

Szakkolgozat:

PEREMEFFEKTUSOK SZEMIKLASSZIKUS
ÉRTELMEZÉSE GRAFÉNBEN



Rakya Péter

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék
Budapest, 2009

Témavezető:
Cserti József

Előszó

A modern nanotechnológia fejlődésével a szén alapú kristályszerkezetek hamar a figyelem középpontjába kerültek széleskörű alkalmazhatóságuk révén. A háromdimenziós kristályszerkezetek (grafit és gyémánt) már a régmúltban is ismertek voltak. A nemrégiben felfedezett *nulladimenziós* fullerén [1] és *egydimenziós* szénnanocsövek [2] manapság is tárgyát képezik sok kutatómunkának különleges mechanikai és elektromos tulajdonságaiknak köszönhetően [3, 4]. Ugyanakkor egészen a közelmúltig nem sikerült *kétdimenziós* szénmódosulatot megfigyelni. Ennek ellenére az elméleti fizika már bő irodalommal rendelkezik erről a módosulatról is. A *grafén* [5, 6, 7, 8, 9] (síkbeli, hatszöges elrendezése a szénatomoknak) hosszú ideje kiindulási pontnak számít minden a grafittal, szénnanocsövekkel és fullerénnel kapcsolatos számolásokban már a 40-es évektől kezdve [10]. A kísérleti eredmények azonban egészen 2004-ig vártak magukra, mikor is már megfelelő technológiai eljárások váltak hozzáférhetővé a felmerülő problémák leküzdéséhez [5]. A töltéshordozók különleges spektruma és az anomális kvantum Hall-effektus a grafénben [6] 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* [11], 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 [12]. Ugyanakkor az effektus lényeges szerepet játszik a grafénnel kapcsolatos elektronikában [13].

A technológiai eljárások fejlődésével lehetőség nyílik tervezett geometriájú grafén minták előállítására. Különböző minták készítése már napjainkban is lehetséges például pásztázó alagútmikroszkóp-litográfia (STM) segítségével [14]. A preparált minták fizikai folyamatainak leírásához elengedhetetlen figyelembe venni a grafén peremének hatásait [15, 16, 17]. A dolgozatban a peremeffektusok kváziklasszikus értelmezését taglaljuk a grafénre kidolgozott szemiklasszikus formalizmus [18, 19] keretein belül összehasonlítva az egzakt kvantum számolásokkal. Az első fejezetben áttekintést adunk a grafén alapvető fizikai tulajdonságairól, majd a második fejezetben bemutatjuk a végtelen grafén minta kötött állapotainak leírására alkalmas szemiklasszikus formalizmust. A harmadik fejezetben a véges minta határain kirótt peremfeltételekkel foglalkozunk, végül pedig a negyedik és ötödik fejezetek a peremeffektusok szemiklasszikus értelmezését mutatják be.

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.

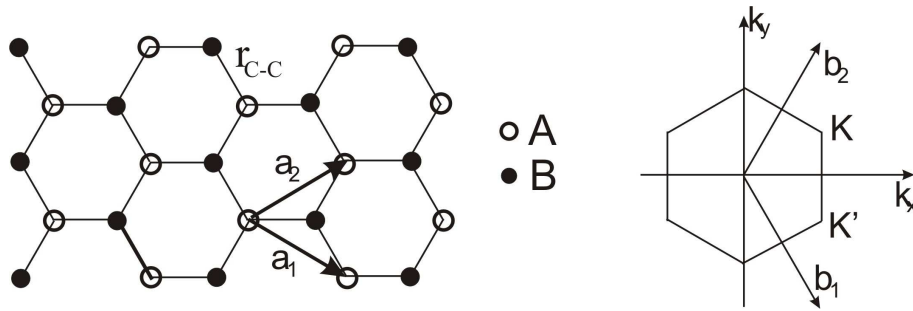
Tartalomjegyzék

Előszó és köszönetnyilvánítás	iii
1. Bevezetés a grafén fizikájába	3
1.1. Burkolófüggvény-közelítés: Dirac-féle Hamilton-operátor	6
1.2. Az izospin	9
2. Kötött állapotok szemiklasszikus kvantálása	13
2.1. A γ fázis kapcsolata az elektronok kiralitásával	15
3. A peremfeltétel általános alakja	17
3.1. A peremfeltétel meghatározása	17
4. A peremek reflexiójának klasszikus leírása	21
4.1. A reflexió-mátrix	21
4.2. Vezető graféncső kvantálása <i>karosszék</i> peremfeltétel mellett	23
4.3. Félvezető graféncső kvantálása <i>karosszék</i> peremfeltétel mellett	25
4.4. A reflexiós fázistolás kapcsolata az elektron kiralitásával	27
4.5. Vezető graféncső kvantálása gyenge mágneses mezőben	28
4.6. Félvezető graféncső kvantálása gyenge mágneses mezőben	33
4.7. Reflexió-mátrix <i>cikk-cakk</i> peremfeltétel esetében	34
4.8. <i>Cikk-cakk</i> peremű graféncső kvantálása mágneses térben	37
5. Felületi állapotok erős mágneses mezőben	39
5.1. A kígyó-állapotok leírása	39
5.2. A felületi és kígyó-állapotok diszperziójának kapcsolata	40
Összefoglalás	45
Függelék	45
A.1. Folytonos térszimmetria tükröződése a szemiklasszikus hullámfüggvényen	49
A.2. A peremfeltétel-mátrix és az áramoperátor antikommutációs relációja	51
A.3. Felületi állapotok. A peremfeltétel meghatározása	51
Irodalomjegyzék	54
Irodalomjegyzék	54

1. fejezet

Bevezetés a grafén fizikájába

Az előszóban már utaltunk rá, hogy grafénnek a szénatomok hatszögrácsban elrendezett rendszerét nevezzük (1.1. ábra). A kristályrács Bravais-cellája háromszög szimmetriát mutat, minden cellában két bázisatommal (A és B atomok). A kristályrács elemi rácsvektorait választhatjuk az alábbi alakban:



1.1. ábra. Bal: a grafén kristályszerkezete, mely két független alrác (A és B atomokból álló) együtteseként fogható fel. Jobb: a megfelelő Brillouin zóna \mathbf{b}_1 és \mathbf{b}_2 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 $r_{C-C} \approx 1.42\text{\AA}$ a szénatomok közötti távolságot jelöli. A kristályrács reciprokrácsa ugyanolyan szimmetriákkal rendelkezik mint a direkt rács. A reciprokrács elemi rácsvektorai az alábbi összefüggésekkel adottak:

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

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

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

pontokban helyezkednek el. Szorosan kötött elektron modellben (*tight binding* - TB) [20] a három legközelebbi szomszédok figyelembe vételével a grafén Hamilton-operátora betöltési szám reprezentációban az alábbi alakot ölti [9, 8]:

$$\mathbf{H} = -\gamma \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + \text{h.c.}) , \quad (1.4)$$

ahol $a_{i,\sigma}$ ($a_{i,\sigma}^\dagger$) az eltüntető (keltő) operátor, mely egy σ spinű elektronra hat az \mathbf{R}_i rácspont A alrácán. Analóg módon értelmezhető a $b_{j,\sigma}$ ($b_{j,\sigma}^\dagger$) operátor is, mely a B alrácson hat. A képletben továbbá $\gamma > 0$ az ún. *hopping-integrált* jelöli, és h.c. a hermitikus konjugáltat. A grafén sáv szerkezetének számolásához térjünk át reciproktér reprezentációba. N elemi cellát tartalmazó mintában a keltő és eltüntető operátorok:

$$a_{i,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \alpha_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger , \quad a_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \alpha_{\mathbf{k},\sigma} , \quad (1.5)$$

valamint:

$$b_{j,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger , \quad b_{j,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \beta_{\mathbf{k},\sigma} , \quad (1.6)$$

Az $\alpha_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ ($\alpha_{\mathbf{k},\sigma}$) keltő (eltüntető) operátor egy $\hbar\mathbf{k}$ impulzusú és σ spinű állapotot kelt (tünet el). Hasonlóan értelmezhetőek a $\beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \beta_{\mathbf{k},\sigma}$ operátorok. Impulzustérben a Hamilton-operátor az alábbi alakot ölti:

$$\mathbf{H} = -\gamma \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[\left(\sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}\mathbf{s}_j} \right) \alpha_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{k},\sigma} + \text{h.c.} \right] , \quad (1.7)$$

ahol \mathbf{s}_j a $j = 1, 2, 3$ szomszédos atomokat tartalmazó elemi cellák rácsvektorait jelentik:

$$\mathbf{s}_1 = -\mathbf{a}_1 , \quad \mathbf{s}_2 = -\mathbf{a}_2 , \quad \mathbf{s}_3 = \mathbf{0} . \quad (1.8)$$

Ezekkel a rácsvektorokkal:

$$f(\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}\mathbf{s}_j} = 1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} . \quad (1.9)$$

Az (1.7) Hamilton-operátor az alábbi kanonikus traszformációval diagonalizálható:

$$\begin{aligned} e_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_A(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + C_B(\mathbf{k}) \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger) , \\ h_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_A(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger - C_B(\mathbf{k}) \beta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger) . \end{aligned} \quad (1.10)$$

A $|C_A(\mathbf{k})| = 1$ és $|C_B(\mathbf{k})| = 1$ együtthatók az alábbi mátrixegyenletet elégítik ki:

$$-\gamma \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k})^* \\ f(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{k}) \\ C_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{k}) \\ C_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} , \quad (1.11)$$

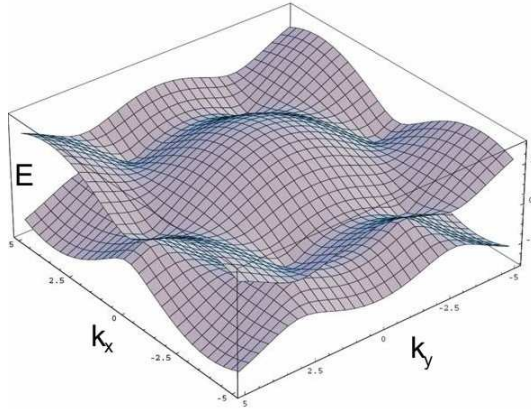
ahol az energiasajátértékek:

$$E_{\mathbf{k}} = \gamma |f(\mathbf{k})| = \gamma \sqrt{3 + 2 \cos \mathbf{k} \mathbf{a}_1 + 2 \cos \mathbf{k} \mathbf{a}_2 + 2 \cos \mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)} . \quad (1.12)$$

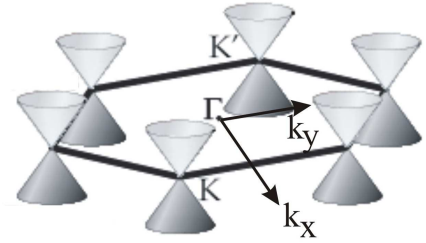
A diagonalizált Hamilton-operátor:

$$\mathbf{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(E_{\mathbf{k}}^+ e_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger e_{\mathbf{k}, \sigma} + E_{\mathbf{k}}^- h_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger h_{\mathbf{k}, \sigma} \right) , \quad \text{ahol: } E_{\mathbf{k}}^\pm = \pm E_{\mathbf{k}} . \quad (1.13)$$

Az $E_{\mathbf{k}}^\pm$ spektrumot az 1.2. ábra szemlélteti. A spektrum szimmetrikus az $E = 0$ síkmetszetre: a



(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 elsőszomszéd kölcsönhatásokkal.

Hamilton-operátor (1.13) alakjából leolvasható, hogy az $e_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$ operátor a vezetési sávban kelt egy $E_{\mathbf{k}}$ energiájú állapotot, a $h_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$ operátor pedig a valenciasávban kelt egy $-E_{\mathbf{k}}$ energiájú állapotot. Ha figyelembe vennénk másodszomszéd kölcsönhatásokat is a modellben, ez a szimmetria elromlana, azonban a soron következő állítások nem vesztenék érvényüket [8]. A spektrum a Dirac-pontok környékén kúpszerű geometriát mutat. Sorbafejtve az (1.12) diszperziós relációt a K pont környékén:

$$E_{\mathbf{q}}^\pm \approx \pm v_F \hbar |\mathbf{q}| + O\left(\left(\frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{K}|}\right)^2\right) , \quad (1.14)$$

ahol $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$, v_F pedig a Fermi-sebesség [26]:

$$v_F = \frac{3\gamma r_{C-C}}{2\hbar} , \quad v_F \sim 10^6 \text{ ms}^{-1} . \quad (1.15)$$

A K' pont környékén sorbafejtve 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 disperziójú kvázirészecskéket formálisan egy Dirac-féle Hamilton-operátorral lehet leírni [9, 8]:

$$\hat{H}_\sigma = v_F \sigma \hat{p}, \quad (1.16)$$

ahol $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$ a Pauli-mátrixokat jelöli. A K' pont elemi gerjesztéseit ún. *valley isotrop* reprezentációban ugyanez a Hamilton-operátor írja le. A fenti állítást az 1.1. szakaszban bizonyítjuk pontosítva a valley isotrop reprezentáció fogalmát is. Az elméleti megfontolásokat mérési eredmények is alátámasztották [6]. Ezek a mérések többnyire az energiafüggő ciklotron-tömeget vizsgálták [8]. Végtelen kiterjedésű grafén mintában, amennyiben nincs átszórás a Dirac-kúpok között, a két független Dirac-pont kétszeres degenerációt okoz az elemi gerjesztések spektrumában. Véges minta esetében a peremek átszórásokat okoznak a Dirac-pontok között [15, 16], ezért a független Dirac-pontok modellje nem alkalmazható.

A grafén elektronszerű és lyukszerű gerjesztései hasonló töltéskonjugációs szimmetriatulajdonságokat mutatnak, mint ahogy azt megszoktuk a kvatumelektrodinamikában [21]. A grafén esetében ez a szimmetria a két alrácsból álló rács szimmetriatulajdonságainak következménye, mivel a grafén elektronjának hullámfüggvényét kétkomponensű vektorok segítségével lehet megadni. 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 *pszeudospinnek* nevezik. A pszeudospin-vektor irányát az elektron kiralitásának nevezzük.

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 pszeudospin-vektora, mely irány egybeesik elektron esetében az impulzus irányával, lyuk esetében pedig vele épp ellentétes irányú. Az analógia a térelméletekkel váratlan fordulatot vesz amikor figyelembe vesszük, hogy a grafén síkja valójában nem teljesen lapos. A szénatomok mindig véges görbületű felületrészekben helyezkednek el. Ez az effektus többek között a *Mermin-Wagner-tétel* [22] következményeként értelmezhető. Köztudott, hogy harmonikus közelítésben a kétdimenziós rendszerekben nem alakulhat ki hosszútávú rend [23]. A felület görbületi torzulása a helyzetet nagy mértékben befolyásolja és megakadályozza a kristályrács felbomlását.

1.1. Burkolófüggvény-közelítés: Dirac-féle Hamilton-operátor

Az előző szakaszban említettük, hogy kontinuum modellben az elemi gerjesztéseket a K és K' Dirac-kúpokban egy Dirac-féle Hamilton-operátorral lehet leírni ((1.16) egyenlet). A továbbiakban az effektív Hamilton-operátor közelítéssel kapott Hamilton-operátor levezetését ismertetjük. Módosított levezetés megtalálható DiVincenzo és Mele [24], Ando és munkatársainak [25], Neto és munkatársainak cikkeiben [8], illetve Cserti József MTA doktori értekezésében [26]. Az állítás bizonyításához térjünk át koordináta reprezentációba! Ehhez vegyük az (1.11)

egyenlet Fourier-transzformáltját:

$$\begin{aligned} E\Psi_A(\mathbf{r}) &= -\gamma \sum_{s_i} \Psi_B(\mathbf{r} + s_i) = -\gamma \left(\Psi_B(\mathbf{r}) + \Psi_B(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1) + \Psi_B(\mathbf{r} - \mathbf{a}_2) \right), \\ E\Psi_B(\mathbf{r}) &= -\gamma \sum_{s_i} \Psi_A(\mathbf{r} - s_i) = -\gamma \left(\Psi_A(\mathbf{r}) + \Psi_A(\mathbf{r} + \mathbf{a}_1) + \Psi_A(\mathbf{r} + \mathbf{a}_2) \right). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Az egyenletekben bevezettük a $\Psi_A(\mathbf{r})$ és $\Psi_B(\mathbf{r})$ hullámfüggvényeket az A és B atomokon:

$$\Psi_A(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} C_A(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \Psi_B(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} C_B(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (1.18)$$

Legyenek a $\mathbf{k} = \mathbf{K}$ és $\mathbf{k} = \mathbf{K}'$ hullámszámokhoz tartozó Bloch-függvények rendre $\Psi_K(\mathbf{r})$ és $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$. Ezekre fennáll:

$$\begin{aligned} \Psi_K(\mathbf{r} \pm \mathbf{a}_i) &= e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{a}_i} \Psi_K(\mathbf{r}), \\ \Psi_{K'}(\mathbf{r} \pm \mathbf{a}_i) &= e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{a}_i} \Psi_{K'}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.19)$$

Az $E = 0$ Fermi-energia közelében az (1.17) egyenletben adott $\Psi_A(\mathbf{r})$ és $\Psi_B(\mathbf{r})$ hullámfüggvények felírhatók $\Psi_K(\mathbf{r})$ és $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$ bázisában:

$$\begin{aligned} \Psi_A(\mathbf{r}) &= \Psi_1(\mathbf{r})\Psi_K(\mathbf{r}) - \Psi_4(\mathbf{r})\Psi_{K'}(\mathbf{r}), \\ \Psi_B(\mathbf{r}) &= i\Psi_2(\mathbf{r})\Psi_K(\mathbf{r}) - i\Psi_3(\mathbf{r})\Psi_{K'}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.20)$$

ahol a $\Psi_1(\mathbf{r})$, $\Psi_2(\mathbf{r})$, $\Psi_3(\mathbf{r})$ és $\Psi_4(\mathbf{r})$ amplitúdókról feltesszük, hogy lassan változnak a grafén rácsállandójához képest. Az együtthatók fenti megválasztását, mely a későbbi számolások során válik jelentőssé, *valley isotrop* reprezentációnak nevezzük. Ezeket az amplitúdókat burkoló függvényeknek (*envelope functions*) nevezik. Mivel az amplitúdók a helynek lassan változó függvényei, sorbafejthetjük őket:

$$\Psi_i(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}) = \Psi_i(\mathbf{r}) + \Delta\mathbf{r} \frac{\partial \Psi_i(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}. \quad (1.21)$$

Beírva ezt a sorfejtést az (1.17) egyenletbe a következőt kapjuk:

$$E \left(\Psi_1(\mathbf{r})\Psi_K(\mathbf{r}) - \Psi_4(\mathbf{r})\Psi_{K'}(\mathbf{r}) \right) = -\gamma \left(\mathbf{g}(\mathbf{K}) i \frac{\partial \Psi_2(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \Psi_K(\mathbf{r}) - \mathbf{g}(\mathbf{K}') i \frac{\partial \Psi_3(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \Psi_{K'}(\mathbf{r}) \right), \quad (1.22)$$

$$E \left(i\Psi_2(\mathbf{r})\Psi_K(\mathbf{r}) - i\Psi_3(\mathbf{r})\Psi_{K'}(\mathbf{r}) \right) = \gamma \left(\mathbf{g}(-\mathbf{K}) \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \Psi_K(\mathbf{r}) - \mathbf{g}(-\mathbf{K}') \frac{\partial \Psi_4(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \Psi_{K'}(\mathbf{r}) \right), \quad (1.23)$$

ahol:

$$\mathbf{g}(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^3 \mathbf{s}_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{s}_i}, \quad (1.24)$$

és \mathbf{s}_i az $i = 1, 2, 3$ szomszédos atomokat tartalmazó elemi cellák rácsvektorait jelentik. Az egyenletek felírásánál felhasználtuk az

$$\sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{K}\mathbf{s}_i} = 0, \quad \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{K}'\mathbf{s}_i} = 0 \quad (1.25)$$

egyenlőségeket is. Az (1.22) és (1.23) egyenletekben összehasonlítva a $\Psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ és $\Psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$ bázisfüggvények együtthatóit, a $\Psi_i(\mathbf{r})$ amplitúdókra az alábbi megkötéseket kapjuk:

$$E\Psi_1(\mathbf{r}) = -i\gamma\mathbf{g}(\mathbf{K})\frac{\partial\Psi_2(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}, \quad (1.26)$$

$$E\Psi_2(\mathbf{r}) = -i\gamma\mathbf{g}(-\mathbf{K})\frac{\partial\Psi_1(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}, \quad (1.27)$$

$$E\Psi_3(\mathbf{r}) = -i\gamma\mathbf{g}(-\mathbf{K}')\frac{\partial\Psi_4(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}, \quad (1.28)$$

$$E\Psi_4(\mathbf{r}) = -i\mathbf{g}(\mathbf{K}')\frac{\partial\Psi_3(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}. \quad (1.29)$$

Könnyű megmutatni, hogy az (1.1) egyenlettel definiált \mathbf{a}_1 és \mathbf{a}_2 rácsvektorokkal:

$$\mathbf{g}(\pm\mathbf{K}) = \frac{3}{2}r_{C-C}\begin{pmatrix} 1 \\ \mp i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}(\pm\mathbf{K}') = \frac{3}{2}r_{C-C}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

Bevezetve a $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ és $\hat{p}_y = -i\hbar\partial_y$ impulzus-operátorokat, és felhasználva a Fermi-sebesség (1.15) definícióját a fenti négy egyenlet mátrix alakba írható:

$$E\begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \\ \Psi_3(\mathbf{r}) \\ \Psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = v_F\begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y & 0 & 0 \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ 0 & 0 & \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \\ \Psi_3(\mathbf{r}) \\ \Psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

A jobb oldalon a mátrix blokk-diagonális szerkezetű, a $\Psi_1(\mathbf{r})$ és $\Psi_2(\mathbf{r})$ amplitúdók a \mathbf{K} pontnak, míg a $\Psi_3(\mathbf{r})$ és $\Psi_4(\mathbf{r})$ amplitúdók a \mathbf{K}' pontnak felelnek meg. A két Dirac-ponthoz rendelt amplitúdók egymástól független blokkokat alkotnak. Ezt a szabadsági fokot nevezzük *izospinnek*, a szabadsági fokhoz tartozó teret pedig *izospin-térnek*. Az (1.31) sajátértékegyenlet tömörebben írható a pszeudospin-téren ható (lásd a pszeudospin (1.16) egyenlet alatti definícióját) σ_0 , $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ és az izospin-téren ható τ_0 , $\boldsymbol{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ egység- és Pauli-mátrixok segítségével:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (1.32)$$

ahol:

$$\hat{H} = \tau_0 \otimes \hat{H}_\sigma, \quad \hat{H}_\sigma = v_F\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}}. \quad (1.33)$$

a Hamilton-operátor, és

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \\ \Psi_3(\mathbf{r}) \\ \Psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

az ún. *Dirac-spinor*. A \hat{H}_σ Hamilton-operátor hasonlít a kétdimenziós elektron relativisztikus Dirac-féle Hamilton-operátorához. Ezért hívják a Brillouin-zóna csúcsait Dirac-pontoknak, és a diszperziós relációt a Dirac-pontok közelében Dirac-kúpoknak. Megmutatható, hogy mágneses térben alkalmazva az ún. *Peierls-transzformációt* [27] az (1.17) TB egyenletek hopping tagján, a fentiekben bevezetett Dirac-féle Hamilton-operátor a szokásos módon transzformálódik:

$$\hat{H} = \tau_0 \otimes \hat{H}_\sigma, \quad \hat{H}_\sigma = v_F\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}), \quad (1.35)$$

ahol $e < 0$ az elektron töltését, \mathbf{A} pedig a vektorpotenciált jelöli.

1.2. Az izospin

Az előző szakaszban bevezettük az izospin-teret (\mathbb{I}), mint a direktszorzat Hilbert-tér egyik tényezőjét. Az izospin-térben választhatunk két bázist, melyekkel a Dirac-kúpok súlyának bármilyen aránya előállítható a hullámfüggvényekben:

$$\mathbf{i}_0^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}. \quad (1.36)$$

A skaláris szorzás hagyományos formája mellett a skaláris szorzat az $SU(2)$ transzformációk mellett marad invariáns, azaz az izospin hagyományos spinalgebrát követ. Az izospint kapcsolatba hozhatjuk az (1.20) egyenletben szereplő $\Psi_K(\mathbf{r})$ és $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$ bázishullámfüggvényekkel. Ezek a hullámfüggvények közvetlen módon fejezik ki adott \mathbf{r} helyen a Dirac-kúpok súlyát az (1.20) TB hullámfüggvényben, ezért kézenfekvő őket az izospin komponenseinek tekinteni. Ezáltal nagyon szemléletesen értelmezhető izospin fogalomhoz jutunk, és nem veszítünk el semmilyen információt a TB leírásmóddhoz képest. Leszögezzük azonban, hogy a $\Psi_K(\mathbf{r})$ és $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$ hullámfüggvényekhez kapcsolódó izospinokat nem alkalmazzuk az (1.34) Dirac-spinor felírásához, csupán a szemlélet kedvéért vezetjük be őket. Szemiklasszikus értelmezésben az

$$\mathbf{i}_{K,K'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Psi_K(\mathbf{r}) \\ \Psi_{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{i}_{K,K'} \in \mathbb{I} \quad (1.37)$$

izospin időfejlődését az $\mathbf{r}(t)$ trajektória mentén a $\Psi_K(\mathbf{r})$ és $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$ hullámfüggvények írják le. Ez az időfejlődés a burkológörbe változásaihoz képest gyors, ezért nem meglepő, hogy a Dirac-féle Hamilton-operátor definíciójából adódóan nem ad róla számot. A $\Psi_K(\mathbf{r})$ és $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$ függvények könnyen meghatározhatóak a TB egyenletek legegyszerűbb (1.17) esetében, eltekintve bármilyen extra erőhatástól. Az $E^\pm = \pm v_F \hbar |\mathbf{k}|$ energiás független megoldások a K és K' kúpokban:

$$\begin{pmatrix} \Psi_A(\mathbf{r}) \\ \pm \Psi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \\ \pm 1 \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi_K(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \\ \pm 1 \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}. \quad (1.38)$$

$$\begin{pmatrix} \Psi'_A(\mathbf{r}) \\ \pm \Psi'_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \\ \pm 1 \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi_{K'}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \\ \pm 1 \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}}. \quad (1.39)$$

Az egyenletekben a $+$ ($-$) előjel az elektroszerű (lyukszerű) gerjesztésekhez tartozik, az α szög pedig a \mathbf{k} vektor és az x tengely által bezárt szöget jelöli az 1.1. ábra geometriájában. A bázishullámfüggvények definíciójából adódóan:

$$\Psi_K(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}, \quad \Psi_{K'}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}}. \quad (1.40)$$

A kiszámolt függvényekkel az izospin:

$$\mathbf{i}_{K,K'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} \\ e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}} \end{pmatrix}. \quad (1.41)$$

A $\mathbf{K}\mathbf{r}$ és $\mathbf{K}'\mathbf{r}$ fázisok fejlődése során az izospin-vektor elfordul az izospin-tér z tengelye körül. Ezt az állítást könnyen megérthetjük, ha képezzük az $\hat{\mathbf{I}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\tau}$ izospin-operátor várható értékét:

$$\begin{aligned}\langle \hat{I}_x \rangle &= \left\langle \hat{\mathbf{i}}_{K,K'} \left| \frac{\hbar}{2} \tau_x \right| \hat{\mathbf{i}}_{K,K'} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\mathbf{K}\mathbf{r} - \mathbf{K}'\mathbf{r}), \\ \langle \hat{I}_y \rangle &= \left\langle \hat{\mathbf{i}}_{K,K'} \left| \frac{\hbar}{2} \tau_y \right| \hat{\mathbf{i}}_{K,K'} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\mathbf{K}\mathbf{r} - \mathbf{K}'\mathbf{r}), \\ \langle \hat{I}_z \rangle &= \left\langle \hat{\mathbf{i}}_{K,K'} \left| \frac{\hbar}{2} \tau_z \right| \hat{\mathbf{i}}_{K,K'} \right\rangle = 0.\end{aligned}\quad (1.42)$$

A felírt izospin tehát a z tengelyre merőleges, az x tengellyel $(\mathbf{K} - \mathbf{K}')\mathbf{r}$ szöget bezáró izospin-vektort ($\hat{\mathbf{v}} := \frac{2}{\hbar} \langle \hat{\mathbf{I}} \rangle$) ír le:

$$\hat{\mathbf{v}} = \begin{pmatrix} \cos(\mathbf{K}\mathbf{r} - \mathbf{K}'\mathbf{r}) \\ \sin(\mathbf{K}\mathbf{r} - \mathbf{K}'\mathbf{r}) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.43)$$

A $(\mathbf{K} - \mathbf{K}')\mathbf{r}$ szög az 1.1. ábrán bevezetett koordináta-rendszer alapján a propagálás y vetülete mentén fejlődik, mivel a $(\mathbf{K} - \mathbf{K}')$ vektor merőleges az x tengelyre. Az izospin-vektor y irányban 3 Wigner-Zeit cella megtétele után fordul el egy fordulattal, azaz 2π szöggel. Eddig figyelmen kívül hagyott erőhatások (például a minta peremének, vagy egy külső erőternek a hatása) figyelembe vételével az izospin leírása bonyolultabbá válik: cikk-cakk peremű grafén minta esetében például a Dirac-spinort az (1.36) izospin-bázis olyan kombinációja állítja elő, amely a z tengely irányába mutató izospin-vektort eredményez (bővebben a 3. fejezetben). Általában az izospin-vektor állása tetszőleges lehet, és a $\Psi_K(\mathbf{r})$ és $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$ hullámfüggvények alakja is változik.

A további fejezetekben bemutatott számolások és az általánosság érdekében célszerű bevezetni az (1.43) izospin-vektor φ szögét az $\mathbf{r} = 0$ helyen. A $\Psi_K(\mathbf{r})$ és $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$ hullámfüggvények egy fázisfaktorialaival való

$$\Psi_K(\mathbf{r}) \longrightarrow \Psi_K(\mathbf{r})e^{i\frac{\varphi}{2}}, \quad \Psi_{K'}(\mathbf{r}) \longrightarrow \Psi_{K'}(\mathbf{r})e^{-i\frac{\varphi}{2}} \quad (1.44)$$

transzformálása során a $\hat{\mathbf{v}}$ izospin-vektor φ szöggel fordul el az $x - y$ síkban. Ahhoz, hogy az (1.20) TB hullámfüggvény invariáns maradjon az izospin-vektor forgatására, az izospin-tér (1.36) bázisait ellentétes irányban, $-\varphi$ szöggel kell elforgatni a z tengely körül. Kétdimenziós ábrázolásban a forgatás generátora a z irányú izospin-operátor ($\hat{I}_z = \frac{\hbar}{2}\tau_z$). Csoportelméleti ismereteket felhasználva felírhatjuk a forgatás operátorát:

$$\hat{F}(\varphi) = \text{Exp} \left(-i\varphi \frac{\hat{I}_z}{\hbar} \right). \quad (1.45)$$

A forgatás-operátor mátrix alakja:

$$\hat{F}(\varphi) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}, \quad (1.46)$$

az elforgatott izospin-bázisok pedig:

$$\mathbf{i}_\varphi^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \pm e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}. \quad (1.47)$$

Az elforgatott izospin-térrel együtt az (1.35) Hamilton-operátor, és a hozzá tartozó Hilbert-tér is transzformálódik. Az izospin-térben a z tengely körüli forgatások szimmetria-csoportját alkotják az (1.35) Hamilton-operátornak, hiszen teljesül az alábbi kommutációs reláció:

$$\left[\left(\hat{F}(\varphi) \otimes \sigma_0 \right), \hat{H} \right] = 0. \quad (1.48)$$

Ebből az következik, hogy az izospin-tér elforgatása nem változtatja meg az (1.35) Hamilton-operátor alakját. Az elforgatott Hilbert-térben az (1.34) Dirac-spinor az alábbi alakot ölti:

$$\Psi_\varphi = \left(\hat{F}(\varphi) \otimes \sigma_0 \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} \end{pmatrix}. \quad (1.49)$$

2. fejezet

Kötött állapotok szemiklasszikus kvantálása

Általában a szemiklasszikus közelítéseket a Schrödinger-egyenlet közelítő megoldásai kapcsán vezethetjük be [30, 31]. Az alábbi számolásokban hasonló gondolatmenetet alkalmazunk a Dirac-egyenlet közelítő megoldásaira [18, 19]. Hagyományos megfogalmazásban a számolásaink \hbar^1 rendig terjednek ki. A számolások során egyelőre feltesszük, hogy a grafén minta végtelen kiterjedésű. Ez a feltevés jelentősen egyszerűsíti a problémát, hiszen így nem kell foglalkoznunk a peremek okozta átszórásokkal a Dirac-kúpok között [15, 16, 17] és dolgozhatunk független Dirac-kúpok képben. Később az eredményeket kiterjesztjük peremes mintákra. Független Dirac-kúpok képben az (1.35) egyenlettel adott Hamilton-operátort használhatjuk az állapotok leírására:

$$\hat{H}_\sigma = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

ahol $\hat{\pi} = \hat{p} - eA$ és A a vektorpotenciál. A $\hat{H}_\sigma \Psi_\sigma = E \Psi_\sigma$ Schrödinger-egyenlet megoldását az alábbi alakban keressük:

$$\Psi_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{k \geq 0} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^k \mathbf{a}_k(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r})}, \quad (2.2)$$

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

$$e^{-\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r})} (\hat{H}_\sigma - E) e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r})} e^{-\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r})} \Psi_\sigma = 0 \quad (2.3)$$

alakra hozható. Behelyettesítve a hullámfüggvény (2.2) alakját a fenti Schrödinger-egyenletbe az alábbi összefüggést kapjuk:

$$\begin{pmatrix} -E & v_F(\hat{\Pi}_x - i\hat{\Pi}_y) \\ v_F(\hat{\Pi}_x + i\hat{\Pi}_y) & -E \end{pmatrix} \left(\mathbf{a}_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{i} \mathbf{a}_1(\mathbf{r}) + \dots \right) = 0, \quad (2.4)$$

ahol bevezettük a

$$\hat{\Pi}_i = \hat{p}_i + \Pi_i^0, \quad \text{ahol: } \Pi_i^0 = p_i - eA_i(\mathbf{r}), \quad \mathbf{p} = \frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \quad i = x, y \quad (2.5)$$

jelöléseket. A szemiklasszikus közelítések alapelvét tekintve megköveteljük, hogy a fenti egyenlet \hbar minden rendjében teljesüljön [30]. Leválasztva a \hbar^0 rendű tagokat:

$$\begin{pmatrix} -E & v_F(\Pi_x^0 - i\Pi_y^0) \\ v_F(\Pi_x^0 + i\Pi_y^0) & -E \end{pmatrix} \mathbf{a}_0(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.6)$$

A (2.6) egyenletben szereplő mátrix diagonalizálható az alábbi $\mathcal{H}^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ sajátértékekkel és $V^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ sajátvektorokkal:

$$\mathcal{H}^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \pm v_F \sqrt{(\Pi_x^0(\mathbf{r}))^2 + (\Pi_y^0(\mathbf{r}))^2}, \quad (2.7)$$

$$V^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm\tau_1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{ha } E \neq 0, \quad \tau_1 = \frac{v_F(\Pi_x^0 - i\Pi_y^0)}{E} = \frac{1}{v_F} \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_x} - i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_y} \right). \quad (2.8)$$

A (2.6) egyenlet diagonalizált alakja voltaképpen nem más, mint két Hamilton-Jacobi egyenlet:

$$E - \mathcal{H}^\pm \left(\frac{\partial S^\pm(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \mathbf{r} \right) = 0. \quad (2.9)$$

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:

$$\mathbf{a}_0^\pm = \mathcal{A}^\pm(\mathbf{r}) e^{i\gamma^\pm(\mathbf{r})} V^\pm, \quad (2.10)$$

ahol $\mathcal{A}^\pm(\mathbf{r})$ egy valós amplitúdó, $\gamma^\pm(\mathbf{r})$ pedig egy fázis. Ezeket a paramétereket a (2.4) egyenlet \hbar^1 rendű tagja határozza meg. (A továbbiakban az egyszerűség kedvéért eltekintünk a \pm indexek használatától.)

$$\left(\frac{\hbar}{i} \right) \left[\begin{pmatrix} -E & v(\Pi_x^0 - i\Pi_y^0) \\ v(\Pi_x^0 + i\Pi_y^0) & -E \end{pmatrix} \mathbf{a}_1(\mathbf{r}) + \begin{pmatrix} 0 & v(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}) \\ v(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}) & 0 \end{pmatrix} \mathbf{a}_0(\mathbf{r}) \right] = 0. \quad (2.11)$$

Ezt az egyenletet beszorozva balról \mathbf{a}_0^\dagger -tal és felhasználva a (2.6) egyenletet:

$$\mathbf{a}_0^\dagger \begin{pmatrix} 0 & v(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}) \\ v(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}) & 0 \end{pmatrix} \mathbf{a}_0(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.12)$$

Ebbe az egyenletbe behelyettesítve a (2.10) összefüggéssel adott spinoralakot, és megkövetelve az egyenlet valós és imaginárius részének egyidejű eltűnését, az alábbi összefüggésekre jutunk:

$$\frac{d}{dt} \gamma(\mathbf{r}(t)) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial x \partial p_y} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial y \partial p_x} \right), \quad \partial_i \left(\mathcal{A}^2(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) = 0. \quad (2.13)$$

A számolások során felhasználtuk, hogy

$$\frac{d}{dt} \gamma(\mathbf{r}(t)) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_x} \partial_x \gamma(\mathbf{r}) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_y} \partial_y \gamma(\mathbf{r}), \quad (2.14)$$

valamint a Hamilton-egyenleteket:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{d}{dt} \mathbf{r}, \quad -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}} = \frac{d}{dt} \mathbf{p}. \quad (2.15)$$

A (2.13) egyenlettel tehát adottak az amplitúdó- és fázisfaktorok. A klasszikus Hamilton-függvényt, mely meghatározza a klasszikus pályát, a (2.7) 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:

$$\frac{1}{\hbar} \oint_{\Gamma_j} \mathbf{p} \, d\mathbf{r} + \gamma_j = 2\pi \left(n_j + \frac{\mu_j}{4} \right). \quad (2.16)$$

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 a trajektória Γ_j -re vett vetületén az érintett klasszikus fordulópontok számát jelöli. (A klasszikus fordulópontokban a (2.13) 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.

2.1. A γ fázis kapcsolata az elektronok kiralitásával

Az előző fejezetben bevezetett γ fázisnak szemléletes geometriai jelentése van. Átalakítva a (2.13) egyenletet felhasználva a (2.15) Hamilton-egyenleteket:

$$\frac{d}{dt} \gamma(\mathbf{r}(t)) = \frac{1}{2} \left(\nabla_{\mathbf{r}} \times \frac{d}{dt} \mathbf{r} \right)_z. \quad (2.17)$$

Az egyenlet integrálásával:

$$\gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \left(\nabla_{\mathbf{r}} \times \frac{1}{v_F} \frac{d}{dt} \mathbf{r} \right)_z \, dl, \quad (2.18)$$

ahol: $dl = v_F dt$. Az egyenletben szereplő $\frac{1}{v_F} \frac{d}{dt} \mathbf{r}$ vektor a mozgásirányba mutató egységvektorral egyenlő. Vektoralgebrai alapismereteket felhasználva megmutatható, hogy:

$$\gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} d\varphi, \quad (2.19)$$

ahol $d\varphi$ a mozgásirány elfordulási szögét jelöli dl hosszúságú görbeív befutásával. A továbbiakban megmutatjuk, hogy a γ_i fázis a pszeudospin-vektor elfordulásával hozható kapcsolatba a trajektória mentén. A mozgásirány kvantummechanikai operátora:

$$\frac{1}{v_F} \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{r}} = \frac{i}{v_F \hbar} [\hat{H}_{\sigma}, \hat{\mathbf{r}}] = \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.20)$$

ami éppen a pszeudospin-operátorral egyenlő $\hbar/2$ egységekben. A pszeudospin-vektor iránya (mely megegyezik a mozgás irányával) az \mathbf{r} helyen az alábbi skalárszorozattal határozható meg:

$$\hat{\mathbf{n}}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \langle \Psi | \boldsymbol{\sigma} | \Psi \rangle_{\sigma}, \quad (2.21)$$

ahol a skalárszorzat csak a Hilbert-tér pszeudospin részére van értelmezve (azaz nem integrálunk az L_2 tér felett). Megemlítjük még, hogy a γ fázist geometriai jelentése miatt gyakran hozzák kapcsolatba az ún. Berry-fázissal [18]. A Berry-fázis időfejlődése a sajátállapotok adiabatikus változásával hozható kapcsolatba a rendszert szabályozó külső paramétertartomány-beli változások során [32, 33]. Szigorú definícióját tekintve a γ fázis nem azonos a Berry-fázis definíciójával, ennek ellenére kézenfekvő Berry-fázisként értelmezni geometriai jelentése miatt. Mindebből az következik, hogy a Berry-fázis a pszeudospin-vektor elfordulási szögének felével egyezik meg. Mágneses térben kialakuló körpályák esetében például a pszeudospin-vektor elfordulási szöge 2π , így a Berry-fázis $\gamma = \pi$ -nek adódik.

3. fejezet

A peremfeltétel általános alakja

Az eddigiekben végtelen kiterjedésű grafén mintával foglalkoztunk. A peremeken azonban a hullámfüggvények egy megfelelő peremfeltételt elégítenek ki. A peremfeltétel alábbi meghatározását a *Physical Review B* folyóiratban megjelent publikáció [16] mintájára mutatjuk be apró változtatásokkal a gondolatmenetben. A számolások előtt osztályozzuk a különböző típusú peremeket. A minta belsejében lévő atomok három, a peremen lévő atomok viszont csak egy vagy két atomhoz kapcsolódnak. A hiányzó szomszédos atomokat a 3.1. ábrán nyitott karikákkal jelöltük. A TB peremfeltétel megköveteli a hullámfüggvény eltűnését a hiányzó atomokon. Feltesszük hogy a peremen lévő atomok elhelyezkedése N egymást követő hiányzó atom után ismétli önmagát, a perem $\mathbf{T} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$ eltolással fedésbe hozható önmagával (n, m nemnegatív egészek). A továbbiakban feltesszük az általánosság elvesztése nélkül, hogy $n - m = 0 \pmod 3$. A hiányzó szomszédos atomok N száma egy \mathbf{T} perióduson belül lehet tetszőlegesen nagy, de nem lehet kisebb $n + m$ -nél. Ennélfogva a hiányzó kötések N' száma sem lehet kisebb $n + m$ -nél. A továbbiakban a peremet *minimálisnak* nevezzük, ha $N = N' = n + m$. A 3.1.c) ábra pereme minimális ($N = N' = 5$), míg a 3.1.a) és 3.1.b) peremek nem minimálisak (rendre $N = 7, N' = 9$ és $N = 5, N' = 7$). A továbbiakban csupán a minimális peremekkel foglalkozunk. A hiányzó N atom szétbontható N_A darab A típusú és N_B darab B típusú hiányzó atom összegére. A minimális perem n darab eltolásból \mathbf{a}_1 mentén és m darab eltolásból \mathbf{a}_2 áll össze. Ebből adódóan $N_A = n$ és $N_B = m$ adódik. A peremet $n = m$ esetén *karosszék* (*armchair*) típusúnak, minden más esetben pedig *cikk-cakk* (*zigzag*) típusúnak nevezzük.

3.1. A peremfeltétel meghatározása

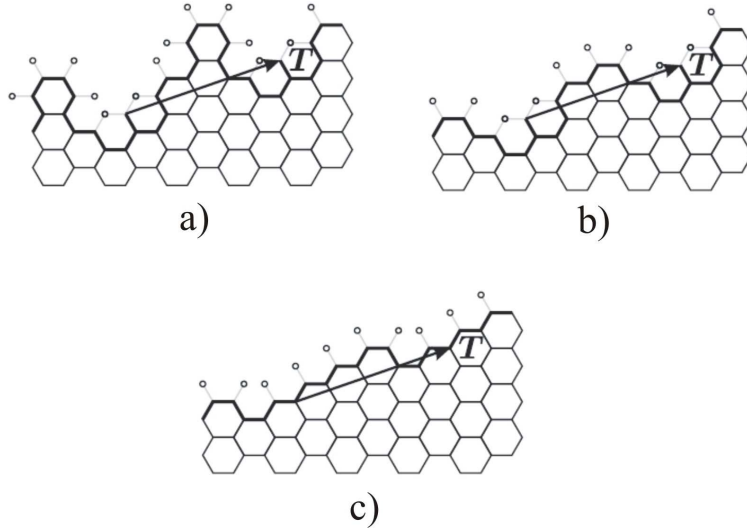
A Ψ hullámfüggvény a peremen (\mathcal{E}) az alábbi peremfeltételt elégíti ki:

$$\hat{M}\Psi = \Psi, \quad (3.1)$$

ahol \hat{M} egy 4×4 mátrix. Az általánosság megsértése nélkül feltesszük, hogy az \hat{M} mátrix nem függ az energiától és az alábbi egyenlőségeket elégíti ki [15, 16]:

$$\hat{M} = \hat{M}^\dagger, \quad \hat{M}^2 = \hat{I}. \quad (3.2)$$

A minta peremén elvárjuk, hogy a peremre merőleges részecskeáram-komponens nulla legyen. A peremfeltétel mátrixát ez a feltétel határozza meg. A részecskeáram-operátor k komponensét



3.1. ábra. A grafén peremének osztályai. A különböző típusok ugyanahoz a \mathbf{T} eltolásvektorhoz tartoznak. Az üres karikák a hiányzó közvetlen szomszédokat jelölik.

az (1.35) Hamilton-operátort felhasználva az alábbi módon határozhatjuk meg:

$$\hat{\mathbf{J}}_k = \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{r}}_k = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}_k] = v_F \tau_0 \otimes \sigma_k . \quad (3.3)$$

Jelölje $\hat{\mathbf{n}}_\mathcal{E}$ a peremre merőleges, a mintából kifelé mutató egységvektort. A peremre merőleges részecskeáram-operátor felírható az alábbi alakban:

$$\hat{\mathbf{J}}_\mathcal{E} = \hat{\mathbf{n}}_\mathcal{E} \hat{\mathbf{J}} = v_F \tau_0 \otimes (\hat{\mathbf{n}}_\mathcal{E} \boldsymbol{\sigma}) . \quad (3.4)$$

Megköveteljük a részecskeáram peremre merőleges komponensének eltűnését:

$$J_\mathcal{E} = \langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}_\mathcal{E} | \Psi \rangle \Big|_\mathcal{E} = 0 . \quad (3.5)$$

Megmutatható, hogy a (3.5) egyenlettel megfogalmazott állítás ekvivalens a peremfeltétel-mátrix és a részecskeáram antikommutációs relációjának alábbi előírásával:

$$\{\hat{M}, \hat{\mathbf{J}}_\mathcal{E}\} = 0 \quad \iff \quad J_\mathcal{E} = 0 . \quad (3.6)$$

Az állítást a függelék A.2. szakaszában bizonyítjuk. A (3.2) egyenletben feltettük hogy az \hat{M} peremfeltétel-mátrix hermitikus. A 4×4 hermitikus mátrixok legáltalánosabb alakja:

$$\hat{M} = \sum_{i,j=0}^3 (\tau_i \otimes \sigma_j) c_{ij} . \quad (3.7)$$

A c_{ij} valós együtthatókra a (3.6) antikommutációs reláció ró ki feltételt. Ehhez először határozzuk meg a peremfeltétel-mátrix antikommutációs relációját a (3.3) részecskeáram-operátor k komponensével:

$$\{\hat{M}, \hat{\mathbf{J}}_k\} = 2 \sum_{i=0}^3 \left[\tau_i \otimes (\hat{I}_2 c_{ik} + \sigma_k c_{i0}) \right] . \quad (3.8)$$

A számolások során felhasználtuk a Pauli-mátrixok jelegzetes tulajdonságát:

$$\sigma_i \sigma_j = \sigma_0 \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k . \quad (3.9)$$

Ezzel felírhatjuk a peremfeltétel-mátrix antikommutációs relációját a (3.4) részecskeáram-operátor felületre merőleges komponensével:

$$\{\hat{M}, \hat{J}_\varepsilon\} = 2 \sum_{i=0}^3 \left\{ [\tau_i \otimes \hat{I}_2] \left(\sum_{j=1}^3 n_\varepsilon^{(j)} c_{ij} \right) + \left[\tau_i \otimes \sum_{j=1}^3 n_\varepsilon^{(j)} \sigma_j \right] c_{i0} \right\} = 0 , \quad (3.10)$$

ahol $n_\varepsilon^{(j)}$ az \hat{n}_ε egységvektor j -dik komponensét jelöli. A fenti egyenlet egymástól lineárisan független elemek lineárkombinációját nullával teszi egyenlővé. Az egyenlőség kizárólag minden együttható egyidejű eltűnésével elégíthető ki:

$$c_{i0} = 0 , \quad \sum_{j=1}^3 n_\varepsilon^{(j)} c_{ij} = 0 , \quad \forall i = 0, 1, 2, 3 . \quad (3.11)$$

Megmutatható, hogy ezekkel a megkötésekkel a peremfeltétel mátrixa kissé hosszadalmas gondolatmenetet követve az alábbi alakban írható fel (\mathbf{n}_i valós háromdimenziós vektorokkal):

$$\hat{M} = \sum_{i,j=0}^3 \tau_i \otimes (\mathbf{n}_i \sigma) , \quad \mathbf{n}_i \perp \mathbf{n}_\varepsilon , \quad \forall i = 0, 1, 2, 3 . \quad (3.12)$$

További megkötéseket kapunk az \mathbf{n}_i vektorokra a (3.2) egyenlet második feltevésével:

$$\hat{M}^2 = \hat{I}_2 \otimes \hat{I}_2 = A + B + C + D , \quad (3.13)$$

ahol:

$$\begin{aligned} A &= \sum_{i,j=1}^3 [\tau_i \tau_j \otimes (\mathbf{n}_i \sigma)(\mathbf{n}_j \sigma)] , & B &= \sum_{i=0}^3 [\tau_i \otimes (\mathbf{n}_i \sigma)(\mathbf{n}_0 \sigma)] , \\ C &= \sum_{j=0}^3 [\tau_j \otimes (\mathbf{n}_0 \sigma)(\mathbf{n}_j \sigma)] , & D &= \hat{I}_2 \otimes (\mathbf{n}_0 \sigma)^2 . \end{aligned} \quad (3.14)$$

A (3.13) feltétel az \mathbf{n}_i vektorok alábbi megválasztása esetén elégíthető ki:

$$\mathbf{n}_i \perp \mathbf{n}_0 \quad \forall i = 1, 2, 3 , \quad \mathbf{n}_0^2 + \sum_{i=1}^3 \mathbf{n}_i = 1 . \quad (3.15)$$

A paramétervektorok ilyen megválasztása mellett: $A = 0$, $B = -C$ és $D = \hat{I}_2 \otimes \hat{I}_2$. Megmutatható, hogy a (3.12) peremfeltétel-mátrix a (3.15) megkötésekkel ekvivalens az alábbi felírással:

$$\hat{M} = \sin \Lambda (\tau_0 \otimes \hat{\mathbf{n}}_1 \sigma) + \cos \Lambda (\hat{\mathbf{v}} \tau \otimes \hat{\mathbf{n}}_2 \sigma) , \quad (3.16)$$

ahol $\hat{\mathbf{n}}_1$, $\hat{\mathbf{n}}_2$ és $\hat{\mathbf{v}}$ egységnyi nagyságú háromdimenziós valós vektorok, melyekre:

$$\hat{\mathbf{n}}_1 \perp \hat{\mathbf{n}}_2 , \quad \hat{\mathbf{n}}_1 \perp \hat{\mathbf{n}}_\varepsilon , \quad \hat{\mathbf{n}}_2 \perp \hat{\mathbf{n}}_\varepsilon . \quad (3.17)$$

A $\hat{\nu}$ vektor az izospin-vektorral azonosítható az 1.2. szakasz értelmezésében. További megszorítások nyerhetők a peremfeltétel-mátrixban szereplő paraméterekre, ha figyelembe vesszük az (1.17) TB egyenletekben az $\Psi_B \rightarrow -\Psi_B$, $E \rightarrow -E$ transzformációval leírható elektron-lyuk transzformációt. Az (1.35) Hamilton-operátorhoz tartozó Hilbert-téren a transzformáció operátora

$$\hat{\Pi} = \tau_z \otimes \sigma_z \quad (3.18)$$

alakban írható. A transzformációt leíró operátor és az (1.35) Hamilton-operátor antikommutálnak egymással:

$$\{\hat{\Pi}, \hat{H}\} = 0. \quad (3.19)$$

A peremfeltétel mátrixának is tükröznie kell ezt a szimmetriát, ezért megköveteljük az alábbi kommutációs reláció teljesülését:

$$[\hat{\Pi}, \hat{M}] = 0. \quad (3.20)$$

A kommutációs reláció érvényességének előírása két jól elkülönülő osztályba sorolható peremfeltétel-mátrixok csoportját eredményezi az alábbi megkötésekkel *cikk-cakk* és *armchair* peremek esetében::

- *cikk-cakk* perem: $\hat{\nu} \parallel \hat{z}$, $\hat{n}_1 \parallel \hat{z}$, $\hat{n}_2 \parallel \hat{z}$, $\Lambda = 0$.
- *karosszék* perem: $\hat{\nu} \perp \hat{z}$, $\hat{n}_1 \parallel \hat{z}$, $\hat{n}_2 \perp \hat{z}$, $\hat{n}_2 \perp \hat{n}_E$.

Megjegyezzük, hogy a (3.20) kommutációs relációból nem következik a két paraméterosztály *cikk-cakk* és *armchair* peremtípusokhoz való csatolása. A függelék A.3. szakaszában bizonyítjuk, hogy a peremtípusokat mégis a felírt kiosztásban rendelhetjük hozzá a paraméterosztályokhoz. Figyelembe véve az új megszorításokat a paramétervektorokra, a peremfeltétel mátrixa az alábbi alakban írható:

$$\hat{M} = \sin \Lambda (\tau_0 \otimes \sigma_z) + \cos \Lambda (\hat{\nu} \tau \otimes \hat{n} \sigma), \quad (3.21)$$

ahol a paraméterek *cikk-cakk* és *armchair* peremek esetében:

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

Karosszék peremfeltétel esetében a Λ paraméter a rendszer időtükrözési szimmetriától való eltérését jelöli. Az időtükröző operátor $\hat{T} = -(\tau_y \otimes \sigma_y) C$ [7], ahol C a komplex konjugálást jelöli. Amennyiben a rendszer időtükrözési szimmetriát mutat, az állapotoktól is elvárjuk, hogy a peremen időtükrözési szimmetriát mutassanak. Ennek feltétele, hogy az $[\hat{M}, \hat{T}] = 0$ kommutációs reláció érvényes legyen. A feltétel éppen $\Lambda = 0$ értéke mellett teljesül.

4. fejezet

A peremek reflexiójának klasszikus leírása

Az előző két fejezetben ismertettük az elektronok kötött állapotainak szemiklasszikus leírását végtelen grafén mintában, valamint levezettük a véges mintára vonatkozó egzakt peremfeltétel általános alakját. A soron következő számolások segítségével klasszikusan értelmezzük a peremek reflexiójának mechanizmusát, és megadjuk a peremes mintákra kiterjesztett kváziklasszikus kvantálási feltételt. A szemiklasszikus kvantálás eredményeit néhány egyszerű példa segítségével összehasonlítjuk a TB számolásokkal nyert energiaspektrumokkal. A TB spektrumokat Wakabayashi és munkatársainak munkájában [34] ismertetett módszerrel határoztuk meg.

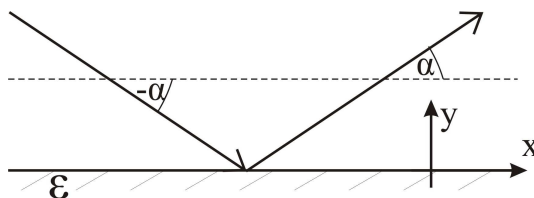
4.1. A reflexió-mátrix

A perem geometria paraméterezése a 4.1. ábrán látható. A soron következő számolások *arm-chair* peremfeltételre érvényesek, *cikk-cakk* perem esetében analóg gondolatmenettel hasonló eredmények kaphatók (lásd a 4.7. szakaszt). A 4.1. ábra koordináta-rendszerében válasszuk a (3.21) egyenletben replő paramétereket az alábbi alakban:

$$\hat{\mathbf{v}} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{n}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

A peremfeltétel mátrixa ekkor:

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \sin \Lambda \sigma_z & \cos \Lambda e^{-i\varphi} \sigma_x \\ \cos \Lambda e^{i\varphi} \sigma_x & \sin \Lambda \sigma_z \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$



4.1. ábra. A perem geometriai paraméterezése. A bejövő síkhullám $-\alpha$ szög alatt esik a határfelületre, a visszaverődő α szög alatt verődik vissza.

A (3.1) peremfeltélt kielégítő hullámfüggvényeket a (4.2) peremfeltétel-mátrix +1 sajátértékű sajátvektoraiból származtathatjuk a görbe mentén. Az állapotok izospinjét célszerű a

$$\mathbf{i}^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \pm e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

bázisban keresni. *Armchair* peremfeltétel mellett ezek éppen a (4.1) $\pm\hat{v}$ izospin-vektorokat leíró bázisok lesznek. Ebben a bázisban a (4.2) peremfeltétel-mátrix +1 sajátértékhez tartozó sajátvektorai:

$$\mathbf{Z}^\pm = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm\varrho \end{pmatrix} \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ \varrho \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad \varrho = \frac{1 - \sin \Lambda}{\cos \Lambda}. \quad (4.4)$$

A teljesség kedvéért felírjuk a -1 sajátértékhez tartozó sajátvektorokat is:

$$\mathbf{U}^\pm = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm\kappa \end{pmatrix} \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ \kappa \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad \kappa = \frac{-1 - \sin \Lambda}{\cos \Lambda}. \quad (4.5)$$

A peremfeltélt kielégítő állapotok a (4.4) sajátvektortól egy fázisfaktor szorzótényezőben különböznek:

$$\Psi^\pm = \eta^\pm \mathbf{Z}^\pm e^{ikx}. \quad (4.6)$$

A peremen felbonthatjuk ezt a hullámfüggvényt egy beeső és egy visszaverődő síkhullám összegére (4.1. ábra):

$$\Psi^\pm = \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} \\ \pm e^{i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} + \frac{\hat{r}^\pm}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} \\ \pm e^{i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \right] e^{ikx}. \quad (4.7)$$

A hullámfüggvény (4.6) és (4.7) alakjainak egyenlőségéből meghatározhatjuk az \hat{r}^\pm reflexiós és η^\pm amplitúdó együtthatókat:

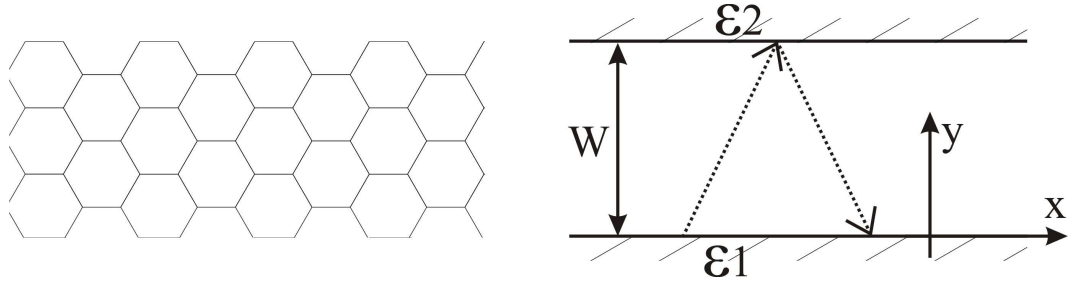
$$\hat{r}^\pm = -\frac{\pm 1 - e^{i\alpha}\varrho}{\pm 1 - e^{-i\alpha}\varrho}, \quad \eta^\pm = \pm \frac{e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}}{\pm 1 - e^{-i\alpha}\varrho}. \quad (4.8)$$

Belátható, hogy a fenti kifejezéssel adott \hat{r}^\pm reflexiós együtthatók egy egységnyi nagyságú komplex számmal egyenlőek, ahogy azt el is várjuk. Ezért felírhatóak az alábbi egyszerűbb alakban:

$$\hat{r}^\pm = \text{Exp}[i(\alpha + \Omega^\pm)], \quad \Omega^\pm = \arg\left(\frac{\varrho \mp e^{-i\alpha}}{\pm 1 - e^{-i\alpha}\varrho}\right), \quad (4.9)$$

ahol $\arg(z)$ a z komplex szám fázisszögét jelöli. Általános esetben tehát a peremen való ütközés során a hullámfüggvény $\Delta\Phi_\varepsilon^\pm = \alpha + \Omega^\pm$ extra fázistolást kap. A fázisugrások a \pm jelöléssel megkülönböztetett

$$\Psi_\varphi^\pm = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} \\ \pm e^{i\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} e^{ikx} \quad (4.10)$$



4.2. ábra. A grafén cső geometriáját.

bejövő állapotokhoz tartoznak. Az \hat{r}^\pm reflexiós együtthatókkal bevezethetjük a reflexiós mátrixot:

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} \hat{r}^+ & 0 \\ 0 & \hat{r}^- \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

ahol az $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ bázisok rendre a \hat{v} és $-\hat{v}$ izospin-vektorú állapothoz tartoznak. A peremfeltételeket is figyelembe vevő kvantálási feltételt (mely a hullámfüggvény egyértékűségét írja elő) a (2.16) kvantálási feltétel kiegészítésével kapjuk meg:

$$\frac{1}{\hbar} \oint_{\Gamma_j} \mathbf{p} \, d\mathbf{r} + \gamma_j + \Delta\Phi_\varepsilon^\pm = 2\pi \left(n_j + \frac{\mu_j}{4} \right), \quad (4.12)$$

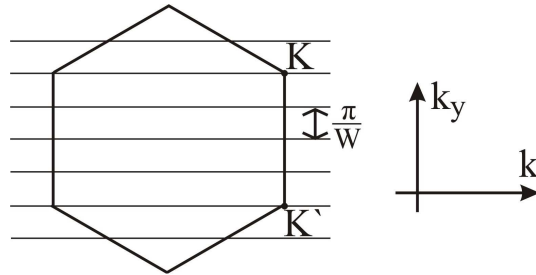
ahol a már bevezetett mennyiségeken kívül $\Delta\Phi_\varepsilon$ a peremek okozta össz fázistolást jelöli. Fontos megjegyezni, hogy ez a fázistolás nem mindig bontható fel az egyes peremek fázistolásainak az összegére, mivel az egyes peremeken különbözhetnek a reflexiós sajátbázisok, így nem társíthatóak külön-külön a peremekhez jól definiált fázistolások, de az össz fázistolás jól definiált (lásd a 4.3 szakaszt). A soron következő két szakaszban egy-egy egyszerű példát mutatunk be a (4.12) kvantálási feltétel alkalmazására.

4.2. Vezető graféncső kvantálása *karosszék* peremfeltétel mellett

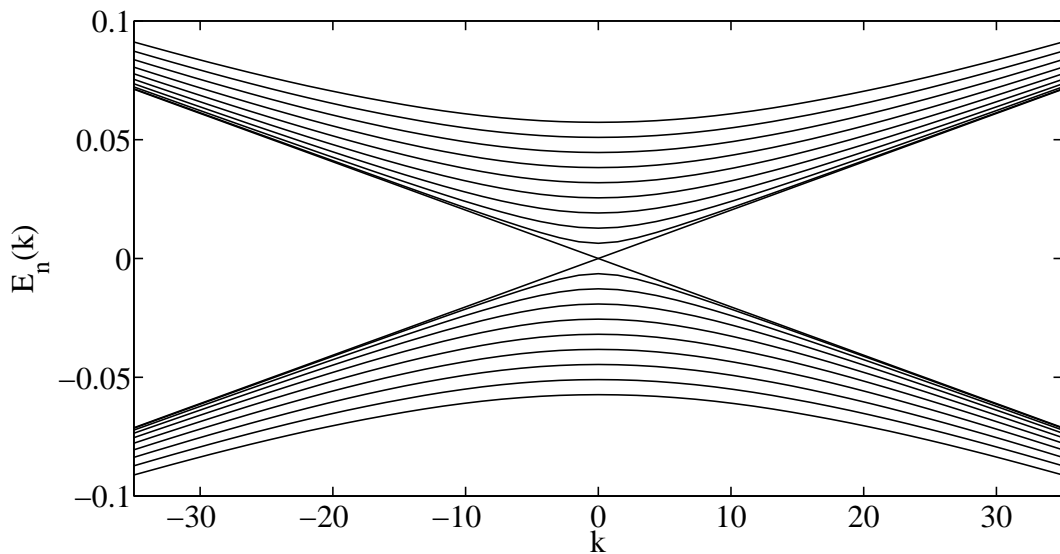
A graféncső geometriáját a 4.2. ábra szemlélteti. A cső spektruma akkor lesz vezetőszerű (azaz nem lesz energiarés a vezető és valenciasáv között), ha a Brillouin-zóna kereszt irányú kvantálása során valamelyik k_y hullámszámvektor-komponens áthalad az egyik *Dirac-ponton* (4.3. ábra). Figyelembe véve, hogy a k_y hullámszámvektor-komponensek $\frac{\pi}{W}$ közönként követik egymást, vezető típusú csőhöz akkor jutunk, ha a cső keresztmetszetében a Wingner-Zeitc cellák száma osztható hárommal. Egy vezető cső tipikus spektrumát a 4.4. ábra szemlélteti. Az egzakt számolások szerint a csőben k hullámszámmal propagáló állapotok energiasajátértékei az alábbi képlettel számolhatók:

$$E_n^\pm(k) = \pm \hbar v_F \sqrt{\left(\frac{n\pi}{W} \right)^2 + k^2}. \quad (4.13)$$

Az $n = 0$ -hoz tartozó spektrumvonalak egyszeresen, míg a többi spektrumvonal kétszeresen degenerált. Az egzakt eredményt szemiklasszikus módszerekkel is megkapjuk, ha behelyettesítjük



4.3. ábra. A Brillouin-zóna kereszt irányú kvantáltsága.



4.4. ábra. Egy keresztirányban 1263 Wingner-Zeitzi cellát tartalmazó vezető típusú cső spektrumának egy része a Dirac-pontok környezetében. Az energiaértékek γ egységekben, a k hullámszámvektor pedig $1/W$ egységekben van feltüntetve. A spektrumvonalak kétszeresen degeneráltak, kivéve melyek a Dirac-pontokban ($E = 0, k = 0$) metszik egymást. TB modellben a degeneráció nem egzakt a cső véges méretéből származó szimmetria-felhasadások következtében.

a (4.12) kvantálási feltételbe az esetünkben kiszámolható mennyiségeket. A hatásintegrált a kanonikus impulzus ($\pm\hbar k_y$) integrálásával kapjuk a cső keresztmetszetében:

$$\frac{1}{\hbar} \oint_{\Gamma_j} \mathbf{p} \, d\mathbf{r} = 2k_y W . \quad (4.14)$$

A γ -fázis trajektória menti járuléka 0-nak adódik, hiszen a trajektória egyenes mentén valósul meg, így a pszeudospin nem fordul el. A Maslov-index szintén $\mu = 0$ -nak adódik, hiszen a rendszerben nincs egy klasszikus fordulópontra sem (a peremeket nem ebbe a kategóriába soroljuk). Végül a peremek extra fázisjárulékát kell meghatároznunk. Mivel a rendszerünk időtükrözési szimmetriát mutat, a peremfeltétel-mátrix (3.21) egyenletében $\Lambda = 0$. Ebből adódóan a reflexiós együtthatókban (lásd a (4.9) és (4.4) egyenleteket) szereplő Ω^\pm fázisok:

$$\Omega^+ = 0 , \quad \Omega^- = \pi . \quad (4.15)$$

A két határfelületen az izospin-vektorok ugyanolyan irányúak, mivel az izospin-vektor $2n\pi$ szöggel fordul el a határfelületek között (lásd az 1.2 szakaszt). Ebben az esetben mindkét határfelületen ugyanaz a sajátbázisa a reflexiomátrixoknak. Ekkor a határfelületek együttes fázistolása szétbontható az egyes peremek fázistolásainak az összegére:

$$\Delta\Phi_{\mathcal{E}}^\pm = (\alpha + \Omega^\pm) + (-\alpha + \Omega^\pm) = 0 \pmod{2\pi} . \quad (4.16)$$

A kvantálási feltétel pedig felhasználva, hogy $E = \pm\hbar v_F \sqrt{k_y^2 + k^2}$:

$$2 \left(\sqrt{\left(\frac{E_n(k)}{\hbar v_F} \right)^2 - k^2} \right) W = 2n\pi . \quad (4.17)$$

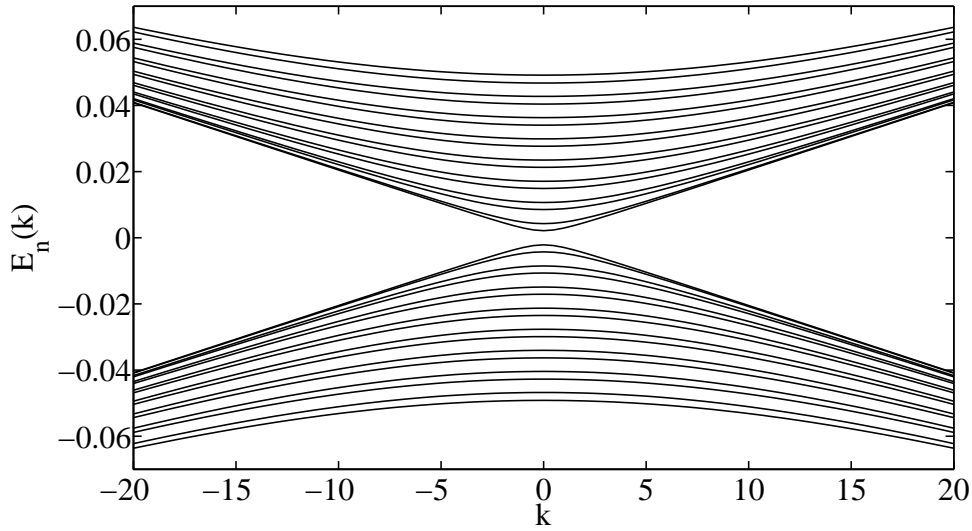
Ebből épp a (4.13) egyenlettel adott spektrumhoz jutunk. A spektrum degenerációja a $\Delta\Phi_{\mathcal{E}}^\pm$ fázis degenerációjából adódik. Így ebben az esetben a szemiklasszikus számolás visszaadja az egzakt energiaszinteket.

4.3. Félvezető graféncső kvantálása *karosszék* peremfeltétel mellett

Félvezető típusú grafén-csőről az előzőeknek megfelelően akkor beszélünk, amikor a cső keresztmetszetében a Wingner-Zeitz cellák száma nem osztható hárommal. Egy félvezető cső tipikus spektrumát a 4.5. ábra szemlélteti. Az egzakt számolások alapján a csőben k hullámszámmal propagáló állapotok energiasajátértékeit az alábbi összefüggéssel számolhatjuk:

$$|E_n^\pm(k)| = \hbar v_F \sqrt{\left(\frac{(n \pm 1/3)\pi}{W} \right)^2 + k^2} . \quad (4.18)$$

Hasonlóan az előző példához, ezt az eredményt is megkaphatjuk szemiklasszikus módszerekkel. Minden számolás a reflexiós együtthatókat leszámítva analóg módon elvégezhető az előző példa



4.5. ábra. Egy keresztirányban 1262 Wingner-Zeitz cellát tartalmazó félvezető típusú cső spektrumának egy része a Dirac-pontok környezetében. Az energiaértékek γ egységekben, a k hullámszámvektor pedig $1/W$ egységekben van feltüntetve. A félvezető jelleg a vezető és valenciasáv közötti energiarésből adódik.

mintájára. Ebben az esetben azonban a határfelületeken az izospin-vektorok $2/3\pi$, vagy $-2/3\pi$ szöveget zárnak be egymással (lásd a 1.2 szakaszt). Az általánosság csorbítása nélkül ez utóbbi szögállástól eltekintünk. Így az $\mathcal{E}1$ határfelületen az izospin bázisok:

$$\mathbf{i}_{\mathcal{E}1}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \pm e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

az $\mathcal{E}2$ határfelületen pedig

$$\mathbf{i}_{\mathcal{E}2}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i(\frac{\varphi}{2} + \frac{1}{3}\pi)} \\ \pm e^{i(\frac{\varphi}{2} + \frac{1}{3}\pi)} \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

A két határfelületen a reflexió-mátrix sajátbázisai nem egyeznek meg. A két izospin bázist a

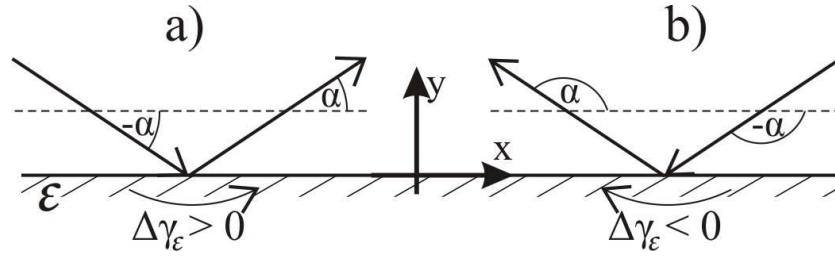
$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\pi}{3} & i \sin \frac{\pi}{3} \\ i \sin \frac{\pi}{3} & \cos \frac{\pi}{3} \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

unitér transzformáció operátora köti össze:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{i}_{\mathcal{E}1}^{+} \\ \mathbf{i}_{\mathcal{E}1}^{-} \end{pmatrix} = \hat{U} \begin{pmatrix} \mathbf{i}_{\mathcal{E}2}^{+} \\ \mathbf{i}_{\mathcal{E}2}^{-} \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

A $\mathcal{E}1$ határfelület sajátbázisában dolgozva a reflexió-mátrix egy periódus után (vagyis egy ütközés a $\mathcal{E}1$ és egy ütközés a $\mathcal{E}2$ peremen):

$$\hat{R}^{(2)} = \hat{U} \hat{R}(-\alpha) \hat{U}^{\dagger} \hat{R}(\alpha). \quad (4.23)$$



4.6. ábra. Visszaverődések a peremről. A mechanikai impulzus peremre merőleges komponense folytonosan, bár a trajektória többi karakterisztikus méretéhez képest nagyon kicsi távolságon előjelet vált, míg a peremmel párhuzamos mechanikai impulzus állandó marad.

A peremek összesített fázistolását az $\hat{R}^{(2)}$ reflexió-mátrix sajátértékei adják (az izospin-vektorok mindkét $\pm 2\pi/3$ relatív szögállása ugyarra az eredményre vezet):

$$r^{\pm(2)} = \text{Exp}(i\Delta\Phi_{\varepsilon}^{\pm}), \quad \text{ahol a fázistolás: } \Delta\Phi_{\varepsilon}^{\pm} = \pm \frac{2}{3}\pi. \quad (4.24)$$

Felhívjuk a figyelmet arra, hogy az egyes peremek fázistolása nem jól határozott, mivel keverik egymás sajátbázisát. A két perem együttes fázistolása ezzel ellentétben egy jól határozott $\Delta\Phi_{\varepsilon}^{\pm}$ fázistolásban nyilvánul meg. Ezzel a fázistolással felírhatjuk a kvantálási feltételt:

$$2 \left(\sqrt{\left(\frac{E_n(k)^{\pm}}{\hbar v_F} \right)^2 - k^2} \right) W \pm \frac{2}{3}\pi = 2n\pi. \quad (4.25)$$

Az egyenletből számolható energiaértékek megegyeznek a (4.18) egzakt eredményekkel.

4.4. A reflexiós fázistolás kapcsolata az elektron kiralitásával

A reflexiós sajátértékek (4.9) alakjából származtatott fázistolások értelmezéséhez először tekintsünk azt az esetet, amikor a rendszer időtükrözési szimmetriát mutat. Ekkor a reflexiós fázistolások (mivel $\Lambda = 0$):

$$\Delta\Phi_{\varepsilon}^{+} = \alpha, \quad \Delta\Phi_{\varepsilon}^{-} = \alpha + \pi. \quad (4.26)$$

A soron következő gondolatmenettel megmutatjuk, hogy az α nagyságú fázistolás az elektronok kiralitásának változásából származtatható. Ehhez tekintsük a 4.6. ábrát, mely a peremről való visszaverődéseket szemlélteti. Mivel a mechanikai impulzus peremre merőleges komponensének pillanatszerű előjelváltásához végtelen nagy erőhatás kellene, természetes azt feltételezni, hogy ez az előjelváltás nem pillanatszerűen, hanem folytonosan történik. A méretskála melyen ez az előjelváltás megtörténik, sokkal kisebb a trajektória minden más karakterisztikus méreténél. A bevezetőben megmutattuk, hogy az elektronszerű állapotok pszeudospin-vektora mindig a mozgás irányába mutat. Ha az elektron mechanikai impulzusa elfordul az impulzustérben, a pszeudospin is elfordul ugyanekkora szöggel, aminek következtében a hullámfüggvény az elfordulás szögének felével megegyező fázistolást kap. A pszeudospin elfordulása a peremen tehát járulékot ad a trajektória lassan változó szakaszaiból származtatott, a (2.14) egyenlettel definiált γ fázishoz.

A 4.6. ábrán két esetet különböztetünk meg: a 4.6. a) ábra olyan ütközést szemléltet amikor $|\alpha| < \frac{\pi}{2}$. Az impulzustérben ekkor az elfordulási szög 2α . A γ fázis járuléka az elfordulási szög felével egyenlő, vagyis épp α . A 4.6. b) ábrán olyan ütközést látunk melynél $|\alpha| > \frac{\pi}{2}$. Az impulzus elfordulási szöge ekkor az előző esethez képest ellentétes irányú, nagysága $2(\alpha - \pi)$. Az elforduláshoz tartozó γ fázis járuléka: $\alpha - \pi$. Mindezt egybevetve a reflexiós fázistolások felírhatók:

$$\Delta\Phi_{\mathcal{E}}^+ = \gamma_{\mathcal{E}} + \Theta\left(-\frac{p_x^M}{|p_x^M|_{\mathcal{E}}}\right)\pi, \quad \Delta\Phi_{\mathcal{E}}^- = \Delta\Phi_{\mathcal{E}}^+ + \pi, \quad (4.27)$$

ahol p_x^M az x irányú mechanikai impulzus, $\Theta(x)$ a Heaviside-féle lépcsőfüggvény, $\gamma_{\mathcal{E}}$ pedig az előjeles γ fázis járuléka a peremeken:

$$\gamma_{\mathcal{E}} = \begin{cases} \alpha & \text{ha } |\alpha| < \frac{\pi}{2} \\ \alpha - \pi & \text{ha } |\alpha| > \frac{\pi}{2} \end{cases}. \quad (4.28)$$

A kvantálási feltétel (4.12) alakját átírhatjuk az alábbi alakra:

$$\frac{1}{\hbar} \oint_{\Gamma_j} \mathbf{p} \, d\mathbf{r} + \gamma_j^{\mathcal{E}} + \Delta\phi^{\pm} = 2\pi\left(n_j + \frac{\mu_j}{4}\right), \quad (4.29)$$

ahol $\Delta\phi^{\pm}$ a (4.27) összefüggésekben az összes, $\gamma_{\mathcal{E}}$ fázison kívüli extra fázisjárulékot jelenti, valamint $\gamma_j^{\mathcal{E}} = \gamma_j + \gamma_{\mathcal{E}}$ az össz γ fázis. A soron következő két példában demonstráljuk a $\gamma^{\mathcal{E}}$ fázis járulékat a kvantálási feltételben.

4.5. Vezető graféncső kvantálása gyenge mágneses mezőben

A 4.2 szakaszban bemutatott *armchair* peremű csőt egy síkjára merőleges, homogén mágneses térbe helyezük. A rendszer x irányú eltolásinvarianciáját őrző vektorpotenciál:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} By \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

Gyenge mágneses térben a hullámfüggvény egyik karakterisztikus távolsága a mágneses hossz:

$$L_B = \sqrt{\frac{\hbar}{|eB|}}, \quad (4.31)$$

ahol $e < 0$ az elektron töltése. A hullámfüggvény egy mágneses hossz nagyságrendű tartományra lokalizálódik, vagyis a mágneses hossz szabályozza a klasszikusan elérhető tartomány nagyságát. Minél nagyobb a mágneses hossz (azaz minél gyengébb a mágneses tér), annál jobban szétfolyik a hullámfüggvény, és a klasszikusan elérhető tartomány annál pontosabban írható le síkhullámokkal. Abban az esetben amikor $L_B \gg r_{C-C}$, lokálisan a rendszer viselkedése csak kicsit fog eltérni az időtükrözésre invariáns nulla mágneses mező esetétől. A (3.21) egyenletben szereplő Λ paraméterről ekkor feltesszük, hogy sokkal kisebb egynél, és elhanyagoljuk. Feltesszük továbbá azt is, hogy az (1.20) TB hullámfüggvényben szereplő $\Psi_K(\mathbf{r})$ és $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$

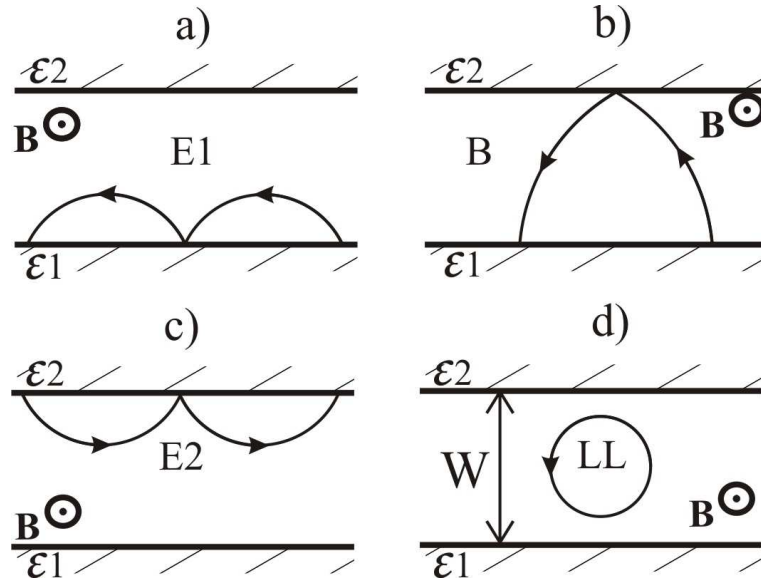
bázishullámfüggvények is csak kicsit térnek el az (1.40) egyenlettel adott alakjuktól. (Ez az izospin-vektor peremek közti elfordulási szöge miatt lényeges.) A későbbiekben majd tárgyaljuk az erősebb mágneses tér esetét is.

A kvantálási feltételt a (2.16) egyenletben szereplő tagok meghatározásával kaphatjuk meg. A felírt (4.30) vektorpotenciált használva felírhatjuk a Hamilton-függvényt:

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = v_F \sqrt{(p_x - eBy)^2 + (p_y)^2}. \quad (4.32)$$

Látható, hogy a Hamilton-függvény x irányú eltolásinvarianciát mutat. Belátható, hogy ebben az esetben a (2.10) egyenletben szereplő γ fázis- és amplitúdó faktor csupán x függvénye lesz, valamint a hatás $S = \int p_y dy + kx$ alakban írható fel. Kvantálási feltételt csupán az x irányú lokalizált mozgásvetülete kapunk, mivel a hullámfüggvény egyértékűsége x 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.1 szakaszában bizonyítjuk.

A hatás és a γ fázisfaktor számolásához először a klasszikus pályát kell meghatároznunk. A



4.7. ábra. A különböző típusú klasszikus pályák homogén mágneses térben.

Hamilton-egyenletek egy E energiájú trajektóriára:

$$\frac{d}{dt}p_y = -\hbar\omega_c \frac{y - Y}{L_B^2}, \quad \frac{d}{dt}p_x = 0, \quad (4.33)$$

$$\frac{d}{dt}y = \frac{(R_c\omega_c)^2}{E} p_y, \quad \frac{d}{dt}x = \frac{(R_c\omega_c)^2}{E} \left(p_x + \text{sgn}(eB)\hbar \frac{y}{L_B^2} \right), \quad (4.34)$$

ahol:

$$R_c = \frac{EL_B^2}{\hbar v_F}, \quad \omega_c = \frac{v_F}{R_c}, \quad Y = -\text{sgn}(eB)kL_B^2, \quad L_B = \sqrt{\frac{\hbar}{|eB|}}, \quad k = \frac{p_x}{\hbar}. \quad (4.35)$$

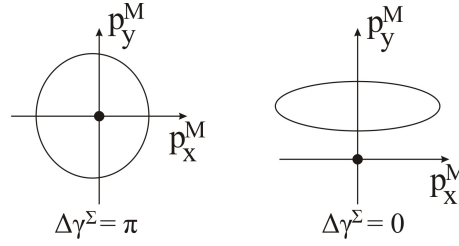
A fenti Hamilton-egyenletek egy körpálya sereget írnak le. A körpályák középpontjának y koordinátája Y , x koordinátája pedig tetszőleges. A körpályák sugara R_c , a mozgás körfrekvenciája pedig ω_c . A kvantálási feltételben szereplő mennyiségek konkrét meghatározásához meg kell különböztetnünk a 4.7. ábrán feltüntetett különböző pályatípusokat, melyeket az választ el egymástól, hogy a körpályák metszik-e valamelyik peremet, vagy nem. Ennek megfelelően a 4 pályatípus:

1. Az $\mathcal{E}1$ peremen pattogó pályák (Edge states 1 - $E1$),
2. A peremek között pattogó pályák (Bouncing states - B),
3. Az $\mathcal{E}2$ peremen pattogó pályák (Edge states 2 - $E2$),
4. Landau nívok. (Landau levels - LL).

A pályatípusokat az alsó (τ_-) és felső (τ_+) fordulópontjaikkal tudjuk jellemezni. Az alábbi táblázatban összefoglaljuk az egyes pályatípusok pályafeltételeit, illetve a kvantálási feltételben szereplő egyéb mennyiségeket, melyeket a továbbiakban részletezünk.

Pálya-típus	Fordulópontok	γ^Σ fázis	Extra fázis $\Delta\phi^\pm \text{ mod } 2\pi$	Maslov-index	$p_x^M(\tau_i)$ impulzus előjele
$E1$	$\tau_- = 0, \tau_+ = Y + R_c$	π	$\Delta\phi^+ = 0, \Delta\phi^- = \pi$	1	$p_x^M(0) > 0$
$E1$	$\tau_- = 0, \tau_+ = Y + R_c$	0	$\Delta\phi^+ = \pi, \Delta\phi^- = 0$	1	$p_x^M(0) < 0$
B	$\tau_- = 0, \tau_+ = W$	0	$\Delta\phi^+ = 0, \Delta\phi^- = 0$	0	$p_x^M(0)/p_x^M(W) > 0$
B	$\tau_- = 0, \tau_+ = W$	π	$\Delta\phi^+ = \pi, \Delta\phi^- = \pi$	0	$p_x^M(0)/p_x^M(W) < 0$
$E2$	$\tau_- = Y - R_c, \tau_+ = W$	0	$\Delta\phi^+ = 0, \Delta\phi^- = \pi$	1	$p_x^M(W) > 0$
$E2$	$\tau_- = Y - R_c, \tau_+ = W$	π	$\Delta\phi^+ = \pi, \Delta\phi^- = 0$	1	$p_x^M(W) < 0$
LL	$\tau_\pm = Y \pm R_c$	π	–	2	–

Az egy ciklusra jutó össz γ^Σ fázist a pseudospin elfordulási szögének a fele adja. Az elfordulási szögbe egyaránt beleszámítjuk a peremek okozta és a trajektória menti elfordulást is. Topológiailag megfogalmazva a γ^Σ fázis akkor különbözik 0-tól, ha az impulzustérben a zárt ciklus körülveszi az origót. A γ^Σ fázis ilyenkor $n\pi$, ahol n azt a számot jelöli, ahányszor a zárt ciklus körülvette az origót. Ha a zárt ciklus nem veszi körül az origót, a γ^Σ fázis zérus lesz. A peremeken való ütközések további extra fázisjárulékát a $p_x^M(y) = \hbar k - eA_x(y)$ mechanikai impulzus előjele határozza meg ((4.27) egyenlet) a peremeken. Ha például a B típusú pályáknál az x irányú impulzusok a peremeken ellentétes irányúak, akkor π az extra fázisjárulék, ha ugyanolyan irányúak, akkor pedig 0 vagy 2π az extra fázisjárulék. (Ez utóbbi helyettesíthető 0-val.) A Maslov-indexet (μ) a klasszikus fordulópontok száma adja meg. A peremeken való ütközés nem tartozik ezek közé, így a Maslov-indexek a felületi állapotok ($E1$, $E2$) és a Landau-nívók



4.8. ábra. A γ^Σ fázis topológikus tulajdonsága: ha az impulzustérben a zárt ciklus körülveszi az origót, akkor a γ^Σ fázis különbözik nullától. Ellenkező esetben a γ^Σ fázis nulla.

(LL) esetében különböznek nullától. A kvantálási feltételhez szükséges még az egy ciklusra vett hatásintegrál meghatározása. Az y tengelyre vetített periodikus mozgás hatásintegrálja:

$$\frac{S}{\hbar} = 2 \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_1}^{\tau_2} |p_y| dy, \quad \frac{p_y}{\hbar} = \frac{1}{L_B^2} \sqrt{R_c^2 - (y - Y)^2}. \quad (4.36)$$

A kör egyenletének definíciójából adódik, hogy a felírt hatásintegrál a pályák által határolt terület fluxusával egyenlő természetes $\hbar/|e|$ egységekben. Elvégezve az integrálást a (4.36) egyenletben:

$$F(\tau) = \frac{1}{L_B^2} \int_{\tau} \sqrt{R_c^2 - (y - Y)^2} dy = \frac{R_c^2}{2L_B^2} \left[\text{asin} \left(\frac{\tau - Y}{R_c} \right) + \frac{\sin \left(2 \text{asin} \left(\frac{\tau - Y}{R_c} \right) \right)}{2} \right]. \quad (4.37)$$

Ezzel az F függvénnyel a hatás könnyen számolható. Végül írjuk fel a kvantálási feltételeket az egyes pályatípusokra:

- **A B típusú pályák kvantálási feltétele:**

$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) = 2n\pi. \quad (4.38)$$

Ezek a pályák kétszeresen degeneráltak mivel a reflexió két független bázisának extra fázisjárulékaira:

$$\Delta\phi^+ = \Delta\phi^- \quad \text{mod } 2\pi.$$

(Ne feledjük el, hogy egy ciklus két ütközést tartalmaz!)

- **Az E_1 és E_2 típusú pályák kvantálási feltétele:**

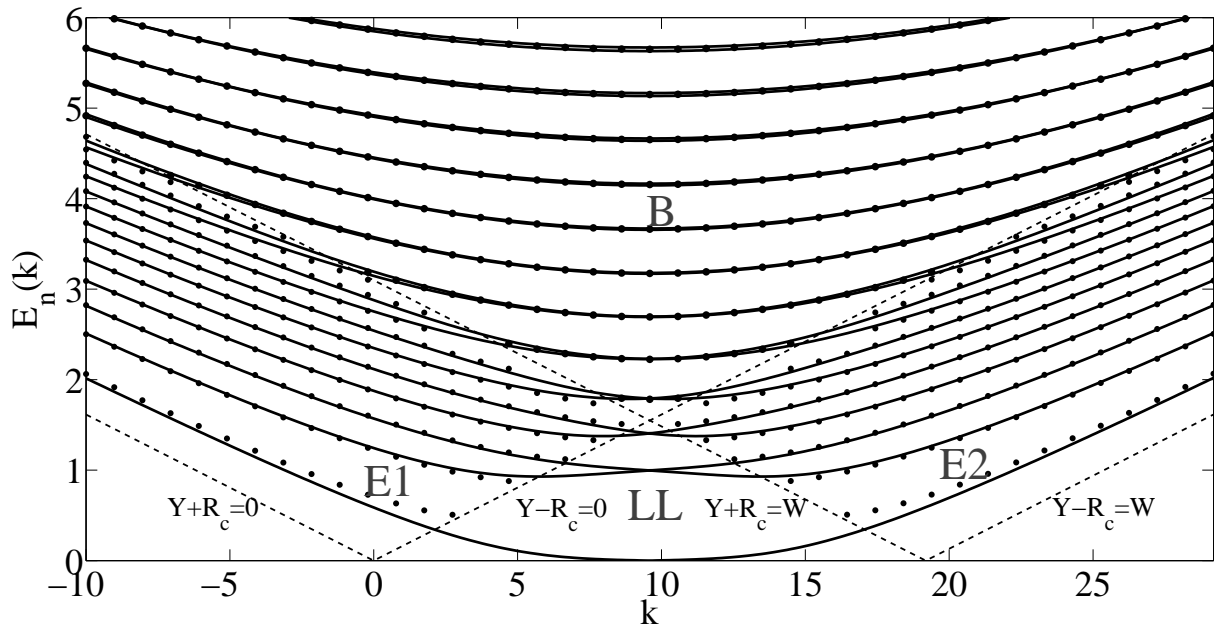
$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) \pm \frac{\pi}{2} = 2n\pi. \quad (4.39)$$

Ez a két kvantálási feltétel helyettesíthető egyel, mely az összes lehetséges esetet magába foglalja:

$$4(F(\tau_+) - F(\tau_-)) - \pi = 2n\pi. \quad (4.40)$$

Az E_n energiasajátértékekhez tartozó i^+ , i^- izospin-vektorok felváltva követik egymást.

- **A Landau-nívók (LL) kvantálási feltétele:**



4.9. ábra. Egy keresztirányban 1263 Wingner-Zeitz cellát tartalmazó vezető típusú cső spektrumának egy része a Dirac-pontok környezetében. A folytonos vonalak a TB eredményeket, a pontok pedig a szemiklasszikus kvantálás energiaértékeit ábrázolják. Az energiaértékek $\hbar\omega_c = \sqrt{2} \frac{\hbar v_F}{L_B}$ egységekben, a k hullámszámvektor pedig $1/W$ egységekben van feltüntetve. A szaggatott vonalak az egyes pályatartományokat választják el egymástól. TB modellben a B pályák degenerációja nem egzakt a cső véges méretéből származó szimmetria-felhasadások következtében. A mágneses tér erősségét szabályozó paraméter értéke $(r_{C-C}/L_B)^2 = 4 \times 10^{-6}$.

$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) = 2n\pi . \quad (4.41)$$

A Landau-nívók kétszeresen degeneráltak. Megjegyezzük, hogy ebből a kvantálási feltételből megkapjuk a Landau-nívók energiasajátértékeinek egzakt alakját [35]. Rövid számolással adódik:

$$F(\tau_+) - F(\tau_-) = \pi \frac{R_c^2}{L_B^2} = \pi \frac{E^2 L_B^2}{\hbar^2 v_F^2} . \quad (4.42)$$

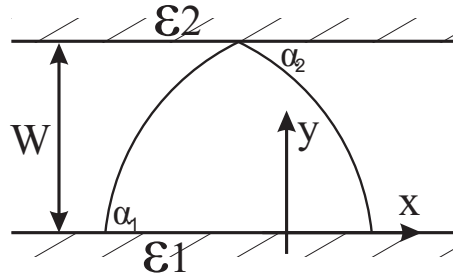
Ezt behelyettesítve a kvantálási feltételbe

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

ami megegyezik a Dirac-féle Hamilton-operátorból számolt energiaértékekkel. A szemiklasszikus eredményeket a 4.9. ábrán hasonlítjuk össze a TB eredményekkel. Az ábra az eredmények nagyon jó egyezését mutatja az $E1$ és $E2$ peremállapotok, valamint a B típusú pályák esetében. A Landau-nívók (LL) szemiklasszikus kvantálásának energiaszintjei megegyeznek az egzakt eredményekkel, így ezeket az állapotokat nem ábráztuk az ábrán.

4.6. Félvezető graféncső kvantálása gyenge mágneses mezőben

A mágneses térbe helyezett félvezető graféncső spektrumának számolásához ötvöznünk kell a 4.3. és 4.5. szakaszban bemutatott számolásokat. Az $E1$, $E2$, és LL pályatípusok esetében nem adódik változás. A B típusú pályák kvantálásához vezessük be az alábbi jelöléseket: legyen α_1 az $\mathcal{E}1$ peremen, α_2 pedig az $\mathcal{E}2$ felületen a reflexió szöge (4.10. ábra). A 4.3. szakaszban vázolt



4.10. ábra. A reflexiók α_1 szöge az $\mathcal{E}1$ peremen és α_2 szöge az $\mathcal{E}2$ felületen.

gondolatmenet alapján, az $\mathcal{E}1$ határfelület sajátbázisában dolgozva a reflexió-mátrix egy periódus után:

$$\hat{R}^{(2)} = \hat{U} \hat{R}(-\alpha_2) \hat{U}^\dagger \hat{R}(\alpha_1) , \quad (4.43)$$

ahol \hat{U} az $\mathcal{E}1$ perem és $\mathcal{E}2$ bázisait összekötő unitér transzformáció operátora ((4.21) egyenlet). A reflexiómátrix sajátértékei megadják a fázistolásokat:

$$r^{\pm(2)} = \text{Exp}(i\Delta\Phi_{\mathcal{E}}^\pm) , \quad (4.44)$$

ahol a fázistolás:

$$\Delta\Phi_{\mathcal{E}}^\pm = \gamma_{\mathcal{E}} + \Delta\phi^\pm , \quad \Delta\phi^\pm = \pm \frac{2}{3}\pi + \Theta\left(-\frac{p_x^M}{|p_x^M|}\Bigg|_{\mathcal{E}1}\right)\pi + \Theta\left(-\frac{p_x^M}{|p_x^M|}\Bigg|_{\mathcal{E}2}\right)\pi . \quad (4.45)$$

Az összefüggésben $\gamma_{\mathcal{E}}$ a peremek járuléka a γ^{Σ} fázishoz. Megjegyezzük hogy ebben az esetben sem bontható fel a peremek fázistolása az egyes peremek fázistolásainak az összegére, mivel ezek a mennyiségek nem vesznek fel határozott értéket a peremek különböző izospin bázisainak keveredése miatt. Ennek alapján az előző szakaszban bemutatott táblázatban szereplő mennyiségek az alábbi értékeket veszik fel:

Pálya-típus	Fordulópontok	γ^{Σ} fázis	Extra fázis $\Delta\phi^{\pm} \bmod 2\pi$	Maslov-index	$p_x^M(\tau_i)$ impulzus előjele
$E1$	$\tau_- = 0, \tau_+ = Y + R_c$	π	$\Delta\phi^+ = 0, \Delta\phi^- = \pi$	1	$p_x^M(0) > 0$
$E1$	$\tau_- = 0, \tau_+ = Y + R_c$	0	$\Delta\phi^+ = \pi, \Delta\phi^- = 0$	1	$p_x^M(0) < 0$
B	$\tau_- = 0, \tau_+ = W$	0	$\Delta\phi^{\pm} = \pm 2/3\pi$	0	$p_x^M(0)/p_x^M(W) > 0$
B	$\tau_- = 0, \tau_+ = W$	π	$\Delta\phi^{\pm} = \pi \pm 2/3\pi$	0	$p_x^M(0)/p_x^M(W) < 0$
$E2$	$\tau_- = Y - R_c, \tau_+ = W$	0	$\Delta\phi^+ = 0, \Delta\phi^- = \pi$	1	$p_x^M(W) > 0$
$E2$	$\tau_- = Y - R_c, \tau_+ = W$	π	$\Delta\phi^+ = \pi, \Delta\phi^- = 0$	1	$p_x^M(W) < 0$
LL	$\tau_{\pm} = Y \pm R_c$	π	-	2	-

A vezető graféncsőhöz képest csak a B típusú pályák kvantálási feltétele változik:

- **A B típusú pályák kvantálási feltétele:**

$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) \pm \frac{2}{3}\pi = 2n\pi . \quad (4.46)$$

Wingner-Zeitzi cellát

- **Az $E1$ és $E2$ típusú pályák kvantálási feltétele:**

$$4(F(\tau_+) - F(\tau_-)) - \pi = 2n\pi . \quad (4.47)$$

Az E_n energiasajátértékekhez tartozó i^+, i^- izospin-vektorok most is felváltva követik egymást.

- **A Landau-nívók (LL) kvantálási feltétele:**

$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) = 2n\pi . \quad (4.48)$$

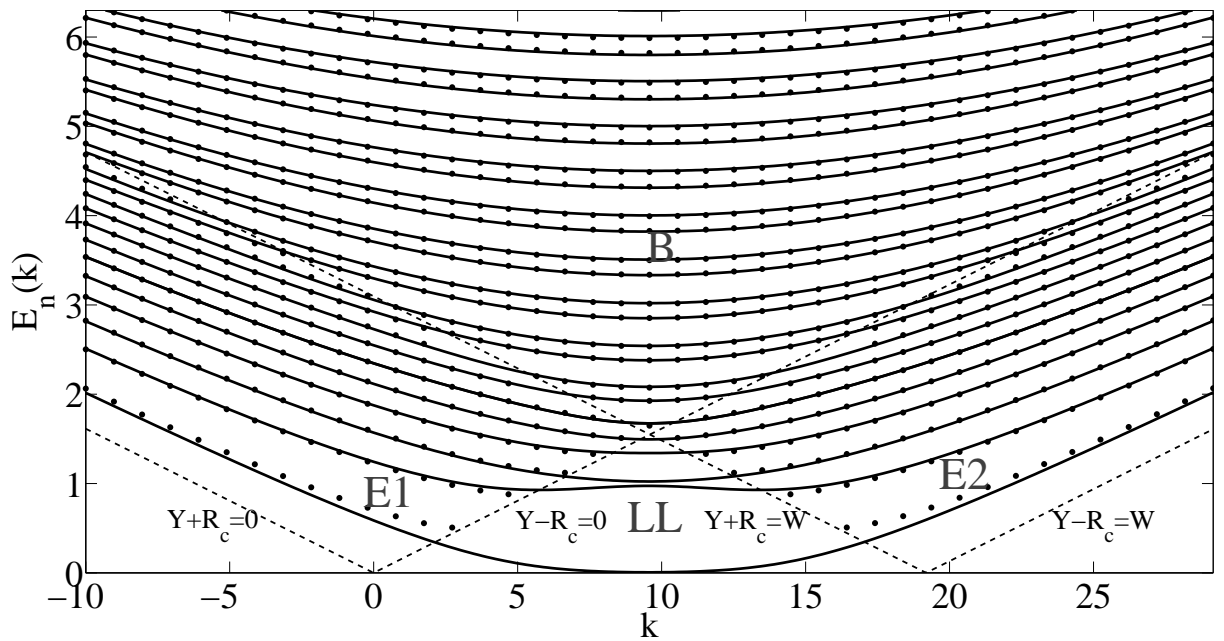
A szemiklasszikus eredményeket a 4.11. ábrán hasonlítjuk össze a TB számolások eredményeivel. Az ábra az eredmények nagyon jó egyezését mutatja az $E1$ és $E2$ peremállapotok, valamint a B típusú pályák esetében. A Landau-nívók (LL) szemiklasszikus kvantálásának energiaszintjei megegyeznek az egzakt eredményekkel, így ezeket az állapotokat nem ábráztuk az ábrán.

4.7. Reflexió-mátrix *cikk-cakk* peremfeltétel esetében

A fejezetben bemutatott reflexió-mátrixot *cikk-cakk* perem esetén is analóg módon meghatározhatjuk. A peremfeltétel-mátrix *cikk-cakk* perem esetében:

$$\hat{M}_C = \xi_{mn}(\tau_z \otimes \sigma_z) , \quad (4.49)$$

ahol: $\xi_{mn} = v_z n_z = \text{sgn}(m - n)$ és n (m) a peremhez már nem csatlakozó A (B) atomok számát jelöli (lásd a peremfeltételek bevezető szakaszát), valamint sgn az előjelfüggvény. A *cikk-cakk*



4.11. ábra. Egy keresztirányban 1262 Wingner-Zeitzi cellát tartalmazó félvezető típusú cső spektrumának egy része a Dirac-pontok környezetében. A folytonos vonalak a TB eredményeket, a pontok pedig a szemiklasszikus kvantálás energiaértékeit ábrázolják. Az energiaértékek $\hbar\omega_c = \sqrt{2} \frac{\hbar v_F}{L_B}$ egységekben, a k hullámszámvektor pedig $1/W$ egységekben van feltüntetve. A szaggatott vonalak az egyes pálytartományokat választják el egymástól. A mágneses tér erősségét szabályozó paraméter értéke $(r_{C-C}/L_B)^2 = 4 \times 10^{-6}$.

típusú perem nem csatolja a Dirac-pontokat, ezért az izospin bázist célszerű az alábbi alakban felvenni (δ a Kronecker-delta függvényt jelöli):

$$\mathbf{i}_C^\pm = \begin{pmatrix} \delta_{1,\pm 1} \\ \delta_{-1,\pm 1} \end{pmatrix}, \quad (4.50)$$

vagyis:

$$\mathbf{i}_C^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{i}_C^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.51)$$

Ebben a bázisban a (4.49) peremfeltétel-mátrix +1 sajátértékhez tartozó sajátvektorai:

$$\mathbf{Z}_C^\pm = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \delta_{1,\pm 1} \begin{pmatrix} 1 + \xi_{mn} \\ 1 - \xi_{mn} \end{pmatrix} \\ \delta_{-1,\pm 1} \begin{pmatrix} 1 - \xi_{mn} \\ 1 + \xi_{mn} \end{pmatrix} \end{pmatrix}. \quad (4.52)$$

A peremfeltételt kielégítő állapotok a (4.52) sajátvektortól egy fázisfaktor szorzótényezőben különböznek:

$$\Psi_C^\pm = \eta_C^\pm \mathbf{Z}_C^\pm e^{ikx}. \quad (4.53)$$

A perem közelében felbonthatjuk ezt a hullámfüggvényt egy beeső és egy visszaverődő síkhullám összegére:

$$\Psi_C^\pm = \mathbf{i}_C^\pm \otimes \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{\hat{r}_C^\pm}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} \right] e^{ikx}. \quad (4.54)$$

A + (-) előjel a \mathbf{i}^+ (\mathbf{i}^-) izospin bázishoz tartozik. A hullámfüggvény (4.53) és (4.54) alakjainak egyenlőségéből meghatározhatjuk az \hat{r}_C^\pm reflexiók és η_C^\pm amplitúdó együtthatókat:

$$\hat{r}_C^\pm = \text{Exp}(i\Delta\Phi_{\mathcal{E},C}^\pm), \quad \eta_C^\pm = i\sqrt{2} \sin \alpha \begin{cases} 1 & \xi_{mn} = \pm 1 \\ -e^{i\alpha} & \xi_{mn} = \mp 1 \end{cases}, \quad (4.55)$$

ahol:

$$\Delta\Phi_{\mathcal{E},C}^\pm = \gamma_{\mathcal{E}} + \Theta \left(\left. \frac{p_x^M}{|p_x^M|} \right|_{\mathcal{E}} \right) \pi \mp \xi_{mn} \alpha. \quad (4.56)$$

A fázis tagok között az első tag az elektron kiralitásának változásához kapcsolható az előző szakaszokban vázolt értelmezésben:

$$\gamma_{\mathcal{E}} = \begin{cases} \alpha & \text{ha } |\alpha| < \frac{\pi}{2} \\ \alpha - \pi & \text{ha } |\alpha| > \frac{\pi}{2} \end{cases}, \quad (4.57)$$

a második tag az ütközés egy extra fázistolása (ezek szerepeltek az *karosszék* peremfeltétel esetében is a (4.27) egyenletben azzal a különbséggel, hogy ebben az esetben a Θ függvény argumentumában nincs negatív előjel), a harmadik tag pedig a peremre merőleges és vele párhuzamos irányú hullámszámvektor-komponensek csatolásából adódik [17, 36]. Ezt a tagot az aktuális peremre jellemző ξ_{mn} értéke határozza meg, míg a $\gamma_{\mathcal{E}}$ fázis a perem típusától független. Az *armchair* típusú peremhez hasonlóan *cikk-cakk* peremhez is hozzárendelhetünk egy reflexiómátrixot:

$$\hat{R}_C = \begin{pmatrix} \hat{r}_C^+ & 0 \\ 0 & \hat{r}_C^- \end{pmatrix}, \quad (4.58)$$

ahol az $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ bázisok rendre a $\hat{\nu} = \pm \hat{z}$ izospin-vektorú állapothoz tartoznak, melyek a független K és K' Dirac-kúpokat írják le.

4.8. Cikk-cakk peremű graféncső kvantálása mágneses térben

Az előző szakaszban meghatározott fázistolásokat egy homogén mágneses térbe helyezett *cikk-cakk* peremű graféncső energiszintjeinek számolásánál demonstráljuk. Jelölje továbbra is α_1 az $\mathcal{E}1$ peremen, α_2 pedig az $\mathcal{E}2$ felületen a beesési szöget. A 4.5. és 4.6. szakaszban vázolt gondolatmenet alapján kitölthetjük szemiklasszikus kvantáláshoz szükséges adatokat tartalmazó táblázatot:

Pálya-típus	Fordulópontok	γ^Σ fázis	Extra fázis $\Delta\phi^\pm \text{ mod } 2\pi$	Maslov- index	$p_x^M(\tau_i)$ impulzus előjele
<i>E1</i>	$\tau_- = 0, \tau_+ = Y + R_c$	π	$\Delta\phi^\pm = \pi \pm \alpha_1$	1	$p_x^M(0) > 0$
<i>E1</i>	$\tau_- = 0, \tau_+ = Y + R_c$	0	$\Delta\phi^\pm = \pm\alpha_1$	1	$p_x^M(0) < 0$
<i>B</i>	$\tau_- = 0, \tau_+ = W$	0	$\Delta\phi^\pm = \pm(\alpha_1 + \alpha_2)$	0	$p_x^M(0)/p_x^M(W) > 0$
<i>B</i>	$\tau_- = 0, \tau_+ = W$	π	$\Delta\phi^\pm = \pi \pm (\alpha_1 + \alpha_2)$	0	$p_x^M(0)/p_x^M(W) < 0$
<i>E2</i>	$\tau_- = Y - R_c, \tau_+ = W$	0	$\Delta\phi^\pm = \pi \pm \alpha_2$	1	$p_x^M(W) > 0$
<i>E2</i>	$\tau_- = Y - R_c, \tau_+ = W$	π	$\Delta\phi^\pm = \pm\alpha_2$	1	$p_x^M(W) < 0$
<i>LL</i>	$\tau_\pm = Y \pm R_c$	π	-	2	-

A *Cikk-cakk* peremű graféncsőben az egyes pályatípusok kvantálási feltétele:

- **A *B* típusú pályák kvantálási feltétele:**

$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) \pm (\alpha_1 + \alpha_2) = 2n\pi . \quad (4.59)$$

- **Az *E1* típusú pályák kvantálási feltétele:**

$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) \pm \alpha_1 - \frac{\pi}{2} = 2n\pi . \quad (4.60)$$

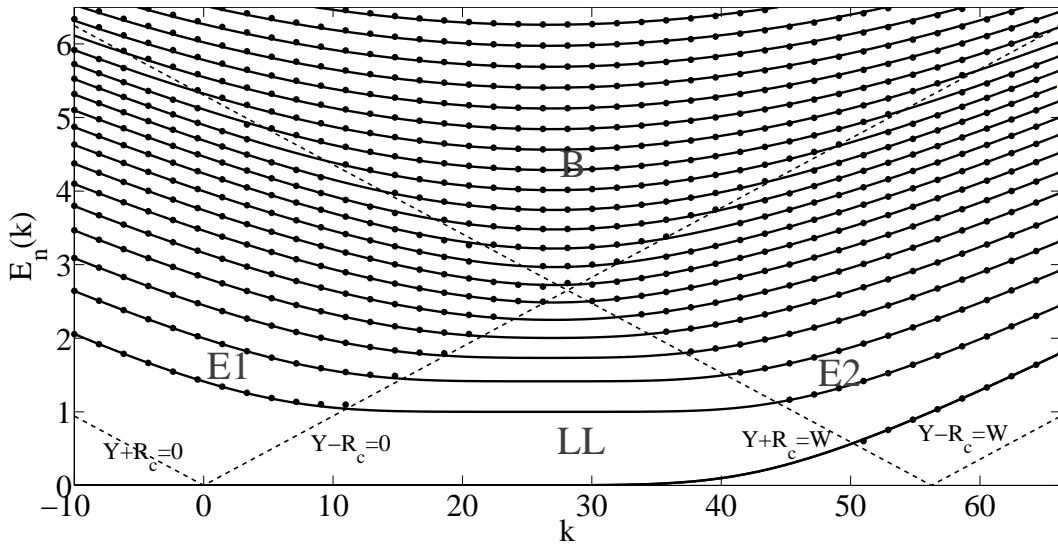
- **Az *E2* típusú pályák kvantálási feltétele:**

$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) \pm \alpha_2 + \frac{\pi}{2} = 2n\pi . \quad (4.61)$$

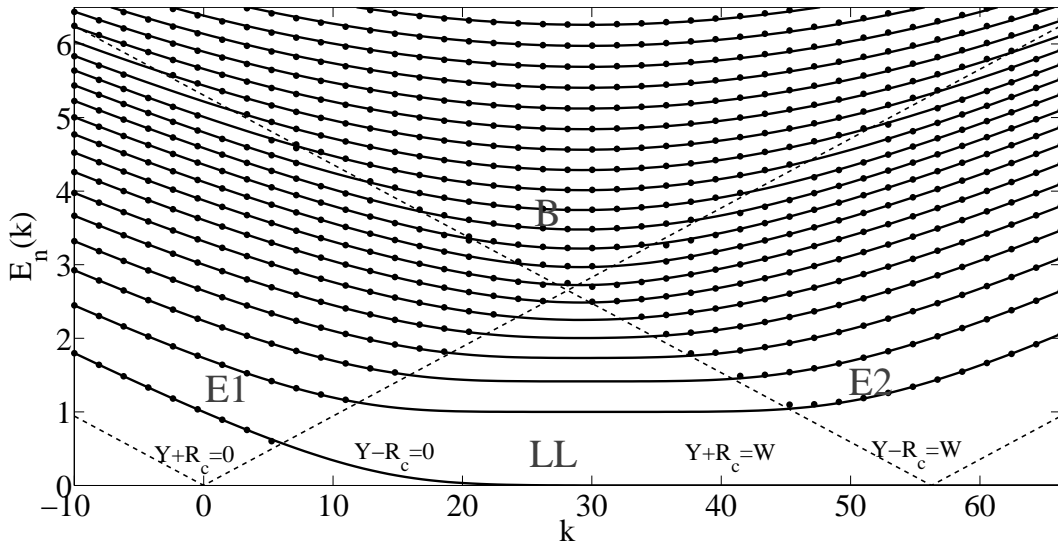
- **A Landau-nívók (*LL*) kvantálási feltétele:**

$$2(F(\tau_+) - F(\tau_-)) = 2n\pi . \quad (4.62)$$

Az egyenletekben a \pm előjelek a K és K' Dirac-kúpokhoz tartoznak a i_C^\pm izospineknek megfelelően. A szemiklasszikus eredményeket a 4.12. és 4.13. ábrán hasonlítjuk össze a TB számolások eredményeivel. Az ábrákon nagyon jó egyezést találunk a két számolás között az *E1* és *E2* peremállapotok, valamint a *B* típusú pályák esetében. A Landau-nívók (*LL*) szemiklasszikus kvantálásának energiszintjei megegyeznek az egzakt eredményekkel, így ezeket az állapotokat nem ábrázoltuk az ábrán.



4.12. ábra. Egy keresztirányban 2500 rácspontot tartalmazó *cikk-cakk* peremű graféncső spektrumának egy része a K Dirac-pont környezetében. A folytonos vonalak a TB eredményeket, a pontok pedig a szemiklasszikus kvantálás energiaértékeit ábrázolják. Az energiaértékek $\hbar\omega_c = \sqrt{2} \frac{\hbar v_F}{L_B}$ egységekben, a k hullámszámvektor pedig $1/W$ egységekben van feltüntetve. A szaggatott vonalak az egyes pálytartományokat választják el egymástól. A mágneses tér erősségét szabályozó paraméter értéke $(r_{C-C}/L_B)^2 = 4 \times 10^{-6}$.



4.13. ábra. Egy keresztirányban 2500 rácspontot tartalmazó *cikk-cakk* peremű graféncső spektrumának egy része a K' Dirac-pont környezetében. A folytonos vonalak a TB eredményeket, a pontok pedig a szemiklasszikus kvantálás energiaértékeit ábrázolják. Az energiaértékek $\hbar\omega_c = \sqrt{2} \frac{\hbar v_F}{L_B}$ egységekben, a k hullámszámvektor pedig $1/W$ egységekben van feltüntetve. A szaggatott vonalak az egyes pálytartományokat választják el egymástól. A mágneses tér erősségét szabályozó paraméter értéke $(r_{C-C}/L_B)^2 = 4 \times 10^{-6}$.

5. fejezet

Felületi állapotok erős mágneses mezőben

Az előző fejezetben *karosszék* perem esetén a (3.21) peremfeltétel olyan tulajdonságait használtuk ki, melyek mágneses mező jelenléte mellett egzaktul nem érvényesek. Ezt a gyenge mágneses mező feltétele tette lehetővé, melynek köszönhetően az eredmények jó egyezést mutattak a TB eredményekkel. Ebben a fejezetben azt vizsgáljuk meg, hogy a peremfeltétel nulla mágneses esetével történő közelítése milyen korlátok között fogadható el. A számolásokat a felületi állapotok ($E1$ és $E2$ pályák) és az ún. kígyó-állapotok diszperziójának hasonlóságára alapozzuk. A kígyó-állapotoknak a mágneses mező előjelváltásának helyére lokalizált állapotokat nevezünk (5.1.ábra). Az ellentétes irányú mágneses mezők kígyó mozgáshoz hasonló klasszikus trajektóriákat eredményeznek. A kígyó-állapotoknak önmagukban is nagyon sok érdekes tulajdonságaik vannak, ezekről [37] cikkünkben és TDK dolgozatomban [38] számolunk be. Tőlünk függetlenül egy kutatócsoport megerősítette eredményeinket [39].

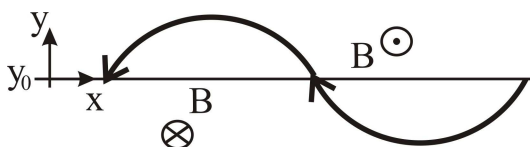
5.1. A kígyó-állapotok leírása

Az 5.1.ábrán bemutatott elrendezésnek megfelelő vektorpotenciál Landau-mértékben az alábbi alakot ölti:

$$\mathbf{A}(y) = \begin{pmatrix} B(|y - y_0|) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

A mágneses mező az $y = y_0$ koordinátában előjelet vált, az elválasztott két félvégteles tartományban pedig homogén. Azaz

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \operatorname{sgn}(y) \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$



5.1. ábra. Kígyó-állapotok. A két elválasztott végtelen tartományban a homogén mágneses mező ellentétes irányú.

A kígyó-állapotokat leíró Hamilton-operátor *valley isotrop* reprezentációban:

$$\hat{H} = \tau_0 \otimes \hat{H}_\sigma, \quad \text{ahol: } \hat{H}_\sigma = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - e\mathbf{A}). \quad (5.3)$$

Az egyenletben a vektorpotenciál az (5.1) egyenlettel adott, τ_i jelöli az izospin-téren ható Pauli-mátrixokat, σ_i pedig a pszeudospin-téren ható Pauli-mátrixokat ($i = 0$ jelöli az egységmatrixot mindkét esetben). Ennek a rendszernek léteznek rejtett szimmetriái, melyek segítséget nyújtanak hullámfüggvények és az illesztési feltétel egyszerűbb felírásában. Jelöljük az $y = y_0$ egyenesre való tükrözés operátorát \hat{T}_{y_0} -val. A tükrözés hatására felcserélődnek a pszeudospin és az ugyan-csak SU(2) algebrát követő izospin leíró hullámfüggvény komponensei:

$$\hat{T}_{y_0} = (\tau_x \otimes \sigma_x) \mathbb{T}_{y_0}, \quad (5.4)$$

ahol \mathbb{T}_{y_0} hatása egy f függvényen: $\mathbb{T}_{y_0} f(y - y_0) = f(y_0 - y)$. Egyszerű számolással ellenőrizhető az alábbi kommutációs reláció teljesülése:

$$[\hat{H}, \hat{T}_{y_0}] = 0. \quad (5.5)$$

A \hat{T}_{y_0} szimmetriaoperátor bázisában (± 1 sajátértékekhez tartozó állapotok) a kígyó-állapotokat leíró hullámfüggvényeket kereshetjük

$$\Psi(x, y) = \begin{cases} \begin{pmatrix} A_K \\ A_{K'} \end{pmatrix} \otimes \Psi_\sigma(x, y), & \text{ha: } y \geq y_0, \\ \hat{T}_{y_0} \begin{pmatrix} A_K \\ A_{K'} \end{pmatrix} \otimes \Psi_\sigma(x, y), & \text{ha: } y < y_0 \end{cases} \quad (5.6)$$

alakban, ahol

$$\hat{H}_\sigma \Psi_\sigma(x, y) = E \Psi_\sigma(x, y). \quad (5.7)$$

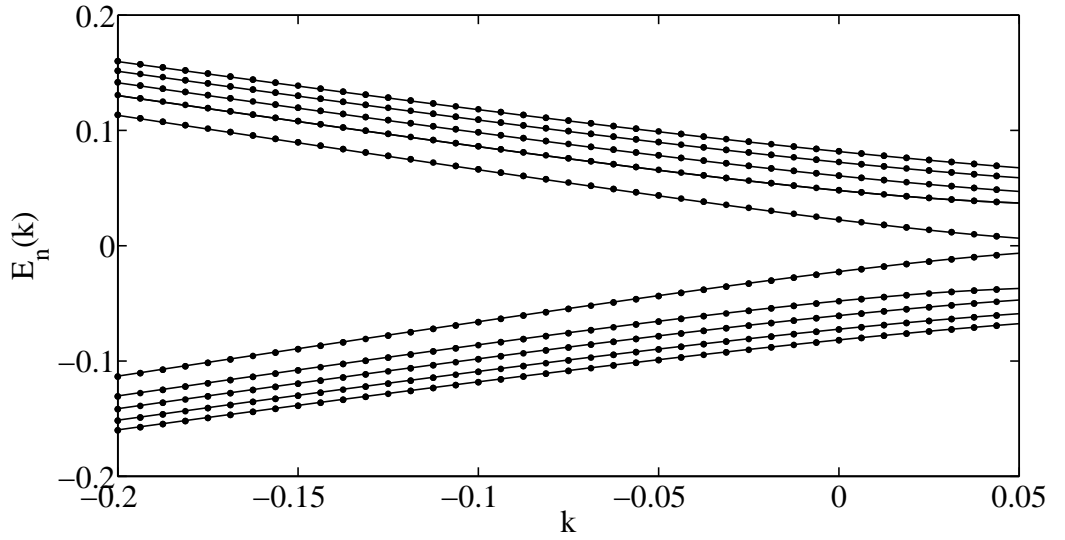
A kígyó-állapotok spektrumát a hullámfüggvény folytonossága szabja meg az $y = y_0$ határfelületen. Az illesztési feltételnek kétszeresen degenerált megoldásai lesznek. A degeneráció az izospin-térbeli forgatásszimmetria következménye: a kétdimenziós izospin-teret két független megoldás tetszőleges lineárkombinációjával feszíthetjük ki. A degenerációtól mentes szekuláris egyenlet az alábbi alakban írható:

$$A_K \Psi_\sigma(x, y_0) = A_{K'} \sigma_x \Psi_\sigma(x, y_0). \quad (5.8)$$

5.2. A felületi és kígyó-állapotok diszperziójának kapcsolata

Az alábbi számolásokkal megmutatjuk, hogy a kígyó-állapotok (5.8) egyenlettel megadott szekuláris egyenlete formailag megegyezik a felületi állapotok ($E1$ és $E2$ pályák) által kielégített peremfeltétel alakjával időtükrözés-invariáns peremfeltétel közelítésben ($\Lambda = 0$). Tegyük fel, hogy egy grafén mintának az $y = y_0$ egyenessel esik egybe az *karosszék* típusú pereme. A minta az $y \geq y_0$ síkrészben helyezkedik el. Ebben a síkrészben a vektorpotenciál Landau-mértékben:

$$\mathbf{A}_E(y) = \begin{pmatrix} B(y - y_0) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$



5.2. ábra. A folytonos vonalak a felületi állapotok spektrumát, a pontok pedig a kígyó-állapotok spektrumát ábrázolják mindkettőt TB modellel számolva. Az energiaértékek $\hbar\omega_c = \sqrt{2} \frac{\hbar v_F}{L_B}$ egységekben, a k hullámszámvektor pedig $1/(3r_{C-C})$ egységekben van feltüntetve. A mágneses tér erősségét szabályozó paraméter értéke $L_B/r_{C-C} = 54.77$.

A vektorpotenciállal felírt Hamilton-operátor megegyezik az (5.3) Hamilton-operátor érvényességének $y \geq y_0$ térrészre való leszűkítésével. Ebből adódóan a felületi állapotok hullámfüggvénye az alábbi alakot ölti:

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} A_K \\ A_{K'} \end{pmatrix} \otimes \Psi_\sigma(x, y), \quad y \geq y_0. \quad (5.10)$$

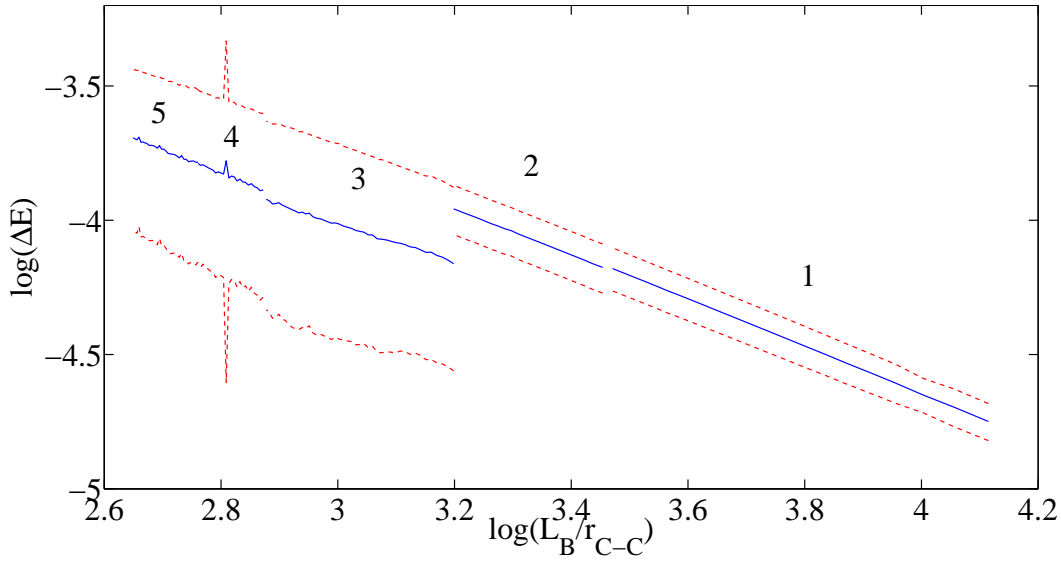
A hullámfüggvény kielégíti a (3.1) peremfeltételt. Válasszuk a peremfeltételt invariánsnak az időtükrözésre ($\Lambda = 0$), valamint az izospin-vektor szögét az x tengellyel $\varphi = 0$ -nak. (A szögállás más értékének választása csupán egy unitér transzformációt jelent a Dirac-spinoron.) Ezekkel a választásokkal a peremfeltétel mátrixa:

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Ezzel a peremfeltétel-mátrixal a felületi állapotok spektrumának szekuláris egyenlete:

$$A_K \Psi_\sigma(x, y_0) = A_{K'} \sigma_x \Psi_\sigma(x, y_0), \quad (5.12)$$

ami megegyezik a kígyó-állapotok (5.8) szekuláris egyenletével. Ennek alapján az alábbi fontos állítást fogalmazhatjuk meg: a kígyó-állapotok spektruma, egy kétszeres degenerációtól eltekintve, megegyezik a felületi állapotok spektrumával időtükrözésre invariáns peremfeltétel közelítésben. Ennek köszönhetően a kígyó-állapotokkal TB modell keretein belül előállíthatjuk a $\Lambda = 0$ paraméterrel közelített felületi állapotok spektrumát és összehasonlíthatjuk azt a felületi állapotok egzakt TB spektrumával. A módszer előnye, hogy minden számolást TB modellben végzünk el, így nem kell számolnunk a TB és kontinuum modell közti numerikus különbségekkel, melyek lényeges zajt okoznának az eredményekben. Az 5.2. ábra a mágneses



5.3. ábra. A folytonos vonalak a spektrumok átlagos eltérését, a szaggatott vonalak pedig az átlagos értékek szórását jelölik. Az energiaértékeket $\hbar\omega_c = \sqrt{2} \frac{\hbar v_F}{L_B}$ egységben számoltuk. A különálló grafikonok különböző vastagságú csövekhez tartoznak: (1) $W_N = 1268$; (2) $W_N = 788$; (3) $W_N = 554$; (4) $W_N = 404$; (5) $W_N = 320$, ahol a W_N számok a keresztirányú rácspontok számát jelölik.

tér erősségét szabályozó $L_B/r_{C-C} = 54.77$ paraméter értéke mellett ábrázolja az egzakt és az időtükrözésre invariáns peremfeltétellel közelített spektrumokat. Láthatjuk hogy a spektrumok csak kis mértékben térnek el egymástól. A továbbiakban numerikus módszerekkel vizsgáljuk, hogy mekkora eltérést okoz a $\Lambda = 0$ közelítéssel felírt peremfeltételből nyert spektrum az egzakthoz képest. Az eltérés vizsgálatához definiáljuk a felületi és a kigyó-állapotok spektrumainak átlagos eltérését egy (k_{min}, k_{max}) intervallumban. Az átlagos eltérés azt jelenti, hogy képezzük minden (k, n) kvantumszámokkal jelölt állapothoz tartozó két energiaérték eltéréseinek az átlagát mindenkor $\hbar\omega_c$ egységekben. Az átlagos eltérés függését a mágneses mezőt jellemző L_B/r_{C-C} paraméter függvényében az 5.3. ábra szemlélteti. Az ábra tengelyeit log – log skálában ábrázoltuk. A különböző vastagságú grafén csövekhez tartozó görbék nagy pontossággal ugyanolyan meredekségűek, csak egymáshoz képest eltoltt egyenesekre illeszkednek. Csupán nagyon vékony csövek esetében válnak zajossá az eredmények. A numerikus eredmények azt sugallják, hogy a spektrumok átlagos eltérése hatványszerű függést követ:

$$\frac{\Delta E(L_B)}{\Delta E_0} = \left(\frac{L_B}{r_{C-C}} \right)^{-\nu} . \quad (5.13)$$

Az összefüggésben szereplő ΔE_0 mennyiség a cső W vastagságától függő $\Delta E_0 \sim O(0.1)\hbar\omega_c$ érték körül mozog. A ν kitevő ezzel szemben univerzális. A numerikus eredményekből:

$$\nu \approx 1.13 . \quad (5.14)$$

Amennyiben a mágneses paraméter néhányszor meghaladja r_{C-C} értékét, az eltérés az egzakt és az időtükrözésre invariáns spektrumok között hatványszerűen csökken. Ezért a $\Lambda = 0$ közelítés

a peremfeltétel mátrixában csupán nagyon nagy mágneses terek esetén ($B > 150$ T!!) veszi el jogosságát.

Összefoglalás

A kutatás során a véges méretű grafén minták peremeffektusait vizsgáltuk a grafén kötött állapotainak leírására alkalmas szemiklasszikus formalizmus [18, 19] keretein belül. A reflexió folyamatok elemzésénél nagy segítséget nyújt az izospin-vektor szemléletes értelmezése (1.2. szakasz). Az *karosszék* típusú peremek vizsgálata során arra az eredményre jutottunk, hogy a peremek fázistolása értelmezhető az elektronok kiralitás-változásának járulékaként, mely a reflexió következtében a pszeudospin elfordulásával hozható kapcsolatba. Ugyanakkor a reflexió során az izospin állandó marad, ezért bevezethető a *reflexió-mátrix*, melynek sajátvektorai a különböző állású izospin-vektorokhoz rendelhetőek. *Cikk-cakk* típusú perem esetében analóg számolásokkal hasonló eredményeket kaphatunk, és ugyancsak bevezethető az izospin-bázisokban felírt reflexió-mátrix. Több reflexiót tartalmazó állapotok esetében a szemiklasszikus kvantálási feltételben szereplő extra fázisjárulék többnyire nem bontható fel az egyes reflexiók fázisjárulékaiként az összegére. Ennek az oka, hogy az egyes reflexiók eltérő izospin-bázisai miatt minden reflexió keveri az őt megelőző reflexió bázisait, ezért egy reflexiónak nincs határozott fázistolása. Ennek ellenére a reflexiók összeségét egy jól definiált össz-fázistolással jellemezhetjük, mely fázistolást az egyes reflexió-mátrixok szorzatának sajátértékeiből számolhatjuk ki.

A kutatás során arra a kérdésre is választ kerestünk, hogy az időtükrözési szimmetriát sértő, külső mágneses térbe helyezett *karosszék* peremű grafén minta leírására milyen feltételek mellett alkalmazható az időtükrözési szimmetriát megtartó peremfeltétel. Numerikus elemzésekből arra következtethetünk, hogy a szénatomok távolságánál százszor nagyobb mágneses hossz mellett már csak (1 – 2)%-os eltérés tapasztalható az egzakt és az időtükrözési szimmetriát megtartó peremfeltétellel számolt spektrum között.

A dolgozatban bemutatott módszer a reflexiók leírására lényeges a tervezett geometriájú grafén-nanoszerkezetek fizikai folyamatainak értelmezésében. Már az eltérő peremű és vastagságú grafén csövek spektrumában is alapvető kvalitatív különbségeket tapasztalunk, melyek többek között a cső vezető vagy félvezető tulajdonságát is meghatározzák.

Függelék

A.1. Folytonos térszimmetria tükröződése a szemiklasszikus hullámfüggvényen

Ez a szakasz a kötött állapotok szemiklasszikus kvantálását leíró 2. fejezethez kapcsolódik. 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 (2.16) 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:

$$\hat{S}(\alpha) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\sum_i c_i(\mathbf{r}) \hat{p}_i \right) \alpha \right], \quad (\text{A-1})$$

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:

$$\text{forgatás:} \quad c_x = -y \quad c_y = x, \quad (\text{A-2})$$

$$\text{x irányú eltolás:} \quad c_x = 1 \quad c_y = 0. \quad (\text{A-3})$$

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

$$\frac{i}{\hbar} \left(\sum_i c_i(\mathbf{r}) \hat{p}_i \right) F = \left(\sum_i c_i(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x_i} \right) F = \mathbf{c} \text{ grad } F = 0. \quad (\text{A-4})$$

A kétdimenziós rendszerünkben ez az invariáns könnyen kifejezhető:

$$F(\mathbf{r}) = \int_{\Gamma} (\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{c}(\mathbf{r})) \, d\mathbf{r}, \quad (\text{A-5})$$

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

$$\text{forgatásra:} \quad F = x^2 + y^2, \quad (\text{A-6})$$

$$\text{x irányú eltolásra:} \quad F = y. \quad (\text{A-7})$$

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 maradnia erre a szimmetriatranszformációra:

$$\hat{S}(\alpha) \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}). \quad (\text{A-8})$$

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

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv \mathcal{H}(F(\mathbf{r}), \mathbf{p}) . \quad (\text{A-9})$$

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

$$\gamma(\mathbf{r}) \equiv \gamma(F(\mathbf{r})) . \quad (\text{A-10})$$

Ennek bizonyítására alakítsuk át a γ fázisfaktor időfejlődésére felírt (2.14) differenciálegyenlet jobb oldalát:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial x \partial p_y} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial y \partial p_x} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial p_y} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial p_x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} \right) = \quad (\text{A-11})$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial p_y} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} (\nabla F)_x - \frac{\partial}{\partial p_x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} (\nabla F)_y \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial p_y} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} (\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{c})_x - \frac{\partial}{\partial p_x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} (\hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{c})_y \right) = \quad (\text{A-12})$$

$$= -\frac{1}{2} \text{grad}_p \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial F} \right) \mathbf{c} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial F} \dot{\mathbf{r}} \right) \mathbf{c} . \quad (\text{A-13})$$

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:

$$\frac{d\gamma(\mathbf{r})}{dt} = \dot{\mathbf{r}} \nabla \gamma(\mathbf{r}) . \quad (\text{A-14})$$

Az átalakítások után a (2.14) differenciálegyenlet:

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial F} \dot{\mathbf{r}} \right) \mathbf{c} = \dot{\mathbf{r}} \nabla \gamma(\mathbf{r}) . \quad (\text{A-15})$$

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:

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial F} \dot{\mathbf{r}} \right) \mathbf{c} =: \mu(F(\mathbf{r})) = \dot{\mathbf{r}} \nabla \gamma(\mathbf{r}) . \quad (\text{A-16})$$

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

$$\gamma(\mathbf{r}) \equiv \gamma(F(\mathbf{r}), V(\mathbf{r})) \quad (\text{A-17})$$

alakra. Itt $V(\mathbf{r})$ az $F(\mathbf{r})$ szintvonalakat merőlegesen metsző szintvonalakat jelöli [40]. Képzeld 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-16) egyenlethez:

$$\mu(F(\mathbf{r})) = \dot{\mathbf{r}}\nabla\gamma(\mathbf{r}) = (\dot{\mathbf{r}}\nabla F)\frac{\partial\gamma}{\partial F} + (\dot{\mathbf{r}}\nabla V)\frac{\partial\gamma}{\partial V}. \quad (\text{A-18})$$

A zárójelekben szereplő skalárszorzatok most is invariánsak a szimmetriatranszformációra, kizárólag F függvényei. Felhasználva továbbá, hogy $\nabla V = \mathbf{c}$:

$$\mu(F(\mathbf{r})) = (a(F))\frac{\partial\gamma}{\partial F} + (b(F))\frac{\partial\gamma}{\partial V}. \quad (\text{A-19})$$

Ez az egyenlet csak akkor maradhat érvényes, ha γ nem függ V -től, hiszen az egyenlet transzformálása során 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.

A.2. A peremfeltétel-mátrix és az áramoperátor antikommutációs relációja

Ebben a szakaszban a (3.6) egyenlettel megfogalmazott állítást bizonyítjuk: megmutatjuk hogy ha a peremfeltétel mátrixa komutál az áramoperátorral, akkor a peremen a részecskeáram peremre merőleges komponense eltűnik és viszont. Az áramoperátor a peremfeltétel mátrixának bázisában az alábbi alakot ölti:

$$\hat{J}_\mathcal{E} = \begin{pmatrix} X & Y \\ Y^\dagger & Z \end{pmatrix}, \quad \hat{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A-20})$$

A hermitikus X operátor az \hat{M} mátrix 1 sajátértékű alterén hat. Ahhoz hogy a peremre merőleges áramkomponens minden (a peremfeltételt kielégítő) állapot esetén eltűnjön, teljesülnie kell hogy $X = 0$. Mivel $(\hat{J}_\mathcal{E})^2 = v_F^2 \hat{I}$ bázisfüggetlenül, az alábbi egyenlőségeknek kell teljesülniük:

$$YY^\dagger = v_F^2 \hat{I}, \quad Z = 0. \quad (\text{A-21})$$

Ebből adódóan $\{\hat{M}, \hat{J}_\mathcal{E}\} = 0$ bázisfüggetlenül. Az állítás másik irányának bizonyításához tekintsük az alábbi egyenlőségsorozatot:

$$J_\mathcal{E} = \langle \Psi | \hat{J}_\mathcal{E} | \Psi \rangle \Big|_\mathcal{E} = \langle \Psi | \hat{M} \hat{J}_\mathcal{E} \hat{M} | \Psi \rangle \Big|_\mathcal{E} = \langle \Psi | \hat{M}^2 (-\hat{J}_\mathcal{E}) | \Psi \rangle \Big|_\mathcal{E} = -J_\mathcal{E}. \quad (\text{A-22})$$

Az átalakítások során felhasználtuk a (3.1) peremfeltételt és hogy $\hat{M}^2 = \hat{I}$. A fenti egyenlet csak akkor teljesül, ha $J_\mathcal{E} = 0$, amivel az állítást bebizonyítottuk.

A.3. Felületi állapotok. A peremfeltétel meghatározása

A perem sérti a kétdimenziós eltolási szimmetriát az (1.1) egyenletben szereplő \mathbf{a}_1 és \mathbf{a}_2 rácsvektorok mentén, azonban a

$$\mathbf{T} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \quad (\text{A-23})$$

vektor mentén az eltolási szimmetria érvényes marad. A perem menti impulzus ezért jó kvantumszáma a rendszernek. A megfelelő Bloch-állapot az alábbi egyenletet elégíti ki:

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = e^{ik} \Psi(\mathbf{r}) , \quad (\text{A-24})$$

ahol $\hbar k = \mathbf{pT}$. A továbbiakban a legegyszerűbb esetre korlátozódunk: szabad elektronokat vizsgálunk a kristályrácson belül. Jelölje λ a k hullámszámmal propagáló módusok peremre merőleges lecsengését jellemző diszkrét kvantumszámot. Az előző egyenlet analógiájára megköveteljük, hogy:

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_3) = \lambda \Psi(\mathbf{r}) , \quad (\text{A-25})$$

ahol $\mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$ egy rácsvektor, melynek a \mathbf{T} eltolásvektorra merőleges komponense $\sqrt{3}r_{C-C} \cos \varphi > \frac{3}{2}r_{C-C}$. Az egyenlőtlenségben szereplő φ szöveget az aktuális \mathbf{T} vektor és az *karosszék* orientációnak megfelelő \mathbf{T}_A eltolásvektor hajlásszögeként értelmezzük:

$$\varphi = \text{atan} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{n-m}{n+m} \right) , \quad -\frac{\pi}{6} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{6} . \quad (\text{A-26})$$

Megköveteljük, hogy a módusok lecsengők legyenek, ezért

$$|\lambda| \leq 1 . \quad (\text{A-27})$$

Alacsony energiás limeszben ($E/\gamma \ll r_{C-C}/|\mathbf{T}|$) az energiát $E \rightarrow 0$ -nak választjuk. Az (1.17) TB egyenletek ekkor függetlenné válnak:

$$\begin{aligned} \Psi_B(\mathbf{r}) + \Psi_B(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1) + \Psi_B(\mathbf{r} - \mathbf{a}_2) &= 0 , \\ \Psi_A(\mathbf{r}) + \Psi_A(\mathbf{r} + \mathbf{a}_1) + \Psi_A(\mathbf{r} + \mathbf{a}_2) &= 0 . \end{aligned} \quad (\text{A-28})$$

Felhasználva az (A-25) és (A-28) egyenleteket:

$$\begin{aligned} \Psi_A(\mathbf{r} + p\mathbf{a}_2 + q\mathbf{a}_3) &= \lambda^q (-1 - \lambda)^{-p} \Psi_A(\mathbf{r}) , \\ \Psi_B(\mathbf{r} + p\mathbf{a}_2 + q\mathbf{a}_3) &= \lambda^q (-1 - \lambda^{-1})^p \Psi_B(\mathbf{r}) . \end{aligned} \quad (\text{A-29})$$

Ha az eltolásvektort $\mathbf{T} = (m+n)\mathbf{a}_2 + n\mathbf{a}_3$ alakban írjuk fel, és felhasználjuk az (A-24) egyenletet, az alábbi egyenlőségekhez jutunk:

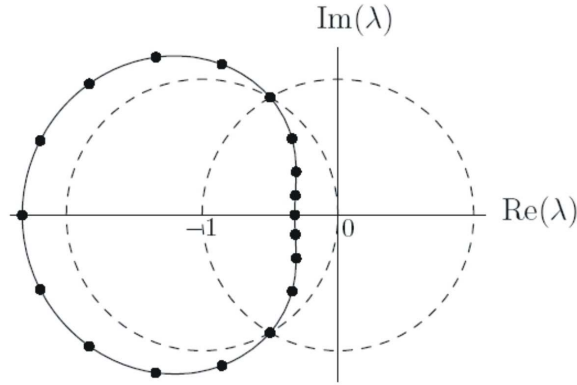
$$\begin{aligned} \text{A atomokon: } \lambda^n &= (-1 - \lambda)^{m+n} e^{ik} , \\ \text{B atomokon: } \lambda^m &= (-1 - \lambda)^{m+n} e^{-ik} . \end{aligned} \quad (\text{A-30})$$

Ezek az egyenletek átírhatóak polárkoordinátás alakba:

$$|1 + \lambda|^{m+n} = |\lambda|^n , \quad (\text{A-31})$$

$$(m+n) \arg(-1 - \lambda) \pm k - n \arg \lambda = 2\pi l , \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots . \quad (\text{A-32})$$

A + (−) előjel az A (B) atomokra felírt egyenletből adódik. A továbbiakban az A atomokra felírt egyenlettel foglalkozunk, mert az eredmények a B atomokra analóg módon megkaphatóak n és m felcserélésével. Az A-1. ábrán az (A-31) egyenlet megoldásseregét ábrázoljuk. A megoldások egy összefüggő vonalon helyezkednek el. A folytonos görbe



A-1. ábra. Az (A-31) egyenletek első egyenletének megoldásserege $n = 5$, $m = 11$ és $k = 0$ esetében. A megoldások a folytonos görbén helyezkednek el, a szaggatott körök a 0 és -1 középpontú egységköröket ábrázolják.

$$\lambda_{\pm} = -\frac{1}{2} \pm i \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (\text{A-33})$$

pontokban metszi az egységköröket $k = 0$ esetben. Az (A-32) egyenlet bal oldala monoton függvénye az A-1. ábra folytonos vonalán mért pozíciónak. Ha a függvény értéke $2\pi\Delta l$ értékkel nő a λ_{\pm} gyökök között, akkor $[\Delta l] - 1$ gyök létezik az A-1. ábra folytonos vonalán λ_{\pm} között, melyek kielégítik az (A-31) és (A-32) egyenleteket egyaránt, valamint az abszolút értékük nem nagyobb mint 1. A gyökök száma tehát:

$$\mathcal{N}_A = \frac{1}{2\pi} [((m+n) \arg(-1 - \lambda_+) - n \arg \lambda_+) - ((m+n) \arg(-1 - \lambda_-) - n \arg \lambda_-)] . \quad (\text{A-34})$$

Behelyettesítve λ_{\pm} értékeit:

$$\mathcal{N}_A = n - \frac{n-m}{3} + 1 . \quad (\text{A-35})$$

A B atomok esetében a gyökök számát n és m felcserélésével kapjuk:

$$\mathcal{N}_B = m - \frac{m-n}{3} + 1 . \quad (\text{A-36})$$

Minden egyes λ_p gyökhöz egy Ψ_p felületi módus tartozik. A hullámfüggvényt az A atomokon ezen módusok szuperpozíciója adja:

$$\Psi_A = \sum_{p=1}^{\mathcal{N}_A} \alpha_p \Psi_p . \quad (\text{A-37})$$

Az α_p együtthatókat a hullámfüggvény eltűnésének feltételéből határozzuk meg a rács \mathcal{N}_A hiányzó közvetlen szomszédján. Analóg módon a B atomokon a hullámfüggvény:

$$\Psi_B = \sum_{p=1}^{\mathcal{N}_B} \alpha'_p \Psi'_p . \quad (\text{A-38})$$

A λ_p megoldások között létezik kettő ($\lambda_{\pm} = \text{Exp}(i2\pi/3)$) melyeknek 1 az abszolút értéke, ezért a hozzájuk tartozó hullámfüggvények nem tűnnek el a peremtől távolodva, és nem függnak az n, m párostól. Ezek a hullámfüggvények $\text{Exp}(\pm i\mathbf{K}\mathbf{r})$ alakban írhatóak, ahol $\mathbf{K} = (4/9)\pi\mathbf{a}_3/r_{C-C}^2$. Könnyen ellenőrizhető, hogy ez a hullámfüggvény kielégíti az (A-24) Bloch-feltételt $k = 0$ értéke mellett, mivel $\mathbf{K}\mathbf{T} = 2\pi(n - m)/3 \pmod{2\pi}$. A hullámfüggvények az A és B atomokon ekkor az alábbi alakban írhatóak:

$$\Psi_A = \Psi_1 e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} - \Psi_4 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} + \sum_{p=1}^{\mathcal{N}_A-2} \alpha_p \Psi_p, \quad (\text{A-39})$$

$$\Psi_B = i\Psi_2 e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} - i\Psi_3 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} + \sum_{p=1}^{\mathcal{N}_B-2} \alpha'_p \Psi'_p. \quad (\text{A-40})$$

A négy $\Psi \equiv (\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4)$ amplitúdó az (1.34) Dirac-spinorral azonosítható, a többi hullámfüggvény pedig a peremtől távolodva a lecsengő felületi módusokat adja, melyekről a kontinuum modell nem ad számot. Az egyenletekben a határozatlan paraméterek száma $\mathcal{N}_A + \mathcal{N}_B = n + m + 2$. Meghatározásukra az A atomok esetében \mathcal{N}_A , a B atomok esetében \mathcal{N}_B egyenlet áll rendelkezésünkre, melyek a rácstól közvetlenül eltávolított atomokon a hullámfüggvény eltűnését írják elő. Az n, m paramétereket három osztályba sorolhatjuk (minden esetben $n - m = 0 \pmod{3}$):

1. $n > m$ esetben $\mathcal{N}_A \leq n$ és $\mathcal{N}_B \geq m + 2$. Ekkor $\Psi_1 = \Psi_4 = 0$, míg Ψ_2 és Ψ_3 határozatlanok.
2. $n < m$ esetben $\mathcal{N}_B \leq n$ és $\mathcal{N}_A \geq m + 2$. Ekkor $\Psi_2 = \Psi_3 = 0$, míg Ψ_1 és Ψ_4 határozatlanok.
3. $n = m$ esetben $\mathcal{N}_A = n + 1$ és $\mathcal{N}_B = m + 1$. Ekkor $|\Psi_1| = |\Psi_4|$, és $|\Psi_2| = |\Psi_3|$.

Mindegyik esetben a peremfeltétel felírható $\Psi = (\hat{\nu}\boldsymbol{\tau} \otimes \hat{\mathbf{n}}\boldsymbol{\sigma})\Psi$ alakban, ahol:

- $n > m$ esetben $\hat{\nu}||\hat{z}, \hat{\mathbf{n}}||\hat{z}, \nu_z n_z = -1$ (cikk-cakk perem).
- $n < m$ esetben $\hat{\nu}||\hat{z}, \hat{\mathbf{n}}||\hat{z}, \nu_z n_z = 1$ (cikk-cakk perem).
- $n = m$ esetben $\hat{\nu} \perp \hat{z}, \hat{\mathbf{n}} \perp \hat{z}, \hat{\mathbf{n}} \perp \hat{\mathbf{n}}_E$ (karosszék perem).

Ezzel meghatároztuk, hogy a peremfeltétel-mátrix egyes osztályai milyen típusú peremeket írnak le.

Irodalomjegyzék

- [1] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl and R. E. Smalley, *Nature* **318**, 162 (1985).
- [2] S. Iijima, *Nature* **354**, 56 (1991).
- [3] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes*, (Imperial College Press, London, 1998).
- [4] S. Reich, C. Thomsen, J. Maultzsch, *Carbon Nanotubes, Basic Concepts and Physical Properties*, (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Berlin, 2004).
- [5] 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).
- [6] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. M. Morozov, D. Jiang, M. I. Katnelson, 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).
- [7] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1337 (2008).
- [8] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [9] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, *Solid State Commun.* **143**, 3-13 (2007).
- [10] P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1942).
- [11] O. Klein, *Z. Phys.* **53**, 157, (1929); N. Dombey and A. Calogheracos, *Phys. Rep.* **315**, 41 (1999); F. Constantinescu, E. Magyari: *Kvantummechanikai feladatok*, 354. old. 17. és 18. feladat (Tankönyv Kiadó, Budapest 1972).
- [12] D. N. Page, *New J. Phys.* **7**, 203 (2005).
- [13] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nature Phys.* **2**, 620 (2006).
- [14] Gergely Dobrik, Philippe Lambin, László P. Biró, Levente Tapasztó, *Nature Nanotechnology* **3**, 397-401 (2008).

- [15] E. McCann and V. I. Fal'ko, J. Phys. Condens. Matter **16**, 2371 (2004).
- [16] A. R. Akhmerov, C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **77**, 085423 (2008).
- [17] J. Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, C.W.J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **96**, 246802 (2006).
- [18] P. Carmier, U. Denis, Phys. Rev. B **77**, 245413 (2008).
- [19] A. Kormanyos, P. Rakya, L. Oroszlány, J. Cserti, Phys. Rev. B **78**, 045430 (2008).
- [20] Sólyom Jenő: *A modern szilárdtestfizika alapjai II.: Elektronok szilárd testekben*, 18.2. fejezet (ELTE Eötvös Kiadó, Budapest 2003).
- [21] G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449, (1984); F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).
- [22] N. D. Mermin, H. Wagner, Phys.Rev.Lett. **17**, 1133 (1966).
- [23] 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).
- [24] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, Phys. Rev. B **29**, 1685 (1984).
- [25] T. Ando, T. Nakanishi and R. Saito, J. Phys. Soc. Japan, **67**, 2857 (1998).
- [26] Cserti József: *Kétdimenziós kvantumrendszerek nanoszerkezetekben*, 3. fejezet, (MTA doktori értekezés).
- [27] R. Peierls, Z. Phys. **80**, 763 (1933); A. S. Alexandrov and H. Cappellmann, Phys. Rev. Lett. **66**, 365 (1991); Sólyom Jenő: *A modern szilárdtestfizika alapjai II.: Elektronok szilárd testekben*, 22.3 fejezet (ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 2003).
- [28] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Chapter XVII, (Dover Publication Inc., Mineola, New York 1999).
- [29] Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- [30] L. D. Landau és E. M. Lifshitz: *Elméleti fizika III. kötet Kvantummechanika. Nemrelativisztikus elmélet*, VII. fejezet (Tankönyvkiadó, Budapest 1978).
- [31] A. Messiah: *Quantum Mechanics*, Chapter VI, (Dover Publication Inc., Mineola, New York 1999).
- [32] M. V. Berry, Proc. Roy. Soc. London A **392**,42 (1984).
- [33] P. Bruno, arXiv:0506270v1.
- [34] K. Wakabayashi, M. Fujita, H. Ajiki, and M. Sigrist, Phys. Rev. B **59**, 8271 (1999).

-
- [35] Csaba Tóke, Paul E. Lammert, Vincent H. Crespi, and Jainendra K. Jain, Phys. Rev. B **74**, 235417 (2006).
- [36] L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006).
- [37] L. Oroszlány, P. Rakyta, A. Kormányos, C.J. Lambert, J. Cserti, Phys. Rev. B **77**, 081403(R) (2008).
- [38] Rakyta Péter, *Kígyó-állapotok különleges természete grafénben*, ELTE TDK dolgozat, 2008 (Témavezető: Cserti József).
- [39] T. K. Ghosh, A. De Martino, W. Häusler, L. Dell'Anna, R. Egger, Phys. Rev. B **77**, 081404(R) (2008).
- [40] R. P. Feynman, R. B. Lighton, M. Sands: *Mai fizika*, 5. kötet, 59. fejezet (Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1986).