

Tudományos Diákköri Dolgozat

Kígyó-állapotok különleges természete grafénben



Rakya Péter

ELTE, TTK Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék
Budapest, 2008.

Témavezető:
Cserti József

Előszó

A szén alapú kristályszerkezetek sokszínű világa a figyelem középpontjába helyezte ezt az elemet nemcsak az alpkutatás, de a széleskörű alkalmazások terén is. A háromdimenziós kristályszerkezetek (grafit és gyémánt) már a régmúltban is ismertek voltak. A nemrégiben felfedezett *nulladimenziós* (fullerén) és *egydimenziós* (szénnanocsövek) változatok manapság is tárgyát képezik sok kutatómunkának különleges mechanikai és elektromos tulajdonságaiknak köszönhetően. Ugyanakkor egészen a közelmúltig nem sikerült *kétdimenziós* szénmódosulatot megfigyelni.

Ennek ellenére az elméleti fizika már bő irodalommal rendelkezik erről a módosulatról is. A *grafén*[1] (síkbeli, hatszöges elrendezése a szénatomoknak) hosszú ideje kiindulási pontnak számít minden a grafittal, szénnanocsövekkel és fullerénnel kapcsolatos számolásokban már a 40-es évektől kezdve[2]. A kísérleti eredmények azonban egészen 2004-ig vártak magukra, mikor is már megfelelő technológiai eljárások váltak hozzáférhetővé a felmerülő problémák leküzdéséhez[3]. A töltéshordozók különleges spektruma és az anomális kvantum Hall-effektus a grafénben [4] nagy figyelmet keltett a kutatási területen.

A grafén felfedezése új lehetőségeket nyitott néhány alapvető jelenség vizsgálatára a relativisztikus kvantumelmélet területéről. Valószínűleg az egyik legfontosabb ilyen példa az ún. *Klein-paradoxon* [5], ami a relativisztikus kvantumrészecskék nagy áthatólóképességét jósolja meg nagyon magas és széles potenciálgátakon. Az effektust eddig csak kísérletileg megvalósíthatatlan (vagy nagy nehézségek árán megvalósítható) elrendezésekben vizsgálták. Ilyen volt pl. a részecske-antirészecske párkeltés a feketelyukak határán[1]. Ugyanakkor az effektus lényeges szerepet játszik a grafénnel kapcsolatos elektronikában [6].

Ez a dolgozat a grafénben lévő elektronok dinamikai tulajdonságait vizsgálja mágneses mezővel kialakított tartományokban. A dolgozatban összefoglalt kutatómunka eredményeképp két tudományos publikációnk jelent meg a Phys. Rev. B szakmai folyóiratban [7, 17].

Köszönetnyilvánítás

Nem fejezhetem be az előszót anélkül, hogy köszönetet ne mondanék témavezetőmnek, *Cserti Józsefnek* az érdekes téma felvetésért és a kutatás közben nyújtott sokoldalú segítségért, tanácsokért. A kutatást ugyancsak előrelendítették *Kormányos Andorral*, *Oroszlány Lászlóval* és *Colin. J. Lambert*-tal való együttműködésünk. Értékes hozzászólásaikért ezúton is szeretnék köszönetet mondani. Köszönetemet szeretném kifejezni szüleimnek is: *Rakya Gabriellának* és *Rakya Vladimírnak*, akik e dolgozat megírása közben emberi és erkölcsi támogatást nyújtottak. Végül, de nem utolsó sorban köszönöm az *ELTE TTK, Komplex Rendszerek Fizikája Tanszéknek* és a *Lancaster University* fizika tanszékének a rendelkezésemre bocsátott számítástechnikai lehetőségeket, amelyek segítségével munkámat színvonalasabban végezhettem.

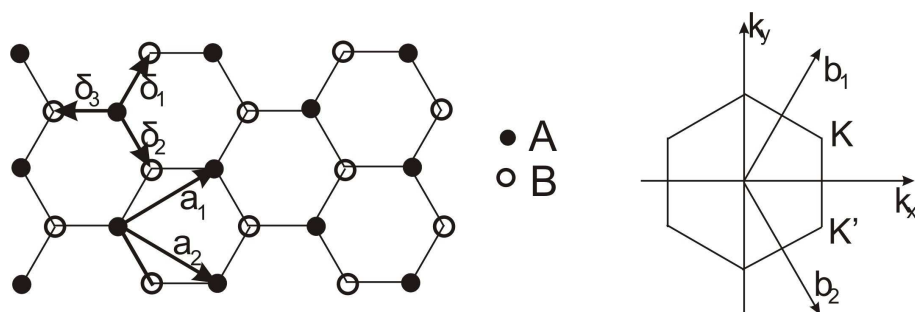
Tartalomjegyzék

Előszó	i
Köszönetnyilvánítás	i
1. Bevezetés a grafén fizikájába	1
2. A rendszer kvantumos leírása a Dirac-kúpok környezetében	5
2.1. A szimmetrikus eset	6
2.1.1. A III. tartomány hullámfüggvényei	7
2.1.2. A II. tartomány hullámfüggvényei	9
2.1.3. Az I. tartomány hullámfüggvényei	10
2.1.4. A hullámfüggvények illesztése a határfelületeken	10
2.2. Az antiszimmetrikus rendszer	11
3. A spektrumok szemiklasszikus közelítése	14
3.1. Kötött állapotok inhomogén mágneses mezőben szemiklasszikus megközelítésben	14
3.2. A szimmetrikus elrendezés szemiklasszikus kvantálási feltétele	16
3.3. Az antiszimmetrikus elrendezés szemiklasszikus kvantálási feltétele	19
3.4. A Landau-nívók	20
3.5. A hullámfüggvény szemiklasszikus közelítése	21
3.6. Az egzakt hullámfüggvény hosszú hullámú közelítése	23
4. Kígyó-állapotok. A spektrumok értelmezése és magyarázata	26
4.1. A módusok áramszállítása	26
4.2. A spektrum értelmezése a szimmetrikus elrendezésre	27
4.3. A spektrum értelmezése az antiszimmetrikus elrendezésre	28
4.4. Összefoglalás	31
Függelék	31
A.1. A szimmetrikus rendszer spektrumára vonatkozó állítások	33
A.2. Az antiszimmetrikus rendszer spektrumára vonatkozó állítások	33
A.3. A Snake-állapotok asszimptotikus meredeksége az antiszimmetrikus elrendezésben	34
A.4. Folytonos térszimmetria tükröződése a szemiklasszikus hullámfüggvényen	35
Irodalomjegyzék	37

1. fejezet

Bevezetés a grafén fizikájába

Ahogy az előszóban már utaltunk rá, a grafénnek a szénatomok hatszögrácsban elrendezett rendszerét nevezzük (1.1. ábra). A kristályrács Bravais-cellája háromszöges szimmetriát mutat, minden cellában két bázisatommal (A és B atomok). A kristályrács elemi rácsvektorai az alábbi alakban írhatóak fel:



1.1. ábra. Bal: a grafén kristályszerkezete, mely két független alrác (A és B atomokból álló) együtteseként fogható fel. Jobb: a megfelelő Brillouin zóna a reciprokrács-vektorokkal.

$$\mathbf{a}_1 = \frac{r_{C-C}}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{r_{C-C}}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad (1.1)$$

ahol r_{C-C} a szénatomok közötti távolságot jelöli. A kristályrács reciprokrácsa ugyanolyan szimmetriákkal rendelkezik mint a direkt rács. A reciprokrács elemi rácsvektorai az alábbi összefüggésekkel adóttak:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3r_{C-C}}(1, \sqrt{3}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{r_{C-C}}(1, -\sqrt{3}). \quad (1.2)$$

A grafén fizikájában különösen fontos szerepet játszanak az ún. K és K' pontok a Brillouin zóna (BZ) sarkaiban. Ezeket a pontokat nevezzük *Dirac-pontoknak*. Az elnevezést a későbbiek során megmagyarázzuk. A Dirac-pontok a reciprokrácsban a

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3r_{C-C}}\left(1, \frac{2}{\sqrt{3}}\right), \quad \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3r_{C-C}}\left(1, -\frac{2}{\sqrt{3}}\right) \quad (1.3)$$

pontokban helyezkednek el. A direkt rácsban a 3 legközelebbi szomszéd pozícióját az alábbi vektorok adják:

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{r_{C-C}}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{r_{C-C}}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = -r_{C-C}(1, 0). \quad (1.4)$$

Szorosan kötött elektron modellben[8] a legközelebbi szomszédok figyelembe vételével a grafén Hamilton-operátora az alábbi alakot ölti[1, 9]:

$$\mathbf{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^+ b_{\sigma,i} + \text{h.c.}) , \quad (1.5)$$

ahol $a_{\sigma,i}$ ($a_{\sigma,i}^+$) az eltüntető (keltő) operátor, mely egy σ spinű elektronra hat az \mathbf{R}_i rácspont A alrácsán. Analóg módon értelmezhető a $b_{\sigma,i}$ operátor, mely a B alrácson hat. A képletben továbbá t az ún. *hopping-integrált* jelöli, valamint h.c. a hermitikus konjugáltat. A Hamilton-operátorból kiszámolható a grafén sáv szerkezete:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y r_{C-C}) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y r_{C-C}\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x r_{C-C}\right)} . \quad (1.6)$$

Az összefüggésben a \pm előjelek a felső illetve alsó spektrumágakat jelölik (1.2. ábra). A spektrum szimmetrikus az $E = 0$ síkmetszetre. Ha figyelembe vennénk másodszomszéd kölcsönhatásokat is a modellben, ez a szimmetria elromlana, de a soron következő állítások nem vesztenék érvényüket[9]. A spektrum a Dirac-pontok környékén kúpszerű geometriát mutat. Sorba fejtve az (1.6) diszperziós relációt a K pont környékén:

$$E_{\pm} \approx v_F \hbar |\mathbf{q}| + O\left(\left(\frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{K}|}\right)^2\right) , \quad (1.7)$$

ahol $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$, $v_F \sim 10^6 \text{ ms}^{-1}$ pedig a Fermi-sebesség:

$$v_F = \frac{3tr_{C-C}}{2\hbar} . \quad (1.8)$$

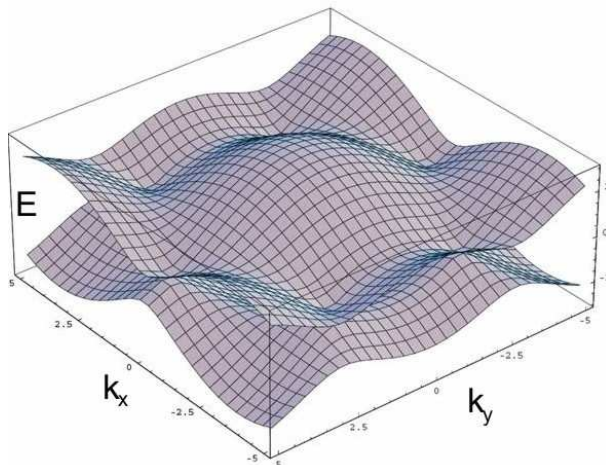
A K' pont környékén sorfejtve a diszperziós relációt, ugyanilyen képletet kapunk a kis energiájú gerjesztések spektrumára. A Fermi-energia, elektronadagolás és kapufeszültségek alkalmazása nélkül, a Dirac-pontok által kifeszített síkba esik. Ezért a grafén elektronszerkezetének tulajdonságait figyelembe véve, a grafén egy nulla tiltott sáv szélességű félvezetőnek számít. Megmutatható hogy a K pont környékén a lineáris diszperziójú kvázirészecskéket formálisan egy *Dirac-féle* Hamilton operátorral lehet leírni[1, 9]:

$$\hat{H}_0^K = v\sigma\hat{\mathbf{p}} , \quad (1.9)$$

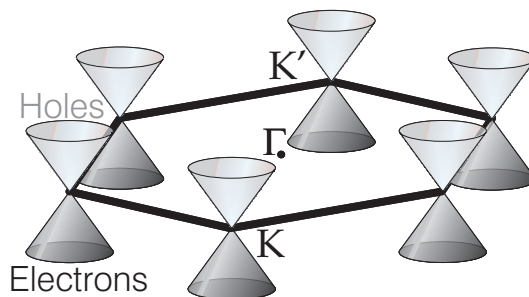
ahol $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$ a Pauli-mátrixokat jelöli. A K' pont elemi gerjesztéseire analóg módon megkapható egy $\hat{H}_0^{K'}$ Hamilton-operátor:

$$\hat{H}_0^{K'} = \sigma_x \hat{H}_0^K \sigma_x . \quad (1.10)$$

Az elméleti megfontolásokat mérési eredmények is alátámasztották [4]. Ezek a mérések többnyire az energiafüggő ciklotron-tömeget vizsgálták[9]. Mivel a független Dirac-pontok Hamilton-operátorait egy unitér transzformáció köti össze, végtelen kiterjedésű grafén mintában a két független Dirac-pont kétszeres degenerációt okoz az elemi gerjesztések spektrumában. Véges minta esetében a peremek átszórásokat okoznak a Dirac-pontok között[10], ezért a független Dirac-pontok modellje nem alkalmazható.



(a) A felső felület a vezetési sávot, az alsó felület pedig a valenciasávot ábrázolja.



(b) A Dirac-kúpok a Fermi-energia környékén. A vezetési és valenciasáv a két jellegzetes K és K' pontban érintik egymást.

1.2. ábra. A grafén spektuma szorosan kötött elektron modellből számolva első szomszéd kölcsönhatásokkal.

A grafén elektronszerű és lyukszerű gerjesztései hasonló töltéskonjugációs szimetriatulajdonságokat mutatnak, mint ahogy azt megszoktuk a kvatumelektrodinamikában [11]. A grafén esetében ez a szimmetria a két alrácsból álló rács szimetriatulajdonságainak következménye, mivel a grafén elektronjait kétkomponensű vektorok segítségével lehet leírni. Az egyes komponensek az egyes alrácscok járulékait jelentik a hullámfüggvényben. A grafén kétkomponensű vektorral történő leírása nagyban hasonlít a feles spinű részecskék leírásához (hasonlóan $SU(2)$ algebrát követ), azonban a megkülönböztetés céljából ezt mégis *pseudospinnek* nevezik. További analógiák is meglelhetők a kvatumelektrodinamika és a grafén elemi gerjesztései között: egy E energiával terjedő (propagáló) elektron ugyanabban a spektrumágban azonosítható, mint egy $-E$ energiájú lyuk, mely az ellentétes irányban propagál. Mindebből az következik, hogy ugyanabból a spektrumágból származó elektronnak és lyuknak ugyanolyan irányba mutat a pseudospin vektora, mely irány egybeesik elektron esetében az impulzus irányával, lyuk esetében pedig vele épp ellentétes irányú. Ennek következtében bevezethető az ún. kiralitás fogalma, mely

formálisan megegyezik a pszeudospinnek a mozgás irányára vett vetületével. Elektronra ez pozitív értéknek adódik, lyuk esetében pedig negatívnak. Az analógia a térelméletekkel váratlan fordulatot vesz amikor figyelembe vesszük, hogy a grafén síkja valójában nem teljesen lapos. A szénatomok mindig véges görbületű felületrészeken helyezkednek el. Ez az effektus többek között a *Mermin-Wagner-tétel* [12] következményeként értelmezhető. Köztudott, hogy harmonikus közelítésben a kétdimenziós rendszerekben nem alakulhat ki hosszútávú rend [13]. A felület görbületi torzulása a helyzetet nagy mértékben befolyásolja és megakadályozza a kristályrács felbomlását.

Az említett relativisztikus-szerű tulajdonságok miatt[5] egyrétegű grafénben csupán mágneses tér használatával képzelhető el a vezetési elektronok tervezett geometriájú síkrészbe történő lokalizálása[14]. A dolgozatban a mágneses mezőbe zárt elektronok dinamikáját vizsgáljuk egzakt kvantumos (második fejezet) és szemiklasszikus (harmadik fejezet) számolásokkal. A dolgozat utolsó fejezetében (negyedik fejezet) pedig értelmezzük a felsorolt számolási módszerek eredményeit.

2. fejezet

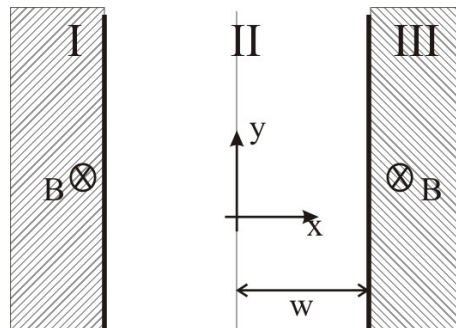
A rendszer kvantumos leírása a Dirac-kúpok környezetében

A dolgozatban, mint azt ahogy a bevezetőben is említettük, a grafénben lévő elektronok dinamikai tulajdonságait vizsgáljuk mágneses mezővel kialakított tartományokban. A mágneses hatásokat egy Peierls-transzformációval vesszük figyelembe a Hamilton-operátorban: a kanonikus impulzust eltoljuk a csatolási állandó (töltés) és a vektorpotenciál szorzatának értékével:

$$\hat{H} = v_F \sigma (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) . \quad (2.1)$$

Az általunk vizsgált elrendezés geometriája a 2.1. ábrán látható. A középső (fehér) tartományban zérus a mágneses mező, míg a két szélső végtelen tartományban (sátrózott) homogén mágneses mezőt létesítünk mely merőleges az ábra síkjára. A dolgozatban két rendszert vizsgálunk majd (szimmetrikus és antiszimmetrikus eset a 2.1. ábrán). Szimmetrikus (antiszimmetrikus) esetben a két szélső tartományban ugyanolyan (ellentétes) a mágneses tér. A rendszert minden irányban végtelen kiterjedésűnek tekintjük, mivel ellenkező esetben a peremek átszórásokat okoznának a Dirac-pontok között[10]. Egyelőre nem ismert olyan formula, mely mágneses tér jelenléte mellett egzaktul megadná a peremfeltételt.

Az eredményeket értelmezzük és összehasonlítjuk a kétdimenziós elektrongázban (2DEG)



2.1. ábra. A rendszer geometriája. A középső (fehér) tartományban nincs mágneses mező, míg a két szélső végtelen tartományban (sátrózott) homogén mágneses mezőt létesítünk. Szimmetrikus (antiszimmetrikus) esetben a két szélső tartományban ugyanolyan (ellentétes) a mágneses tér.

létesített ugyanilyen geometriájú rendszer tulajdonságaival. A kutatás során az antiszimmetrikus esetben lényegesen eltérő tulajdonságokat találtunk a hagyományos 2DEG fizikájához képest. A dolgozat ezen fejezetében a rendszer egzakt kvantumos leírását adjuk meg. A soron következő számolások alapegyenlete a *Dirac-kúpok* leírására használt kontinuum modell Hamilton-operátorával felírt Schrödinger-egyenlet((1.9), (2.1)).

2.1. A szimmetrikus eset

A kvantumos számolásokat először a szimmetrikus elrendezésen mutatjuk be. A vizsgált rendszer geometriája a 2.1. ábrán tekinthető meg. Az ábrán bejelölt tartományokban a vektorpotenciál az alábbi alakban írható fel, ha ún. *Landau-mértéket* választunk:

$$\mathbf{A}^I = \begin{pmatrix} 0 \\ -B(x+w) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{II} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{A}^{III} = \begin{pmatrix} 0 \\ -B(x-w) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

A megadott vektorpotenciál az alábbi mágneses térnek felel meg:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -B \Theta(|x| - w) \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

ahol:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{ha } x \geq 0 \\ 0 & \text{ha } x < 0 \end{cases}. \quad (2.4)$$

A rendszert leíró Hamilton-operátor az alábbi alakot ölti:

$$\hat{H} = v_F \sigma (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}). \quad (2.5)$$

A feladat ezen operátor sajátérték-problémájának a megoldása. Ennek érdekében képezzük az előző Hamilton-operátor négyzetét:

$$\hat{H}^2 = v_F^2 (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2 - v_F^2 \hbar e \sigma \mathbf{B}. \quad (2.6)$$

A keresett energiasajátértékek (E) az alábbi összefüggést elégítik ki:

$$\hat{H}^2 \Psi = E^2 \Psi. \quad (2.7)$$

A rendszer „szimmetrikus” elnevezése egy kicsit félrevezető lehet. Vegyük ugyanis a \hat{T} tükrözőoperátor hatását:

$$\hat{T} \Psi(x, s) = \Psi(-x, -s), \quad (2.8)$$

vagyis a térkoordinátákat tükrözi, a spinorkomponenseket pedig felcseréli. (A pszeudospin ugyanolyan algebrát követ, mint a hagyományos spin.) Ugyanez érvényes a *Hilbert-téren* ható operátorokra is. Rövid számolással adódik:

$$\hat{T} \hat{H} \hat{T}^{-1} = \hat{H}(-B). \quad (2.9)$$

Vagyis a rendszert tükrözve nem kapjuk vissza az eredetit, hanem egy az eredetihez képest el-
lentétes mágneses mezőjű rendszert kapunk. Ennek az a következménye, hogy nem kereshetjük
az állapotokat leíró hullámfüggvényeket szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus alakban.

Térjünk vissza az eredeti sajátértékproblémához. Ha E egy sajátértéke a Hamilton-operátornak
($\hat{H}\Psi = E\Psi$), akkor E^2 sajátértéke lesz a \hat{H}^2 operátornak: $\hat{H}^2\Psi = \hat{H}(\hat{H}\Psi) = E^2\Psi$. Ez
utóbbi operátornak legalább kétszeresen elfajult sajátértékei vannak, mivel $(\pm E)^2$ ugyanolyan
jó sajátértékek. Ennek megfelelően \hat{H}^2 bázisai nem adhatóak meg egyértelműen. Ez tehát
információvesztést jelent az eredeti Hamilton-operátorhoz képest, azonban a \hat{H}^2 operátorral
felírt független differenciálegyenleteket könnyebben megoldhatjuk. Ezután visszatérve az eredeti
Hamilton-operátorhoz, rögzítjük a spinorkomponensek egymáshoz való viszonyát. Most nézzük
meg konkrétan az egyes tartományokra vonatkozó számolásokat:

2.1.1. A III. tartomány hullámfüggvényei

A III. térrészben érvényes Hamilton-operátor a (2.5) egyenlettel adott. Könnyen ellenőrizhető
az alábbi kommutátor-reláció teljesülése:

$$[\hat{H}, \hat{p}_y] = 0. \quad (2.10)$$

Ez az y irányban eltolásinvariáns rendszer természetes következménye. Ebből adódóan a
hullámfüggvényt olyan szorzat alakban kereshetjük, mely szorzatban az egyik tényező az y
irányú síkhullámszerű propagálást írja le:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_{-1}(x) \end{pmatrix} e^{iky}. \quad (2.11)$$

A (2.5) Hamilton-operátorban a \hat{p}_y operátor hatása így lecserélhető $\hbar k$ -val való szorzásra:

$$\hat{H} = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i(\hbar k - eA_y) \\ \hat{p}_x + i(\hbar k - eA_y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

A Hamilton-operátor négyzete diagonális mátrixra vezet:

$$\frac{1}{v_F^2} \hat{H}^2 = \left(\hat{p}_x^2 + (\hbar k - eA_y)^2 \right) \hat{I}_2 + \hbar e \sigma_z B. \quad (2.13)$$

Hattatva ezt az operátort a hullámfüggvény (2.11) komponenseire az alábbi differenciálegyenlethez
jutunk:

$$\left[-\hbar^2 \partial_x^2 + (\hbar k - eA_y)^2 + \hbar e s B - \frac{E^2}{v_F^2} \right] \Phi_s = 0, \quad (2.14)$$

ahol $s = \pm 1$ a *pseudospin*változó, azaz a hullámfüggvény egyes komponenseit jelöli. Legyen
 $L_B = \sqrt{\frac{\hbar}{|eB|}}$ a mágneses hossz, valamint

$$\xi^{III}(x) = -\sqrt{2} L_B \left(k - \frac{e}{\hbar} A_y(x) \right) = \sqrt{2} \frac{(x-w) - X}{L_B}, \quad \text{ahol:} \quad X = -\text{sgn}(eB) k L_B^2.$$

Az összefüggésben sgn az előjelfüggvényt jelöli. Klasszikus értelmezésben az X mennyiség a klasszikus ciklotronközpont x irányú koordinátáját adja meg a határfelülettől számítva. A szemiklasszikus értelmezést a következő fejezet tárgyalja részletesen. Áttérve az x változóról az új dimenziótlan ξ^{III} változóra, figyelembe kell venni a differenciáloperátorok változását is:

$$\partial_x^2 = \frac{d\xi}{dx} \partial_\xi \frac{d\xi}{dx} \partial_\xi = \frac{2}{L_B^2} \partial_\xi^2.$$

Tehát a differenciálgyenlet:

$$\left[\partial_\xi^2 - \left(\frac{(\xi^{III})^2}{4} + a_s \right) \right] \Phi_s = 0, \quad \text{ahol:} \quad a_s = -\frac{s}{2} - \frac{E^2}{2|eB|\hbar v_F^2}. \quad (2.15)$$

A (2.15) egyenletnek két független megoldása van. Ezek közül a végtelenben lecsengőt választjuk ki fizikailag értelmes megoldásnak:

$$\Phi_s(x) = A_s U(a_s, \xi^{III}(x)), \quad (2.16)$$

ahol $U(a, \xi)$ az ún. *Whittaker-függvény*:

$$U(a, \xi) = \cos\left(\pi\left(\frac{1}{4} + \frac{a}{2}\right)\right) Y_1(a, \xi) - \sin\left(\pi\left(\frac{1}{4} + \frac{a}{2}\right)\right) Y_2(a, \xi), \quad (2.17)$$

$$Y_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{a}{2}\right)}{2^{\frac{a}{2} + \frac{1}{4}}} e^{-\frac{\xi^2}{4}} {}_1F_1\left(\frac{a}{2} + \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{\xi^2}{2}\right); \quad (2.18)$$

$$Y_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{a}{2}\right)}{2^{\frac{a}{2} - \frac{1}{4}}} \xi e^{-\frac{\xi^2}{4}} {}_1F_1\left(\frac{a}{2} + \frac{3}{4}, \frac{3}{2}, \frac{\xi^2}{2}\right). \quad (2.19)$$

${}_1F_1(a, b, z)$ a konfluens hipergeometrikus függvényt jelöli [15]. Miután meghatároztuk a spinorkomponenseket leíró függvényeket, meg kell adnunk a komponensek egymáshoz való viszonyát is. Hattassuk a (2.12) Hamilton-operátort a $\Phi_1 = A_1 U(a_1, \xi)$ -t és $\Phi_{-1} = A_{-1} U(a_{-1}, \xi)$ komponenseket tartalmazó spinorra:

$$\hat{H}\Psi = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - i(\hbar k - eA_y) \\ p_x + i(\hbar k - eA_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_{-1} \end{pmatrix} e^{iky} = E \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_{-1} \end{pmatrix} e^{iky}. \quad (2.20)$$

Felhasználható az alábbi rekurziós összefüggés:

$$U'(a, x) + \frac{1}{2}x U(a, x) + \left(a + \frac{1}{2}\right) U(a + 1, x) = 0. \quad (2.21)$$

Vagy ami ezzel ekvivalens:

$$U'(a, x) - \frac{1}{2}x U(a, x) + U(a - 1, x) = 0. \quad (2.22)$$

Ekkor ugyanis a (2.20) felső egyenlete:

$$\frac{\hbar}{i} \partial_x \Phi_{-1} - i(\hbar k - eA_y) \Phi_{-1} = \frac{E}{v} \Phi_{-1}. \quad (2.23)$$

Használjuk ki az egyenletekben szereplő mennyiségek algebrai tulajdonságait: $A_y = -B(x - w)$, $a_{-1} - 1 = a_1$! Felhasználva a (2.22) egyenletet:

$$\left(\frac{\hbar \sqrt{2} \xi^{III}}{i L} + \frac{\hbar k}{i} + \frac{eB(x - w)}{i} \right) \Phi_{-1} - \frac{\hbar \sqrt{2} A_{-1}}{i L_B A_1} \Phi_{-1} = \frac{E}{v_F} \Phi_{-1}. \quad (2.24)$$

Ebben az egyenletben az első zárójel (a benne szereplő mennyiségek definíciójából adódóan) 0-nak adódik. Így a sajátérték-egyenlet az alábbi egyszerű alakra hozható:

$$\left(-\frac{\hbar \sqrt{2} A_{-1}}{i L_B A_1} - \frac{E}{v_F} \right) \Phi_{-1} = 0. \quad (2.25)$$

Hasonló gondolatmenettel és felhasználva a (2.21) egyenletet adódik:

$$\left(\frac{\hbar \sqrt{2} A_1}{i L_B A_{-1}} \frac{E^2}{2v_F^2 |eB| \hbar} - \frac{E}{v_F} \right) \Phi_{-1} = 0. \quad (2.26)$$

Ez a két egyenlet egymással kompatibilis, és megkötést jelentenek a spinorkomponensek amplitúdóinak arányára:

$$\boxed{\gamma^{III} = \frac{A_{-1}}{A_1} = -\frac{i L_B E}{\hbar \sqrt{2} v_F}}. \quad (2.27)$$

A *III* tartomány spinormegoldásai tehát az alábbi alakban írhatóak fel:

$$\boxed{\Psi^{III} = A \begin{pmatrix} U(a_1, \xi^{III}(x)) \\ \gamma^{III} U(a_{-1}, \xi^{III}(x)) \end{pmatrix} e^{iky}}. \quad (2.28)$$

2.1.2. A II. tartomány hullámfüggvényei

A II. térrészben a vektorpotenciál zérusnak vehető ((2.2) egyenlet). Ezért a hullámfüggvényekre vonatkozó differenciálegyenlet:

$$\left(-\hbar^2 \partial_x^2 + \hbar^2 k^2 - \frac{E^2}{v_F^2} \right) \Phi_s = 0, \quad (2.29)$$

azaz:

$$\boxed{(\partial_x^2 + K^2) \Phi_s = 0}, \quad \text{ahol:} \quad \boxed{K^2 = \frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} - k^2}. \quad (2.30)$$

A megoldásokat kétkomponensű síkhullámokként kapjuk:

$$\Psi^\pm = \begin{pmatrix} A_1^\pm \\ A_{-1}^\pm \end{pmatrix} e^{i(\pm Kx + ky)}, \quad (2.31)$$

ahol \pm a $\pm x$ irányban haladó hullámokat különbözteti meg egymástól. Most határozzuk meg az amplitúdók arányát! Hattatva az (1.9) Hamilton-operátort a hullámfüggvényre:

$$\begin{aligned} (\pm\hbar K - i\hbar k) A_{-1}^{\pm} &= \frac{E}{v_F} A_1^{\pm}, \\ (\pm\hbar K + i\hbar k) A_1^{\pm} &= \frac{E}{v_F} A_{-1}^{\pm}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Erre az egyenletrendszerre a triviálistól különböző megoldások létezésének feltétele kompatibilis a $K^2 = \frac{E^2}{v_F^2 \hbar^2} - k^2$ feltétellel, így nem ütközünk ellentmondásba. Az amplitúdók aránya könnyen adódik:

$$\boxed{\gamma_{\pm}^{II} = \frac{A_{-1}^{\pm}}{A_1^{\pm}} = \frac{E}{v_F (\pm\hbar K - i\hbar k)}}. \quad (2.33)$$

Így a megoldás:

$$\boxed{\Psi^{II} = B_+ \begin{pmatrix} 1 \\ \gamma_+^{II} \end{pmatrix} e^{i(Kx+ky)} + B_- \begin{pmatrix} 1 \\ \gamma_-^{II} \end{pmatrix} e^{i(-Kx+ky)}}. \quad (2.34)$$

2.1.3. Az I. tartomány hullámfüggvényei

Ebben a térrészben hasonlóan számolhatóak a hullámfüggvények, mint a *III.* térrészben. Az eredményeket, a *III.* térrészre vonatkozó számolásokban a $w \leftrightarrow -w$ és $\xi^I(x) = -\xi^{III}(x)$ cserével kapjuk meg. (Ez utóbbi csere azért szükséges, hogy a hullámfüggvény lecsengő legyen $x \rightarrow -\infty$ értékekre.) Az amplitúdók arányára az alábbi megkötés adódik: $\gamma^I = (\gamma^{III})^*$.

$$\boxed{\Psi^I = C \begin{pmatrix} U(a_1, \xi^I(x)) \\ \gamma^I U(a_{-1}, \xi^I(x)) \end{pmatrix} e^{iky}}, \quad (2.35)$$

ahol:

$$\xi^I(x) = -\sqrt{2} \frac{(x+w) - X}{L_B}.$$

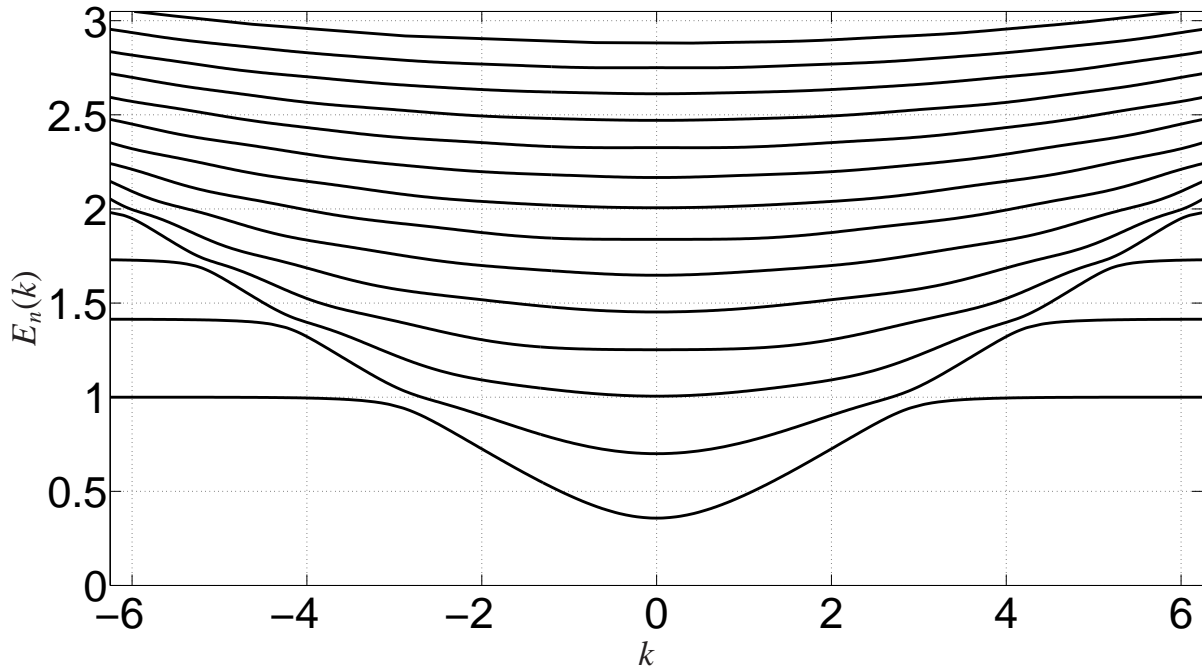
2.1.4. A hullámfüggvények illesztése a határfelületeken

A hullámfüggvényeket a határfelületeken a folytonosságuk megkövetelésével illesztjük. (A differenciálegyenletek elsőrendűek, ezért a megoldások deriváltjaira nem kell kirónunk feltételt.)

$$\begin{aligned} \Psi^{III}(x=w) &= \Psi^{II}(x=w), \\ \Psi^I(x=-w) &= \Psi^{II}(x=-w). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Ez az egyenletrendszer megszorítást jelent a (2.28), (2.34) és (2.35) összefüggésekben szereplő A , B_{\pm} , C együtthatókra. Az egyenletrendszernek akkor van triviálistól különböző megoldása, ha a belőle képzett determináns zérus. Így tehát az illeszkedő hullámfüggvények feltétele:

$$\left(\begin{pmatrix} U(a_1, \xi^{III}(w)) & -e^{iKw} & -e^{-iKw} & 0 \\ \gamma^{III} U(a_{-1}, \xi^{III}(w)) & -\gamma_+^{II} e^{iKw} & -\gamma_-^{II} e^{-iKw} & 0 \\ 0 & -e^{-iKw} & -e^{iKw} & U(a_1, \xi^I(-w)) \\ 0 & -\gamma_+^{II} e^{-iKw} & -\gamma_-^{II} e^{iKw} & \gamma^I U(a_{-1}, \xi^I(-w)) \end{pmatrix} \right) = 0. \quad (2.37)$$



2.2. ábra. A szimmetrikus rendszer spektruma a Brillouin-zóna K pontja környékén. A rendszert jellemző paraméter értéke $\eta = w/L_B = 2.2$. Az energiaértékek $\hbar\omega_c = \sqrt{2}\frac{\hbar v_F}{L_B}$ egységben vannak ábrázolva, a hullámszám pedig $1/w$ egységekben.

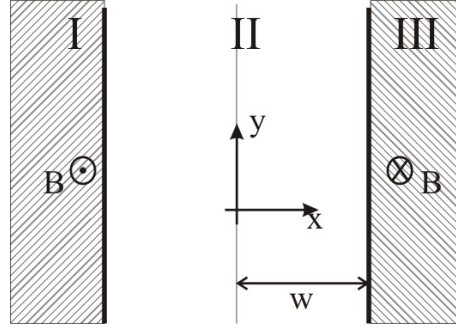
A rendszer spektrumát a Brillouin-zóna K pontja környékén ennek a determinánsnak a gyökei adják. A gyököket elegendő az $E > 0$ tartományban keresni, mert belátható hogy a spektrum szimmetrikus $E = 0$ -ra és $E = 0$ is nem triviális gyöke a fenti determinánsnak k minden értékére. Ezeket az állításokat az A.1 függelékben bizonyítjuk. A szimmetrikus rendszer spektrumát a 2.2. ábra szemlélteti. A spektrum értelmezését egyelőre a későbbiekre hagyjuk, előbb áttekintjük az antiszimmetrikus elrendezésre vonatkozó analóg számolásokkal nyerhető eredményeket.

2.2. Az antiszimmetrikus rendszer

Az antiszimmetrikus rendszer annyiban különbözik a szimmetrikus változattól, hogy a két szélső térrészben a mágneses mezők ellentétes irányúak. (2.3. ábra) Az elrendezésnek megfelelő vektorpotenciál az alábbi alakot ölti:

$$\mathbf{A}^I = \begin{pmatrix} 0 \\ -B(-x-w) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{II} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{A}^{III} = \begin{pmatrix} 0 \\ -B(x-w) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Ennek a rendszernek vannak rejtett szimmetriái, melyek segítségével könnyebben felírhatjuk a hullámfüggvényeket és az illesztési feltételt, mint ahogy azt a szimmetrikus rendszer esetén tettük. Legyen \hat{T}_x a tükrözőoperátor, melynek hatása egy tetszőleges $f(x)$ függvényen: $\hat{T}_x f(x) = f(-x)$.



2.3. ábra. Az antiszimmetrikus elrendezés geometriája. A középső (fehér) tartományban nincs mágneses mező, míg a két szélső végtelen tartományban (sátrózott) homogén mágneses mezőt létesítünk.

Könnyen ellenőrizhetőek ekkor az alábbi kommutátor-relációk:

$$[\hat{H}, \hat{p}_y] = 0, \quad [\hat{H}, \sigma_y \hat{T}_x] = 0, \quad [\sigma_y \hat{T}_x, \hat{p}_y] = 0. \quad (2.39)$$

Ennek megfelelően a hullámfüggvényeket kereshetjük $\Psi(x, y) = \Phi(x)e^{iky}$ alakban, ahol a $\Phi(x)$ spinorfüggvény páros/páratlan (ps/pt), ha a $\sigma_y \hat{T}_x$ operátor 1/-1 sajátértéket vesz fel rajta. A hullámfüggvények ezek után könnyen felírhatók az egyes tartományokban:

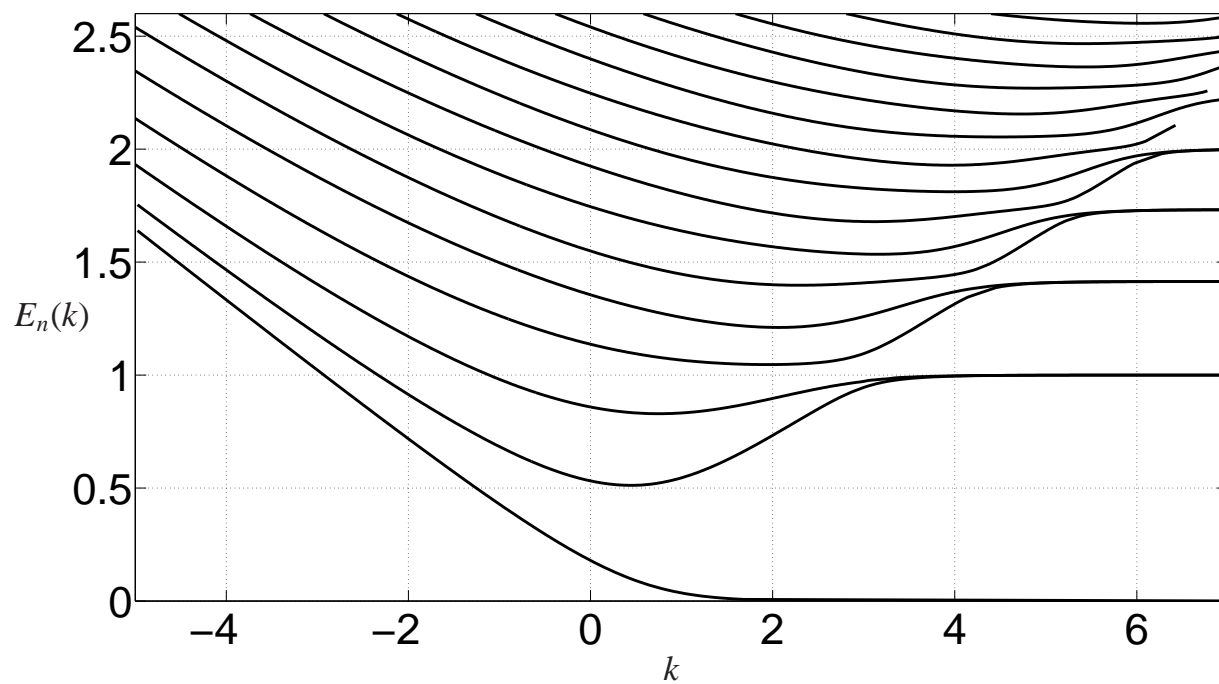
$$\Psi_{(ps)}^I(x) = A \begin{pmatrix} U(a_+, \xi) \\ \gamma^I U(a_-, \xi) \end{pmatrix} e^{iky}, \quad \Psi_{(pt)}^I = \Psi_{(ps)}^I, \quad (2.40)$$

$$\Psi_{(ps)}^{II}(x) = B \left[\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{iKx} - i \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ -1 \end{pmatrix} e^{-iKx} \right] e^{iky}, \quad (2.41)$$

$$\Psi_{(pt)}^{II}(x) = B \left[\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{iKx} + i \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ -1 \end{pmatrix} e^{-iKx} \right] e^{iky}, \quad (2.42)$$

$$\Psi_{(ps)}^{III}(x) = \sigma_y T_x \Psi_{(ps)}^I(x), \quad \Psi_{(pt)}^{III}(x) = -\sigma_y T_x \Psi_{(pt)}^I(x), \quad (2.43)$$

ahol $\xi(x) = -\sqrt{2}(x + w + kL_B^2)/L_B$, $\gamma^I = \frac{i}{\hbar} \frac{L_B}{\sqrt{2}} \frac{E}{v_F}$, $\tan \varphi = k/K$, $K = \sqrt{\varepsilon^2 - k^2}$, és $\varepsilon = E/(\hbar v_F)$. A szekuláris egyenletet jelentő 4×4 determináns így automatikusan felírható két 2×2 determináns szorzatára. A rendszer spektrumát ezeknek a redukált determinánsoknak a gyökei adják. Belátható, hogy elég vizsgálni az $E \geq 0$ gyököket, ugyanis a spektrum megint csak tükörszimmetrikus az $E = 0$ -ra. Ezt az állítást az A.2 függelékben bizonyítjuk. Az antiszimmetrikus rendszer spektrumát a 2.4. ábra szemlélteti. A spektrum értelmezését egyelőre a későbbiekre hagyjuk.



2.4. ábra. Az antiszimmetrikus rendszer spektruma a Brillouin-zóna K pontja környékén. A rendszert jellemző paraméter értéke $\eta = w/L_B = 2.2$. Az energiaértékek $\hbar\omega_c = \sqrt{2}\frac{\hbar v_F}{L_B}$ egységben vannak ábrázolva, a hullámszám pedig $1/w$ egységekben.

3. fejezet

A spektrumok szemiklasszikus közelítése

A szemiklasszikus közelítések lehetőséget nyújtanak arra, hogy mélyebb betekintést nyerjünk rendszereink kvantummechanikai leírásába. Ebben a fejezetben a grafén elektronjainak leírására alkalmas szemiklasszikus formalizmust mutatjuk be. Az ismertetett módszer az irodalomban újnak számít [17, 16]!

3.1. Kötött állapotok inhomogén mágneses mezőben szemiklasszikus megközelítésben

Általában a szemiklasszikus közelítéseket a Schrödinger-egyenlet közelítő megoldásai kapcsán vezethetjük be[18]. Az alábbi néhány oldalon hasonló gondolatmenetet alkalmazunk a Dirac-egyenlet közelítő megoldásaira: hagyományos megfogalmazásban a számolásaink \hbar^1 rendig terjednek ki. A számolások során feltesszük, hogy a grafén mintánk végtelen kiterjedésű. Ez a feltevés jelentősen egyszerűsíti a problémát, hiszen így nem kell foglalkoznunk a peremek okozta átszórásokkal a Dirac-kúpok között[10] és dolgozhatunk független Dirac-kúpok képben. Ekkor a (2.1) egyenlettel adott Hamilton-operátort használhatjuk az állapotok leírására:

$$\hat{H} = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

ahol $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}$ és \mathbf{A} a vektorpotenciál. A $\hat{H}\Psi = E\Psi$ Schrödinger-egyenlet megoldását az alábbi alakban keressük:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{k \geq 0} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k \mathbf{a}_k(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r})}, \quad (3.2)$$

ahol $\mathbf{a}_k(\mathbf{r})$ kétkomponensű vektorok (spinorok) és $S(\mathbf{r})$ pedig a klasszikus hatás. A Schrödinger-egyenletet kicsit átrendezve az:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r})} (\hat{H} - E) e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r})} e^{-\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r})} \Psi = 0 \quad (3.3)$$

alakra hozható. Behelyettesítve a hullámfüggvény (3.2) alakját a Schrödinger-egyenletbe az alábbi összefüggést kapjuk:

$$\begin{pmatrix} -E & v_F(\hat{\Pi}_x - i\hat{\Pi}_y) \\ v_F(\hat{\Pi}_x + i\hat{\Pi}_y) & -E \end{pmatrix} \left(\mathbf{a}_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{i} \mathbf{a}_1(\mathbf{r}) + \dots \right) = 0. \quad (3.4)$$

Az egyenletben:

$$\hat{\Pi}_i = \hat{p}_i + \Pi_i^0, \quad \text{ahol: } \Pi_i^0 = p_i - eA_i(\mathbf{r}), \quad p_i = \frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial i} \quad i = x, y. \quad (3.5)$$

A szemiklasszikus közelítések alapelvét tekintve megköveteljük hogy a fenti egyenlet \hbar minden rendjében teljessüljön[18]. Leválasztva a \hbar^0 rendű tagokat:

$$\begin{pmatrix} -E & v_F(\Pi_x^0 - i\Pi_y^0) \\ v_F(\Pi_x^0 + i\Pi_y^0) & -E \end{pmatrix} \mathbf{a}_0(\mathbf{r}) = 0. \quad (3.6)$$

A (3.6) egyenletben szereplő klasszikus Hamilton-operátor diagonalizálható az alábbi $\mathcal{H}^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ sajátértékekkel és $V^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ sajátvektorokkal:

$$\mathcal{H}^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \pm v_F \sqrt{(\Pi_x^0(\mathbf{r}))^2 + (\Pi_y^0(\mathbf{r}))^2}, \quad (3.7)$$

$$V^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm \tau_1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{ha } E \neq 0, \quad \tau_1 = \frac{v(\Pi_x^0 - i\Pi_y^0)}{E} = \frac{1}{v} \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_x} - i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_y} \right). \quad (3.8)$$

A (3.6) egyenlet diagonalizált alakja voltaképpen nem más mint két Hamilton-Jacobi egyenlet:

$$E - \mathcal{H}^\pm \left(\frac{\partial S^\pm(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \mathbf{r} \right) = 0. \quad (3.9)$$

Az összefüggésekben szereplő $+$ ($-$) előjel az elektronszerű (lyukszerű) állapotokhoz tartozik. Az \mathbf{a}_0^\pm spinor a V^\pm sajátvektorhoz képest egy skalár szorzótényezőben térhet el:

$$\mathbf{a}_0^\pm = \mathcal{A}^\pm(\mathbf{r}) e^{i\gamma^\pm(\mathbf{r})} V^\pm, \quad (3.10)$$

ahol $\mathcal{A}^\pm(\mathbf{r})$ egy valós amplitúdó, $\gamma^\pm(\mathbf{r})$ pedig egy fázis. Ezeket a paramétereket a (3.4) egyenlet \hbar^1 rendű tagja határozza meg. A továbbiakban az egyszerűség kedvéért eltekintünk a \pm indexek használatától.

$$\left(\frac{\hbar}{i} \right) \left[\begin{pmatrix} -E & v(\Pi_x^0 - i\Pi_y^0) \\ v(\Pi_x^0 + i\Pi_y^0) & -E \end{pmatrix} \mathbf{a}_1(\mathbf{r}) + \begin{pmatrix} 0 & v(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}) \\ v(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}) & 0 \end{pmatrix} \mathbf{a}_0(\mathbf{r}) \right] = 0. \quad (3.11)$$

Ezt az egyenletet beszorozva balról \mathbf{a}_0^+ -tal és felhasználva a (3.6) egyenletet:

$$\mathbf{a}_0^+ \begin{pmatrix} 0 & v(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}) \\ v(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}) & 0 \end{pmatrix} \mathbf{a}_0(\mathbf{r}) = 0. \quad (3.12)$$

Ebbe az egyenletbe behelyettesítve a (3.10) összefüggéssel adott spinoralakot, és megkövetelve az egyenlet valós és imaginárius részének egyidejű eltűnését, az alábbi összefüggésekre jutunk:

$$\frac{d}{dt} \gamma(\mathbf{r}(t)) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial x \partial p_y} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial y \partial p_x} \right), \quad \partial_i \left(\mathcal{A}^2(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) = 0. \quad (3.13)$$

A számolások során felhasználtuk, hogy

$$\frac{d}{dt} \gamma(\mathbf{r}(t)) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_x} \partial_x \gamma(\mathbf{r}) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_y} \partial_y \gamma(\mathbf{r}), \quad (3.14)$$

valamint a Hamilton-egyenleteket:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{d}{dt} \mathbf{r}, \quad -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}} = \frac{d}{dt} \mathbf{p}. \quad (3.15)$$

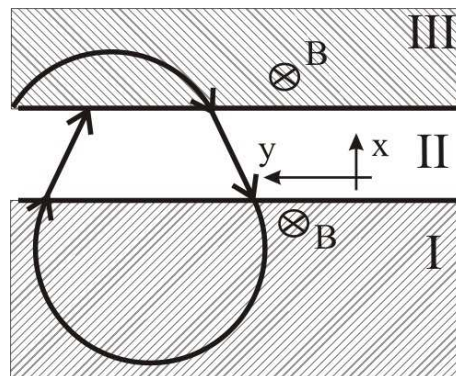
A (3.13) egyenlettel tehát adottak az amplitúdó- és fázisfaktorok. A klasszikus Hamilton-függvényt, mely meghatározza a klasszikus pályát, a (3.7) egyenlettel adtuk meg. Ez már elegendő a szemiklasszikus hullámfüggvény felírására, hiszen a hatást a kanonikus impulzus integrálásával számolhatjuk ki a klasszikus pálya mentén. A kötött állapotok kvantálási feltételét a hullámfüggvény egyértékűségének előírásával kapjuk meg. Egy N dimenziós integrálható rendszer esetében a kvantálási feltétel az alábbi alakban írható:

$$\frac{1}{\hbar} \oint_{\Gamma_j} \mathbf{p} d\mathbf{r} + \gamma_j = 2\pi \left(n_j + \frac{\mu_j}{4} \right). \quad (3.16)$$

Az egyenletben Γ_j , $j = 1 \dots N$ az irreducibilis zárt ciklusokat jelöli az N dimenziós tórusz felületén, azaz minden ciklikus szabadsági fokra egy kvantálási feltételt kapunk. Továbbá n_j pozitív egészek, és μ_j -k a Maslov-indexek, melyek azon kausztikák számát jelölik, melyeket érintett a klasszikus trajektória Γ_j mentén. A kausztika a klasszikus pályák burkológörbéiként definiálható, vagyis minden alkalommal, amikor a klasszikus pálya egy fordulópontra érint, egyben egy kausztikát is érint. (A klasszikus fordulópontokban a (3.13) egyenlettel adott amplitúdófaktor divergál. Ez a divergencia okozza a $\pi/2$ -es fázisugrást.) Végül γ_j jelöli a hullámfüggvény spinor részének a fáziskülönbségét miközben a trajektória végigfut a Γ_j cikluson. A soron következő két alfejezetben levezetjük az előző fejezetben bemutatott két rendszer szemiklasszikus kvantálási feltételét.

3.2. A szimmetrikus elrendezés szemiklasszikus kvantálási feltétele

A szimmetrikus elrendezés geometriáját a 3.1. ábra mutatja be. Az ábra 90° -kal el van forgatva a 2.1. ábrához képest. A kvantálási feltételt a (3.16) egyenletben szereplő tagok



3.1. ábra. Egy klasszikus pálya a szimmetrikus elrendezés esetében.

meghatározásával kaphatjuk meg. Az előző fejezetben felírt (2.2) vektorpotenciált használva felírhatjuk a Hamilton-függvényt az egyes térrészekben:

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \begin{cases} v_F \sqrt{(p_x)^2 + (p_y + eB(x-w))^2} & \text{ha } x > w, \\ v_F \sqrt{(p_x)^2 + (p_y)^2} & \text{ha } -w \geq x \geq w, \\ v_F \sqrt{(p_x)^2 + (p_y + eB(x+w))^2} & \text{ha } x < -w. \end{cases} \quad (3.17)$$

Látható, hogy a Hamilton-függvény y irányú eltolásinvarianciát mutat. Belátható, hogy ebben az esetben a (3.10) egyenletben szereplő γ fázis- és amplitúdó faktor csupán x függvénye lesz, valamint a hatás $S = \int p_x dx + ky$ alakban írható fel. Kvantálási feltételt csupán az x irányú lokalizált mozgásvetületre kapunk, mivel a hullámfüggvény egyértékűsége y irányban nem ró ki semmilyen feltételt. Csoportelméleti megfontolásokkal belátható, hogy ez az állítás általában is igaz: ha egy rendszer folytonos térszimmetriát mutat valamilyen általános koordinátában, akkor erre a koordinátára nézve vagy nem írható fel kvantálási feltétel, vagy felírható, de triviális alakot ölt. A triviális alak azt jelenti, hogy a kvantálási feltételben nem szerepel a γ fázisjárulék, és a hatásnak a szimmetriát mutató koordinátára eső vetülete egyszerű szorzat alakjában írható fel, hiszen a szimmetriát mutató koordinátához tartozó kanonikus impulzus mozgásállandó lesz. Az állítást a függelék A.4 szakaszában bizonyítjuk.

A hatás és a γ fázisfaktor számolásához először a klasszikus pályát kell meghatározni. A középső tartományban ($-w \geq x \geq w$) egyenletes egyenesvonalú mozgást kapunk, ahogy azt várjuk. A két szélső tartományban görbült pályákon valósul meg a mozgás. A Hamilton egyenletek a III-as tartományban (3.1. ábra) egy E energiájú trajektóriára:

$$\frac{d}{dt}p_x = -\hbar\omega \frac{(x-w) - X}{L_B^2}, \quad \frac{d}{dt}p_y = 0, \quad (3.18)$$

$$\frac{d}{dt}x = \frac{(R_c\omega)^2}{E}p_x, \quad \frac{d}{dt}y = \frac{(R_c\omega)^2}{E} \left(p_y + \text{sgn}(eB)\hbar \frac{x-w}{L_B^2} \right), \quad (3.19)$$

ahol:

$$R_c = \frac{EL_B^2}{\hbar v_F}, \quad \omega = \frac{v_F}{R_c}, \quad X = -\text{sgn}(eB)kL_B^2, \quad L_B = \sqrt{\frac{\hbar}{|eB|}}, \quad k = \frac{p_y}{\hbar}. \quad (3.20)$$

A fenti Hamilton-egyenletek egy körpálya sereget írnak le. A körpályák középpontjának x koordinátája ($X + w$), y koordinátája pedig tetszőleges. A körpályák sugara R_c , a mozgás körfrekvenciája pedig ω . Az I -es tartományban a megoldások $w \rightarrow -w$ cserével adódnak. Az x tengelyre vetített periodikus mozgás hatásintegrálja az egyes tartományokra bontva:

$$S^I = 2 \int_{-w+X-R_c}^{-w} p_x dx, \quad S^{II} = 4\hbar K w, \quad S^{III} = 2 \int_w^{w+X+R_c} p_x dx. \quad (3.21)$$

Az egyenletekben:

$$K = \sqrt{\frac{E^2}{(v_F\hbar)^2} - k^2}, \quad \frac{p_x}{\hbar} = \frac{|eB|}{\hbar} \sqrt{R_c^2 - (x \pm w - X)^2}, \quad (3.22)$$

ahol a + (-) előjel az I-es (III-as) tartományra vonatkozik. A kör egyenletének definíciójából adódik, hogy a felírt hatásintegrálok az I-es és III-as tartományban a 3.1. ábrán bejelölt pályák által határolt területek fluxusával egyenlő természetes $\hbar/|e|$ egységekben. Elvégezve az integrálokat a (3.21) egyenletben:

$$\int_{\tau} \sqrt{R_c^2 - ((x \pm w) - X)^2} dx = \frac{R_c^2}{2} \left[\operatorname{asin} \left(\frac{(\tau \pm w) - X}{R_c} \right) + \frac{\sin \left(2 \operatorname{asin} \left(\frac{(\tau \pm w) - X}{R_c} \right) \right)}{2} \right]. \quad (3.23)$$

Behelyettesítve ebbe a primitív függvénybe a hatásintegrálokban definilált határokat, az alábbi fluxusokat kapjuk:

$$\Phi^{\pm} = 2 \frac{|eB|}{\hbar} \int_0^{R_c \pm X} \sqrt{R_c^2 - (x' \mp X)^2} dx' = \frac{|eB|}{\hbar} R_c^2 \left[\frac{\pi}{2} + \operatorname{asin} \left(\frac{\pm X}{R_s} \right) + \frac{\sin \left(2 \operatorname{asin} \left(\frac{\pm X}{R_s} \right) \right)}{2} \right], \quad (3.24)$$

ahol $\hbar\Phi^- = S^I$ és $\hbar\Phi^+ = S^{III}$. Egy periódus összhatásintegrálja az x tengelyre vetítve:

$$\boxed{\frac{S}{\hbar} = \frac{S^I + S^{II} + S^{III}}{\hbar} = \frac{|eB|}{\hbar} \pi R_c^2 + 4Kw}. \quad (3.25)$$

A γ fázisfaktor számolásához alakítsuk át a (3.14) egyenletet felhasználva a vektorpotenciál (2.2) alakját:

$$\frac{d}{dt} \gamma(\mathbf{r}(t)) = \frac{\partial \gamma}{\partial x} \dot{x} = \frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_x} = \frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{v^2 p_x}{E} = \frac{1}{2} \left(-\frac{v^2 e \partial_x A_y}{E} \right) = \frac{v_F^2 e B(x)}{2E}. \quad (3.26)$$

Vagyis a γ fázisfaktor nem fejlődik abban a térrészben, ahol a mágneses tér zérus. A mi esetünkben a két szélső tartományban (I és III) homogén a mágneses tér, így ezekben a térrészekben egyenletesen fejlődik a γ fázisfaktor:

$$\gamma = \frac{v_F^2 e B(x)}{2E} (T^I + T^{III}), \quad (3.27)$$

ahol T^I és T^{III} rendre az I-es és III-as tartományban eltöltött időt jelölik. Egyszerű geometriából adódik, hogy:

$$T^I + T^{III} = \frac{2\pi R_c}{v_F}. \quad (3.28)$$

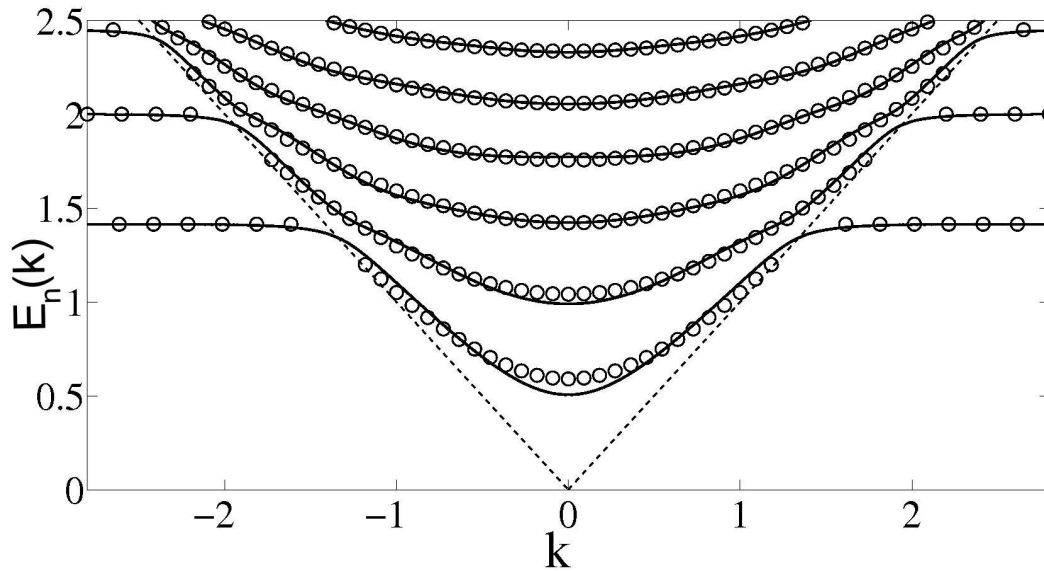
Ebből adódóan:

$$\boxed{\gamma = \operatorname{sgn}(eB)\pi}. \quad (3.29)$$

A kvantálási feltétel felírásához hátra van még a (3.16) egyenletben szereplő μ Moslov-index meghatározása. A pályáknak egy periódus alatt két fordulópontjuk van: egy az I-es és egy a III-as tartományban. Ebből adódóan $\mu = 2$. Így a kvantálási feltétel:

$$\boxed{\frac{|eB|}{\hbar} \pi R_c^2 (E_n) + 4Kw + (\operatorname{sgn}(eB) - 1)\pi = 2n\pi}. \quad (3.30)$$

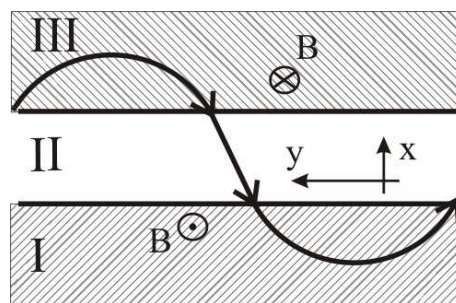
Geometriai jelentését tekintve a pályák által határolt fluxust kvantáljuk meg ezzel a feltétellel. Az összegben ugyanis az első tag jelentése a fluxus, a második tag a középső tartományban a síkhullámszerű propagálás fáziskülönbségét adja meg, az utolsó tag pedig a kausztikák és a hullámfüggvény spinor jellegéből adódó fázis járulékaként értelmezhető. A szemiklasszikus spektrum összevetését az egzakt eredményekkel a 3.2. ábra szemlélteti. A kvantumos és szemiklasszikus eredmények nagyon jó egyezést mutatnak.



3.2. ábra. A szimmetrikus rendszer spektruma a rendszert jellemző paraméter $\eta = w/L_B = 2.2$ értéke mellett. A folytonos vonal az egzakt spektrumot jelöli, az üres karikák pedig a szemiklasszikus eredményeket. A szaggatott vonal ($|X| = R_c$) az áramszállító állapotokat választja el a diszperzió mentes Landau-nívóktól. Az energiaértékek $E_0 = \frac{\hbar\nu_F}{L}$ egységben vannak ábrázolva, a hullámszám pedig $1/w$ egységekben.

3.3. Az antiszimmetrikus elrendezés szemiklasszikus kvantálási feltétele

A 3.3. ábra egy klasszikus pályát mutat az antiszimmetrikus elrendezésben. Az ábra 90° -kal el van forgatva a 2.1. ábrához képest. Erre az elrendezésre teljesen analóg módon elvégezhetőek



3.3. ábra. Egy klasszikus pályát az antiszimmetrikus elrendezés esetében.

azok a számolások, melyek a Bohr-Sommerfeld alakú kvantálási feltételhez vezettek az előző szakaszban. Belátható hogy az antiszimmetrikus esetben a hatás:

$$S = 2\hbar\Phi^+ . \quad (3.31)$$

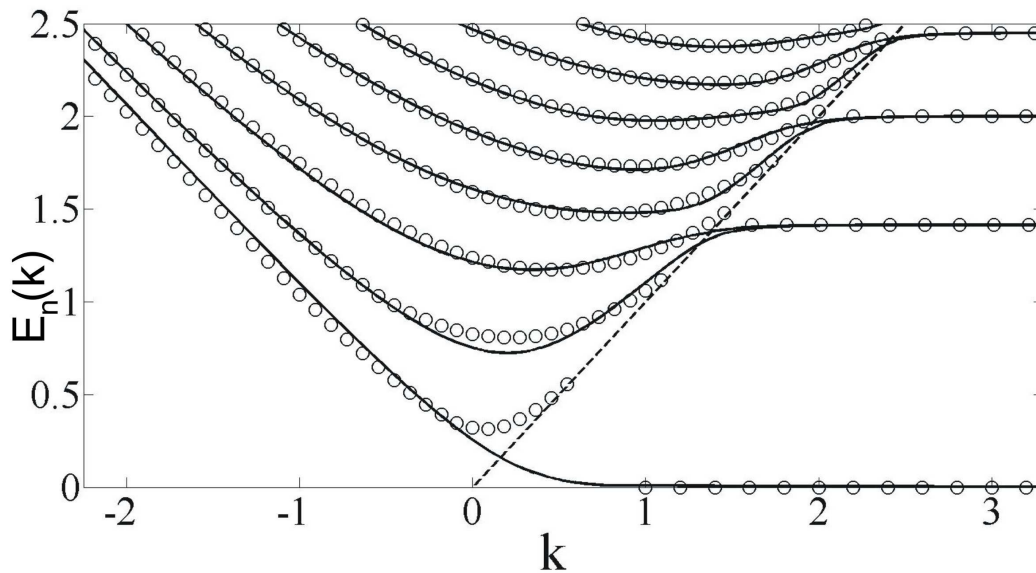
A γ fázisfaktor pedig:

$$\gamma = \frac{v_F^2 e B(x)}{2E} (-T^I + T^{III}) . \quad (3.32)$$

A képletben a negatív előjel abból ered, hogy a két szélső térrészben ellentétes előjelű a mágneses tér. Mivel szimmetria okok miatt mindkét térfélben ugyanannyi időt töltenek el a részecskék, a két térrészben a γ fázisfaktor fejlődései kioltják egymást: $\gamma = 0$. A pályák ebben az esetben is két fordulóponttal rendelkeznek, így a Moslov-index: $\mu = 2$. Ebből adódóan a kvantálási feltétel az alábbi alakot ölti:

$$\boxed{2\Phi^+(E_n) + 4Kw - \pi = 2n\pi} . \quad (3.33)$$

A szemiklasszikus spektrum összevetését az egzakt eredményekkel a 3.4. ábra szemlélteti. A kvantumos és szemiklasszikus eredmények ismét nagyon jó egyezést mutatnak.



3.4. ábra. Az antiszimmetrikus rendszer spektruma a rendszert jellemző paraméter $\eta = w/L_B = 2.2$ értéke mellett. A folytonos vonal az egzakt spektrumot jelöli, az üres karikák pedig a szemiklasszikus eredményeket. A szaggatott vonal ($X = R_c$) az áramszállító állapotokat választja el a diszperzió mentes Landau-nívóktól. Az energiaértékek $\frac{\hbar v_F}{L}$ egységben vannak ábrázolva, a hullámszám pedig $1/w$ egységekben.

3.4. A Landau-nívók

Az előzőek szerint tehát a klasszikus pályák által határolt fluxust kell kvantálni. A bemutatott két elrendezésben könnyen megvalósulhatnak tiszta ciklotron körmozgások is. Ezek a spektrumokban a diszperzió nélküli, ún. *Landau-nívókban* jelennek meg. Az irodalom [19] szerint a Landau-nívók energiaszintjei:

$$E_n^L = \sqrt{2n|eB|\hbar v^2} .$$

Ez a képlet könnyen megkapható szemiklasszikus közelítéssel is. Egy körpálya által határolt fluxus ugyanis:

$$\varphi = \frac{|eB|}{\hbar} \pi R_c^2 = \pi \frac{E^2 L_B^2}{\hbar^2 v^2} . \quad (3.34)$$

A *Berry-fázisból* [1] adódik még egy extra π tag is a fluxushoz. (A γ fázisfaktor lényegében nem más mint a Berry-fázis közelítése.) A Berry-fázis járulékat viszont kioltja a két fordulópontból adódó fázisugrás, így az energiaértékek a szemiklasszikus közelítésből:

$$E_n^L = \sqrt{2n|eB|\hbar v^2} = \sqrt{n}\hbar\omega_c ,$$

ami pont megegyezik az egzakt eredményekkel. A 3.2. és 3.4. ábrákon ellenőrizhetjük, hogy a spektrumok diszperzió nélküli részei nagyon jó összhangban vannak a Landau-nívók energiaértékeivel.

3.5. A hullámfüggvény szemiklasszikus közelítése

Ebben a szakaszban megkonstruáljuk a szemiklasszikus hullámfüggvényt a felírt (3.2) hullámfüggvény sorának \hbar^0 rendű tagjából, majd a következő szakaszban összehasonlítjuk az eredményt az egzakt hullámfüggvény hosszú hullámú közelítésével. Elegendő csupán a *III*-as tartományban dolgoznunk, hiszen az *I*-es tartományban a hullámfüggvényt szimmetriamegfontolásokkal megkaphatjuk, a *II*-es tartományban pedig a síkhullámok egzakt megoldást adnak. Az x tengely kezdőpontját ezért az alábbi számolásokhoz a *III*. tartomány peremére választjuk. A szemiklasszikus hullámfüggvény alakja:

$$\Psi = \mathcal{A}(\mathbf{r})e^{i\gamma(\mathbf{r})} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tau_1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r})} . \quad (3.35)$$

Az ebben szereplő mennyiségekre:

$$\tau_1 = \frac{1}{v} \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_x} - i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_y} \right) , \quad \mathcal{H} = v_F \sqrt{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2} , \quad (3.36)$$

$$\frac{d}{dt} \gamma(\mathbf{r}(t)) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial x \partial p_y} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial y \partial p_x} \right) , \quad \partial_i \left(\mathcal{A}^2(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) = 0 . \quad (3.37)$$

A vektorpotenciált Landau-mértékben ($A_x = 0$, $A_y(x) = -Bx$) választva:

$$\mathcal{H} = v_F \sqrt{p_x^2 + \Pi_y^2} \equiv E , \quad \Pi_y = p_y - eA_y(x) = \hbar k + eBx = eB(x - X) . \quad (3.38)$$

A 3.2 szakaszban megmutattuk, hogy ilyen feltételek mellett a klasszikus pályák körívek lesznek. Ezt felhasználva egyszerű számolással adódik:

$$p_x = \pm |eB| \sqrt{R_c^2 - (x - X)^2} , \quad R_c = \frac{EL_B^2}{\hbar v_F} \quad (3.39)$$

a klasszikusan elérhető tartományban. A \pm előjel azon múlik, hogy milyen irányú a mozgás ($\pm x$ irányok). A klasszikusan elérhetetlen tartományban:

$$p_x = i |eB| \sqrt{(x - X)^2 - R_c^2} . \quad (3.40)$$

Itt csak az egyik előjelet tartottuk meg, hogy a végtelenben lecsengő maradjon a hullámfüggvény. A (3.36) egyenletből adódik:

$$\tau_1 = v_F \frac{p_x - i\Pi_y}{E}. \quad (3.41)$$

Ez a kifejezés az alábbi alakra hozható:

$$\tau_1 = \begin{cases} \exp\left(+i \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right)\right) & \text{ha } +x \text{ irányú a mozgás a klasszikusan elérhető tartományban,} \\ \exp\left(i\pi - i \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right)\right) & \text{ha } -x \text{ irányú a mozgás a klasszikusan elérhető tartományban,} \\ -i \exp\left(\operatorname{acosh}\left(\frac{x-X}{R_c}\right)\right) & \text{a klasszikusan elérhetetlen tartományban.} \end{cases} \quad (3.42)$$

Feltűnhet, hogy a klasszikusan elérhetetlen tartományban a τ_1 függvény nem lecsengő. A hullámfüggvény lecsengését az imaginárius hatás fogja biztosítani ebben a térrészben, ugyanis:

$$S_x(x-X > R_c) = i|eB| \int_{X+R_c}^x \sqrt{(x-X)^2 - R_c^2} dx = \frac{i|eB|R_c^2}{2} \left(\frac{x-X}{R_c} \sqrt{\left(\frac{x-X}{R_c}\right)^2 - 1} + \operatorname{acosh}\left(\frac{x-X}{R_c}\right) \right). \quad (3.43)$$

Mivel az $\operatorname{acosh}(x)$ egy logaritmusfüggvény, a hatásban szereplő lineáris tag (mely exponenciálizálva lecsengő függést ad) ellensúlyozni tudja a τ_1 -ben fellépő exponenciális növekedést. Összeségében mindkét spinorkomponens lecsengő lesz, de az egyik kisebb karakterisztikus távolságon tűnik el mint a másik.

A rendszer y irányú eltolásinvarianciájából következik, hogy a hatás $S = \int p_x dx + \hbar ky$ alakban írható fel, és a hullámfüggvényben más y függés nem jelenik meg: $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x)$, $\gamma = \gamma(x)$. A (3.26) differenciálegyenlet megoldásával megkapjuk a γ fázisfaktort:

$$\gamma(x) = -\frac{1}{2} \begin{cases} \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right) & \text{ha } +x \text{ irányú a mozgás a klasszikusan elérhető tartományban,} \\ \pi - \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right) & \text{ha } -x \text{ irányú a mozgás a klasszikusan elérhető tartományban,} \\ \frac{\pi}{2} - i \operatorname{acosh}\left(\frac{x-X}{R_c}\right) & \text{a klasszikusan elérhetetlen tartományban.} \end{cases} \quad (3.44)$$

Az integrálási konstansokat úgy választjuk meg, hogy az egyes tartományok folytonosan illeszkedjenek egymáshoz. Végül az amplitúdófaktor differenciálegyenlete:

$$\partial_i \left(\mathcal{A}^2(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) = \partial_x \left(\mathcal{A}^2(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_x} \right) = 0, \quad (3.45)$$

$$2(\partial_x \mathcal{A}) p_x = -\mathcal{A} \partial_x p_x. \quad (3.46)$$

Ezt a differenciálegyenletet megoldva:

$$\mathcal{A}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|p_x|}} & \text{ha } +x \text{ irányú a mozgás a klasszikusan elérhető tartományban,} \\ \frac{1}{\sqrt{|p_x|}} (-i) & \text{ha } -x \text{ irányú a mozgás a klasszikusan elérhető tartományban,} \\ \frac{1}{\sqrt{|p_x|}} (e^{-i\frac{\pi}{4}}) & \text{a klasszikusan elérhetetlen tartományban.} \end{cases} \quad (3.47)$$

Az integrálási konstansokat megintcsak úgy választjuk meg, hogy a komplex számsíkra kiterjesztve a függvényeket az egyes tartományok folytonosan illeszkedjenek egymáshoz. (A valós

tengelyen ugyanis pont az illesztési pontban divergál az amplitúdófaktor, így megköveteljük, hogy a szingularitást bármilyen úton megkerülve folytonos legyen az átmenet a tartományok között.) A kiszámolt mennyiségekkel felírhatunk egy $+x$ irányba (\rightarrow) és $-x$ irányba (\leftarrow) haladó hullámfüggvényt:

$$\Psi_{\rightarrow} \sim \frac{1}{\sqrt{2|p_x|}} \left(\exp \left[i \left(\frac{S_x(x)}{\hbar} + \frac{1}{2} \operatorname{asin} \left(\frac{x-X}{R_c} \right) \right) \right] \right) e^{iky}, \quad (3.48)$$

$$\Psi_{\leftarrow} \sim \frac{-i}{\sqrt{2|p_x|}} \left(\exp \left[i \left(\frac{-S_x(x)}{\hbar} + \frac{\pi}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{asin} \left(\frac{x-X}{R_c} \right) \right) \right] \right) e^{iky}, \quad (3.49)$$

ahol:

$$\frac{S_x(x)}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_{X+R_c}^x p_x dx. \quad (3.50)$$

A hullámfüggvényt ezek lineárkombinációjával kapjuk meg:

$$\Psi = A\Psi_{\rightarrow} + B\Psi_{\leftarrow}. \quad (3.51)$$

Behelyettesítve a kifejezéseket a fenti lineárkombinációba és az amplitúdófaktorban szereplő $-i$ -t beolvasztva az exponensbe:

$$\Psi \sim \frac{1}{\sqrt{2|p_x|}} \left(A \exp \left(i \frac{S_x(x)}{\hbar} + \frac{1}{2} \operatorname{asin} \left(\frac{x-X}{R_c} \right) \right) + B \exp \left[i \left(\frac{-S_x(x)}{\hbar} - \frac{1}{2} \operatorname{asin} \left(\frac{x-X}{R_c} \right) \right) \right] \right) e^{iky}. \quad (3.52)$$

Hogy folytonosan lehessen átmenni a komplex számsíkon a klasszikus fordulópontot megkerülő tetszőleges útvonalon a klasszikusan elérhető és klasszikusan elérhetetlen tartományok között, a lineáris együttthatókra az alábbi feltételt kapjuk:

$$A = B = \frac{Ci}{2}. \quad (3.53)$$

Ezzel a feltétellel a hullámfüggvény alakja az alábbi egyszerűbb alakra hozható:

$$\Psi \sim \frac{C}{\sqrt{2|p_x|}} \left(\begin{array}{l} i \cos \left(\frac{S_x(x)}{\hbar} + \frac{1}{2} \operatorname{asin} \left(\frac{x-X}{R_c} \right) \right) \\ - \sin \left(\frac{S_x(x)}{\hbar} - \frac{1}{2} \operatorname{asin} \left(\frac{x-X}{R_c} \right) \right) \end{array} \right) e^{iky}. \quad (3.54)$$

3.6. Az egzakt hullámfüggvény hosszú hullámú közelítése

Ebben a szakaszban megvizsgáljuk hogyan viszonyul a (2.28) egzakt hullámfüggvény hosszúhullámú közelítése a (3.54) egyenlettel adott szemiklasszikus hullámfüggvényhez. Ehhez először számoljuk ki az egzakt hullámfüggvény hosszúhullámú közelítését. Elevenítsük fel az egzakt hullámfüggvény (2.28) alakját:

$$\Psi^{III} = A \left(\begin{array}{l} U(a_1, \xi^{III}(x)) \\ \gamma^{III} U(a_{-1}, \xi^{III}(x)) \end{array} \right) e^{iky}, \quad (3.55)$$

ahol:

$$a_{\pm 1} = \mp \frac{1}{2} - \frac{E^2}{2|eB|\hbar v^2}, \quad \xi^{III} = \sqrt{2} \frac{(x-w) - X}{L_B}, \quad X = -\operatorname{sgn}(eB)kL_B^2, \quad \gamma^{III} = \frac{i}{\hbar} \frac{L_B E}{\sqrt{2} v}. \quad (3.56)$$

A hosszú hullámú közelítés azt jelenti, hogy a hullámfüggvény oszcillációs hullámhossza sokkal kisebb mint a rendszer minden más karakterisztikus hossza. Ilyen karakterisztikus hosszak lehetnek például a potenciál változásokhoz rendelt skálák. A hosszú hullámú közelítés ekkor azt jelenti, hogy a potenciál sokkal nagyobb skálákon változik, mint amilyen skálán oszcillál a hullámfüggvény, vagyis a potenciál Fourier-spektrumának csupán a hosszú hullámú komponensei adnak járulékot. Az előírt feltétel tipikusan nagy energiákon lesz érvényes. A fenti kifejezésekből látszik, hogy nagy energiákon $1 \ll -a$. Felhasználva [15]-ben közölt közelítő formulákat $-a$ nagy értékei mellett:

$$U(a, \xi) \approx \frac{2\sqrt{\Gamma\left(\frac{1}{2} - a\right)}}{(2\pi)^{1/4}} e^{\nu} \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi a}{2} + \theta\right), \quad (3.57)$$

$$\nu = -\frac{1}{2} \ln Y, \quad \theta = \frac{1}{2} \int_0^{\xi} Y d\xi = \frac{1}{4} \xi Y + |a| \operatorname{asin} \frac{\xi}{2\sqrt{|a|}}, \quad Y = \sqrt{4|a| - \xi^2}. \quad (3.58)$$

Könnyen ellenőrizhető hogy: $a_1 = a_{-1} - 1$. Felhasználva továbbá hogy $\Gamma(1+x) = x\Gamma(x)$, adódik az alábbi összefüggés:

$$\sqrt{\Gamma\left(\frac{1}{2} - a_1\right)} = \sqrt{\Gamma\left(\frac{1}{2} - a_{-1} + 1\right)} = \sqrt{\Gamma\left(\frac{1}{2} - a_{-1}\right)} \sqrt{\frac{1}{2} - a_{-1}} = \sqrt{\Gamma\left(\frac{1}{2} - a_{-1}\right)} i\gamma^{III}. \quad (3.59)$$

Beírva ezeket az eredményeket a (3.55) egyenletbe:

$$\Psi^{III} = A \begin{pmatrix} i \sqrt{\frac{1}{Y_1}} \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi a_1}{2} + \theta_1\right) \\ \sqrt{\frac{1}{Y_{-1}}} \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi a_{-1}}{2} + \theta_{-1}\right) \end{pmatrix} e^{iky}, \quad (3.60)$$

ahol

$$Y_{\pm} = Y(a_{\pm}, \xi), \quad \theta_{\pm} = \theta(a_{\pm}, \xi).$$

Az amplitúdókban a használt közelítés mellett vehető az alábbi egyszerűsítés:

$$Y_1 \approx Y_{-1} \approx Y\left(\frac{a_1 + a_{-1}}{2}\right). \quad (3.61)$$

Most összehasonlítjuk a hosszú hullámú közelítést a szemiklasszikus hullámfüggvény (3.54) alakjával. Az amplitúdó faktorok algebrailag megfeleltethetőek egymásnak. Most vizsgáljuk meg hogy viszonyulnak egymáshoz a fázisfaktorok. Az elemzéshez vegyük először is a (3.58) egyenlettel definiált θ mennyiség közelítését:

$$\theta_1 \approx \theta_{-1} \approx \theta\left(\frac{a_1 + a_{-1}}{2}\right) = \theta(a), \quad (3.62)$$

ahol $a = (a_1 + a_{-1})/2$. Számoljuk ki, hogy ez a mennyiség mennyiben tér el a klasszikus hatástól.

$$\frac{S_x(x)}{\hbar} - \theta(\xi(x)) = \frac{1}{\hbar} \int_{R_c+X}^x p_x dx - \frac{1}{2} \int_0^{\xi(x)} Y d\xi = \frac{1}{\hbar} \int_{R_c+X}^x p_x dx - \frac{1}{L_B^2} \int_X^x \sqrt{2|a|L_B^2 - (x-X)^2}, \quad (3.63)$$

$$\frac{S_x(x)}{\hbar} - \theta(\xi(x)) = \frac{1}{\hbar} \int_{R_c+X}^x p_x dx - \frac{1}{\hbar} \int_X^x p_x dx = \frac{1}{\hbar} \int_{R_c+X}^X p_x dx = -\frac{\pi R_c^2}{4 L_B^2} = \frac{\pi}{2} a. \quad (3.64)$$

Tahát az eltérés nagysága $\frac{\pi}{2}a$:

$$\boxed{S_x(x) = \theta + \frac{\pi}{2}a}. \quad (3.65)$$

Felhasználva még, hogy $a_1 = a - 1/2$ és $a_{-1} = a + 1/2$, valamint $a_1 = a_{-1} - 1$, és $\sin(\pi/2 - x) = \cos(x)$, megmutatható, hogy a szemiklasszikus hullámfüggvény átalakítható:

$$\begin{pmatrix} i \cos\left(\frac{S_x}{\hbar} + \frac{1}{2} \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right)\right) \\ -\sin\left(\frac{S_x}{\hbar} - \frac{1}{2} \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right)\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi a_1}{2} + \theta + \frac{1}{2} \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right)\right) \\ \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi a_{-1}}{2} + \theta - \frac{1}{2} \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right)\right) \end{pmatrix}. \quad (3.66)$$

A különbség a (3.60) képlethez képest, hogy abban $\theta_{\pm 1}$ szerepel, míg ebben a képletben csak θ és egy-egy extra $\operatorname{asin}()$ tag. Kiinduló feltevésünk volt, hogy $1 \ll -a$ ezért a $\theta_{\pm 1} - \theta$ eltérés sorbafejthető a körül:

$$\theta_{\pm 1} - \theta \approx \operatorname{asin}\left(\frac{\xi}{2\sqrt{|a|}}\right)\left(\pm\frac{1}{2}\right) = \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right)\left(\pm\frac{1}{2}\right). \quad (3.67)$$

Ezzel a sorfejtéssel:

$$\begin{pmatrix} i \cos\left(\frac{S_x}{\hbar} + \frac{1}{2} \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right)\right) \\ -\sin\left(\frac{S_x}{\hbar} - \frac{1}{2} \operatorname{asin}\left(\frac{x-X}{R_c}\right)\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi a_1}{2} + \theta_1\right) \\ \cos\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi a_{-1}}{2} + \theta_{-1}\right) \end{pmatrix}. \quad (3.68)$$

Ez az eredmény megegyezik a (3.60) összefüggéssel. Ezzel megmutattuk, hogy a szemiklasszikus elvek alapján felírt hullámfüggvény algebrailag ugyanarra az alakra vezet, mint az egzakt hullámfüggvény hosszúhullámú közelítése. Megmutatható továbbá az is, hogy a szemiklasszikus hullámfüggvények illesztéséből a határfelületeken, a (3.30) és (3.33) egyenletekkel adott kvantálási feltételekhez jutunk.

A fejezetben bemutatott grafén vizsgálatára alkalmas szemiklasszikus módszert, mely alkalmas tetszőleges mágneses és elektromos tér előírása mellett az elektronok dinamikájának vizsgálatára, és általánosítható kétrétegű grafén esetére is. A fejezetben kiszámoltuk két rendszerre a szemiklasszikus spektrumot és összehasonlítottuk az egzakt eredményekkel a 3.2. és 3.3. szakaszokban. A fejezet végén megmutattuk, hogy a szemiklasszikus hullámfüggvény algebrailag megegyezik az egzakt hullámfüggvény hosszúhullámú közelítésével.

4. fejezet

Kígyó-állapotok. A spektrumok értelmezése és magyarázata

Az előző fejezetben láttuk, a szemiklasszikus kvantálási feltételek eredményei nagyszerű egyezést mutattak az egzakt eredményekkel. (3.2. és 3.4. ábrák) A spektrumok tartományaihoz így egyértelműen hozzárendelhetők a megfelelő klasszikus trajektóriák. Ezeket a mágneses tér hatására kígyómozgást utánozó pályákat (3.1. és 3.3. ábrák), illetve a nekik megfelelő kvantummechanikai energiasajátállapotokat nevezzük *kígyó-állapotoknak* [20, 21]. A spektrumok tulajdonságaiból következtetni tudunk az egyes módusok által szállított áramokra.

4.1. A módusok áramszállítása

Az áram i -dik komponensét az alábbi formulával számíthatjuk ki:

$$I_i \sim \frac{d}{dt} \langle r_i \rangle = \left\langle \Psi \left| \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}_i] \right| \Psi \right\rangle . \quad (4.1)$$

Konkrétan grafénes rendszerekre:

$$I_i \sim \frac{d}{dt} \langle r_i \rangle = \left\langle \Psi \left| v_F \left[\partial_k - i \frac{e}{\hbar} A_k, \hat{r}_i \right] \sigma_k \right| \Psi \right\rangle = \langle \Psi | v_F \sigma_i | \Psi \rangle , \quad (4.2)$$

azaz:

$$I_x \sim 2v_F \int \Re(\Psi_1 \Psi_{-1}^*) \quad I_y \sim 2v_F i \int \Im(\Psi_1 \Psi_{-1}^*) , \quad (4.3)$$

ahol $\Re(a + ib) = a$ és $\Im(a + ib) = b$. Felhasználva a 2. fejezetben megadott hullámfüggvények tulajdonságait, könnyen adódik az $I_x \equiv 0$ azonosság, ahogy azt el is várjuk, mivel a módusok keresztirányban nyilván nem szállítanak áramot. Az áram képletéből (de akár a relativisztikus elektront leíró Dirac-egyenlet analógiájából is) arra a következtetésre jutunk, hogy az áramsűrűség eloszlását az alábbi összefüggés adja meg:

$$j_i = \Psi^+ \sigma_i \Psi . \quad (4.4)$$

Könnyen belátható, hogy a grafén Hamilton-operátorával teljesül a kontinuitási egyenlet is a felírt áramsűrűséggel. Rövid számolással megmutatjuk, hogy a spektrumvonalak meredeksége

a módusok csoportsebességét adja, ami konstans szorzótényező erejéig megegyezik a módus áramával:

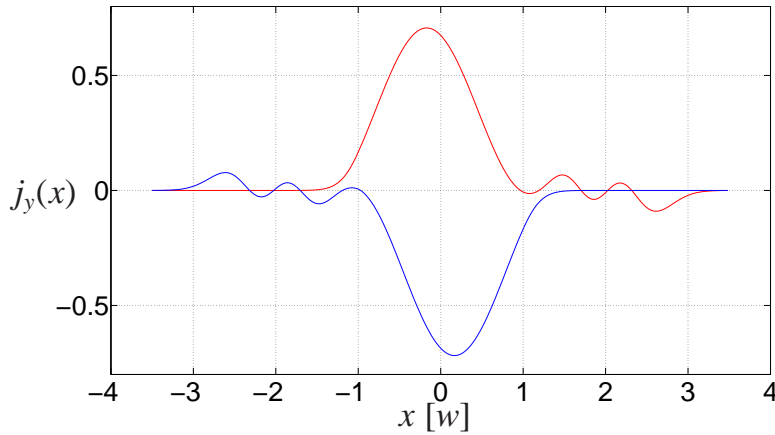
$$I_y \sim \langle \Psi | v_F \sigma_y | \Psi \rangle = \left\langle \Psi \left| \frac{d(v_F \sigma_y \hbar k)}{d(\hbar k)} \right| \Psi \right\rangle = \left\langle \Psi \left| \frac{d}{d(\hbar k)} v_F (\sigma_y (\hbar k - eA_y) + \sigma_x \hat{p}_x) \right| \Psi \right\rangle = \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial(\hbar k)} \right| \Psi \right\rangle, \quad (4.5)$$

$$I_y \sim \frac{\partial}{\partial(\hbar k)} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \frac{\partial E}{\partial(\hbar k)}. \quad (4.6)$$

Vagyis a spektrumvonalak meredeksége megadja az áramot. Ilyen módon az eredő áram felírható az egyes módusok áramainak összegeként, mivel az egyes állapotok ortogonálisak egymásra és ezért az energia várható értékének képzésénél a vegyes tagok nem adnak járulékot.

4.2. A spektrum értelmezése a szimmetrikus elrendezésre

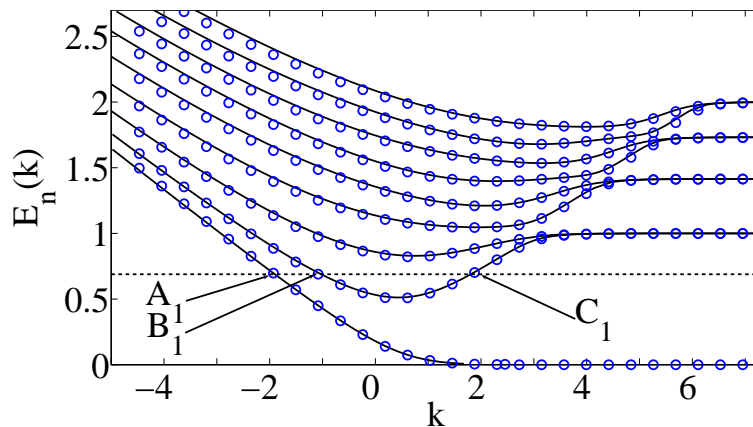
Az előző fejezetben ismertetett szemiklasszikus analízis lehetővé teszi a mélyebb betekintést a rendszer fizikájába. A 3.2. ábrán bemutatott nagyszerű egyezés a klasszikus és egzakt spektrum között arra utal, hogy az állapotok mögé a 3.1. ábra klasszikus pályáit képzelhetjük. Az előző szakasz számolásai alapján egy-egy állapot áramát a spektrumvonal meredekségéből számíthatjuk ki. A spektrum szimmetrikusságából adódóan a $\pm y$ irányba propagáló módusok áramai kompenzálják egymást. A 4.1. ábrán egy egymást kompenzáló móduspárhoz tartozó árameloszlás látható. Az árameloszlások (hullámfüggvények) átfedik egymás, ezért ezek az állapotok szóródnak egymáson. Az elektromos ellenállást az átfedési integrál határozza meg.



4.1. ábra. Árameloszlások $j_y(x)$ (mértékegység nélkül) az x dimenziótlan koordináta függvényében. Az alsó (felső) görbe $k = -4.5/w$ ($k = 4.5/w$) hullámszámú és $E = 1.502 \hbar \omega_c$ energiájú állapothoz tartozik. Jól látszik, hogy a kettő módus áramjáruléka kompenzálja egymást.

4.3. A spektrum értelmezése az antiszimmetrikus elrendezésre

A 4.2. ábra szemlélteti az $E_n(k)$ spektrumot a \mathbf{K} pont környékén a Dirac-egyenletből és a szorosan kötött elektron modellből [8] (*tight binding* - TB) számolva. A TB számolásaink módszere megegyezik a [23]-ban ismertetett módszerrel, kivéve, hogy itt a szerzők homogén mágneses teret alkalmaztak. Az ábrán nincsenek feltüntetve a TB modellből adódó felületi állapotok (a minta végeessége miatt ezek megjelennek). Ezeket az állapotokat a későbbiekben tárgyaljuk majd. A Dirac-egyenletből ezeket az állapotokat nem kaptuk meg, mivel ezek a számolások idealizált, végtelen kiterjedésű közegre voltak érvényesek. A TB számolások na-



4.2. ábra. Az antiszimmetrikus elrendezés spektruma a \mathbf{K} pont környékén. Az energiaértékek $\hbar\omega_c = \sqrt{2} \frac{\hbar v_F}{L_B}$ egységekben vannak ábrázolva. A rendszerre jellemző paraméter értéke $\eta = w/L_B = 2.2$. A folytonos vonal a Dirac-egyenletből számolt energiaértékeket jelöli, az üres karikák pedig a TB modell eredményeit mutatják cikk-cakk peremfeltétel mellett. Az ábrán bejelöltük az A_1 , B_1 és C_1 kígyó-állapotokat az energia $E = 0.688 \hbar\omega_c$ értékénél.

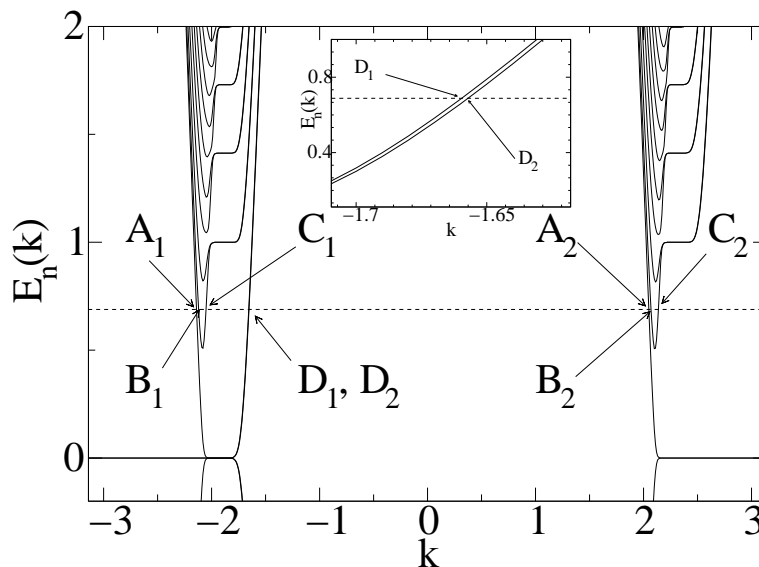
gyon jó egyezést mutatnak a Dirac-egyenletből számolt spektrummal. Nagy pozitív k értékekre az összes állapot a diszperzió nélküli Landau-nívókba csoportosul. Ezeknek a nívóknak ugyanolyan energiaértékeik vannak, mint a homogén mágneses mezőben megvalósuló ciklotronpályáknak [23, 24, 26]. A k hullámszám negatív értékeire a spektrumvonalak diszperzíviek. A módusok csoportsebessége láthatóan egy konstans értékhez tart az összes állapokra (kígyó-sebesség). A függelék A.3 szakaszában megmutatjuk, hogy a csoportsebesség

$$v_g = \sqrt{2} v_F.$$

Az asszimptotikus csoportsebesség tehát univerzális, a mágneses tértől független értéket vesz fel. Néhány diszperzív állapotot, A_1 , B_1 és C_1 , megjelöltünk a 4.2. ábrán. Ezek mind az y vagy $-y$ irányban szállítanak áramot a csoportsebességük előjelének megfelelően. Közülük kettő (A_1, B_1) árama már lényegében az asszimptotikus kígyó-sebességgel adható meg. Ezekhez az állapotokhoz tartozó hullámfüggvények a rendszer középtáján (x koordinátát figyelve a 4.4. ábrán), a nulla mágneses mező tartományában vannak lokalizálva.

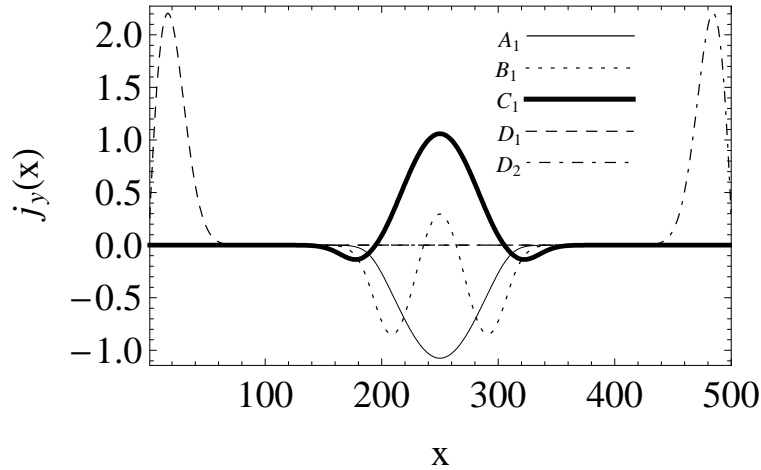
A 4.2. ábrából kitűnik, hogy a jobbra és balra propagáló állapotok száma nem egyezik meg, ami első gondolatra paradoxonnak tűnik. A rendszer alapállapota ennek következtében nem lehetne termodinamikai egyensúlyban, mivel egy eredő áram folyna $-y$ irányban mindenféle

külső feszültség nélkül. Hogy feloldjuk ezt a paradoxont, számításba kell vennünk a felületekra lokalizálódott állapotokat is, melyek a TB számolásokból adódnak. (A minta szélének $x = \pm D$.) A 4.3. ábra ugyanazokat a spektrumvonalakat szemlélteti, mint amelyeket a 4.2. ábra is, csak most feltüntettük az összes spektrumvonalat, amit a TB számolásokból megkaptunk. Mint látjuk, kettő extra állapot adódott, melyeket D_1 -gyel és D_2 -vel jelöltünk a 4.3. ábrán. Nehéz ugyan őket szabad szemmel megkülönböztetni, de két jól elkülönülő állapotról van szó, ahogy ezt a betétabra is mutatja. Ezek az extra állapotok éppen az említett felületi állapotok, melyek a TB számolások során használt véges mintaméretből adódnak. Ez legkönnyebben a hullámfüggvényekből számolt árameloszlásból látható. Az áramok eloszlása a bejelölt állapotokra a 4.4. ábrán tekinthetők meg. Az ábrából jól láthatóak az áramszállítással



4.3. ábra. Az antiszimmetrikus elrendezés spektruma TB modellel számolva k minden lehetséges ($1/a$ egységekben, ahol $a = \sqrt{3}r_{C-C}$ a rácsállandó) értékére cikk-cakk peremfeltétel mellett. Az ábrára ugyanazok a paraméterek érvényesek mint a 4.2. ábra esetében, mely ennek a spektrumnak egy kinagyított részét ábrázolta. A különbség a két ábra között csupán az, hogy a hullámszámparaméter más egységekben van feltüntetve. Az A_i , B_i , C_i and D_i ($i = 1, 2$) állapotokat is ugyanakkora energiaértéknél jelöltük be.

és lokalizáltsággal kapcsolatos tulajdonságok: a 4.3. ábrán bejelölt $A_{1,2}$, $B_{1,2}$ és $C_{1,2}$ állapotok a kigyó-állapotok. Az első kettő $-y$ irányban, a harmadik pedig y irányban propagál. Számításba véve a $D_{1,2}$ felületi állapotokat látható, hogy a jobbra és balra propagáló módusok száma ugyanaz minden energiaérték mellett. Ez biztosítja a rendszer termodinamikai egyensúlyát. Hasonló eredményt kellene kapnunk, ha véges méretű mintára felírt Hamilton-operátort használunk. [25] Változtatva az E_F Fermi-energiát az állapotok tulajdonságai és ezért az árameloszlásuk is változik. A nulladik és első Landau-nívó között fekvő Fermi-energia esetében a B_1 és C_1 állapotok áramai a zérus mágneses mező tartományában lokalizálódnak és lokálisan kompenzálják egymást. Azonban az A_1 állapot (mely szintén a középső térrészben van lokalizálva) árama lokálisan kompenzálatlan. Globálisan egyedül a felületi D_1 állapot árama kompenzálja ezt az áramot, biztosítva a termodinamikai egyensúlyt. Lényeges azonban, hogy ezeknek az állapotoknak (A_1 és D_1) az átfedési integrálja lényegében zérus, így az A_1 állapot árama

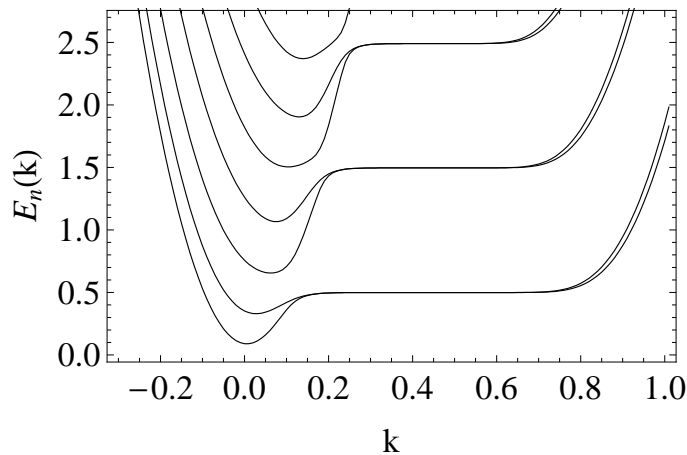


4.4. ábra. Árameloszlás $j_y(x)$ (mértékegység nélkül) az x dimenziótlan koordináta függvényében az A_1 , B_1 , C_1 , D_1 és D_2 állapotokra, melyek a 4.3. ábrán vannak feltüntetve.

lokálisan kompenzálatlan. Amint a Fermi-energia átlépi az első Landau-nívó energiaszintjét, az A_1 állapoton kívül a B_1 állapot is lokálisan kompenzálatlanná válik, mivel a C_1 állapot felületi állapottá alakul át. Tovább növelve a Fermi-energiát, analóg gondolatmenetet használhatunk az értelmezés során.

Mindennek tükrében azt találtuk, hogy grafénben a Fermi-energia minden értékére találunk legalább egy lokálisan kompenzálatlan áramú állapotot, mely a rendszer nulla mágneses mező tartományában van lokalizálva. Ezeket az áramokat csak a messzi felületre korlátozódott állapotok kompenzálják.

Érdekes lehet összevetni ezeket az eredményeket a hagyományos kétdimenziós elektrongázzal (2DEG). A geometriai elrendezés természetes ugyanaz, mint a grafénes rendszerre. A 2DEG-re



4.5. ábra. A 2DEG spektruma a TB modelltől számolva ugyanolyan geometria esetében, mint ahogy a 2.3. ábrán látható. Az energiaértékek $\hbar\Omega_c$ egységben vannak ábrázolva, ahol $\Omega_c = eB/m$ (m az elektronok effektív tömege). A k hullámszámot $1/a$ egységben mérjük, ahol a a rácsállandó.

számolt spektrum a 4.5. ábrán látható. A számolásokat négyzetrácsú TB modellel végeztük el. A Landau-nívók az $E_n(k) = \hbar\Omega_c(n + 1/2)$ energiaértékeknel találhatók meg, ahol Ω_c a ciklotronkörfrekvencia. A spektrumot analóg módon magyarázhatjuk a kígyó-állapotokkal, mint a grafénes esetben. Az egyedüli szembetűnő különbség az, hogy az $n = 1$ Landau-nívó alatt már nem találunk kompenzálatlan állapotot. Ez egy alapvető különbség a grafénnel és 2DEG-vel megvalósított rendszer között.

4.4. Összefoglalás

A kutatás során inhomogén mágneses mezőben mozgó elektronok dinamikáját vizsgáltuk. A mágneses mező egyszerű lépcsőfüggvényes profilja mellett hasonló tulajdonságokat találtunk grafénben mint 2DEG-ben. A hasonlóság az ún. kígyó-állapotokban nyilvánult meg. Kiszámoltuk a spektrumot végtelen minta esetében a Dirac-féle Hamilton-operátor segítségével. Az eredmények egyezést mutattak a TB számolások eredményeivel, mely már véges méretű mintát vesz figyelembe. Úgy találtuk, hogy a mágneses mező antiszimmetrikus elrendezésében a minta felületi állapotai biztosítják a termodinamikai egyensúlyt. Grafénben a Fermi-energia bármilyen értékénél találunk lokálisan kompenzálatlan állapotokat, míg a 2DEG-re elvégzett számolások azt mutatják, hogy csak az első Landau-nívó felett létezik ez az effektus. Ez a különbség egy újabb bizonyítéka a Dirac-féle nulla tömegű elektrongerjesztéseknek grafénben. A grafén minta belsejébe lokalizált, áramot szállító kígyó-állapotok elegendően kis energiákon ($n = 0$ Landau-szint környékén egészen az $n = 1$ vagy $n = -1$ Landau-szintekig) elvárásaink szerint érzéketlenek a mintában lévő szennyeződésekkel való szórásra, hasonlóan mint a felületi állapotok a kvantum Hall-effektus esetében. Az egzakt számolások mellett először alkalmaztunk az irodalomban szemiklasszikus módszereket a grafén sáv szerkezetének leírására mágneses mezőben. Módszerünk alkalmas tetszőleges mágneses és elektromos tér előírása mellett az elektronok dinamikájának vizsgálatára, és általánosítható kétrétegű grafén esetére is. Eredményeinket a *Physical Review B* folyóirat hasábjain közöltük [17]. A kígyó-állapotok különleges természetére vonatkozó eredményeinket [7], tőlünk függetlenül megerősítették mások által végzett kutatások is [22]. A kutatás eredményei azt sugallják, hogy a kígyó-állapotok tulajdonságai elméleti és mérési kutatásban egyaránt jelentősek lehetnek.

Függelék

A.1. A szimmetrikus rendszer spektrumára vonatkozó állítások

Állítás: Ha E jó sajátértéke a (2.5) Hamilton-operátornak, akkor $-E$ is jó sajátérték.

Bizonyítás: Hattassuk a (2.12) alakban megadott Hamilton-operátort a hullámfüggvényre:

$$\hat{H}\Psi = v\sigma(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_{-1} \end{pmatrix} e^{iky} = v \begin{pmatrix} 0 & p_x - i(\hbar k - eA_y) \\ p_x + i(\hbar k - eA_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_{-1} \end{pmatrix} e^{iky} = E \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_{-1} \end{pmatrix} e^{iky} . \quad (\text{A-1})$$

Az egyenletet konjugálva és megszorozva -1 -gyel:

$$v \begin{pmatrix} 0 & p_x - i(\hbar k - eA_y) \\ p_x + i(\hbar k - eA_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1^* \\ \Phi_{-1}^* \end{pmatrix} e^{-iky} = -E \begin{pmatrix} \Phi_1^* \\ \Phi_{-1}^* \end{pmatrix} e^{-iky} . \quad (\text{A-2})$$

Ebből az egyenletből az állítás következik, hiszen a konjugálással és a szorzással nem rontottuk el a hullámfüggvények illeszkedését a határfelületen. Ezek a negatív és pozitív energiás megoldások.

Állítás: Az $E = 0$ jó sajátértéke a (2.5) Hamilton-operátornak k minden értékére.

Bizonyítás: Felhasználva a számolások során bevezetett jelöléseket, a hullámfüggvények a következő képpen írhatóak: ($\gamma_-^{\text{II}} = 0$, $1/\gamma_+^{\text{II}} = 0$, ha $E = 0$)

$$\Psi^{\text{III}} = A \begin{pmatrix} U(a_1, \xi^{\text{III}}(x)) \\ 0 \end{pmatrix} e^{iky} , \quad (\text{A-3})$$

$$\Psi^{\text{II}} = \begin{pmatrix} 0 \\ B_+ \end{pmatrix} e^{i(Kx+ky)} + \begin{pmatrix} B_- \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(-Kx+ky)} \quad \text{ahol: } K = ik , \quad (\text{A-4})$$

$$\Psi^{\text{I}} = C \begin{pmatrix} U(a_1, \xi^{\text{I}}(x)) \\ 0 \end{pmatrix} e^{iky} . \quad (\text{A-5})$$

Az illesztésből azonnal látszik, hogy $B_+ = 0$. A többi együttható az alábbi független egyenleteket elégítik ki:

$$A \cdot U(a_1, \xi(w)) = B_- \cdot e^{kw} , \quad (\text{A-6})$$

$$C \cdot U(a_1, \xi^{\text{III}}(-w)) = B_- \cdot e^{-kw} . \quad (\text{A-7})$$

Ennek az egyenletrendszernek láthatóan van nemtriviális megoldása, vagyis $E = 0$ mellett valóban találunk illeszkedő hullámfüggvényeket k minden értékére.

A.2. Az antiszimmetrikus rendszer spektrumára vonatkozó állítások

Állítás: Ha E jó sajátértéke a (2.5) Hamilton-operátornak, akkor $-E$ is jó sajátérték.

Bizonyítás: Vegyük a \hat{T} tükrözőoperátos hatását.

$$\hat{T}\Psi(x, s) = \Psi(-x, -s) , \quad (\text{A-8})$$

vagyis a térkoordinátákat tükrözi, a spinorkomponenseket pedig felcseréli. Ugyanez érvényes a mátrixoperátorokra is. Így könnyen adódik:

$$\hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1} = -\hat{H}. \quad (\text{A-9})$$

Ebből az összefüggésből már könnyen látható, hogy a tükrözőoperátor hatása az E_n energiás állapoton az, hogy leképezi azt a $-E_n$ energiás altérbe.

A.3. A Snake-állapotok asszimptotikus meredeksége az anti-szimmetrikus elrendezésben

A 2. fejezetben említettük, hogy az antiszimmetrikus elrendezésre a szekuláris egyenlet két 2×2 determináns szorzataként írható fel. Kifejtve a determinánsokat az alábbi egyenletre jutunk (K tisztán valósértékeire):

$$(\delta_1 U(a_1, \xi(w)) - \delta_{-1}^+ U(a_{-1}, \xi(w))) (\delta_1 U(a_1, \xi(w)) - \delta_{-1}^- U(a_{-1}, \xi(w))) = 0, \quad (\text{A-10})$$

ahol:

$$\delta_1 = \Re(\gamma_+^{II} e^{2iKw}) \quad \delta_{-1}^\pm = i\gamma^I (\sin(2Kw) \pm \Re(\gamma_+^{II})).$$

A mennyiségek definícióit felhasználva:

$$\delta_1 = \frac{\tilde{K}}{\tilde{E}\eta} \cos 2\tilde{K} - \frac{\tilde{k}}{\tilde{E}\eta} \sin 2\tilde{K} \quad \delta_{-1}^\pm = -\frac{\tilde{E}}{\sqrt{2}} \left(\sin 2\tilde{K} \pm \frac{\tilde{K}}{\tilde{E}\eta} \right), \quad (\text{A-11})$$

ahol: $\tilde{K} = Kw$, $\tilde{k} = kw$, $\tilde{E} = E/(\hbar\omega_c)$, $\hbar\omega_c = \sqrt{2} \frac{\hbar v_F}{L_B}$, $\eta = \frac{w}{L_B}$. Az (A-10) egyenletben elég csak az egyik zárójellel foglalkozni (valamint felhasználva hogy $a_{-1} - 1 = a_1$):

$$\left(\frac{\tilde{K}}{\tilde{E}\eta} \cos 2\tilde{K} - \frac{\tilde{k}}{\tilde{E}\eta} \sin 2\tilde{K} \right) U_1 - \frac{\tilde{E}}{\sqrt{2}} \left(\sin(2\tilde{K}) \pm \frac{\tilde{K}}{\tilde{E}\eta} \right) U_{-1} = 0. \quad (\text{A-12})$$

Asszimptotikusan a Whittaker-függvények aránya:

$$\frac{U_1}{U_{-1}} \approx \sqrt{\frac{\Gamma(\frac{1}{2} - a_1)}{\Gamma(\frac{1}{2} - a_{-1})}} = \sqrt{\frac{1}{2} - a_1 - 1} \approx \sqrt{-a_1} = \frac{\tilde{E}}{\sqrt{2}}.$$

Ezt felhasználva az előző egyenlet az alábbira módosul:

$$\left(\frac{\tilde{K}}{\tilde{E}\eta} \cos 2\tilde{K} - \frac{\tilde{k}}{\tilde{E}\eta} \sin 2\tilde{K} \right) - \left(\sin(2\tilde{K}) \pm \frac{\tilde{K}}{\tilde{E}\eta} \right) = 0. \quad (\text{A-13})$$

Ezt az egyenletet átalakítva:

$$\tilde{K} (\cos 2\tilde{K} \mp \tilde{K}) = \sin 2\tilde{K} (\tilde{E}\eta + \tilde{k}). \quad (\text{A-14})$$

Deriváljuk ezt az egyenletet \tilde{k} szerint és felhasználva hogy:

$$\frac{d}{d\tilde{k}} \tilde{K} = \frac{\eta^2 \tilde{E} \frac{d}{d\tilde{k}} \tilde{E} - \tilde{k}}{\tilde{K}},$$

az alábbi egyenlet adódik:

$$\frac{d}{d\tilde{k}} \tilde{E} = \frac{\tilde{k} \frac{f(\tilde{K})}{\tilde{K}} + \sin 2\tilde{K}}{\tilde{E} \eta^2 \frac{f(\tilde{K})}{\tilde{K}} - \sin 2\tilde{K}}. \quad (\text{A-15})$$

Ha $\tilde{k} \rightarrow -\infty$, akkor $\tilde{E} \rightarrow \infty$. Képezve ezt a határértéket:

$$\frac{d}{d\tilde{k}} \tilde{E} = \frac{\tilde{k}}{\eta^2 \tilde{E}}. \quad (\text{A-16})$$

Ebből a differenciálegyenletből már könnyen adódik, hogy a Snake-állapotok asszimptotikus meredeksége:

$$\frac{d}{d\tilde{k}} \tilde{E} = \frac{1}{\eta}.$$

Felhasználva a csoportsebesség definícióját:

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} E, \quad (\text{A-17})$$

a csoportsebességre az alábbi összefüggés adódik:

$$v_g = \frac{\omega_c \mathcal{W}}{\eta} = \sqrt{2} v_F. \quad (\text{A-18})$$

A.4. Folytonos térszimmetria tükröződése a szemiklasszikus hullámfüggvényen

Ez a szakasz a dolgozat szemiklasszikus kvantálást leíró részéhez kapcsolódik (lásd a 3.2 szakaszt). Az alábbi állítást bizonyítjuk csoportelméleti megfontolásokkal: ha egy rendszer folytonos térszimmetriát mutat valamilyen általános koordinátában, akkor erre a koordinátára nézve vagy nem írható fel kvantálási feltétel, vagy felírható, de triviális alakot ölt. A triviális alak azt jelenti hogy a kvantálási feltételben nem szerepel a γ fázisjárulék, és a hatásnak a szimmetriát mutató koordinátára eső vetülete egyszerű szorzat alakjában írható fel, hiszen a szimmetriát mutató koordinátához tartozó kanonikus impulzus mozgásállandó lesz. Az állításnak a hatás alakjára tett kijelentése triviális, a bizonyításával nem foglalkozunk. A továbbiakban a $\gamma(\mathbf{r})$ fázisfaktor koordinátáktól való függését vizsgáljuk.

Legyen egy általános folytonos szimmetriaművelet operátora:

$$\hat{S}(\alpha) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\sum_i c_i(\mathbf{r}) \hat{p}_i \right) \alpha \right], \quad (\text{A-19})$$

ahol $i = x, y$; α a transzformáció mértéke (forgatásnál pl. a szög nagysága), $c_i(\mathbf{r})$ pedig a transzformáció generátorának előállításához szükséges együtthatók. Például:

$$\text{forgatás:} \quad c_x = -y \quad c_y = x, \quad (\text{A-20})$$

$$y \text{ irányú eltolás:} \quad c_x = 0 \quad c_y = 1. \quad (\text{A-21})$$

Minden ilyen egyparaméteres szimmetria-transzformációnak létezik egy fundamentális invariánsa, az összes többi invariáns ebből az egyből előállítható. Ez a fundamentális invariáns a koordináták egy kombinációját jelöli. Legyen ez az invariáns $F(x, y)$. A transzformáció generátorának a hatása ezen az invariánson eltűnik:

$$\frac{i}{\hbar} \left(\sum_i c_i(\mathbf{r}) \hat{p}_i \right) F = \left(\sum_i c_i(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x_i} \right) F = \mathbf{c} \text{ grad } F = 0. \quad (\text{A-22})$$

A kétdimenziós rendszerünkben ez az invariáns könnyen kifejezhető:

$$F(\mathbf{r}) = \int_{\Gamma} (\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{c}(\mathbf{r})) \, d\mathbf{r}, \quad (\text{A-23})$$

ahol $\hat{\mathbf{z}}$ a z irányú egységvektor, Γ pedig egy alkalmasan választott tetszőleges görbe. Ezzel könnyen adódnak:

$$\text{forgatásra:} \quad F = x^2 + y^2, \quad (\text{A-24})$$

$$y \text{ irányú eltolásra:} \quad F = x. \quad (\text{A-25})$$

Az $F(x, y) = C$ megoldásai adják a kontúrvonalakat, melyek helyfüggő érintővektora $\mathbf{c}(\mathbf{r})$. Amennyiben a rendszer szimmetriát mutat valamilyen transzformációra, a rendszerhez rendelt klasszikus Hamilton-függvénynek ($\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$) is invariánsnak kell lennie erre a szimmetriatranszformációra:

$$\hat{S}(\alpha) \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}). \quad (\text{A-26})$$

Ezért az előbbieket alapján elmondható, hogy a Hamilton-függvény csak $F(\mathbf{r})$ -en keresztül függhet a koordinátáktól:

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv \mathcal{H}(F(\mathbf{r}), \mathbf{p}). \quad (\text{A-27})$$

Ezeket felhasználva bizonyítható, hogy γ is csak F -en keresztül függhet a koordinátáktól:

$$\gamma(\mathbf{r}) \equiv \gamma(F(\mathbf{r})). \quad (\text{A-28})$$

Ennek bizonyítására alakítsuk át a γ fázisfaktor időfejlődésére felírt (3.26) differenciálegyenlet jobb oldalát:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial x \partial p_y} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial y \partial p_x} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial p_y} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial p_x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} \right) = \quad (\text{A-29})$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial p_y} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} (\nabla F)_x - \frac{\partial}{\partial p_x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} (\nabla F)_y \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial p_y} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} (\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{c})_x - \frac{\partial}{\partial p_x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} (\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{c})_y \right) = \quad (\text{A-30})$$

$$= -\frac{1}{2} \text{grad}_p \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} \right) \mathbf{c} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial F} \dot{\mathbf{r}} \right) \mathbf{c}. \quad (\text{A-31})$$

Az átalakítások során felhasználtuk, hogy $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$, valamint: $\nabla F = \hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{c}$ és $\hat{\mathbf{z}} \text{grad}_p \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} = 0$, mivel \mathcal{H} -nak nincs z függése, végül pedig $\text{grad}_p \mathcal{H} = \dot{\mathbf{r}}$. Ugyanennek a differenciálegyenletnek a baloldala:

$$\frac{d\gamma(\mathbf{r})}{dt} = \dot{\mathbf{r}} \nabla \gamma(\mathbf{r}) . \quad (\text{A-32})$$

Vagyis a differenciálegyenlet:

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial F} \dot{\mathbf{r}} \right) \mathbf{c} = \dot{\mathbf{r}} \nabla \gamma(\mathbf{r}) . \quad (\text{A-33})$$

Nyilvánvalóan az $\dot{\mathbf{r}}$ és \mathbf{c} mennyiségek vektorai a szimmetriaoperátornak, hiszen a helyvektorral megegyező módon transzformálódnak (az egyik a sebesség, a másik pedig egy invariáns görbe érintővektora). Ezeknek egy invariáns skalár (F) szerinti deriváltja is vektor marad. Az egyenlet bal oldalán tehát két vektor skalárszorzata áll, mely skalárszorzat a szimmetriatranszformációra nézve skalárként transzformálódik, vagyis ugyanúgy mint F : nem változik, ezért csakis F függvénye lehet:

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial F} \dot{\mathbf{r}} \right) \mathbf{c} =: \mu(F(\mathbf{r})) = \dot{\mathbf{r}} \nabla \gamma(\mathbf{r}) . \quad (\text{A-34})$$

A $\gamma(\mathbf{r})$ helyfüggése mindig átírható:

$$\gamma(\mathbf{r}) \equiv \gamma(F(\mathbf{r}), V(\mathbf{r})) \quad (\text{A-35})$$

alakra. Itt $V(\mathbf{r})$ az $F(\mathbf{r})$ szintvonalakat merőlegesen metsző szintvonalakat jelöli. Képzeljük el, hogy $F(\mathbf{r}) = C$ egy potenciál kontúrvonalait adja. Ezen kontúrvonalakat merőlegesen metszik a potenciál erővonalai. Definíció szerint $V(\mathbf{r}) = C'$ éppen ezeket az erővonalakat írja le. (A szerepek fel is cserélhetőek.) Ezzel F és V segítségével egy görbevonalú koordinátarendszerrel paramétereztük be az $x - y$ síkot, vagyis az előző egyenlet állítása értelmes. Visszatérve ekkor az (A-34) egyenlethez:

$$\mu(F(\mathbf{r})) = \dot{\mathbf{r}} \nabla \gamma(\mathbf{r}) = (\dot{\mathbf{r}} \nabla F) \frac{\partial \gamma}{\partial F} + (\dot{\mathbf{r}} \nabla V) \frac{\partial \gamma}{\partial V} . \quad (\text{A-36})$$

A zárójelekben szereplő skalárszorzatok most is invariánsak a szimmetriatranszformációra, kizárólag F függvényei ($\nabla V = \mathbf{c}$):

$$\mu(F(\mathbf{r})) = (a(F)) \frac{\partial \gamma}{\partial F} + (b(F)) \frac{\partial \gamma}{\partial V} . \quad (\text{A-37})$$

Ez az egyenlet csak akkor maradhat érvényes, ha γ nem függ V -től, hiszen az egyenletet transzformálva F nem változna, V viszont igen, így elromlana az egyenlőség. Tehát γ a koordináták azon kombinációjától függhet csak, mely kombináció invariáns a transzformációra nézve: $\gamma(\mathbf{r}) \equiv \gamma(F(\mathbf{r}))$. Ezzel az állítást bizonyítottuk.

Irodalomjegyzék

- [1] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, Solid State Commun. **143**, 3-13 (2007).
- [2] P. R. Wallace, Phys. Rev. **71**, 56 (1991).
- [3] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. M. Morozov, and A. K. Geim, PNAS **102**, 10452, (2005); K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. M. Morozov, D. Jiang, Y. Yhang, S. V. Dobunos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004).
- [4] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. M. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dobunos, and A. A. Firsov, Nature **438**, 197, (2005); Y. Zhang, Y. -W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, Nature **438**, 201 (2005).
- [5] O. Klein, Z. Phys. **53**, 157, (1929); N. Dombey and A. Calogeracos, Phys. Rep. **315**, 41 (1999); F. Constantinescu, E. Magyari: *Kvantummechanikai feladatok*, 354. old. 17. és 18. feladat (Tankönyv Kiadó, Budapest 1972).
- [6] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Nature Phys. **2**, 620 (2006).
- [7] L. Oroszlány, P. Rakyta, A. Kormányos, C.J. Lambert, J. Cserti, Phys. Rev. B **77**, 081403(R) (2008).
- [8] Sólyom Jenő: *A modern szilárdtestfizika alapjai II.: Elektronok szilárd testekben*, 18.2. fejezet (ELTE Eötvös Kiadó, Budapest 2003).
- [9] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, arXiv:0709.1163v2.
- [10] A. R. Akhmerov, C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **77**, 085423 (2008); J. Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, C.W.J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **96**, 246802 (2006), E. McCann and V. I. Fal'ko, J. Phys. Condens. Matter **16**, 2371 (2004).
- [11] G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449, (1984); F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).
- [12] N. D. Mermin, H. Wagner, Phys.Rev.Lett., **17**, 1133 (1966).
- [13] R. E. Peierls, Helv. Phys. Acta **7**, 81 (1934); R. E. Peierls, Ann. Inst. H. Poincaré **5**, 177 (1935); L. D. Landau, Phys. Z. Sowjet Union **11**, 26 (1937); L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Elméleti Fizika V. kötet Statisztikus Fizika I.*, (Tankönyvkiadó, Budapest 1981).

- [14] A. De Martino, L. Dell'Anna, and R. Egger, Phys. Rev. Lett. **98**, 066802 (2007).
- [15] Abramowitz and Stegun: *Handbook of Mathematical Functions* (chapter 19), 9th ed. (Dover Publication Inc., New York, NY, 1972).
- [16] P. Carmier, U. Denis, Phys. Rev. B **77**, 245413 (2008).
- [17] A. Kormanyos, P. Rakya, L. Oroszlany, J. Cserti, Phys. Rev. B **78**, 045430 (2008).
- [18] L. D. Landau és E. M. Lifshitz: *Elméleti fizika III. kötet Kvantummechanika. Nemrelativisztikus elmélet* (Tankönyvkiadó, Budapest 1978); A. Messiah: *Quantum Mechanics* (Chapter VI), (Dover Publication Inc., Mineola, New York 1999).
- [19] Csaba Tóke, Paul E. Lammert, Vincent H. Crespi, and Jainendra K. Jain, Phys. Rev. B **74**, 235417 (2006).
- [20] J. E. Müller, Phys. Rev. Lett. **68**, 385 (1992).
- [21] J. Reijnders and F. M. Peeters, J. Phys.: Condens. Matter **12**, 9771 (2000); J. Reijnders, A. Matulis, K. Chang, F. M. Peeters and P. Vasilopoulos, Europhys. Lett. **59**, 749 (2002); A. K. Geim et al., Nature **390**, 259 (1997); H. Xu et al., Phys. Rev. B **75**, 205301 (2007).
- [22] T. K. Ghosh, A. De Martino, W. Häusler, L. Dell'Anna, R. Egger, Phys. Rev. B **77**, 081404(R) (2008).
- [23] K. Wakabayashi, M. Fujita, H. Ajiki, and M. Sigrist, Phys. Rev. B **59**, 8271 (1999).
- [24] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988); Y. Zheng and T. Ando, Phys. Rev. B **65**, 245420 (2002); V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, Phys. Rev. Lett. **95**, 146801 (2005); N. M. R. Peres F. Guinea and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. B **73**, 125411 (2006); L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006).
- [25] Special issue of Solid State Commun. **143**, 1 (2007).
- [26] M. Ezawa, J. Phys. Soc. Jpn. **76**,094701 (2007).