytwarzanie obwodów grafenowych w sposób powtarzalny, lecz wydaje się, że ostatnio w tej dziedzinie nastąpił przełom [8].

Pierwsza praca na temat dwuwarstwowego grafenu pojawiła się w 2006 roku [10]. Okazało się, iż jego fizyczne właściwości są nie mniej interesujące. Jedną z nich jest możliwość kontrolowania szerokości pasma wzbronionego prostopadłym do jego powierzchni polem elektrycznym (monowarstwa posiada zerową przerwę energetyczną), co może mieć zasadnicze znaczenie dla zastosowań w przemyśle elektronicznym. Dwuwarstwa zachowuje przy tym część pożądaných cech pojedynczej warstwy- między innymi wysoką wytrzymałość mechaniczną czy wysoka ruchliwość nośników ładunku.

Wyjątkowość grafenu potwierdziła obserwacja kwantowego efektu Halla w temperaturze pokojowej w układzie opartym na tym materiale. Detekcja tego efektu w standardowych układach półprzewodnikowych z dwuwymiarowym gazem elektronowym wymaga temperatur nie przekraczających 30 K [9]. Doświadczenie to było możliwe głównie dzięki dużym odstępom energetycznym między poziomami Landaua. Różnica energii między zerowym a pierwszym poziomem Landaua w monowarstwie w polu $B = 30$ T wynosi około $\Delta E \approx 2300$ K, jest więc około ośmiokrotnie większa od energii termicznej $k_B T$. Obserwacja ta otworzyła perspektywy produkcji urządzeń opartych na efektach kwantowych a zarazem działających w wysokich temperaturach. Warto zauważyć, że analogiczna obserwacja kwantowego efektu Halla w temperaturze pokojowej w przypadku dwuwarstwy grafenowej wymagałaby zastoso-

wania pola około 50 T. Wydaje się zatem, że taki eksperyment może również zostać wkrótce wykonany.

Szczególnie interesujące są właściwości transportowe obu materiałów. Badania teoretyczne wykazały, iż, przy zaniedbaniu oddziaływania elektron- elektron i rozpraszania na zanieczyszczeniach sieci, oba układy zachowują się w pewnych okolicznościach jak klasyczne układy dyfuzyjne: ich konduktancja jest proporcjonalna do ilorazu W/L (W - szerokość próbki, L - długość próbki w kierunku prądu), zaś czynnik Fano wynosi $F = 1/3$, co jest identyczne z wynikiem dla drutu z nieporządkiem [11, 12, 13]. Eksperymenty [14, 15] wkrótce potwierdziły przytoczone wyniki teoretyczne. Z tego powodu, możemy mówić o pseudodyfuzyjnym charakterze przewodnictwa w grafenie.

Analiza teoretyczna pojedynczej warstwy grafenowej w obecności prostopadłego do jej powierzchni pola magnetycznego ujawniła, iż pole to nie wpływa na właściwości transportowe w pobliżu punktów Diraca [16]. Co więcej, pole o odpowiednim natężeniu jest w stanie stłumić przewodność w układzie wypełnionym elektronowo lub dziuowo. Okazuje się jednak, iż w wyniku rezonansów w pobliżu poziomów Landaua znów pojawia się pseudodyfuzyjny charakter transportu. Zwiększając natomiast wypełnienie układu przechodzimy do obszaru transportu balistycznego, w którym konduktancja jest proporcjonalna do szerokości układu.

Celem tej pracy jest przeprowadzenie analogicznej analizy teoretycznej magnetoprzewodnictwa dwuwastwowego grafenu i porównanie wyników z rozważanymi wcześniej układami. Problem ten nie był jak dotąd dyskutowany w literaturze podmiotu.

Praca składa się z ośmiu rozdziałów. Rozdział 2. został poświęcony podstawom opisu ruchu elektronów w układach grafenowych. W rozdziale 3. wyznaczono funkcje falowe w układach grafenowych w polu magnetycznym, które w dalszych rozdziałach wykorzystywane zostaną do analizy przewodnictwa elektrycznego. Dodatkowo, w rozdziale 3. zestawiono poziomy Landaua układów grafenowych i dwuwymiarowego gazu elektronowego, które, jak się później okaże, odgrywają ważną rolę w opisie przewodnictwa. Rozdział 4. zawiera podstawowe informacje na temat zagadnienia kwantowego transportu w układach nanoskopowych. Przedstawiono w nim również zarys teorii Landauera.

Rozdziały 5. i 6. stanowią wprowadzenie do problemu przewodnictwa dwuwarstwowego grafenu w niezerowym polu. Przytoczone zostały w nich wyniki dotychczasowych prac na temat przewodnictwa monowarstwy w polu magnetycznym [16] i dwuwarstwy w zerowym polu [13]. Rozdział 7. został poświęcony prezentacji oryginalnych wyników dotyczących magnetoprzewodnictwa dwuwarstwy grafenowej oraz dyskusji ich relacji z wynikami literatury przedmiotu dla podobnych układów (rozdziały 5. i 6.). Ostatni rozdział stanowi podsumowanie pracy.

2. Podstawy kwantowego opisu grafenu

2.1. Struktura krystaliczna

Grafen to dwuwymiarowa sieć atomów węgla typu plaster miodu. Można ją opisać jako sieć rombowa Bravais'go z dwupunktową bazą:

$$\vec{b}_A = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_B = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

gdzie $a \approx 0.147 \text{ nm}$ to długość wiązania między sąsiadującymi atomami węgla. Sieć ta rozpięta jest na wektorach bazowych (rys. 2.1):

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ -a\sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}a \\ \frac{\sqrt{3}}{2}a \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

zatem położenie atomów podsieci A i B na płaszczyźnie można zapisać jako:

$$\begin{aligned} \vec{R}_{i,A} &= m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + \vec{b}_A = \vec{R}_i + \vec{b}_A, \\ \vec{R}_{i,B} &= m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + \vec{b}_B = \vec{R}_i + \vec{b}_B, \end{aligned} \quad (2.3)$$

gdzie m, n to liczby całkowite, \vec{R}_i odpowiada położeniu i -tego węzła sieci, do którego atomy te należą.

Z równania definiującego wektory odwrotnej $\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j^* = 2\pi\delta_{ij}$ wynika, iż są one postaci:

$$\vec{a}_1^* = \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{3a} \\ -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2^* = \begin{pmatrix} \frac{4\pi}{3a} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Pierwsza strefa Brillouina (komórka Wignera-Seitz w sieci odwrotnej) określa przedział niezależnych wartości wektorów sieci odwrotnej. W grafenie ma ona postać sześciokąta (rys. 2.1). Wektory falowe w sieci Bravais'ego są określone z dokładnością do wektora sieci odwrotnej $\vec{G} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^*$, gdzie h, k to liczby całkowite. Wierzchołki strefy Brillouina odpowiadają więc dwóm niezależnym wektorom falowym (\vec{K} i \vec{K}').

W dwuwarstwie odległość między warstwami wynosi około 0.34 nm , jest więc ponad dwa razy większa od parametru a [17]. Najpopularniejszą rozważaną geometrią jest ułożenie Bernala typu AB (rys. 2.1). W takim układzie atomy węgla podsieci A górnej warstwy

znajdują się bezpośrednio nad atomami podsieci B dolnej warstwy, zaś atomy podsieci B górnej warstwy położone są nad środkami sześciokątów warstwy dolnej.

2.2. Hamiltonian układów grafenowych

Hamiltonian monowarstwy grafenowej oparty na modelu ciasnego wiązania można zapisać w postaci [18]:

$$\mathbf{H}(\vec{k}) = \left[V_0 - t' \sum_{l=1}^6 \exp\left(i \vec{k} \cdot \vec{r}'_l\right) \right] \sigma_0 - \tau \left[\sigma_x \sum_{l=1}^3 \cos\left(\vec{k} \cdot \vec{r}_l\right) + \sigma_y \sum_{l=1}^3 \sin\left(\vec{k} \cdot \vec{r}_l\right) \right], \quad (2.5)$$

gdzie V_0 to energia potencjalna (zakładamy, że jest taka sama dla elektronów obu podsieci), τ, t' - całki przeskoku między najbliższymi i kolejnymi najbliższymi sąsiadami odległymi o wektor odpowiednio \vec{r}_l i \vec{r}'_l ; σ_x, σ_y to macierze Pauliego, zaś σ_0 to macierz jednostkowa. Funkcje falowe odpowiadające wektorom własnym Hamiltonianu (2.5) mają postać spinorową $\begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$,

gdzie

$$\psi_{A(B)}(\vec{k}, \vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_{i,A(B)}} \exp\left(i \vec{k} \cdot \vec{R}_{i,A(B)}\right) u_{i,A(B)}(\vec{x}). \quad (2.6)$$

Z rozwiązania zagadnienia własnego $\mathbf{H} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$ otrzymujemy energie własne:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = V_0 - t' \left(2 \cos\left(k_x \sqrt{3} a\right) + 4 \cos\left(\sqrt{3} k_x a/2\right) \cos\left(3 k_y a/2\right) \right) \pm \tau \sqrt{3 + 2 \cos\left(\sqrt{3} k_x a\right) + 4 \cos\left(\sqrt{3} k_x a/2\right) \cos\left(3 k_y a/2\right)}. \quad (2.7)$$

$E_+(\vec{k})$ i $E_-(\vec{k})$ to energie elektronu w paśmie przewodnictwa i dziury w paśmie walencyjnym. Pasma te stykają się w punktach \vec{K} i \vec{K}' (w wierzchołkach strefy Brillouina), które nazywamy punktami Diraca. Ze względu na stożkowy kształt struktury pasmowej w ich pobliżu, obszary te określa się mianem dolin K i K' (zob. rys. 2.1).

Energia odpowiadająca punktom styku pasma walencyjnego i pasma przewodnictwa jest w układach grafenowych bliska energii Fermiego E_F . W zagadnieniu przewodnictwa rozważa się stany w pobliżu E_F (stany w dolinach K lub K'). Z rozwinięcia energii (2.7) w szereg względem wektora falowego bliskiego \vec{K} lub \vec{K}' dostajemy liniową relację dyspersji (w dalszej dyskusji przyjmujemy $V_0 = 0$):

$$E_{\pm}(\vec{K} + \vec{k}) = E_{\pm}(\vec{K}' + \vec{k}) \approx \pm \hbar \left| \vec{k} \right| \bar{\nu}_F, \quad (2.8)$$

gdzie $\nu_F = 3\pi\tau a/h \approx 10^6$ m/s to prędkość Fermiego. W przypadku układu umieszczonego w polu magnetycznym definiujemy tzw. masę cyklotronową $m_C \equiv \frac{\hbar^2 \partial S(E)}{2\pi \partial E}$, gdzie $S(E)$ to miara obszaru otoczonego powierzchnią Fermiego. W grafenie $S(E) \propto E^2$, zatem $m_C \propto |E|$ i znika dla $E=0$.

Hamiltonian efektywny dla stanów z dolin K i K' zapisuje się zwykle w postaci:

$$\mathbf{H}_K = \nu_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p} = -\mathbf{H}_{K'}^T, \quad (2.9)$$

gdzie $\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \end{pmatrix}$ to wektor zbudowany z macierzy Pauliego, natomiast $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ to operator pędu w płaszczyźnie XY. Funkcje falowe mają postać spinorową $\begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$:

$$\psi_{k,s}^K(x,y) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \begin{pmatrix} s \\ e^{i\theta_k} \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

$$\psi_{k,s}^{K'}(x,y) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \begin{pmatrix} e^{i\theta_k} \\ s \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

gdzie $\theta_k = \arg(k_x + i k_y)$, zaś s odnosi się do elektronów ($s = 1$) lub dziur ($s = -1$). Górny i dolny element funkcji falowej to amplituda prawdopodobieństwa znalezienia elektronu na podsioci A lub B.

W przypadku dwuwarstwy funkcje falowe mają postać czteroelementowych spinorów $\psi = (\psi_{A_1}, \psi_{B_1}, \psi_{B_2}, \psi_{A_2})^T$, Hamiltonian efektywny można natomiast przedstawić korzystając z pomocniczego indeksu ξ ($\xi = 1$ dla K, $\xi = -1$ dla K') jako macierz o rozmiarze 4×4 [19]:

$$\mathbf{H}_K = \mathbf{H}_{K'}^* = \begin{pmatrix} -\xi V/2 & \nu_F(p_x + ip_y) & t_\perp & 0 \\ \nu_F(p_x - ip_y) & -\xi V/2 & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & \xi V/2 & \nu_F(p_x - ip_y) \\ 0 & 0 & \nu_F(p_x + ip_y) & \xi V/2 \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

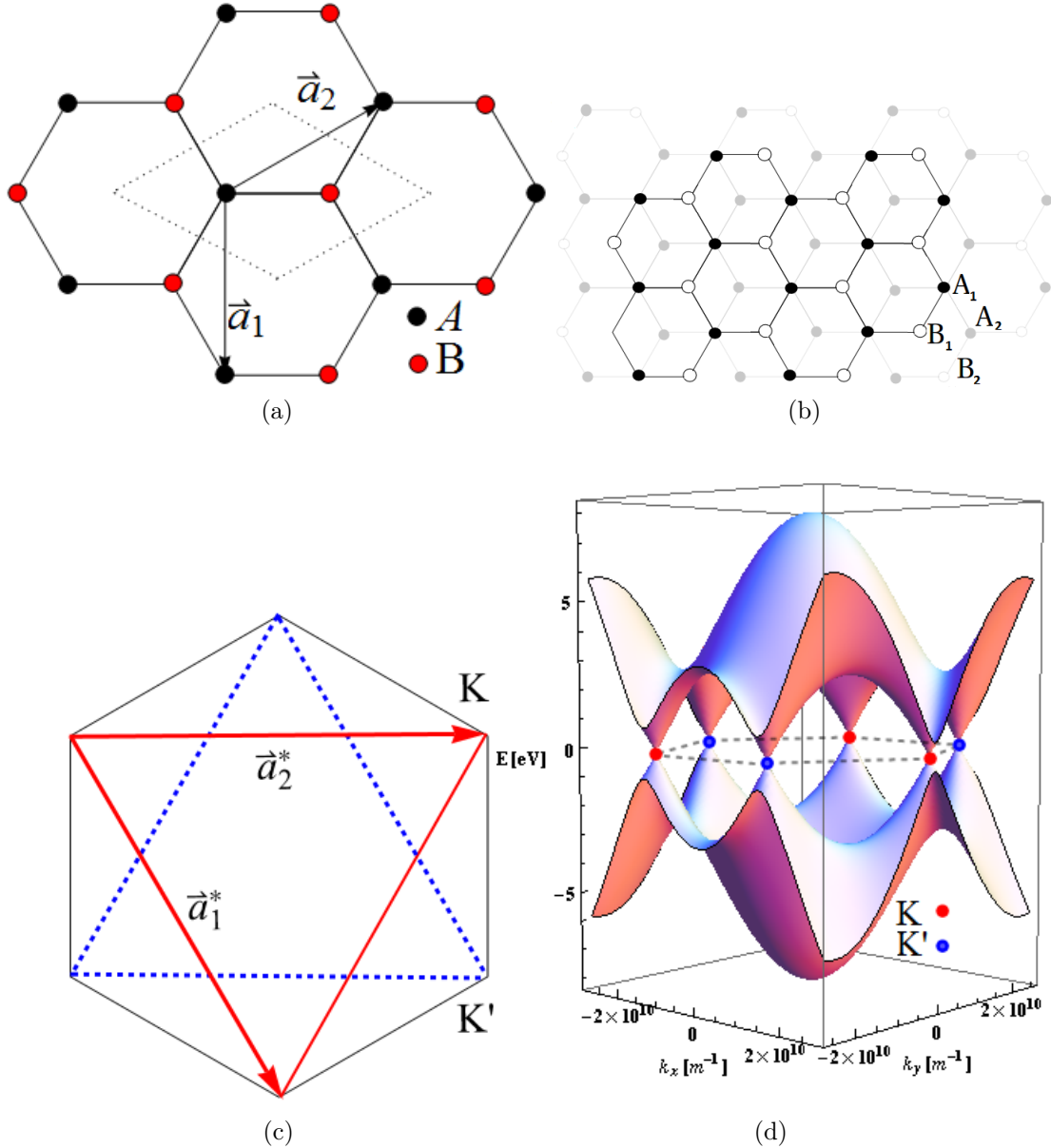
gdzie t_\perp jest całką przeskoku pomiędzy atomami posieci A_1 i B_2 (ozn. $A_1 \leftrightarrow B_2$), V to różnica energii potencjalnej między warstwami związana z obecnością prostopadłego do powierzchni układu pola elektrycznego. Jest to uproszczona postać Hamiltonianu, która pomija dalsze całki przeskoku (tabela 2.1), z czym wiąże się utrata pewnych informacji dla wyższych energii. Wobec faktu, iż dalsze całki przeskoku nie są dokładnie znane, model (2.12) jest powszechnie stosowany i uznawany za wystarczający w obszarze niskich energii.

Chcąc rozważać układy grafenowe w obecności pola magnetycznego, w obu przypadkach dokonuje się podstawienia $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}$ ($-e$ to ładunek elektronu, \vec{A} to potencjał wektorowy pola magnetycznego), dzięki czemu otrzymujemy postać hamiltonianu niezmienniczą względem transformacji cechowania. Można pokazać, iż przy transformacji potencjału wek-

torowego o gradient pewnego potencjału skalarnego $\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \nabla \chi$ musimy jednocześnie dokonać transformacji funkcji falowej $\psi \rightarrow \exp(-i e \chi / \hbar) \psi$ (zob. Dodatek A).

τ [eV]	t_{\perp}/τ	γ_3/τ	γ_4/τ	t'/τ
3.1	0.1	0.03-0.1	0.04-0.07	0.04

Tablica 2.1: Zestawienie zmierzonych wartości całek przeskoku: τ - między najbliższymi sąsiadami ($A_i \leftrightarrow B_i$), t' - między drugimi najbliższymi sąsiadami, t_{\perp} - $A_1 \leftrightarrow B_2$, γ_3 - $B_1 \leftrightarrow A_2$, γ_4 - $A_1 \leftrightarrow A_2/B_1 \leftrightarrow B_2$ [17].



Rysunek 2.1: (a) Komórka elementarna (oznaczona liniami przerywanymi) i wektory rozpinające rozważaną strukturę krystaliczną. Czarnymi i czerwonymi punktami zaznaczono atomy należące odpowiednio do podsieci A i B. (b) Widok dwuwarstwy z góry (ułożenie Bernala typu AB). Czarnymi punktami oznaczono atomy z podsieci A, białymi atomy z podsieci B. (c) Pierwsza strefa Brillouina. Kolorowymi liniami połączono za pomocą wektorów sieci odwrotnej wierzchołki strefy (niebieskimi, przerywanymi- równoważne punkty K' , czerwonymi- punkty K). (d) Energia pasmowa w grafenie ($V_0 = 0$). Czerwonymi i niebieskimi kropkami oznaczono odpowiednio punkty K i K' .

3. Układy dwuwymiarowe w polu magnetycznym. Poziomy Landaua

3.1. Dwuwymiarowy gaz elektronów nierelatywistycznych w zewnętrznym polu magnetycznym

Do opisu ruchu cząstki o masie efektywnej m^* , ładunku $-e$ w zewnętrznym polu elektrycznym zadanym potencjałem skalarnym E_p i polu magnetycznym zadanym potencjałem wektorowym \vec{A} można posłużyć się Hamiltonianem [20]:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m^*}(-i\hbar\nabla + e\vec{A})^2 + E_p. \quad (3.1)$$

Ponieważ przewidywania fizyczne są niezależne od wyboru cechowania \vec{A} , dla prostoty rachunków można skorzystać z cechowania Landaua

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ -Bx \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Hamiltonian (3.1) w układzie dwuwymiarowym przyjmuje wtedy postać

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\partial_x^2 + \frac{(i\hbar\partial_y + eBx)^2}{2m^*} + E_p. \quad (3.3)$$

Co więcej, można zauważyć, iż rozważany Hamiltonian komutuje z y-ową składową pędu $p_y = -i\hbar\partial_y$:

$$[\mathbf{H}, -i\hbar\partial_y] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\partial_x^2, -i\hbar\partial_y\right] + \left[\frac{(i\hbar\partial_y + eBx)^2}{2m^*}, -i\hbar\partial_y\right] + [E_p, -i\hbar\partial_y] = 0. \quad (3.4)$$

Z tego wynika, iż oba te operatory posiadają wspólną rodzinę funkcji własnych. Można je dobrać w taki sposób, by wyizolować czynnik opisujący ruch fali płaskiej w kierunku \hat{y} :

$$\psi(x, y) = \exp(iy k_y) \phi(x), \quad (3.5)$$

co pozwala sprowadzić zagadnienie do problemu jednowymiarowego. Po prostych przekształceniach otrzymujemy równanie różniczkowe

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \partial_x^2 + \frac{1}{2m^*} (-\hbar k_y + e B x)^2 + E_p \right) \phi(x) = E \phi(x). \quad (3.6)$$

Dokonując zamiany zmiennych $l_B^{-1} [x - \hbar k_y / (e B)] = \xi$, gdzie $l_B = \sqrt{\hbar / (e B)}$ to długość magnetyczna, możemy sprowadzić rozważane równanie do prostszej postaci:

$$(-\partial_\xi^2 + \xi^2) \tilde{\varphi}(\xi) = l_B^2 \frac{2m^*}{\hbar^2} (E - E_p) \tilde{\varphi}(\xi) = \alpha \tilde{\varphi}(\xi). \quad (3.7)$$

Jest to równanie Webera, którego rozwiązanie można wyrazić przez kombinację liniową funkcji Webera-Hermite'a [21]:

$$\varphi(\alpha, \chi) = c_1 U\left(-\frac{\alpha}{2}, \sqrt{2}\xi\right) + c_2 V\left(-\frac{\alpha}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \quad (3.8)$$

Stanom stacjonarnym układu odpowiadają funkcje normowalne- w rozwiązaniu (3.8) należy więc przyjąć stałą $c_2 = 0$ ($\forall a V(a, x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \infty$). $U\left(-\frac{\alpha}{2}, \sqrt{2}\xi\right)$ ma regularne zachowanie w granicy $|\xi| \rightarrow \infty$, gdy spełniona jest zależność: $\alpha = 2n + 1$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Z warunku na normalizację funkcji $U\left(-\frac{\alpha}{2}, \sqrt{2}\xi\right)$ otrzymujemy kwantyzację energii i nową postać funkcji falowej:

$$E - E_p = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.9)$$

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{m^* \omega_c}{\pi \hbar}} e^{-\frac{m^* x^2 \omega_c}{2 \hbar}} H_n \left(x \sqrt{\frac{m^* \omega_c}{\hbar}} \right), \quad (3.10)$$

gdzie $\omega_c = e B / m^*$ to tzw. częstość cyklotronowa, $H_n(x)$ to wielomian Hermite'a n -tego rzędu.

3.2. Monowarstwowy grafen w polu magnetycznym

Analogiczne rozumowanie można przeprowadzić w przypadku grafenu w prostopadłym polu magnetycznym \vec{B} . Poniższe rachunki przeprowadzono na podstawie pracy Elsy Prady oraz jej współpracowników [16].

Ze względu na obecność pola wprowadza się niezmienniczą względem cechowania postać hamiltonianu (nie uwzględniamy tu spinu)

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} E_p & \nu_F (\pi_x - i \pi_y) & 0 & 0 \\ \nu_F (\pi_x + i \pi_y) & E_p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_p & \nu_F (\pi_x + i \pi_y) \\ 0 & 0 & \nu_F (\pi_x - i \pi_y) & E_p \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

gdzie E_p to pewna energia potencjalna, $\vec{\pi} = -i \hbar \nabla + e \vec{A}$. Jak poprzednio, posłużymy się

cechowaniem Landaua: $\vec{A} = -B(0, x)^T$. Funkcje spinorowe będące funkcjami własnymi powyższego Hamiltonianu są postaci: $\psi = [\psi_A^K, \psi_B^K, \psi_A^{K'}, \psi_B^{K'}]^T$. Ze względu na strukturę Hamiltonianu elementy spinora odpowiadające różnym dolinom (K i K') są niezależne. Zwykle rozważa się tylko jedną z dolin, drugą zaś uwzględnia się poprzez dwukrotną degenerację poziomów energetycznych.

Na początku można rozważyć najprostszą, z rachunkowego punktu widzenia, sytuację, w której spełniony jest warunek $\epsilon = E - E_p = 0$. Wyznaczenie funkcji falowych sprowadza się do rozwiązania układu równań różniczkowych postaci (dla doliny K)

$$\nu_F \begin{pmatrix} 0 & -i(\hbar \partial_x - e B x) - \hbar \partial_y \\ -i(\hbar \partial_x + e B x) + \hbar \partial_y & 0 \end{pmatrix} \psi(x, y) = 0, \quad (3.12)$$

gdzie $\psi(x, y) = [\psi_A(x, y), \psi_B(x, y)]^T$. Podobnie jak w przypadku zagadnienia dwuwymiarowego gazu elektronowego, Hamiltonian naszego układu komutuje z y -ową składową operatora pędu $p_y = -i \hbar \partial_y$, z tego względu funkcje falowe możemy wyrazić jako iloczyn fali płaskiej w kierunku \hat{y} i funkcji falowej zależnej od x : $\psi_{A,B}(x, y) = \exp(i y k_y) \phi_{A,B}(x)$. Pozwoli nam to przejść do problemu jednowymiarowego:

$$\begin{pmatrix} 0 & (\hbar \partial_x - e B x + \hbar k_y) \\ (\hbar \partial_x + e B x - \hbar k_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix} = 0. \quad (3.13)$$

W celu dalszego uproszczenia równań, wprowadzamy nową zmienną $\xi = l_B^{-1}x - k_y l_B$, gdzie $l_B = \sqrt{\hbar/(e B)}$. Ostatecznie otrzymujemy dwa niezależne równania:

$$\begin{pmatrix} 0 & \partial_\xi - \xi \\ \partial_\xi + \xi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_A(\xi) \\ \varphi_B(\xi) \end{pmatrix} = 0, \quad (3.14)$$

których rozwiązaniem są funkcje $\varphi_A(\xi) = e^{\xi^2/2}$, $\varphi_B(\xi) = e^{-\xi^2/2}$. Ponieważ φ_A i φ_B są niezależne, funkcję spinorową możemy przedstawić jako ich kombinację liniową

$$\varphi(\epsilon = 0, B, k_y, x) = c_1 \begin{pmatrix} e^{\xi^2/2} \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-\xi^2/2} \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

Dla doliny K' mamy $\varphi_A^{K'}(\xi) = \varphi_B^K(\xi)$ i $\varphi_B^{K'}(\xi) = \varphi_A^K(\xi)$.

W przypadku $\epsilon = E - E_p \neq 0$ postępujemy w sposób analogiczny:

$$\begin{pmatrix} E - E_p & i \nu_F (\hbar \partial_x - e B x + \hbar k_y) \\ i \nu_F (\hbar \partial_x + e B x - \hbar k_y) & E - E_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix} = 0. \quad (3.16)$$

Dokonując zmiany zmiennych jak poprzednio: $\xi = l_B^{-1}x - k_y l_B$, (wprowadzając dodatkowo oznaczenie $\varepsilon = (E - E_p) l_B / (\nu_F \hbar)$) sprowadzamy nasz układ do postaci:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & i(\partial_\xi - \xi) \\ i(\partial_\xi + \xi) & \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_A(\xi) \\ \varphi_B(\xi) \end{pmatrix} = 0. \quad (3.17)$$

Po jego rozwikłaniu możemy otrzymać równanie różniczkowe na funkcję φ_A :

$$\partial_\xi^2 \varphi_A(\xi) - \xi^2 \varphi_A(\xi) + (\varepsilon^2 + 1) \varphi_A(\xi) = 0, \quad (3.18)$$

którego rozwiązaniem jest funkcja postaci

$$\varphi_A(\varepsilon, \xi) = c_1 U\left(-\frac{(\varepsilon^2 + 1)}{2}, \sqrt{2}\xi\right) + c_2 V\left(-\frac{(\varepsilon^2 + 1)}{2}, \sqrt{2}\xi\right). \quad (3.19)$$

Korzystając ze wzoru (3.17) i własności rekurencyjnych funkcji Webera-Hermite'a [21], otrzymujemy:

$$\varphi_B(\varepsilon, \xi) = -i \varepsilon^{-1} \sqrt{2} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} c_1 U\left(-\frac{(\varepsilon^2 - 1)}{2}, \sqrt{2}\xi\right) + c_2 V\left(-\frac{(\varepsilon^2 - 1)}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \right). \quad (3.20)$$

Rozwiązanie ogólne można przedstawić w postaci

$$\varphi(\varepsilon, \xi) = c_1 \varphi_1(\varepsilon, \xi) + c_2 \varphi_2(\varepsilon, \xi), \text{ gdzie:}$$

$$\varphi_1(\varepsilon, \xi) = \begin{pmatrix} U\left(-\frac{(\varepsilon^2 + 1)}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \\ -i \varepsilon \sqrt{2}^{-1} U\left(-\frac{(\varepsilon^2 - 1)}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

$$\varphi_2(\varepsilon, \xi) = \begin{pmatrix} V\left(-\frac{\varepsilon^2}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \\ -i \varepsilon^{-1} \sqrt{2} V\left(-\frac{(\varepsilon^2 - 1)}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \end{pmatrix}.$$

W przypadku gdybyśmy poszukiwali stanów stacjonarnych, żądalibyśmy normowalnej postaci funkcji falowych, co narzuca warunki $c_2 = 0$ i $\varepsilon^2 = 2n$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Otrzymujemy stąd warunek na kwantyzację energii w polu magnetycznym [16]:

$$E_n - E_p = \nu_F \sqrt{2 \hbar e B} \sqrt{n}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.22)$$

3.3. Dwuwarstwowy grafen w polu magnetycznym

Problem ten poruszony był już wcześniej w pracach [10, 22]. Poniższe wyprowadzenie przeprowadzono w oparciu o pracę Milтона Pereiry i jego współpracowników [22]. Podobnie

jak w zagadnieniu monowarstwy, zwykle rozważa się tylko jedną z dolin (w naszym przypadku K):

$$\begin{pmatrix} E_p - E - V/2 & \nu_F(\pi_x + i\pi_y) & t_\perp & 0 \\ \nu_F(\pi_x - i\pi_y) & E_p - E - V/2 & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & E_p - E + V/2 & \nu_F(\pi_x - i\pi_y) \\ 0 & 0 & \nu_F(\pi_x + i\pi_y) & E_p - E + V/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{A_1}(x, y) \\ \psi_{B_1}(x, y) \\ \psi_{B_2}(x, y) \\ \psi_{A_2}(x, y) \end{pmatrix} = 0, \quad (3.23)$$

gdzie E_p to energia potencjalna, $\vec{\pi} = -i\hbar\nabla + \vec{A}$, V to różnica energii potencjalnych w dwóch warstwach (odpowiada ona przerwie energetycznej). Ponownie wybieramy cechowanie Landaua: $\vec{A} = -B(0, x)^T$ i postępujemy analogicznie jak w przypadku rachunku dla pojedynczej warstwy. Ze względu na symetrię układu wybieramy funkcję falową postaci $\psi(x, y) = e^{ik_y y} \varphi(x)$.

Na początku warto rozważyć najprostszy przypadek: $E - E_p = 0$ i $V = 0$. Układ nasz przyjmuje wtedy zredukowaną formę:

$$\begin{pmatrix} 0 & \partial_x - k_y + l_B^{-2}x & t_\perp & 0 \\ \partial_x + k_y - l_B^{-2}x & 0 & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & 0 & \partial_x + k_y - l_B^{-2}x \\ 0 & 0 & \partial_x - k_y + l_B^{-2}x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{A_1}(x) \\ \varphi_{B_1}(x) \\ \varphi_{B_2}(x) \\ \varphi_{A_2}(x) \end{pmatrix} = 0. \quad (3.24)$$

Jego rozwiązanie można przedstawić w następującej formie:

$$\begin{pmatrix} \varphi_{A_1}(x) \\ \varphi_{B_1}(x) \\ \varphi_{B_2}(x) \\ \varphi_{A_2}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \exp(\frac{l_B^{-2}x^2}{2} - xk_y) \\ i(c_2 - c_3 x t_\perp) \exp(xk_y - \frac{l_B^{-2}x^2}{2}) \\ c_3 \exp(xk_y - \frac{l_B^{-2}x^2}{2}) \\ i(c_4 - c_1 x t_\perp) t_\perp \exp(\frac{l_B^{-2}x^2}{2} - xk_y) \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Chcąc otrzymać normalizowalne funkcje odpowiadające stanom stacjonarnym, należy przyjąć warunek $c_1 = c_4 = 0$.

W przypadku gdy $E \neq E_p$ korzystamy z podstawienia $\xi = l_B^{-1}x - k_y l_B$ i otrzymujemy:

$$\begin{pmatrix} -\varepsilon - \delta & \partial_\xi + \xi & t & 0 \\ \partial_\xi - \xi & -\varepsilon - \delta & 0 & 0 \\ t & 0 & -\varepsilon + \delta & \partial_\xi - \xi \\ 0 & 0 & \partial_\xi + \xi & -\varepsilon + \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A_1}(\xi) \\ i\phi_{B_1}(\xi) \\ \phi_{B_2}(\xi) \\ i\phi_{A_2}(\xi) \end{pmatrix} = 0, \quad (3.26)$$

gdzie $\varepsilon = (E - E_p) / (\hbar\nu_F l_B^{-1})$, $\delta = V / (2\hbar\nu_F l_B^{-1})$, $t = t_\perp / (\hbar\nu_F l_B^{-1})$. Po prostych przekształceniach otrzymujemy dwa równania:

$$\begin{aligned}
(\partial_\xi + \xi)(\partial_\xi - \xi)\phi_{A_1}(\xi) &= -(\varepsilon + \delta)^2\phi_{A_1}(\xi) + t(\varepsilon + \delta)\phi_{B_2}(\xi), \\
(\partial_\xi - \xi)(\partial_\xi + \xi)\phi_{B_2}(\xi) &= -(\varepsilon - \delta)^2\phi_{B_2}(\xi) + t(\varepsilon - \delta)\phi_{A_1}(\xi).
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Podstawiając jedno z równań do drugiego i korzystając z zależności

$(\partial_\xi + \xi)(\partial_\xi - \xi) = (\partial_\xi - \xi)(\partial_\xi + \xi) - 2$ otrzymujemy ostateczną postać równania różniczkowego dla funkcji $\phi_{A_1}(\xi)$:

$$(\partial_\xi^2 - \xi^2)\phi_{A_1}(\xi) = -\zeta_\pm\phi_{A_1}(\xi), \tag{3.28}$$

gdzie $\zeta_\pm = \varepsilon^2 + \delta^2 \pm \sqrt{((1 - 2\delta\varepsilon)^2 + t^2(\varepsilon^2 - \delta^2))}$. Rozwiązanie równania można przedstawić w postaci kombinacji liniowej

$$\varphi_{A_1,\pm}(\varepsilon, \xi) = c_1(\delta + \varepsilon)U\left(-\frac{\zeta_\pm}{2}, \sqrt{2}\xi\right) + c_2(\delta + \varepsilon)V\left(-\frac{\zeta_\pm}{2}, \sqrt{2}\xi\right). \tag{3.29}$$

Pozostałe funkcje spinorowe wyznaczamy korzystając z układu (3.26) i relacji rekurencyjnych funkcji Webera-Hermite'a [21]:

$$\begin{aligned}
\left(\partial_x + \frac{x}{2}\right)U(a, x) &= -\left(a + \frac{1}{2}\right)U(a + 1, x), \\
\left(\partial_x - \frac{x}{2}\right)U(a, x) &= -U(a - 1, x), \\
\left(\partial_x + \frac{x}{2}\right)V(a, x) &= V(a + 1, x), \\
\left(\partial_x - \frac{x}{2}\right)V(a, x) &= \left(a - \frac{1}{2}\right)V(a - 1, x).
\end{aligned}$$

Ostatecznie nasze rozwiązanie przyjmuje postać:

$$\begin{aligned}
\varphi_{A_1,\pm}(\varepsilon, \xi) &= c_1(\delta + \varepsilon)U\left(-\frac{\zeta_\pm}{2}, \sqrt{2}\xi\right) + c_2(\delta + \varepsilon)V\left(-\frac{\zeta_\pm}{2}, \sqrt{2}\xi\right), \\
\varphi_{B_1,\pm}(\varepsilon, \xi) &= \sqrt{2}\left(c_1U\left(-\frac{\zeta_\pm}{2} - 1, \sqrt{2}\xi\right) + c_2\left(\frac{\zeta_\pm}{2} + \frac{1}{2}\right)V\left(-\frac{\zeta_\pm}{2} - 1, \sqrt{2}\xi\right)\right), \\
\varphi_{B_2,\pm}(\varepsilon, \xi) &= \alpha_1^\pm\left(c_1U\left(-\frac{\zeta_\pm}{2}, \sqrt{2}\xi\right) + c_2V\left(-\frac{\zeta_\pm}{2}, \sqrt{2}\xi\right)\right), \\
\varphi_{A_2,\pm}(\varepsilon, \xi) &= \alpha_2^\pm\left(c_1\left(\frac{\zeta_\pm}{2} - \frac{1}{2}\right)U\left(1 - \frac{\zeta_\pm}{2}, \sqrt{2}\xi\right) + c_2V\left(1 - \frac{\zeta_\pm}{2}, \sqrt{2}\xi\right)\right),
\end{aligned} \tag{3.30}$$

gdzie $\alpha_1^\pm = t^{-1}((\delta + \varepsilon)^2 - 2(\zeta_\pm + \frac{1}{2}))$, $\alpha_2^\pm = \sqrt{2}(t(\varepsilon - \delta))^{-1}[(\delta + \varepsilon)^2 t(\varepsilon - \delta) - 2(\zeta_\pm + \frac{1}{2})]$.

Powyższe rozwiązanie można zapisać w następującej formie:

$$\varphi_{\pm}(\varepsilon, \xi) = c_1 \varphi_1^{\pm}(\varepsilon, \xi) + c_2 \varphi_2^{\pm}(\varepsilon, \xi),$$

$$\varphi_1^{\pm}(\varepsilon, \xi) = \begin{pmatrix} \varphi_{1,A_1}^{\pm}(\varepsilon, \xi) \\ \varphi_{1,B_1}^{\pm}(\varepsilon, \xi) \\ \varphi_{1,B_2}^{\pm}(\varepsilon, \xi) \\ \varphi_{1,A_2}^{\pm}(\varepsilon, \xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\delta + \varepsilon) U\left(-\frac{\zeta_{\pm}}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \\ i\sqrt{2}(\delta + \varepsilon) U\left(-\frac{\zeta_{\pm}}{2} - 1, \sqrt{2}\xi\right) \\ \alpha_1^{\pm} U\left(-\frac{\zeta_{\pm}}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \\ i\alpha_2^{\pm} \left(\frac{\zeta_{\pm}}{2} - \frac{1}{2}\right) U\left(1 - \frac{\zeta_{\pm}}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

$$\varphi_2^{\pm}(\varepsilon, \xi) = \begin{pmatrix} \varphi_{2,A_1}^{\pm}(\varepsilon, \xi) \\ \varphi_{2,B_1}^{\pm}(\varepsilon, \xi) \\ \varphi_{2,B_2}^{\pm}(\varepsilon, \xi) \\ \varphi_{2,A_2}^{\pm}(\varepsilon, \xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\delta + \varepsilon) V\left(-\frac{\zeta_{\pm}}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \\ i\sqrt{2} \left(\frac{\zeta_{\pm}}{2} + \frac{1}{2}\right) V\left(-\frac{\zeta_{\pm}}{2} - 1, \sqrt{2}\xi\right) \\ \alpha_1^{\pm} V\left(-\frac{\zeta_{\pm}}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \\ i\alpha_2^{\pm} V\left(1 - \frac{\zeta_{\pm}}{2}, \sqrt{2}\xi\right) \end{pmatrix}.$$

Aby otrzymać normalizowalną postać rozwiązań, musimy przyjąć $c_2 = 0$. Jeśli chodzi o rozwiązania związane z funkcją $U(a, x)$, z rozwinięcia w szereg względem $x \rightarrow \infty$ wynika, iż należy narzucić:

$$\zeta_{\pm} = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.32)$$

Otrzymujemy stąd warunek kwantyzacji energii. Dla $\delta = 0$ przyjmuje on natomiast postać:

$$E_n - E_p = \pm \frac{\hbar \nu_F}{\sqrt{2} l_B} \sqrt{2 + 4n + t^2 \pm \sqrt{4 + 4(1 + 2n)t^2 + t^4}}, \quad (3.33)$$

$$E_n - E_p = \pm \frac{\hbar \nu_F}{\sqrt{2} l_B} \sqrt{2 + 4n + t^2 \mp \sqrt{4 + 4(1 + 2n)t^2 + t^4}}.$$

Rozwiązanie to zostało po raz pierwszy podane przez Milтона Pereirę i innych w 2007 roku [22]. Poziomy Landaua wyznaczone przez Edwarda McCanna w pracy [10] odpowiadają granicznemu przypadkowi $n/t^2 \ll 1$:

$$E_n - E_p \cong \pm \left(\frac{\hbar \nu_F}{l_B}\right)^2 \frac{2}{t_{\perp}} \sqrt{n(n+1)}. \quad (3.34)$$

W ogólnym przypadku ($E \neq E_p$ i $\delta \neq 0$) warunek kwantyzacji nie posiada niestety zwartej formy. Na rysunku (3.1) zestawiono widma poziomów Landaua dyskutowanych trzech układów.

Mając już wyznaczone poziomy Landaua, można porównać odległości między zerowym i pierwszym poziomem w skali temperaturowej. W przypadku dwuwymiarowego gazu elektronowego dla pola $B = 30 \text{ T}$ otrzymujemy: $\Delta E = E_1 - E_0 = \hbar e B / m_e \approx 3.46 \text{ meV}$. Dla monowarstwy i dwuwarstwy grafenowej (z zerową przerwą) ΔE wynosi odpowiednio

198.43 meV

i 111.34 meV. W skali temperaturowej odległość między poziomami wynosi więc w przybliżeniu odpowiednio 40 K, 2300 K i 1290 K. Generalnie wielkości te sugerują możliwość obserwacji kwantowego efektu Halla w monowarstwie grafenowej w temperaturze pokojowej (szумы termiczne występujące w temperaturze ok. 300 K nie przeszkodziłyby w odróżnieniu poziomów). W roku 2007 Nowosiółkowi i jego współpracownikom udało się doświadczalnie potwierdzić te teoretyczne przewidywania[9]. Jest to o tyle ciekawe, iż w przypadku dwuwymiarowego gazu elektronowego detekcja wspomnianego efektu wymaga zastosowania temperatur rzędu kilku kelwinów. W dwuwarstwowym grafenie efekt ten powinien być zatem obserwowalny w temperaturze około 120 K (dla pola 30 T). Obserwacja w temperaturze pokojowej wymagałaby z kolei zastosowania pól około 50 T.

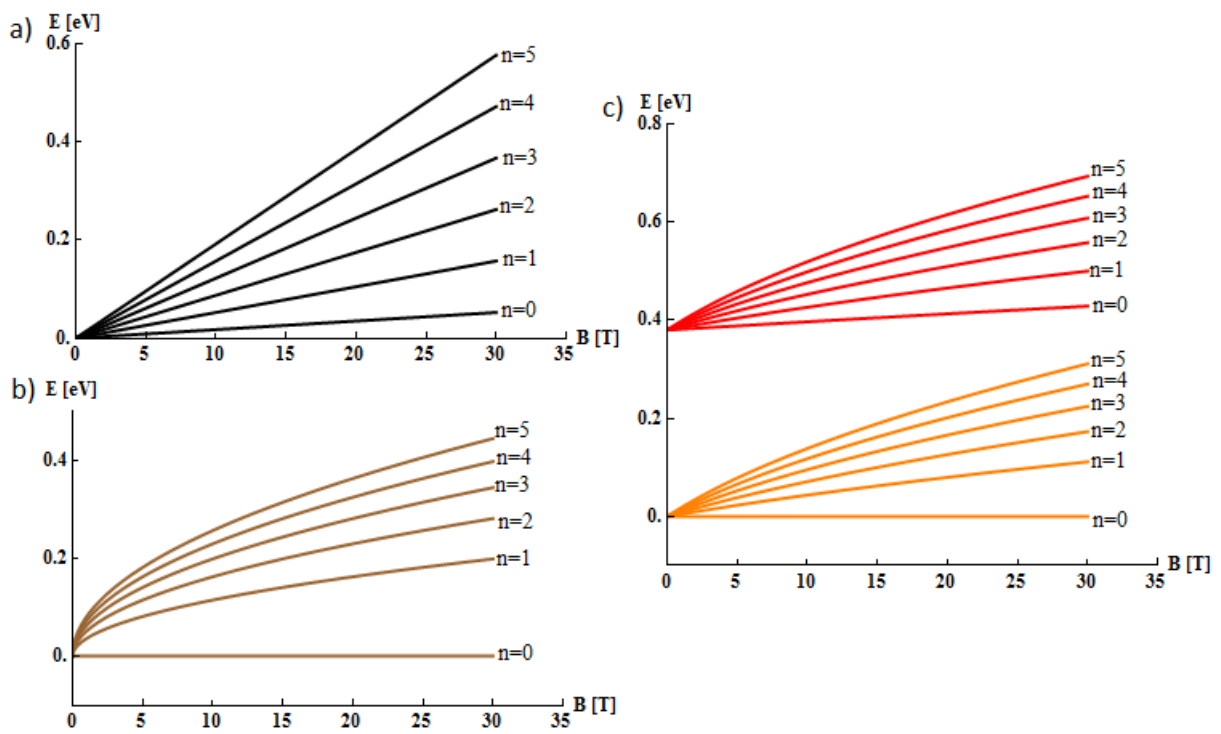
3.4. Rozszczepienie zeemanowskie

Uwzględniając dodatkowo w naszych teoretycznych rozważaniach spin, mielibyśmy do czynienia ze zniesieniem spinowej degeneracji poziomów energetycznych na skutek efektu Zeemana. Rozszczepienia poziomów w wyniku tego efektu to $\Delta z = g \mu_B B$, gdzie $g \approx 2$, $\mu_B = e \hbar / (2 m_e)$ to magneton Bohra. Miarę rozszczepienia zeemanowskiego można przyrównać do odległości między poziomami Landaua $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$:

$$\frac{\Delta z}{\Delta E_n} = \begin{cases} m^*/m_e & \text{2DEG,} \\ \frac{\sqrt{\hbar e B/2}}{m_e \nu_F \Delta n} & \text{monowarstwowy grafen,} \\ \frac{t_{\perp}}{2 m_e \nu_F^2 \Delta \tilde{n}} & \text{dwuwarstwowy grafen } (E_n \text{ dane wzorem (3.34)),} \end{cases} \quad (3.35)$$

gdzie $\Delta n = \sqrt{n+1} - \sqrt{n}$, $\Delta \tilde{n} = \sqrt{n(n+1)} - \sqrt{n(n-1)}$. W standardowym dwuwymiarowym gazie elektronowym powyższy stosunek zależy jedynie od masy efektywnej.

W półprzewodnikach samoistnych w pobliżu przerwy energetycznej jest ona 10-100 razy mniejsza od masy elektronu swobodnego. W układach grafenowych należy wziąć pod uwagę wartość pola B i n . Biorąc $B = 1$ T i $n = 1$, rozszczepienie zeemanowskie dla monowarstwy i dwuwarstwy grafenowej jest odpowiednio 130 i 40 razy mniejsze od odległości między poziomami Landaua. Z tego względu analizując w kolejnych rozdziałach przewodnictwo monowarstwowego i dwuwarstwowego grafenu będziemy zaniedbywać ten efekt.



Rysunek 3.1: Poziomy Landaua w dwuwymiarowym gazie elektronowym (o masie efektywnej $m^* = 0.033 m_e$) (a), monowarstwie grafenowej (b), grafenie dwuwarstwowym ($\delta = 0$) (c).

4. Kwantowy opis przewodnictwa elektrycznego. Wzór Landauera-Büttikera

Opisując ruch nośników ładunku w kryształach zwykle rozważa się wpływ rozprożeń na atomach sieci czy jej defektach. Średnia droga swobodna l określa statystyczną odległość między kolejnymi rozproszczeniami. Przy rozpatrywaniu zagadnień transportu kwantowego w prostokątnej próbce o szerokości W i długości L możemy mówić o trzech podstawowych reżimach:

- dyfuzyjnym,
- kwazibalistycznym,
- balistycznym,

które zostały zilustrowane na rys. (4.1). W dalszej części pracy rozważamy wyłącznie układy balistyczne, tj. takie, w których średnia droga swobodna elektronu jest większa niż rozmiary układu. W transporcie balistycznym dominują zatem elementarne efekty kwantowe, związane z zasadą superpozycji i zasady nieoznaczoności.

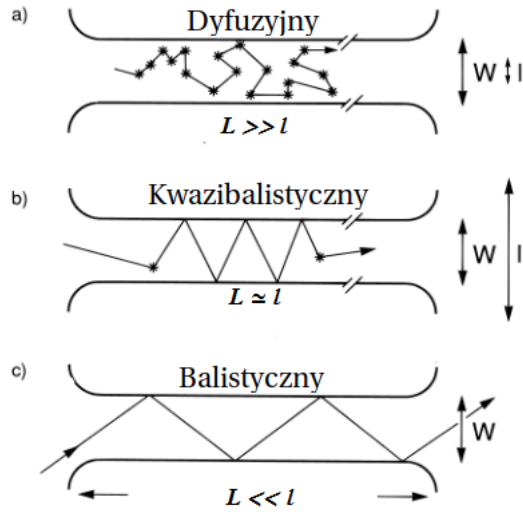
4.1. Przewodnictwo elektryczne jako zagadnienie rozpraszania

Modelowy układ dla kwantowego opisu przewodnictwa składa się z dwóch rezerwuarów elektronów (rys. 4.2), między którymi znajduje się badana próbka materiału.

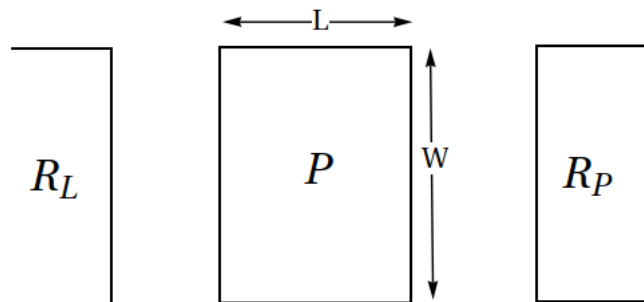
Jeśli gęstość stanów elektronowych n w rezerwuarach różni się o pewien niewielki czynnik δn , do momentu wyrównania się gęstości stanów, płynie pomiędzy nimi prąd dyfuzyjny J elektronów o energiach z zakresu E_F i $E_F + \delta\mu$, gdzie $\delta\mu$ to różnica potencjów elektrochemicznych między rezerwuarami. Jednym ze sposobów analizy przewodnictwa próbki w takim układzie jest posłużenie się tzw. wzorem Landauera-Büttikera wiążącym przewodność próbki G ze współczynnikami transmisji t dla elektronu na poziomie energii Fermiego (w ogólności mogą to być macierze współczynników transmisji):

$$G = \frac{g_s g_v e^2}{h} \text{Tr}(\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}) = \frac{g_s g_v e^2}{h} \sum_{n=1}^N T_n, \quad (4.1)$$

gdzie g_s i g_v to współczynniki odpowiadające degeneracji energii elektronów ze względu na spin i doliny (w przypadku grafenu $g_s = g_v = 2$), zaś T_n to wartości własne macierzy $\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}$ [25].



Rysunek 4.1: Trajektorie elektronów w reżimach (a) dyfuzyjnym ($l < W, L$), (b) kwazibalistycznym ($W < l < L$), (c) balistycznym ($W, L < l$). Gwiazdkami oznaczono rozproszenie na zanieczyszczeniu sieci. Rysunek jest uproszczoną wersją grafiki z publikacji *Physics and Technology of Submicron Structures*[24].



Rysunek 4.2: Schematyczny układ pomiarowy próbki P o szerokości W i długości L umieszczonej pomiędzy dwoma rezerwuarami elektronów (R_L, R_P).

4.2. Wyprowadzenie wzoru Landauera-Büttikera

Poniższe wyprowadzenie zostało oparte na pracy doktorskiej dr. Michała Tyca [25].

Dla dwuwymiarowego układu o skończonych rozmiarach, rozważamy dyskretny zbiór efektywnie jednowymiarowych kanałów przejścia przez próbkę (w naszym przypadku byłyby to kanały odpowiadające modom ruchu poprzecznego względem kierunku przewodnictwa). Załóżmy, iż jesteśmy w stanie rozseparować ruch w kierunku przewodzenia i w kierunku do niego prostopadłym. Kanały mogą wtedy odpowiadać skwantowanym wartościom prostopadłej do kierunku transmisji składowej wektora falowego $k_{\perp,j}$ (indeks j przypisany jest odpowiedniemu modowi poprzecznemu). Jeśli prąd padający na próbkę z lewej (lub prawej) strony oznaczmy odpowiednio $\mathbf{J}_{in}^{L(R)} = (J_{in,1}^{L(R)}, J_{in,2}^{L(R)}, \dots, J_{in,N_{\perp}^{L(R)}}^{L(R)})^T$ (indeks $L(R)$ odpowiada ruchowi elektronów z rezerwuaru $L(R)$ do $R(L)$), prąd odbitych nośników ładunku $\mathbf{J}_{ref}^{L(R)}$ i prąd nośników przetransmitowanych przez próbkę $\mathbf{J}_{tr}^{L(R)}$ można otrzymać działając odpowiednimi operatorami macierzowymi:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^L \mathbf{J}_{in}^L &= \mathbf{J}_{ref}^L, & \mathbf{T}^L \mathbf{J}_{in}^L &= \mathbf{J}_{tr}^R, \\ \mathbf{T}^R \mathbf{J}_{in}^R &= \mathbf{J}_{tr}^R, & \mathbf{R}^R \mathbf{J}_{in}^R &= \mathbf{J}_{ref}^R, \end{aligned}$$

gdzie \mathbf{T}^L , \mathbf{R}^L , \mathbf{T}^R , \mathbf{R}^R to macierze zespolone o rozmiarach odpowiednio $N_{\perp}^R \times N_{\perp}^L$, $N_{\perp}^L \times N_{\perp}^L$, $N_{\perp}^L \times N_{\perp}^R$ i $N_{\perp}^R \times N_{\perp}^R$. Elementy macierzowe tych operatorów odpowiadają iloczynowi macierzy współczynników odbicia (transmisji) i ich sprzężeń hermitowskich, tj. $T_{i,j}^{L(R)} = (t^{L(R)\dagger} t^{L(R)})_{i,j}$, $R_{i,j}^{L(R)} = (r^{L(R)\dagger} r^{L(R)})_{i,j}$ (współczynnik $t_{i,j}$ odpowiadałby więc transmisji nośnika ładunku z kanału i -tego kanałem j -tym). Operatory te tworzą razem unitarną macierz rozpraszania o wymiarach $(N_{\perp}^L + N_{\perp}^R) \times (N_{\perp}^L + N_{\perp}^R)$ [26]:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{r}^L & \mathbf{t}^R \\ \mathbf{t}^L & \mathbf{r}^R \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Unitarność macierzy \mathbf{S} wynika z warunku ciągłości strumienia nośników. Zakładając dodatkowo niezależność kanałów transmisji (co implikuje symetrię $N_{\perp}^L = N_{\perp}^R = N_{\perp}$), dostajemy $R_{i,j}^{L(R)} = R_i^{L(R)} \delta_{i,j} = (r^{L(R)\dagger} r^{L(R)})_{i,i}$, $T_{i,j}^{L(R)} = T_i^{L(R)} \delta_{i,j} = (t^{L(R)\dagger} t^{L(R)})_{i,i}$, i $T_i^{L(R)} + R_i^{R(L)} = 1$. W skończonych temperaturach prąd I płynący przez rozważaną próbkę na jednostkę szerokości W wyraża się wzorem:

$$I = e \sum_{i=1}^{N_{\perp}} \int dE n_i(E) v_i(E) (f_L(E) T_i^L(E) - f_R(E) (1 - T_i^R(E))), \quad (4.3)$$

gdzie $n_i = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{dE}{dk_i} \right)^{-1} = \frac{1}{h v_i}$ to gęstość stanów energetycznych w i -tym kanale na jednostkę szerokości W , v_i to prędkość w kierunku przewodzenia, $f_{L(R)}$ to rozkłady Fermiego-Diraca w rezerwuarach L i R [25]. Przewodność zdefiniowana jest jako odwrotność oporu $G = 1/R$, korzystając z prawa Ohma mamy więc:

$$G = I/U = \frac{eI}{\delta\mu}, \quad (4.4)$$

$$G = \frac{e^2}{\delta\mu} \sum_{i=1}^{N_{\perp}} \int dE n_i(E) v_i(E) T_i^L(E) (f_L(E) - f_R(E)). \quad (4.5)$$

Dla małych $\delta\mu$ zależność współczynników $T_i^L = T_i$ od energii można uznać za zaniedbywalną. Przechodząc do granicy $T \rightarrow 0$ K dostajemy:

$$f_{L(R)}(E) \xrightarrow{T \rightarrow 0 \text{ K}} \theta(\mu_{L(R)} - E), \quad (4.6)$$

$$\int dE (f_L(E) - f_R(E)) \xrightarrow{T \rightarrow 0 \text{ K}} \delta\mu, \quad (4.7)$$

gdzie $\theta(x)$ to funkcja Heaviside'a. Otrzymujemy zatem:

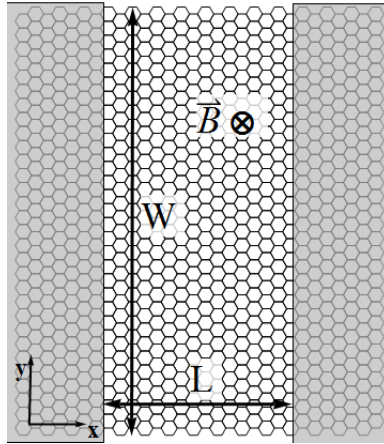
$$G = \frac{g_s g_v e^2}{h} \sum_{i=1}^{N_{\perp}} T_i = \frac{g_s g_v e^2}{h} \text{Tr}(\mathbf{t}^{\dagger} \mathbf{t}). \quad (4.8)$$

Ostateczny wzór uzupełniamy współczynnikami degeneracji spinowej i dolinowej (odpowiednio oznaczonymi jako g_s , g_v). Analizując w kolejnych rozdziałach przewodnictwo układów grafenowych będziemy przyjmować $g_s = 2$, $g_v = 2$, $G_0 = 4e^2/h$.

5. Magnetoprzewodnictwo grafenu monowarstwowego

5.1. Schemat układu i jego hamiltonian

Podobnie jak w pracach [11, 16], rozważamy próbkę monowarstwowego grafenu umieszczoną między dwiema elektrodami metalicznymi (rys. 5.1). Elektrody te modelujemy jako obszary grafenu o silnym domieszkowaniu zaindukowanym wysokim potencjałem elektrochemicznym ($E_p = U_\infty \rightarrow -\infty$). Dalej, zakładamy że pole magnetyczne B działa wy-



Rysunek 5.1: Schemat analizowanego układu. Szare obszary symbolizują podłączone do próbki monowarstwowego grafenu elektrody (silnie domieszkowane paski grafenowe). Pod płatką grafenu znajduje się dodatkowa elektroda kontrolująca potencjał elektrochemiczny w jego obszarze. Rozważana próbka posiada szerokość większą niż długość $W > L$ w celu zminimalizowania wpływu efektów brzegowych na przewodnictwo.

łącznie na obszar centralny układu. Przyjmujemy, że w okładkach potencjał przyjmuje graniczną wartość $E_p = U_\infty \rightarrow -\infty$ (co odpowiada silnie domieszkowanemu ośrodkowi), w płatku $E_p = U_0$ (ośrodek o zerowym lub niewielkim domieszkowaniu). Taka geometria układu pozwala otrzymać rozwiązanie niezależne od poziomu domieszkowania w elektrodach. Dynamikę elektronów w układzie opisuje Hamiltonian:

$$\mathbf{H} = \left(\vec{p} + e\vec{A} \right) \cdot \vec{\sigma} + E_p, \quad (5.1)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \begin{cases} -B(0, x, 0)^T & \text{w obszarze } 0 \leq x \leq L, \\ 0 & \text{dla } x < 0 \text{ i } x > L, \end{cases} \\ E_p &= \begin{cases} U_0 \\ U_\infty \end{cases} \quad \text{analogicznie jak dla } \vec{A}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

5.2. Zagadnienie rozpraszania

Problem transportu elektronów przez układ z rys. 5.1 formułujemy następująco: elektrony wychodzące z lewego rezerwuaru ulegają odbiciu od próbki ze współczynnikiem odbicia r lub przechodzą przez próbkę ze współczynnikiem transmisji t . Ponieważ Hamiltonian zagadnienia jest operatorem różniczkowym pierwszego rzędu, warunki ciągłości dla spinorowych funkcji falowych na granicy elektrod i badanej próbki zapisujemy następująco:

$$\begin{aligned} \psi_I(k_x, x_0) + r \psi_I(-k_x, x_0) &= \psi_{II}(B, k_y, x_0), \\ \psi_{II}(B, k_y, x_1) &= t \psi_{III}(k_x, x_1), \end{aligned} \quad (5.3)$$

gdzie $x_0 = 0$, $x_1 = L$; funkcje falowe elektronu o indeksie I , II lub III odpowiadają stanom w lewej elektrodzie, w obszarze centralnym lub w elektrodzie prawej. Ich jawna postać to:

$$\begin{aligned} \psi_I(k_x, x) &= e^{i k_x x} \begin{pmatrix} e^{i \theta_k} \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \psi_{II}(B, k_y, x) &= \begin{cases} c_1 \begin{pmatrix} e^{\xi^2/2} \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-\xi^2/2} \end{pmatrix}, & \text{gd } E - U_0 = 0, \\ c_1 \varphi_1(\varepsilon, \xi) + c_2 \varphi_2(\varepsilon, \xi), & \text{gd } E - U_0 \neq 0 \text{ (wzór (3.21))}, \end{cases} \\ \psi_{III}(k_x, x) &= e^{i k_x (x-L)} \begin{pmatrix} e^{i \theta_k} \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

gdzie $\theta_k = \arg(k_x + i k_y)$, $\varepsilon = (E - U_0) l_B / (\nu_F \hbar)$, $\xi = l_B^{-1} x - k_y l_B$. Przy $U_\infty \rightarrow -\infty$ czynnik fazowy $e^{i \theta_k} \approx \text{sgn}(k_x)$. W punkcie Diraca ($E - U_0 = 0$) (5.3) można przedstawić w postaci $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ (przypadek $E - U_0 \neq 0$ znajduje się w dodatku B), gdzie:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & \exp(-\frac{B e L^2}{2 \hbar} + L k_y) & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \exp(\frac{B e L^2}{2 \hbar} - L k_y) \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} r \\ t \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Dla powyższego przypadku otrzymujemy rozwiązanie w zwartej formie:

$$t^\dagger t = \cosh^{-2} \left[\frac{1}{2} L \left(\frac{B e L}{\hbar} - 2 k_y \right) \right]. \quad (5.6)$$

Zakładając periodyczne warunki brzegowe w kierunku prostopadłym do kierunku przewodzenia

$$k_y = \pm \frac{2 \pi}{W} n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.7)$$

obliczenie śladu $\text{Tr}(t^\dagger t)$ biegnie po skończonej ilości kanałów (wzór (4.1)). W granicy $W \gg L$ dyskretność zbioru modów poprzecznych k_y i jego skończoność można zaniedbać[13]. Sumowanie po wartościach k_y we wzorze na przewodnictwo można w takim przypadku przybliżyć całką

$$G = G_0 \sum_{-\infty < k_y < \infty} t^\dagger(k_y) t(k_y) \xrightarrow{W \gg L} G_0 \frac{W}{2 \pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y t^\dagger(k_y) t(k_y). \quad (5.8)$$

Wstawiając do powyższej całki (5.6), otrzymujemy ostatecznie wzór:

$$G = G_0 \frac{1}{\pi} \frac{W}{L}. \quad (5.9)$$

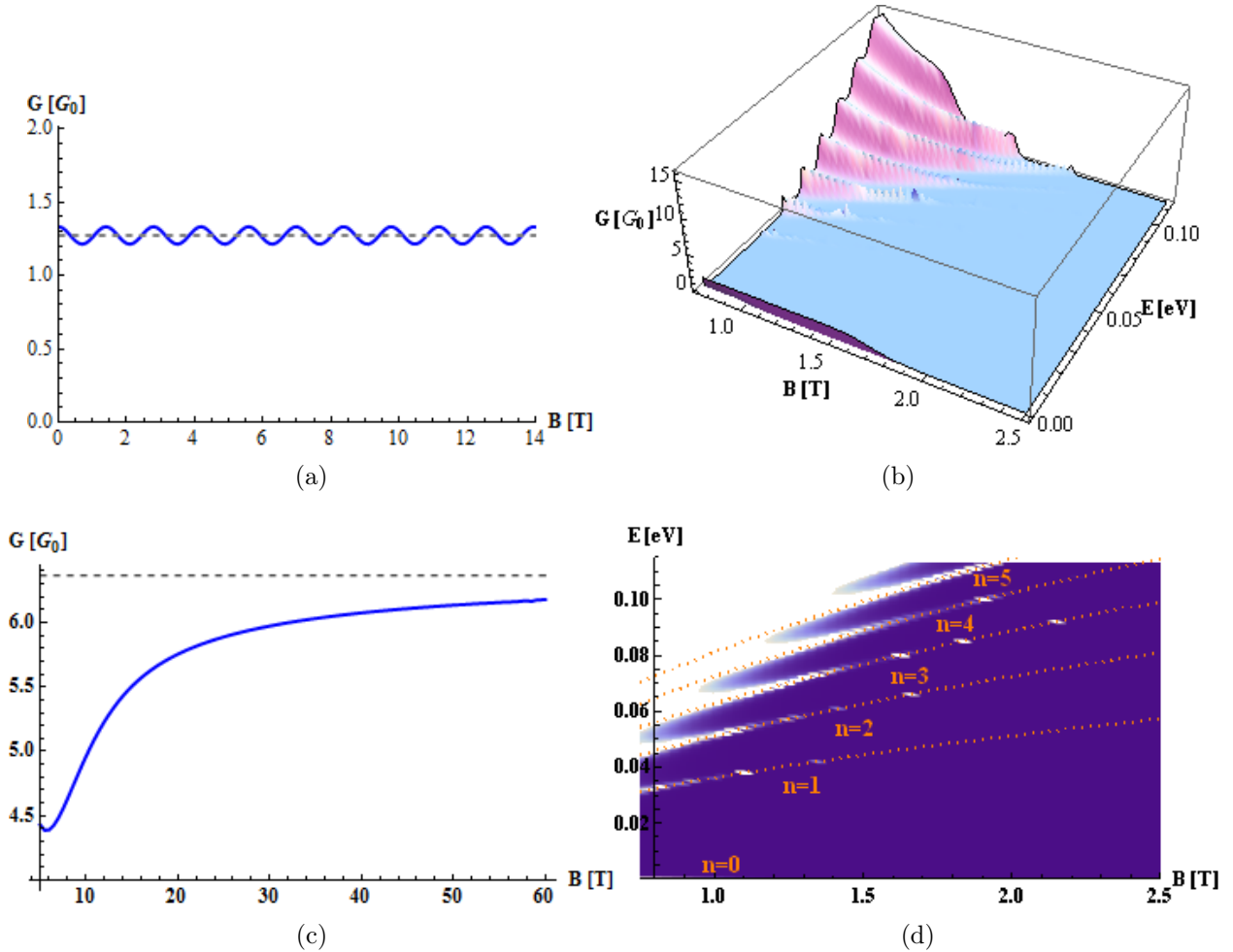
Jak widać, dla zerowego poziomu Landaua przewodność nie zależy od pola magnetycznego i jest proporcjonalna do ilorazu W/L . Na rysunku 5.2 przedstawiono przykładowy przebieg zależności $G(B)$ dla próbki o wymiarach $L = 38.5 \text{ nm}$, $W = 20 L = 770 \text{ nm}$. Jak widać, graniczny przypadek (5.9) odpowiada średniej wartości, wokół której występują oscylacje (dla $W \gg L$ oscylacje zanikają).

W przypadku niezerowego wypełnienia, przy wysokich wartościach pola B mamy do czynienia z tłumieniem transmisji. Efekt ten występuje w przypadku, gdy promień cyklotronowy jest mniejszy od połowy długości próbki $r_c = p_\perp / (q B) < \frac{1}{2} L$ (p_\perp to pęd prostopadły do pola \vec{B}). Można to poglądowo tłumaczyć w ten sposób, iż pole magnetyczne zakrzywia tor elektronów tak silnie, iż nie są w stanie pokonać odległości między jedną ścianką próbki a drugą w kierunku przewodnictwa. Niezerowa transmisja może się jednak pojawić w wy-

niku rezonansów przez poziomy Landaua. Dokonując zgrubnego przybliżenia $p_{\perp} \approx \hbar k$, otrzymujemy:

$$|\epsilon| > \frac{1}{2} \nu_F e B L. \quad (5.10)$$

Warunek ten pozwala zgrubnie oszacować obszar reżimu balistycznego. Na rysunku 5.2 przedstawiono wykres konduktancji w zależności od przyłożonego pola magnetycznego i energii elektronów. Widać, iż przewodnictwo poza pojedynczymi maksimumami jest raczej wygaszone, położenie wspomnianych maksimumów odpowiada zaś poziomom Landaua. Warto podkreślić, że dla każdego punktu (E, B) leżącego na poziomie Landaua mamy nie jeden, lecz wiele rezonansów (dla różnych k_y) tak, że odtwarzany jest charakter pseudodyfuzyjny przewodnictwa. Dla bardzo wysokich pól wartość przewodności na poziomach Landaua odpowiada tej wyznaczonej w punkcie Diraca (wzór (5.9)). Dla pól nieco niższych ($B < 70\text{T}$) nie jesteśmy w stanie otrzymać granicznej wartości (5.9) (różnica jest rzędu kilku procent), gdyż rezonanse są nieco przesunięte w stosunku do poziomów Landau w wyniku niepełnego wygaszenia transmisji. W przypadku, gdy przechodzimy do reżimu balistycznego, wierzchołki w krzywej odpowiadającej zależności przewodności od energii przestają odpowiadać energiom poziomów Landaua.



Rysunek 5.2: (a) Zależność przewodnictwa G od pola magnetycznego w punkcie Diraca dla próbki o wymiarach $L = 38.5 \text{ nm}$, $W = 5L = 154 \text{ nm}$. Przerywaną linią oznaczono wartość $G = G_0 W/(\pi L)$ (5.9), która odpowiada granicy $W \gg L$. (b) Zależność przewodnictwa G od pola magnetycznego i energii elektronów ($L = 154 \text{ nm}$, $W = 5L$). Widoczny zarys reżimu balistycznego (niskie pole, wysokie wartości energii). (c) Konduktancja w funkcji pola magnetycznego dla elektronu na pierwszym poziomie Landaua (wymiarzy próbki: $L = 38.5 \text{ nm}$, $W = 20L = 770 \text{ nm}$). Przerywaną linią oznaczono przewodność graniczną (5.9), którą można uzyskać dla bardzo wysokich pól. (d) Dopasowanie poziomów Landaua do maksimum przewodnictwa (biały kolor). Kolorem niebieskim oznaczono obszar o stłumionym przewodnictwie.

6. Przewodnictwo elektryczne grafenu dwuwarstwowego

Analiza przewodnictwa dwuwarstwy grafenowej w zerowym polu magnetycznym została po raz pierwszy przeprowadzona przez Izaka Snymana i Carlo Beenakera w 2006 roku [13]. W tym rozdziale zreferujemy główne wyniki z tej pracy. W rozdziale 7. część z nich wykorzystamy do opisu elektronów w elektrodach.

Schemat układu nie różni się zasadniczo od wykorzystanego przy analizie przewodnictwa monowarstwy w polu magnetycznym- pojedynczą warstwę grafenu zastępujemy dwiema warstwami (rys. 6.1).

6.1. Równanie Diraca i masa efektywna

Dla uproszczenia rachunków skorzystamy z hamiltonianu o jednakowej energii potencjalnej E_p w obu warstwach (uogólnienie zostanie przedstawione w rozdziale 6). Równanie Diraca można przedstawić następująco:

$$\begin{pmatrix} E_p - E & \nu_F (p_x + i p_y) & t_\perp & 0 \\ \nu_F (p_x - i p_y) & E_p - E & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & E_p - E & \nu_F (p_x - i p_y) \\ 0 & 0 & \nu_F (p_x + i p_y) & E_p - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{A_1}(x, y) \\ \psi_{B_1}(x, y) \\ \psi_{B_2}(x, y) \\ \psi_{A_2}(x, y) \end{pmatrix} = 0. \quad (6.1)$$

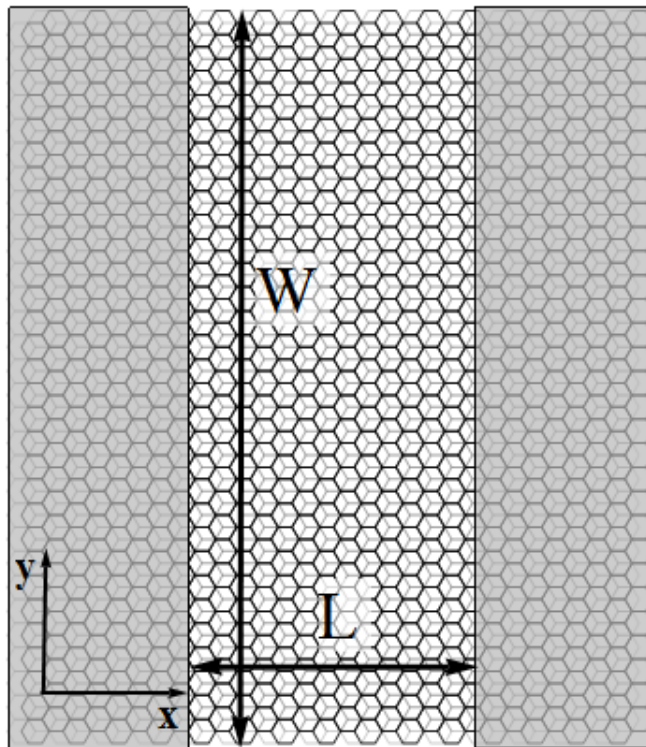
Rozwiązaniem tego układu równań różniczkowych są fale płaskie $\psi(x, y) = e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} (a_1, b_1, b_2, a_2)^T$. Działając Hamiltonianem (2.12) na funkcje tego typu otrzymujemy równanie własne

$$\begin{pmatrix} E_p - E & \hbar \nu_F k e^{i \theta_k} & t_\perp & 0 \\ \hbar \nu_F k e^{-i \theta_k} & E_p - E & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & E_p - E & \hbar \nu_F k e^{-i \theta_k} \\ 0 & 0 & \hbar \nu_F k e^{i \theta_k} & E_p - E \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ b_2 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (6.2)$$

z którego z kolei dostajemy relację dyspersji ($\epsilon = E - E_p$, $\theta_k = \arg(k_x + i k_y)$):

$$\epsilon_+ = \pm \left(\frac{1}{2} t_\perp + \sqrt{\frac{1}{4} t_\perp^2 + (\nu_F \hbar k)^2} \right), \quad (6.3)$$

$$\epsilon_- = \pm \left(\frac{1}{2} t_\perp - \sqrt{\frac{1}{4} t_\perp^2 + (\nu_F \hbar k)^2} \right). \quad (6.4)$$



Rysunek 6.1: Schemat rozważanego układu. Podobnie jak w przypadku monowarstwy, badamy próbkę o szerokości W znacznie większej od długości L w celu zminimalizowania wkładu przewodnictwa brzegowego. Elektrody modelujemy jako paski dwuwarstwowego grafenu o wysokim wypełnieniu. Środkowy obszar to płatek grafenu o niskim bądź zerowym poziomie wypełnienia.

Rozwijając wzory (6.3), (6.4) w szereg Taylora względem niskich wartości wektora falowego k otrzymujemy przybliżoną kwadratową relację dyspersji:

$$\epsilon_+ \approx \pm t_\perp \mp (\nu_F \hbar k)^2 / t_\perp \quad \epsilon_- \approx \pm (\nu_F \hbar k)^2 / t_\perp. \quad (6.5)$$

Mając powyższą zależność energii od wektora falowego, możemy w łatwy sposób oszacować masę efektywną elektronu m^* korzystając ze wzoru $m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$:

$$m^* = \frac{t_\perp}{2 v_F^2} = \frac{t_\perp \hbar^2}{2 (3 \pi \tau a)^2} \approx 0.033 m_e. \quad (6.6)$$

Identyczny wynik można otrzymać ze wzoru na masę cyklotronową $m_C \equiv \frac{\hbar^2 \partial S(E)}{2\pi \partial E}$ (zob. roz. 2.2), zatem $m^* = m_C$ (w obszarze energii, dla którego przybliżenie McCanna się stosuje (3.34)). Mała masa efektywna wynika z wartości całki przeskoaku między najbliższymi sąsiadami τ (około 3.1 meV). Dużą wartość τ wiąże się jest z łatwością przeskoaku elektronów między jonami węgla [23]. Ponadto, masa efektywna bezpośrednio wpływa na odległości między poziomami Landaua (dla dwuwymiarowego gazu elektronowego w klasycznych półprzewodnikach

$E_{n+1} - E_n = \hbar \omega_c = \hbar \frac{e}{m^* B}$). Niski stosunek m^*/m_e pożądanym jest między innymi w badaniu kwantowego efektu Halla w skończonych temperaturach [9].

6.2. Funkcje falowe

Dla punktu Diraca ($\epsilon = E - E_p = 0$) rozwiązania układu (6.2) przyjmują formę:

$$\begin{pmatrix} \varphi_{A_1}(x) \\ \varphi_{B_1}(x) \\ \varphi_{B_2}(x) \\ \varphi_{A_2}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 e^{-x k_y} \\ c_2 e^{x k_y} - c_3 x t_\perp e^{x k_y} \\ c_3 e^{x k_y} \\ c_4 e^{-x k_y} - c_1 x t_\perp e^{-x k_y} \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

Poza punktem Diraca ($\epsilon \neq 0$) rozwiązanie ma postać kombinacji liniowej fal płaskich:

$$\begin{pmatrix} \varphi_{A_1}(x) \\ \varphi_{B_1}(x) \\ \varphi_{B_2}(x) \\ \varphi_{A_2}(x) \end{pmatrix} = c_1 \psi_L^+(x) + c_2 \psi_L^-(x) + c_3 \psi_R^+(x) + c_4 \psi_R^-(x), \quad (6.8)$$

gdzie

$$\begin{aligned}
\psi_L^+(x) &= e^{-ixk_x^+} \begin{pmatrix} -\epsilon \\ k_x^+ + ik_y \\ \epsilon \\ -k_x^+ + ik_y \end{pmatrix}, & \psi_R^+(x) &= e^{ixk_x^+} \begin{pmatrix} -\epsilon \\ -k_x^+ + ik_y \\ \epsilon \\ k_x^+ + ik_y \end{pmatrix}, \\
\psi_L^-(x) &= e^{-ixk_x^-} \begin{pmatrix} \epsilon \\ -k_x^- - ik_y \\ \epsilon \\ -k_x^- + ik_y \end{pmatrix}, & \psi_R^-(x) &= e^{ixk_x^-} \begin{pmatrix} \epsilon \\ k_x^- - ik_y \\ \epsilon \\ k_x^- + ik_y \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{6.9}$$

ponadto $k_x^\pm = \text{sgn}(k_x^\pm) \sqrt{\epsilon(\epsilon \pm t)/(\hbar\nu_F)^2 - k_y^2} \xrightarrow{U_\infty \rightarrow -\infty} \text{sgn}(k_x^\pm) |U_\infty|$.

6.3. Zagadnienie rozpraszania

Zagadnienie rozpraszania dla przejścia elektronu między elektrodami przez badaną próbkę formułujemy następująco (dwa przypadki odpowiadają wyborowi funkcji fali padającej ψ_{RI}^\pm):

$$\begin{aligned}
\psi_{RI}^\pm(x_0) + r_+^\pm \psi_{L,I}^\pm(x_0) + r_-^\pm \psi_{L,I}^\mp(x_0) &= \psi_{II}^\pm(x_0), \\
t_+^\pm \psi_{R,III}^\pm(x_1) + t_-^\pm \psi_{R,III}^\mp(x_1) &= \psi_{II}^\pm(x_1),
\end{aligned} \tag{6.10}$$

gdzie $x_0 = 0$, $x_1 = L$. Podobnie jak w monowarstwie, funkcje falowe elektronu o indeksie I , II lub III odpowiadają stanom w lewej elektrodzie, w obszarze centralnym lub w elektrodzie prawej. Ich jawna postać to:

$$\begin{aligned}
\psi_{\alpha,I}^\pm(x) &= \psi_\alpha^\pm(x), \text{ (zob. 6.9)} \\
\psi_{II}^\pm(x) &= \begin{cases} c_1^\pm \psi_L^+(x) + c_2^\pm \psi_L^-(x) + c_3^\pm \psi_R^+(x) + c_4^\pm \psi_R^-(x), & \text{gd}y \ \epsilon \neq 0, \\ \begin{pmatrix} c_1^\pm e^{-xk_y} \\ c_2^\pm e^{xk_y} - c_3^\pm x t_\perp e^{xk_y} \\ c_3^\pm e^{xk_y} \\ c_4^\pm e^{-xk_y} - c_1^\pm x t_\perp e^{-xk_y} \end{pmatrix}, & \text{gd}y \ \epsilon = 0, \end{cases} \\
\psi_{\alpha,III}^\pm(x) &= \psi_\alpha^\pm(x - L).
\end{aligned} \tag{6.11}$$

Zagadnienie sprowadza się zatem do rozwiązania układu ośmiu równań liniowych na osiem niewiadomych. Poniżej przedstawiono układ, jaki rozwiązuje się dla warunku $\epsilon = 0$ (przypadek $\epsilon \neq 0$ zamieszczono w dodatku B).

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b},$$

gdzie

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-Lk_y} & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i e^{Lk_y} & -i L t_{\perp} e^{Lk_y} & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{Lk_y} & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -i L t_{\perp} e^{-Lk_y} & 0 & 0 & i e^{Lk_y} & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

zaś

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} r_{+}^{\pm} \\ r_{-}^{\pm} \\ c_1^{\pm} \\ c_2^{\pm} \\ c_3^{\pm} \\ c_4^{\pm} \\ t_{+}^{\pm} \\ t_{-}^{\pm} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mp 1 \\ \mp 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6.12)$$

Ponieważ w zagadnieniu przewodnictwa interesują nas jedynie współczynniki transmisji, rozwiązanie układu sprowadza się do wyznaczenia śladu macierzy 2×2 dla każdej wartości k_y :

$$\mathbf{t} \equiv \begin{pmatrix} t_{+}^{+} & t_{-}^{+} \\ t_{+}^{-} & t_{-}^{-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4(2 + L^2 t_{\perp}^2 \cosh(2Lk_y))}{(4 \cosh(Lk_y)^2 + L^2 t_{\perp}^2)^2} & \frac{4L \sinh(2Lk_y) t_{\perp} (-2i + Lt_{\perp})}{(4 \cosh(Lk_y)^2 + L^2 t_{\perp}^2)^2} \\ \frac{4L \sinh(2Lk_y) t_{\perp} (2i + Lt_{\perp})}{(4 \cosh(Lk_y)^2 + L^2 t_{\perp}^2)^2} & \frac{4(2 + L^2 t_{\perp}^2 \cosh(2Lk_y))}{(4 \cosh(Lk_y)^2 + L^2 t_{\perp}^2)^2} \end{pmatrix}, \quad (6.13)$$

której pierwszy i drugi wiersz związane są z rozwiązaniami układu $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ z odpowiednio górnymi i dolnymi znakami \mathbf{b} . Szukany ślad iloczynu $\mathbf{t}^{\dagger} \mathbf{t}$ powyższej macierzy przyjmuje postać:

$$\text{Tr } \mathbf{t}^{\dagger} \mathbf{t} = \frac{16 + 8 \cosh(2Lk_y) (2 + L^2 t_{\perp}^2)}{(4 \cosh(Lk_y)^2 + L^2 t_{\perp}^2)^2}. \quad (6.14)$$

Podobnie jak w monowarstwie (wzór (5.8)), jeśli szerokość naszej próbki jest znacznie większa od jej długości ($W \gg L$), sumę we wzorze (4.1) można zastąpić całką:

$$G = G_0 \text{Tr} (\mathbf{t}^{\dagger} \mathbf{t}) = G_0 \sum_{-\infty < k_y < \infty} \text{Tr} (\mathbf{t}^{\dagger}(k_y) \mathbf{t}(k_y)) \xrightarrow{W \gg L} G_0 \frac{W}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \text{Tr} (\mathbf{t}^{\dagger}(k_y) \mathbf{t}(k_y)). \quad (6.15)$$

Wstawiając do całki wzór (6.14), otrzymujemy:

$$G = G_0 \frac{2}{\pi} \frac{W}{L}. \quad (6.16)$$

Jak widać, pomimo silnego sprzężenia pomiędzy warstwami (całka $t_{\perp} \approx 0.31$ eV), przewodnictwo dwuwarstwowego grafenu okazuje się być (dla zerowego wypełnienia) po prostu sumą przewodności niezależnych warstw!

7. Magnetoprzewodnictwo w dwuwarstwowym grafenie

7.1. Zagadnienie rozpraszania

W tym rozdziale rozważamy przewodnictwo elektryczne podobnego układu, jak omówiony w poprzednim rozdziale (rys. 6.1), dodatkowo przyjmując, iż środkowa część układu (słabo domieszkowana próbka dwuwarstwy grafenowej) umieszczona jest w prostopadłym polu magnetycznym. Środkowy obszar opisany jest układem równań przedstawionym w rozdziale drugim (wzór (3.23)). Opis ruchu elektronu w zerowym polu dla dowolnego wypełnienia został przedstawiony w rozdziale 5., tutaj pozostaje on bez zmian dla obszaru elektrod. Ponieważ dla elektrod zakładamy głębokie wypełnienie ($E_p \rightarrow -\infty$), możemy zaniedbać różnicę pomiędzy energią potencjalną dolnej i górnej warstwy. Stosowane w układzie o niezerowym wypełnieniu funkcje Webera w granicy $\epsilon = E - E_p \rightarrow 0$ stają się osobliwe. Analizę przewodnictwa prowadzimy zatem osobno dla dwóch przypadków- zerowego ($\epsilon = 0$) i skończonego wypełnienia ($\epsilon \neq 0$) w obszarze centralnym. Zagadnienie rozpraszania możemy więc opisać wzorem (6.10), pamiętając, iż funkcja opisująca stany w środkowej części jest zależna dodatkowo od pola magnetycznego.

7.1.1. Zerowe wypełnienie pasma

Funkcje falowe opisujące stany rozproszeniowe w obszarze centralnym zostały wyrowadzone w rozdziale 2. (wzór (3.25)). W obszarach silnie domieszkowanych korzystamy natomiast z rozwiązania wyznaczonego w rozdziale 5. (wzór (6.9)).

Analiza zagadnienia rozpraszania w układzie sprowadza się do rozwiązania układu Cramera ośmiu równań liniowych (przypadek niezerowej różnicy między energiami potencjalnymi warstw grafenu V - zostanie przeanalizowane w dalszej części pracy):

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b},$$

gdzie

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{L^2 l_B^{-2}}{2} - L k_y} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & i e^{-\frac{L^2 l_B^{-2}}{2} + L k_y} & -i e^{-\frac{L^2 l_B^{-2}}{2} + L k_y} L t_{\perp} & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\frac{L^2 l_B^{-2}}{2} + L k_y} & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -i e^{\frac{L^2 l_B^{-2}}{2} - L k_y} L t_{\perp} & 0 & 0 & i e^{\frac{L^2 l_B^{-2}}{2} - L k_y} & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.1)$$

zaś

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} r_+^{\pm} \\ r_-^{\pm} \\ c_1^{\pm} \\ c_2^{\pm} \\ c_3^{\pm} \\ c_4^{\pm} \\ t_+^{\pm} \\ t_-^{\pm} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mp 1 \\ \mp 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Podobnie jak poprzednio, interesują nas jedynie współczynniki transmisji. Dla ustalonej wartości pędu poprzecznego k_y , można je zapisać w formie macierzy transmisji:

$$\mathbf{t} \equiv \begin{pmatrix} t_+^+ & t_-^+ \\ t_+^- & t_-^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{e^{\frac{L^2 l_B^{-2}}{2} + L k_y} (e^{L^2 l_B^{-2}} + e^{2L k_y}) (2 + i L t_{\perp})}{(e^{L^2 l_B^{-2}} + e^{2L k_y})^2 + e^{L(L l_B^{-2} + 2k_y)} L^2 t_{\perp}^2} & \frac{i e^{\frac{L^2 l_B^{-2}}{2} + L k_y} (e^{L^2 l_B^{-2}} - e^{2L k_y}) L t_{\perp}}{(e^{L^2 l_B^{-2}} + e^{2L k_y})^2 + e^{L(L l_B^{-2} + 2k_y)} L^2 t_{\perp}^2} \\ \frac{i e^{\frac{L^2 l_B^{-2}}{2}} (e^{3L k_y} - e^{L(L l_B^{-2} + k_y)}) L t_{\perp}}{(e^{L^2 l_B^{-2}} + e^{2L k_y})^2 + e^{L(L l_B^{-2} + 2k_y)} L^2 t_{\perp}^2} & \frac{e^{\frac{L^2 l_B^{-2}}{2} + L k_y} (e^{L^2 l_B^{-2}} + e^{2L k_y}) (2 - i L t_{\perp})}{(e^{L^2 l_B^{-2}} + e^{2L k_y})^2 + e^{L(L l_B^{-2} + 2k_y)} L^2 t_{\perp}^2} \end{pmatrix}. \quad (7.2)$$

Ślad iloczynu macierzy $\mathbf{t}^{\dagger} \mathbf{t}$ wynosi:

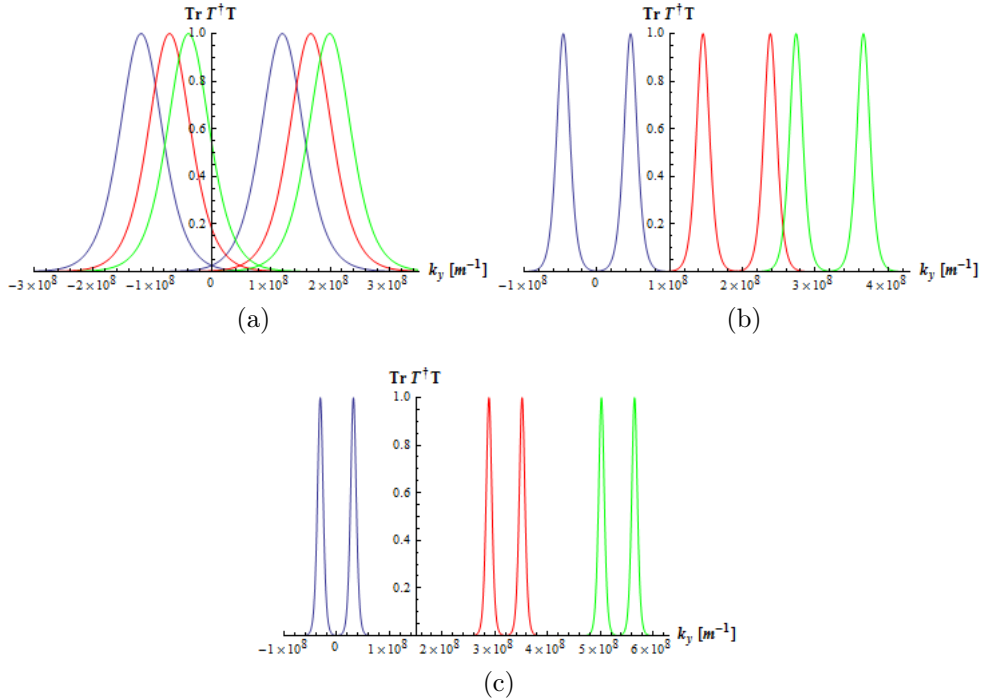
$$\text{Tr } \mathbf{t}^{\dagger} \mathbf{t} = \frac{4 e^{L(2k_y + L l_B^{-2})} \left(4 e^{L(2k_y + L l_B^{-2})} + (e^{4k_y L} + e^{2L^2 l_B^{-2}}) (2 + L^2 t_{\perp}^2) \right)}{\left(e^{4k_y L} + e^{2L^2 l_B^{-2}} + e^{L(2k_y + L l_B^{-2})} (2 + L^2 t_{\perp}^2) \right)^2}. \quad (7.3)$$

Łatwo się przekonać, iż przy podstawieniu $l_B^{-1} = 0$ odtwarzamy wynik dla przypadku bez pola B (6.14).

Mając wyznaczony ślad $\text{Tr } \mathbf{t}^{\dagger} \mathbf{t}$, możemy skorzystać ze wzoru na przewodność (4.1) i wysu-

mować prawdopodobieństwa transmisji dla różnych wartości k_y . Dla uproszczenia, ponownie przyjmujemy okresowe warunki brzegowe (wzór (5.7)). Dodatkowo, jeśli zastosujemy uciążlenie sumy (przy warunku $W \gg L$) (6.15), otrzymamy wynik niezależny od pola, zgodny ze wzorem (6.16).

Na rysunku 7.1 przedstawiono wykresy wartości $\text{Tr } \mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}$ dla trzech wybranych pól $B = 0 \text{ T}$, 3 T , 5 T . Jak widać, widmo transmisji posiada dwa maksima, które wraz ze zwiększają-



Rysunek 7.1: Transmisja w polu magnetycznym przez płatek dwuwarstwowego grafenu o zerowym domieszkowaniu (kolor niebieski odpowiada polu $B = 0 \text{ T}$, czerwony $B = 3 \text{ T}$, natomiast zielony $B = 5 \text{ T}$). Wykres (a) odpowiada próbce o długości $L = 21 \text{ nm}$, (b) 84 nm , (c) $L = 140 \text{ nm}$.

cym się polem magnetycznym przesuwać do obszaru większych wartości wektora falowego k_y . Szerokość maksimów transmisyjnych zależy ściśle od długości próbki- im dłuższą drogę muszą pokonać elektrony w próbce (w kierunku przewodzenia), tym węższe zakresy wektora falowego k_y , w których prawdopodobieństwo transmisji ma niezerową wartość. Co więcej, im dłuższa próbka, tym szybciej wspomniane maksima wędrują wraz ze zwiększającym się polem B w kierunku wyższych wartości k_y . Na rysunku 7.2 przedstawiono otrzymane zależności przewodności od pola magnetycznego. Analizując oba wykresy można zauważyć, iż wraz ze wzrostem długości próbki, przewodność coraz szybciej oscyluje w funkcji pola B . Stosunek W/L wpływa na amplitudę oscylacji i wartość przewodnictwa (im większy stosunek, tym większa konduktancja). Dla $W/L \approx 5$ amplituda ta jest rzędu kilku procent, łatwo wtedy przekonać się, iż spełniony jest warunek proporcjonalności $G = G_0 2W/(\pi L)$ (6.16).

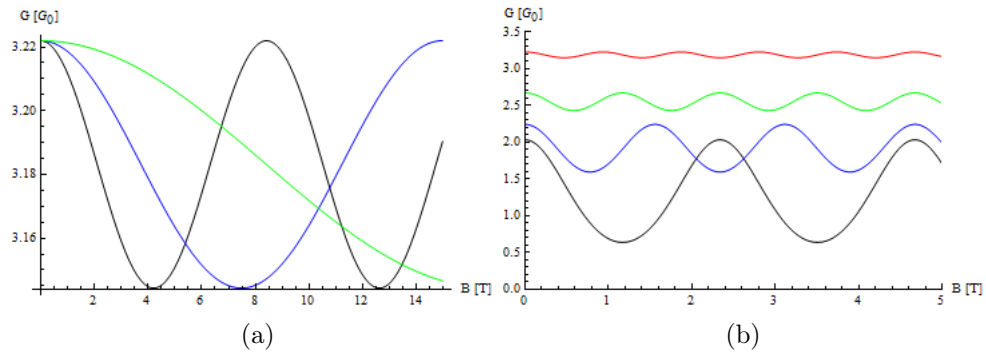
7.1.2. Niezerowe wypełnienie pasma

Dla obszaru centralnego funkcje falowe mają postać wyznaczoną w rozdziale 2. (wzór (3.30)). Ponownie jak w przypadku zerowego wypełnienia, zagadnienie rozpraszania sprowadza się do rozwiązania układu ośmiu równań liniowych (dodatek B), z którego wyznaczamy macierz współczynników transmisji $\mathbf{t} \equiv \begin{pmatrix} t_+^+ & t_-^+ \\ t_+^- & t_-^- \end{pmatrix}$. Ze względu na obszerność rozwiązania nie zostanie ono przedstawione jawnie.

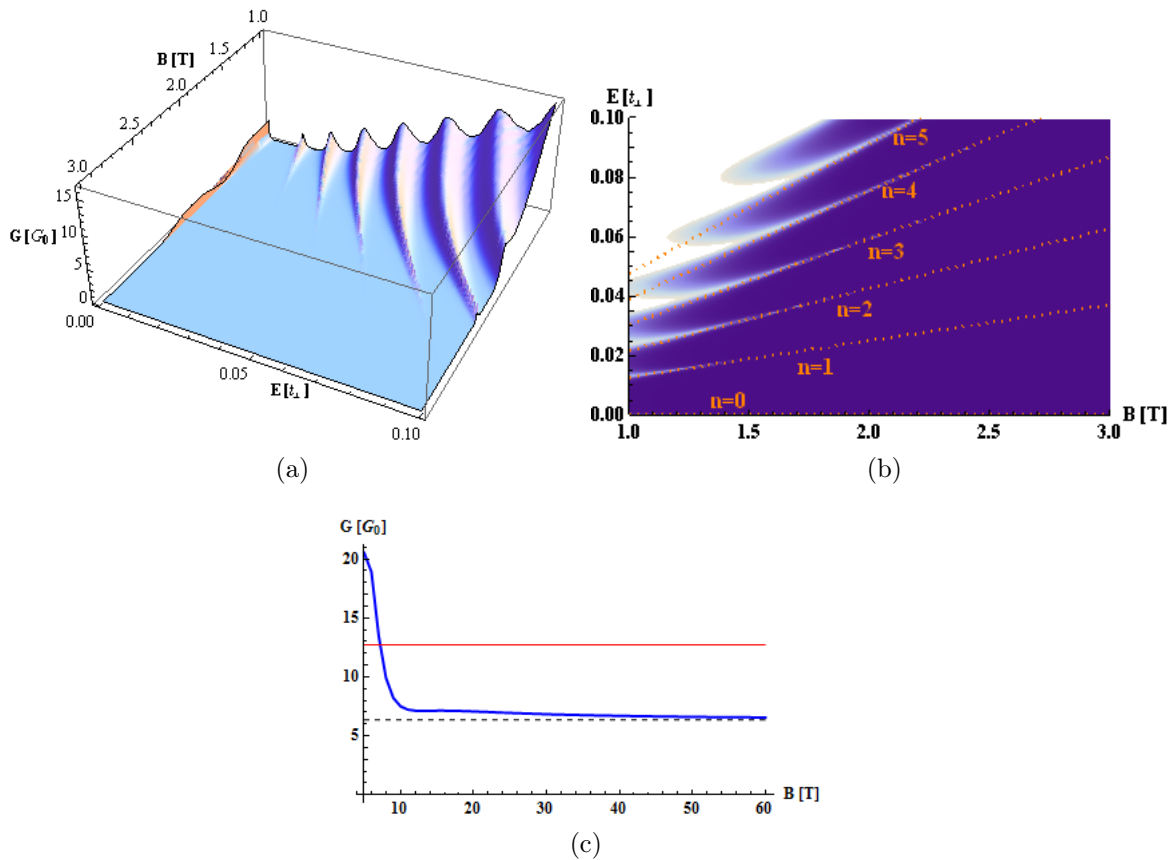
Podobnie jak w przypadku monowarstwy w polu magnetycznym, opierając się na warunku $r_c \approx \hbar k / (eB) = l_B^{-2} k < \frac{1}{2} L$ i rozwinięciu w szereg energii elektronów dla małych wartości wektora falowego (wzór (6.5)), możemy w pewnym przybliżeniu oszacować zakres reżimu balistycznego:

$$|\epsilon_+ - t_\perp| > \frac{(LeB\nu_F)^2}{4t_\perp} \quad |\epsilon_-| > \frac{(LeB\nu_F)^2}{4t_\perp}. \quad (7.4)$$

Na rysunku 7.3 przedstawiono otrzymane zależności przewodności od pola magnetycznego i energii. Jak łatwo zauważyć, w zakresie niskich energii i wysokich pól magnetycznych mamy do czynienia z wygaszeniem przewodnictwa pod wpływem pola magnetycznego poza rezonansami. Co więcej, w rezonansach odpowiadających poziomom Landaua (poza zerowym) ma wartość $G = G_0 W / (\pi L)$, jest więc dwukrotnie mniejsza, niż w punkcie Diraca. Przy niższych polach przewodnictwo rośnie, nie można zatem wyodrębnić rezonansów związanych z poziomami Landaua.



Rysunek 7.2: Przewodność płata grafenowego o zerowym wypełnieniu w funkcji pola magnetycznego. (a) Oscylacje przewodnictwa dla różnych długości próbki (stosunek $W/L = 5$); kolor czarny, niebieski i zielony odpowiadają długościom kolejno 14 nm, 10.5 nm, 7 nm. (b) Przewodność układu o $L = 42$ nm dla różnych wartości W/L ; kolorem czarnym, niebieskim, zielonym i czerwonym oznaczono krzywe o W/L wynoszącym odpowiednio 2, 3, 4 i 5.



Rysunek 7.3: (a) Zależność przewodnictwa od energii elektronów i przyłożonego pola magnetycznego dla próbki o długości $L = 154$ nm i szerokości $W = 770$ nm. (b) Dopasowanie poziomów Landaua do rezonansów. (c) Zależność konduktancji od pola magnetycznego na pierwszym poziomie Landaua ($L = 154$ nm, $W = 3080$ nm). Linią przerywaną oznaczono graniczną wartość $G = G_0 W/(\pi L) = G_0 20/\pi$, czerwoną linią oznaczono wartość przewodnictwa w punkcie Diraca- $G = G_0 40/\pi$.

8. Podsumowanie

Celem pracy była analiza przewodnictwa elektrycznego dwuwarstwowy grafenowej w polu magnetycznym. Rozważaliśmy próbkę dwuwarstwowego grafenu o zerowej przerwie energetycznej. Ze względu na małe rozszczepienie zeemanowskie w stosunku do odstępów energetycznych między poziomami Landau (zob. (3.35)) przyjęliśmy w układzie degenerację spinową. Analizowaliśmy prostokątną próbkę dwuwarstwy o szerokości W i długości L umieszczoną między elektrodami modelowanymi dwuwarstwowym grafenem o głębokim wypełnieniu. Symetria układu pozwala traktować mody poprzeczne do kierunku przewodnictwa wektora falowego jako kanały transmisji w zagadnieniu rozpraszania (rozd. 4.2). W celu zminimalizowania wkładu przewodnictwa brzegowego, zakładaliśmy, iż szerokość próbki jest znacznie większa od jej długości ($W \gg L$). Geometria ta usprawiedliwia przyjęcie okresowych warunków brzegowych (por. (5.7)).

Analizę przewodnictwa przeprowadziliśmy osobno dla zerowego ($\epsilon = 0$) i skończonego wypełnienia ($\epsilon \neq 0$) w obszarze centralnym. Wykazaliśmy, że, niezależnie od wartości przyłożonego pola magnetycznego, przewodnictwo w punkcie Diraca wynosi $G = 2 G_0 W / (\pi L)$. Jest więc ono dwukrotnie większe niż w monowarstwie grafenowej (5.9). Przez związek przewodnictwa i promienia cyklotronowego oszacowaliśmy granicę między obszarem przewodnictwa balistycznego i tłumionego przez pole (zob. (7.4)). Pokazaliśmy również, iż, przy niskim wypełnieniu i dla wysokich wartości pola magnetycznego, rezonanse transmisji w obszarze tłumionym położone są w poziomach Landaua. Co więcej, przez numeryczną analizę układów o skończonym wypełnieniu, wykazaliśmy, że w niezerowych poziomach Landaua przewodnictwo okazuje się być w przybliżeniu dwukrotnie mniejsze niż w punkcie Diraca.

Dodatek A Symetria względem transformacji cechowania

W dodatku tym przedstawiono, w jaki sposób transformują się funkcje własne Hamiltonianów układów grafenowych przy transformacji cechowania potencjału wektorowego $\vec{A}(\vec{r}) \rightarrow \vec{A}(\vec{r}) + \nabla \chi(\vec{r})$. Przecechowane Hamiltoniany monowarstwowego i dwuwarstwowego grafenu można zapisać następująco :

$$\mathbf{H}_{M/D} = \begin{pmatrix} E_p & \nu_F (\pi_x \mp i \pi_y) & 0 & 0 \\ \nu_F (\pi_x \pm i \pi_y) & E_p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_p & \nu_F (\pi_x \pm i \pi_y) \\ 0 & 0 & \nu_F (\pi_x \mp i \pi_y) & E_p \end{pmatrix}, \quad (8.1)$$

gdzie $\vec{\pi} = -i \hbar \nabla + e (\vec{A}(\vec{r}) + \nabla \chi(\vec{r}))$. Hamiltonian z górnymi znakami opisuje monowarstwę, z dolnymi dwuwarstwę (rozważamy w jej przypadku tylko dolinę K ; przyjmujemy zerową różnicę energii potencjalnych między warstwami). Postulujemy, iż ich funkcje falowe są następującej postaci:

$$\psi(\vec{r}) = \begin{cases} \exp(i \gamma(\vec{r})) (\psi_A^K, \psi_B^K, \psi_A^{K'}, \psi_B^{K'}) (\vec{r}) & \text{dla monowarstwy,} \\ \exp(i \gamma(\vec{r})) (\psi_{A_1}, \psi_{B_1}, \psi_{B_2}, \psi_{A_2}) (\vec{r}) & \text{dla dwuwarstwy,} \end{cases} \quad (8.2)$$

gdzie $\gamma(\vec{r})$ jest czynnikiem fazowym nieznaney postaci. Równanie Diraca

$$\mathbf{H}_{M/D} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (8.3)$$

można zapisać następująco:

$$\begin{pmatrix} \frac{E_p - E}{\hbar \nu_F} & \pi'_x \mp i \pi'_y & 0 & 0 \\ \pi'_x \pm i \pi'_y & \frac{E_p - E}{\hbar \nu_F} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{E_p - E}{\hbar \nu_F} & \pi'_x \pm i \pi'_y \\ 0 & 0 & \pi'_x \mp i \pi'_y & \frac{E_p - E}{\hbar \nu_F} \end{pmatrix} \psi(\vec{r}) = 0, \quad (8.4)$$

gdzie $\vec{\pi}' = \nabla\gamma(\vec{r}) - i\nabla + \frac{e}{\hbar}(\vec{A}(\vec{r}) + \nabla\chi(\vec{r}))$. By równanie (8.3) miało niezmienniczą postać ze względu na transformację cechowania, narzucamy warunek

$$\gamma(\vec{r}) = -\frac{e}{\hbar}\chi(\vec{r}). \quad (8.5)$$

Przy transformacji cechowania, w celu zachowania niezmienniczej postaci równania Diraca (8.3), oprócz potencjału wektorowego musimy przetransformować również funkcje falowe:

$$\begin{cases} \vec{A}(\vec{r}) \longrightarrow \vec{A}(\vec{r}) + \nabla\chi(\vec{r}), \\ \psi(\vec{r}) \longrightarrow \exp\left(-i\frac{e}{\hbar}\chi(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}). \end{cases} \quad (8.6)$$

Postać transformacji funkcji falowych jest zatem identyczna jak dla elektronów schrödingerskich [20].

Dodatek B Jawne sformułowanie zagadnienia rozpraszania dla $E - E_p \neq 0$

W dodatku tym przedstawiono jawnie macierze \mathbf{A} z równania $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ zagadnienia rozpraszania dla układów grafenowych analizowanych w rozdziale 4., 5. i 6. przy niezerowym wypełnieniu ($E - E_p \neq 0$). Postać \mathbf{x} i \mathbf{b} jest identyczna jak w przypadku $E - E_p = 0$ (wzory (3.17), (6.12), (7.1)).

B.1 Magnetoprzewodnictwo w monowarstwowym grafenie

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & \text{U} \left[-\frac{(\varepsilon^2+1)}{2}, -\sqrt{2} k_y l_B \right] & \text{V} \left[-\frac{(\varepsilon^2+1)}{2}, -\sqrt{2} k_y l_B \right] \\ -1 & 0 & -i \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \text{U} \left[-\frac{(\varepsilon^2-1)}{2}, -\sqrt{2} k_y l_B \right] & -i \frac{\sqrt{2}}{\varepsilon} \text{V} \left[-\frac{(\varepsilon^2-1)}{2}, -\sqrt{2} k_y l_B \right] \\ 0 & 1 & \text{U} \left[-\frac{(\varepsilon^2+1)}{2}, \sqrt{2}(L l_B^{-1} - k_y l_B) \right] & \text{V} \left[-\frac{(\varepsilon^2+1)}{2}, \sqrt{2}(L l_B^{-1} - k_y l_B) \right] \\ 0 & -1 & -i \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \text{U} \left[-\frac{(\varepsilon^2-1)}{2}, \sqrt{2}(L l_B^{-1} - k_y l_B) \right] & -i \frac{\sqrt{2}}{\varepsilon} \text{V} \left[-\frac{(\varepsilon^2-1)}{2}, \sqrt{2}(L l_B^{-1} - k_y l_B) \right] \end{pmatrix}, \quad (8.7)$$

gdzie $\varepsilon = (E - E_p) l_B / (\nu_F \hbar)$, $l_B = \sqrt{\hbar / (e B)}$.

B.2 Przewodnictwo elektryczne grafenu dwuwarstwowego

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -\epsilon & \epsilon & -\epsilon & \epsilon & 0 & 0 \\ -1 & 1 & k e^{i\theta_k^+} & -k e^{i\theta_k^-} & -k e^{-i\theta_k^+} & k e^{-i\theta_k^-} & 0 & 0 \\ -1 & -1 & \epsilon & \epsilon & \epsilon & \epsilon & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -k e^{-i\theta_k^+} & -k e^{-i\theta_k^-} & k e^{i\theta_k^+} & k e^{i\theta_k^-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\epsilon e^{-i k_x^+ L} & \epsilon e^{-i k_x^- L} & -\epsilon e^{i k_x^+ L} & \epsilon e^{i k_x^- L} & 1 & -1 \\ 0 & 0 & k e^{i(\theta_k^+ - k_x^+ L)} & -k e^{i(\theta_k^- - k_x^- L)} & -k e^{-i(\theta_k^+ - k_x^+ L)} & k e^{-i(\theta_k^- - k_x^- L)} & 1 & -1 \\ 0 & 0 & \epsilon e^{-i k_x^+ L} & \epsilon e^{-i k_x^- L} & \epsilon e^{i k_x^+ L} & \epsilon e^{i k_x^- L} & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -k e^{-i(\theta_k^+ + k_x^+ L)} & -k e^{-i(\theta_k^- + k_x^- L)} & k e^{i(\theta_k^+ + k_x^+ L)} & k e^{i(\theta_k^- + k_x^- L)} & -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (8.8)$$

gdzie $\epsilon = (E - E_p) / (\hbar \nu_F)$, $\theta_k^\pm = k_x^\pm + i k_y$, $k_x^\pm = \text{sgn}(k_x^\pm) \sqrt{\epsilon(\epsilon \pm t) / (\hbar \nu_F)^{-2} - k_y^2}$.

B.3 Magnetoprzewodnictwo grafenu dwuwarstwowego

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & \varphi_{1,A_1}^+(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{1,A_1}^-(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{2,A_1}^+(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{2,A_1}^-(\epsilon, \xi_0) & 0 & 0 \\ -1 & 1 & \varphi_{1,B_1}^+(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{1,B_1}^-(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{2,B_1}^+(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{2,B_1}^-(\epsilon, \xi_0) & 0 & 0 \\ -1 & -1 & \varphi_{1,B_2}^+(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{1,B_2}^-(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{2,B_2}^+(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{2,B_2}^-(\epsilon, \xi_0) & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \varphi_{1,A_2}^+(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{1,A_2}^-(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{2,A_2}^+(\epsilon, \xi_0) & \varphi_{2,A_2}^-(\epsilon, \xi_0) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varphi_{1,A_1}^+(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{1,A_1}^-(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{2,A_1}^+(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{2,A_1}^-(\epsilon, \xi_1) & 1 & -1 \\ 0 & 0 & \varphi_{1,B_1}^+(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{1,B_1}^-(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{2,B_1}^+(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{2,B_1}^-(\epsilon, \xi_1) & 1 & -1 \\ 0 & 0 & \varphi_{1,B_2}^+(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{1,B_2}^-(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{2,B_2}^+(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{2,B_2}^-(\epsilon, \xi_1) & -1 & -1 \\ 0 & 0 & \varphi_{1,A_2}^+(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{1,A_2}^-(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{2,A_2}^+(\epsilon, \xi_1) & \varphi_{2,A_2}^-(\epsilon, \xi_1) & -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (8.9)$$

gdzie $\xi_0 = -k_y l_B$, $\xi_1 = l_B^{-1} L - k_y l_B$, $\epsilon = (E - E_p) l_B / (\nu_F \hbar)$. Funkcje $\varphi_{i,\alpha}^\pm$ zostały wprowadzone w rozdziale 2. (wzory (3.30), (3.31)).

Bibliografia

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, Science, Vol 306, 666 (2004).
- [2] Y. Zhang, J.P. Small, W.V. Pontius, P. Kim, *Fabrication and Electric Field Dependent Transport Measurements of Mesoscopic Graphite Devices*, Appl. Phys. Lett. 86, 073104 (2005).
- [3] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D.Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov, *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, Nature 438:197 (2005).
- [4] D.P. DiVincenzo, E.J. Mele, *Self-Consistent Effective Mass Theory for Intralayer Screening in Graphite Intercalation Compounds*, Physical Review B 295 (4): 1685 (1984).
- [5] G.W. Semenoff, *Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly*, Physical Review Letters 53, 2449 (1984).
- [6] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone, *Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene*, Science 321 (5887): 385-388 (2008).
- [7] R.R. Nair, P. Blake, A.N. Grigorenko, K.S. Novoselov, T.J. Booth, T. Stauber, N.M.R. Peres, A.K. Geim, *Fine structure constant defines visual transparency of graphene*, Science 320, 1308 (2008).
- [8] Y.M. Lin, A. Valdes-Garcia, S.J. Han, D.B. Farmer, I. Meric, Y. Sun, Y. Wu, C. Dimitrakopoulos, A. Grill, P. Avouris, K.A. Jenkins, *Wafer-Scale Graphene Integrated Circuit*, Science 332, 6035 (2011).
- [9] E. McCann, V.I. Fal'ko, *Landau-Level Degeneracy and Quantum Hall Effect in a Graphite Bilayer*, Phys. Rev. Lett. 96, 086805 (2006).
- [10] K.S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S.V. Morozov, H.L. Stormer, U. Zeitler, J.C. Maan, G.S. Boebinger, P. Kim, A.K. Geim, *Room-Temperature Quantum Hall Effect in Graphene*, Science 315, 1379 (2007).
- [11] J. Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, C.W.J. Beenakker, *Sub-Poissonian shot noise in graphene*, Phys. Rev. Lett. 96, 246802 (2006).
- [12] M.I. Katsnelson, *Minimal conductivity in bilayer graphene*, Eur. Phys. J. B 52, 151-153 (2006).
- [13] I. Snymán, C.W.J. Beenakker, *Ballistic transmission through a graphene bilayer*, Phys. Rev. B 75, 045322 (2007).
- [14] F. Miao, S. Wijeratne, Y. Zhang, U.C. Coskun, W. Bao, C.N. Lau, *Phase-coherent transport in graphene quantum billiards*, Science 317 (5844): 1530-1533 (2007).

- [15] R. Danneau, F. Wu, M.F. Craciun, S. Russo, M.Y. Tomi, J. Salmilehto, A.F. Morpurgo, P.J. Hakonen, *Shot noise in ballistic graphene*, Phys. Rev. Lett. 100, 196802 (2008).
- [16] E. Prada, P. San-Jose, B. Wunsch, F. Guinea, *Pseudo-diffusive magnetotransport in graphene*, Phys. Rev. B, 75, 113407 (2007).
- [17] E.V. Castro, K.S. Novoselov, S.V. Morozov, N.M.R. Peres, J.M.B. Lopes dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A.K. Geim, A.H. Castro Neto, *Electronic properties of a biased graphene bilayer*, J. Phys.: Condens. Matter 22, 175503 (2010).
- [18] M. Wimmer, *Quantum transport in nanostructures: From computational concepts to spintronics in graphene and magnetic tunnel junctions*. Dissertationsreihe der Fakultät für Physik der Universität Regensburg 5, PhD, (Universität Regensburg, 2009), dodatek G.
- [19] D.S.L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler, T. Chakraborty, *Properties of Graphene: A Theoretical Perspective*, Advances in Physics, V. 59 (4), p.261-482 (2010).
- [20] S. Kryszewski, *Mechanika Kwantowa*, (Uniwersytet Gdanski, 2010), <http://iftia9.univ.gda.pl/~sjk/QM/indexQM.html>
- [21] M. Abramowitz, I.A. Stegun, eds., *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, Inc., New York, 1965), rozdział 13.
- [22] J. Milton Pereira Jr., F.M. Peeters, P. Vasilopoulos, *Landau levels and oscillator strength in a biased bilayer of graphene*, Phys. Rev. B 76, 115419 (2007).
- [23] Ch. Kittel, *Wstęp do fizyki ciała stałego*, (Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 1999), rozdziały 8, 9.
- [24] *Physics and Technology of Submicron Structures*, pod red. H. Heinrich, G. Bauer, F. Kuchar, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 83 (Springer-Verlag, Berlin, 1988).
- [25] C.W.J. Beenakker, H. van Houten, *Quantum transport in semiconductor nanostructures*, Solid State Physics, 44, 1-228 (1991) .
- [26] Ya.M. Blanter, M. Buttiker, *Shot Noise in Mesoscopic Conductors*, Phys. Rep. 336, 1 (2000).
- [25] M.H. Tyc, *Przewodnictwo elektryczne układów niskowymiarowych w zewnętrznym polu elektrycznym i magnetycznym*, (Politechnika Wrocławska, 2003), strony 25-29, www.if.pwr.wroc.pl/~wsalejda/doktoraty/mhtyc.pdf