

Grafén optikai vezetőképességének vizsgálata különös tekintettel a rácshibák és szennyezők hatására

Diplomamunka

Készítette:

Németh Adrián

fizikus szak

Témavezetők:

Dr. Cserti József
egyetemi docens

Komplex Rendszerek
Fizikája Tanszék

Dr. Oroszlány László
tudományos
segédmunkatárs

Komplex Rendszerek
Fizikája Tanszék



Budapest
2011

Tartalomjegyzék

Előszó	2
1. Elméleti áttekintés	4
1.1. Grafén alapok	4
1.1.1. Rácsszerkezet	4
1.1.2. Sávszerkezet	6
1.1.3. Kvázirészecske kép	10
1.1.4. Kétrétegű grafén	13
1.2. Kubo-formula	18
1.3. Optikai vezetőképesség grafénban	21
2. A szimuláció bemutatása	23
2.1. A numerikus eljárás ismertetése	23
2.1.1. Állapotsűrűség számolása	23
2.1.2. Optikai vezetőképesség számolása	25
2.2. Grafén-modellek	27
2.2.1. Tiszta grafén	27
2.2.2. Rácshibák	27
2.2.3. Homogén nyújtás leírása	29
2.3. A program bemutatása	29
3. Eredmények bemutatása	31
3.1. Kalibráció	31
3.2. Szennyezők hatásának általános vizsgálata, különös tekintettel az állapot- sűrűsége	34
3.3. Az optikai vezetőképesség vizsgálata	38
3.3.1. Rezonáns szennyezők vizsgálata	38
3.3.2. A Stone-Wales-hiba vizsgálata	42
Összefoglalás	46
Függelék	47
Köszönetnyilvánítás	49
Nyilatkozat	54

Előszó

A szén a legkorábban felfedezett kémiai elemek egyike. Régóta ismert módosulatai a grafit és a gyémánt, melyek teljesen különböző fizikai tulajdonságokat mutatnak: a kemény, nagyban átlátszó, elektromosan szigetelő gyémánttal szemben a grafit puha, átlátszatlan és jó elektromos vezető. Eltérő viselkedésüket kristályszerkezetbeli különbségek okozzák: a grafit hatszöges rétegekből tevődik össze, a gyémánt szénatomjai pedig az úgynevezett gyémántrácsba rendeződnek [1].

Egészen 1985-ig kellett várni a szén nulla dimenziós módosulatai, a fullerének felfedezésére [2]. Focilabdára emlékeztető szerkezetüket páros sok szénatom alkotja, melyek öt- és hattagú gyűrűkbe szerveződve helyezkednek el egy gömbfelületen. A felfedezésért 1996-ban kémiai Nobel-díjat kapott Kroto, Curl, és Smalley. 1991-ben Iijima sikeresen szintetizált szén nanocsöveket, a szén egydimenziós módosulatait [3]. A szén nanocsövek számos előnyös tulajdonsággal és ígéretes felhasználási lehetőséggel rendelkeznek, kiterjedt irodalmuk van [4][5].

A grafén – amely nem más, mint a grafit egyetlen atomnyi vastagságban elkülönített hexagonális rétege – a szén kétdimenziós módosulata. Előállítását elsőként Geim és Novoselov kutatócsoportja vitte véghez 2004-ben [6][7]. Mechanikai úton, ragasztószalaggal sikerült leválasztaniuk egy- és kétrétegű grafénpikkelyeket ceruzahegyről. Módszerüket nem sokkal ezután sikerrel alkalmazva megerősítette eredményeiket Kim és kutatócsoportja [8][9].

A grafén számos olyan tulajdonsággal rendelkezik, amely vonzóvá teheti az alkalmazások szempontjából, ezzel is magyarázható, hogy munkájukért Geim és Novoselov már 2010-ben elnyerték a fizikai Nobel-díjat. A valaha készített legvékonyabb anyag, miközben egyike a legerősebb ismert anyagoknak: ahogy azt a Nobel-díj honlapján megjelent összefoglaló [10] írja, szakítószilárdsága mintegy százszorosa az acélénak, egy grafénből készített hipotetikus háló képes lenne megtartani egy macska súlyát, de tömege nem haladná meg a macska egyetlen szál bajúszának tömegét. Azonban nem csak mechanikai tulajdonságai emelik ki az anyagok közül. Kvázirészecskéi jó közelítéssel írhatóak le kétdimenziós zérus tömegű Dirac-egyenlettel [11][12][13], ami a neutrínók révén kapcsolódási pontot jelent a részecskefizikával. Fontos különbség, hogy az effektív fénysebesség itt mintegy háromszázad része a vákuumbeli értéknek. Zérus tiltott sávú félvezető, de rendkívül nagy benne a töltéshordozók mozgékonyasága, a félvezetők esetén megszokott értékek többszöröse, ezért vezetőképessége ballisztikusnak tekinthető szubmikronos skálán is [14]. Szennyezés és dópolás segítségével vezetőképessége széles tartományban befolyásolható. Jó elektromos és hővezetőképességén túl átlátszósága is különlegessé teszi: az optikai tartományban a fény hullámhosszától függetlenül a fényintenzitásnak csak mintegy $\alpha\pi \approx 2,3\%$ -át nyeli el, ahol α a finomszerkezeti állandó [15]. Fontos még megemlíteni lineáris diszperziójának azon következményét, hogy a kvantum Hall-effektus jellegében különbözik a kétdimenziós elektrongáz esetén megszokottól [9]. Egy lényeges alkalmazási területe lehet még a szén alapú elektronikának, hogy mekkönnyítheti az

elektronikai és szerves rendszerek integrációját.

Nem mehetünk el szó nélkül a Mermin-Wagner-tétel [16] mellett, mely szerint kétdimenziós rendszerben a nagyhullámhosszú fluktuációk amplitúdója a minta méretével logaritmikusan növekszik. Ez látszólag ellentmondásban áll azzal, hogy akár 70 *cm*-es szélességű rétegekben is elő tudunk állítani grafént. Az ellentmondás feloldható azzal, hogy a grafén (részben a tétel következményeként, részben rácshibák miatt) nem teljesen síkbeli szerkezetű, és ez stabilizálja a rácsot.

Számtalan cikk vizsgálta már kísérleti vagy elméleti úton a grafén transzporttulajdonságait. Diplomamunkámban a Katsnelson és társai [17][18] által javasolt numerikus módszer effektív implementációját készítettem el C++-ban az MPI API használatával sokmagos rendszerekre, majd vizsgáltam vele különböző rácshibák és szennyezők, köztük a Stone-Wales-hiba optikai vezetőképességre gyakorolt hatását, egy- illetve kétrétegű grafénon. Végeztem szimulációkat egyenletesen nyújtott grafénon is, a mechanikai deformációk és a rácshibák együttes hatásának kiderítésére. Emellett másik fontos feladatomban az egyes szennyezők és hibák megkülönböztethetőségének kérdését tekintetem.

A dolgozat három részre tagolódik. Az első fejezetben foglalom össze a grafénnel kapcsolatos legfontosabb ismereteket, a rövidebb, középső fejezetben tisztázom a szimuláció részleteit, a záró fejezetben pedig ismertetem a főbb eredményeket.

1. fejezet

Elméleti áttekintés

Ezen fejezet célja a grafén elektromos és optikai tulajdonságainak vizsgálatához szükséges elméleti alapok összefoglalása. Készítéséhez felhasználtam Cserti József [14], Neto és társai [19], valamint Peres [20] összefoglaló munkáit, illetve Dresselhaus könyvét [4]. Az első szakasz rövid bevezetés a grafén fizikájába, ezt követi a Kubo-formula ismertetése, végül a grafén optikai vezetőképességéről szóló rész zárja a fejezetet.

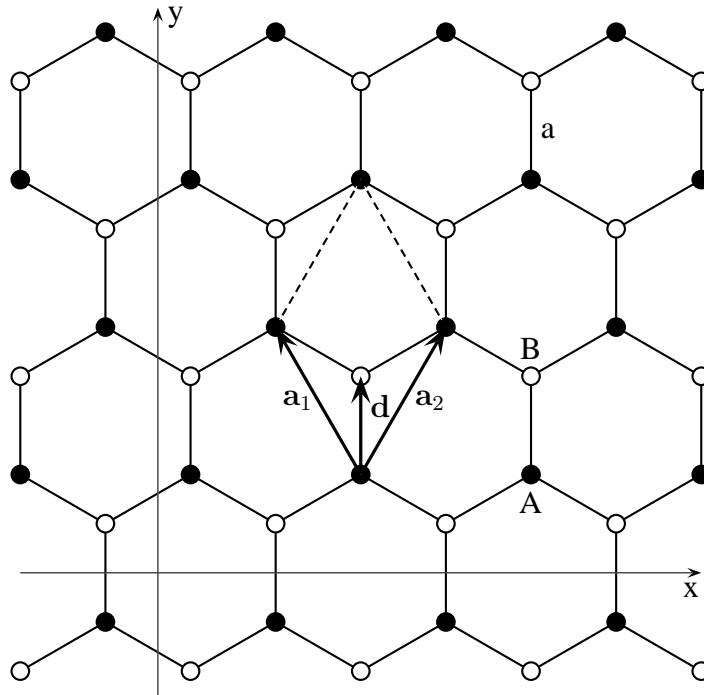
1.1. Grafén alapok

1.1.1. Rácsszerkezet

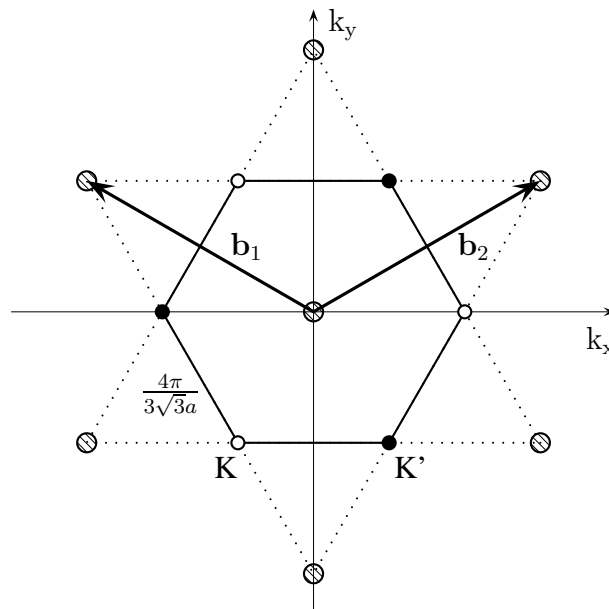
A grafén síkbeli szerkezete az egymással 120° -os szöget bezáró tengelyű sp^2 -hibrid-pályák között kialakuló σ -kötésekkel magyarázható. Az így létrejövő méhsejtszerű szerkezet csomópontjaiban elhelyezkedő szénatomok két típusát különböztethetjük meg az eltolások segítségével, ezeket A-, illetve B-típusú szénatomoknak nevezzük, az 1.1. ábrán jelölt módon. Az elemi cella – az ábrán szaggatott vonalak által határolt tartomány – mindkét típusú atomból egyet-egyet tartalmaz, az A-típusú szénatomból a B-típusúba mutató vektort \mathbf{d} -vel jelöljük.

Az $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ translációs vektorok 60° -os, a $\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ összefüggés által definiált reciprokvektor-rendszer $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ vektorai pedig 120° -os szöget zárnak be egymással, így mind a Bravais-, mind a reciprokrács hexagonális szerkezetű. A Brillouin-zóna szabályos hatszög alakú lesz, ahogy az az 1.2. ábrán látható. Amennyiben a -val jelöljük a rácsállandót, úgy a Brillouin-zóna hatszögének oldalhossza éppen $\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$ -val egyenlő. A Brillouin-zóna határvonalán elhelyezkedő két nemekvivalens csúcspontot a szakirodalom Dirac-pontnak nevezi és \mathbf{K}, \mathbf{K}' -vel jelöli. Ezen magas szimmetriájú pontok hullámszámvektorát többféleképpen is meghatározhatjuk, egy jó választás $\mathbf{K} = \frac{\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1}{3}, \mathbf{K}' = \frac{\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2}{3}$.

A leendő számítások megkönnyítése és egységesítése érdekében érdemes rögzíteni a koordinátarendszert. Ezentúl x tengelynek nevezzük a cikk-cakk-vonallal párhuzamos tengelyt, y -nak pedig az erre merőleges tengelyt, ahogy az az 1.1. ábrán is látható. Ekkor az $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{d}$ vektorok az $\mathbf{a}_1 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{3}{2}a\right), \mathbf{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{3}{2}a\right), \mathbf{d} = (0, a)$ alakban állnak elő, a reciproktérbeli $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{K}, \mathbf{K}'$ vektorok pedig a $\mathbf{b}_1 = \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a}\right), \mathbf{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a}\right), \mathbf{K} = \left(-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right), \mathbf{K}' = \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right)$ formát öltik.



1.1. ábra. Grafén hexagonális rácsa. A koordináarendszert úgy választjuk, hogy x legyen a cikk-cakk-kal párhuzamos tengely. Az egyes atomok típusát A és B jelöli. Szaggatott vonal határolja az elemi cellát, a Bravais-rácsot az a_1, a_2 translációs vektorok feszítik ki.



1.2. ábra. Grafén reciprokrácsa. A reciprokrácsot az a_1, a_2 translációs vektorok b_1, b_2 reciprokvektor-rendszere feszíti ki, rácspontjait az ábra satírozott körlapjai jelölik. A Brillouin-zónát az ábrán folytonos vonal határolja. K és K' jelöli a Brillouin-zóna két nemekvivalens csúcsát.

1.1.2. Sávszerkezet

A rács szénatomjai a – teljes egészében betöltött – σ -sávot kialakító sp^2 -hibridpályák mellett rendelkeznek egy félig betöltött, hibridizációban részt nem vevő p -pályával, melynek tengelye merőleges a grafén síkjára, ezért p_z -vel jelöljük. Ezen p_z pályák alakítják ki a félig betöltött π -sávot, amely meghatározza a grafén elektromos és optikai tulajdonságait.

A sávszerkezetet szoros kötésű (tight binding) közelítésben számítjuk. Ennek lényege, hogy a p_z -pályák közötti gyenge átfedések miatt feltesszük, hogy az elektronra mindenütt legfeljebb egy atom van jelentős hatással, így a π -sáv pályáit a p_z -pályák lineárkombinációinak alakjában keressük. A számolás során a spint csak a Pauli-elven keresztül vesszük figyelembe. Az együtthatókat úgy határozzuk meg, hogy az időfüggetlen Schrödinger-egyenletnek minél pontosabb megoldásait kapjuk eredményül.

Keressük tehát a H Hamilton-operátor

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

sajátérték-egyenletének

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} (b_A(\mathbf{R})\varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + b_B(\mathbf{R})\varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{d})) \quad (1.2)$$

alakban felírható közelítő megoldásait, ahol $\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$ indexeli a Bravais-rács pontjait, $\varphi_A(\mathbf{r})$, $\varphi_B(\mathbf{r})$ az A- illetve B-típusú atomok p_z pályához tartozó normált hullámfüggvényei, $b_A(\mathbf{R})$, $b_B(\mathbf{R})$ komplex együtthatók. Vegyük figyelembe, hogy az eltolási szimmetria következtében H sajátfüggvényeit kereshetjük $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ alakban, melyre

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.3)$$

ahol a \mathbf{k} hullámszám a Brillouin-zónában veszi fel értékeit. Helyettesítsük be az (1.3) összefüggésbe a hullámfüggvény (1.2) alakját, majd végezzük el a változócsere a bal oldali szummában, így a b_B , b_A együtthatókra felírt

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k},A}(\mathbf{R}) &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}b_{\mathbf{k},A}(\mathbf{0}), \\ b_{\mathbf{k},B}(\mathbf{R}) &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}b_{\mathbf{k},B}(\mathbf{0}) \end{aligned} \quad (1.4)$$

összefüggésekre jutunk. Visszahelyettesítve a hullámfüggvény (1.2) alakjába, a \mathbf{k} -állapotú Bloch-hullámra felírt

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} (b_A(\mathbf{k})\varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + b_B(\mathbf{k})\varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{d})) \quad (1.5)$$

próba-függvényt kapjuk, ahol N az elemi cellák száma, az $\frac{1}{\sqrt{N}}$ normálási tényezőt pedig a $b_A(\mathbf{k})$, $b_B(\mathbf{k})$ együtthatók korrekt kontinuumlímesze érdekében vezettük be.

Ha az (1.5) hullámfüggvényre felírt (1.1) Schrödinger-egyenletet balról skalárszorozzuk a $\varphi_A(\mathbf{r})$, $\varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{d})$ hullámfüggvényekkel, akkor egy $E(\mathbf{k})$ -paraméteres kétismeretlenes homogén lineáris egyenletrendszer kapunk a $b_A(\mathbf{k})$, $b_B(\mathbf{k})$ együtthatókra. Ennek éppen akkor van nullától különböző megoldása, ha determinánsa pozitív, ebből meghatározhatjuk a \mathbf{k} hullámszámhoz tartozó $E(\mathbf{k})$ energiát, majd megoldhatjuk az egyenletrendszer. A (megfelelően normált) megoldást tekintjük az együtthatók legjobb választásának.

Határozzuk meg a diszperziós relációt. Az előbbieket értelmében adott \mathbf{k} hullámszámra felírhatjuk a

$$H_{ij}(\mathbf{k})b_j(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})S_{ij}(\mathbf{k})b_j(\mathbf{k}) \quad i, j = A, B \quad (1.6)$$

egyenletet, melynek együtthatói:

$$H_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \varphi_i^*(\mathbf{r} - \delta_{i\mathbf{B}}\mathbf{d})(H\varphi_j)(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \delta_{j\mathbf{B}}\mathbf{d}) \quad (1.7)$$

és

$$S_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \varphi_i^*(\mathbf{r} - \delta_{i\mathbf{B}}\mathbf{d})\varphi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \delta_{j\mathbf{B}}\mathbf{d}). \quad (1.8)$$

Itt φ_A és φ_B egy tetszőlegesen megválasztható fázisban különböznek.

Végezzük el a számítást a legegyszerűbb közelítésben: hanyagoljuk el a különböző rácspontok közötti S_{ij} átfedési integrálokat, H_{ij} -ben pedig csak a legközelebbi szomszédokat összekötő tagokat tartjuk meg. Kihaszználva a rács diszkrét forgatási szimmetriáját, valamint bevezetve az $\epsilon_0 = \int d\mathbf{r} \varphi_A^*(\mathbf{r})(H\varphi_A)(\mathbf{r})$, $\gamma_0 = \int d\mathbf{r} \varphi_A^*(\mathbf{r})(H\varphi_B)(\mathbf{r} - \mathbf{d})$ jelöléseket, az (1.7), (1.8) komponensek a következő értékeket veszik fel:

$$\begin{aligned} H_{AA} &= H_{BB} = \epsilon_0, \\ H_{AB} &= H_{BA}^* = (1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}) \gamma_0, \\ S_{AA} &= S_{BB} = 1, \\ S_{AB} &= S_{BA} = 0. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Az $f(\mathbf{k}) = 1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}$ jelölést bevezetve az (1.6) egyenlet az

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0 - E(\mathbf{k}) & f(\mathbf{k})\gamma_0 \\ f^*(\mathbf{k})\gamma_0^* & \epsilon_0 - E(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_A(\mathbf{k}) \\ b_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = 0 \quad (1.10)$$

alakba rendezhető. A nemtriviális megoldás létének feltétele, hogy az egyenlet mátrixának determinánsa zérus legyen:

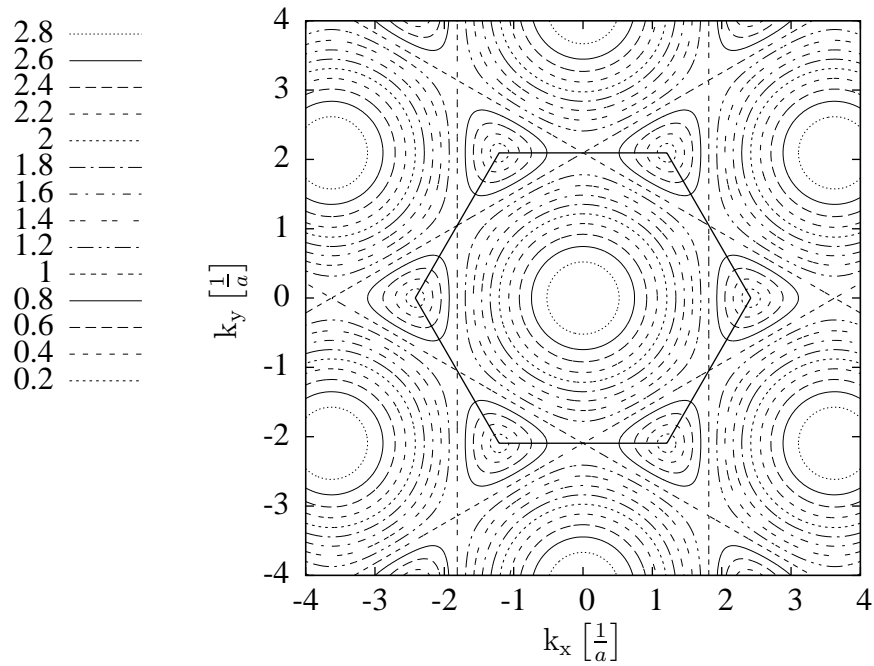
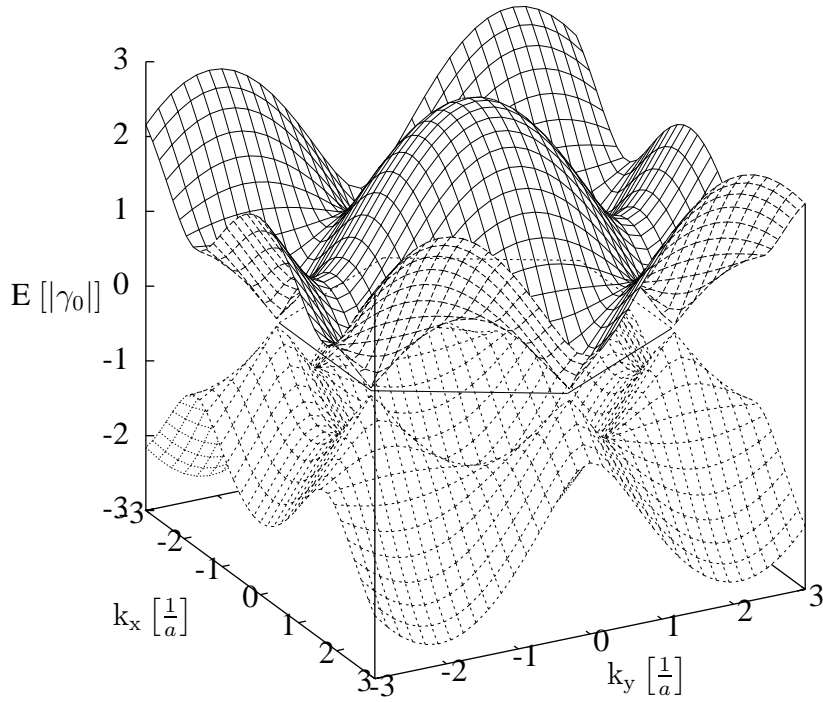
$$\begin{vmatrix} \epsilon_0 - E(\mathbf{k}) & f(\mathbf{k})\gamma_0 \\ f^*(\mathbf{k})\gamma_0^* & \epsilon_0 - E(\mathbf{k}) \end{vmatrix} = (\epsilon_0 - E(\mathbf{k}))^2 - |\gamma_0|^2 |f(\mathbf{k})|^2 = 0, \quad (1.11)$$

ebből pedig rögtön adódik a diszperziós reláció:

$$E(\mathbf{k}) = \epsilon_0 \pm |\gamma_0| \sqrt{3 + 2 \cos \mathbf{k}\mathbf{a}_1 + 2 \cos \mathbf{k}\mathbf{a}_2 + 2 \cos \mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}. \quad (1.12)$$

Ezen diszperziós reláció, illetve szintvonalas térképe látható az 1.3. ábrán. Itt jegyezzük meg, hogy γ_0 fázisa tetszőlegesen beállítható φ_A és φ_B megfelelő választásával, a konvenciónak megfelelően negatív valóságnak választjuk, értéke $-2,7 eV$ körüli.[21] Az ϵ_0 onsite-energia szerepe az energia nullszintjének rögzítése, a továbbiakban ezt 0-nak tekintjük.

Az 1.3. ábráról és diszperziós reláció (1.12) képletéből is leolvasható, hogy a π -sáv két át nem lapoló alsávra bomlik, melyek a K, K' pontokban összeérnek. Töltés nélküli grafén esetén a π -sáv éppen félig betöltött, ezért az alsó sávot lyuksávnak, a felsőt részecskesávnak nevezzük. A diszperziós reláció szimmetrikus az $E = 0$ síkra, ezt nevezzük részecske-lyuk szimmetriának.



1.3. ábra. Diszperziós reláció grafénban. Az energiát $|\gamma_0|$ egységekben mérjük, $\epsilon_0 = 0$. Az ábrákon az első közelítés eredménye látható, vagyis az átfedési integrálokat elhanyagoltuk, és csak a rácsszomszédok közötti kölcsönhatást vettük figyelembe. A térbeli és a szintvonalas ábráról leolvasható, hogy a K, K' pontokban $E = 0$, illetve ezek környezetében a diszperziós reláció szabályos kúpfelülettel írható le.

Az elektromos tulajdonságokat a diszperziós reláció Fermi-energia körüli viselkedése határozza meg, így kitüntetett fontosságú (1.12) összefüggés részletes vizsgálata a \mathbf{K} , \mathbf{K}' Dirac-pontok környékén. Helyettesítsük be a vektorok 1.1.1. szakaszban rögzített alakját az (1.12) képletbe, visszakapjuk a várt

$$E(\mathbf{K}) = E(\mathbf{K}') = 0$$

összefüggést. Mérjük a hullámszámot a Dirac-pontoktól, vezessük be a $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$, $\tilde{\mathbf{k}}' = \mathbf{k} - \mathbf{K}'$ mennyiségeket. Írjuk fel a diszperziós relációt az új változóiban, bontsuk fel a $\cos(\pm \frac{2\pi}{3} + \tilde{\mathbf{k}}\mathbf{a})$ -s tagokat, majd számítsuk ki a gyökjel alatti kifejezést $|\tilde{\mathbf{k}}|$ -ban másodrendig. Vegyük észre, hogy a $\sin(\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{a})$ -s tagok járulékaik másodrendig kiejtik egymást, így csak a $\cos(\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{a})$ -s tagok sorfejtéséből eredő járulékokat kell figyelembe venni. Algebrai átalakítások után az

$$E(\tilde{\mathbf{k}}) = \pm |\gamma_0| \sqrt{\left(\tilde{\mathbf{k}} \left(\frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2}{2}\right)\right)^2 + \left(\tilde{\mathbf{k}} \left(\frac{\sqrt{3}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right)\right)^2} = \pm \frac{3}{2} a |\gamma_0| |\tilde{\mathbf{k}}|,$$

$$E(\tilde{\mathbf{k}}') = \pm \frac{3}{2} a |\gamma_0| |\tilde{\mathbf{k}}'| \quad (1.13)$$

eredményre jutunk. Vezessük be a

$$\hbar v = \frac{3}{2} a |\gamma_0| \quad (1.14)$$

jelölést, ennek segítségével az (1.13) diszperziós relációk az

$$E(\tilde{\mathbf{k}}) = \pm \hbar v |\tilde{\mathbf{k}}|,$$

$$E(\tilde{\mathbf{k}}') = \pm \hbar v |\tilde{\mathbf{k}}'| \quad (1.15)$$

alakra egyszerűsödnek. Látjuk, hogy a Dirac-pontok közelében érvényes (1.15) összefüggések szabályos kúpfelületet írnak le. Alakjuk egy-egy kétdimenziós, zérus tömegű részecske (és antirészecske) diszperziós relációjára emlékeztet $v = c$ helyettesítéssel.

A Dirac-pontok körüli diszperziós reláció segítségével meghatározhatjuk az alacsony-energiás állapotsűrűséget. A számítást a \mathbf{K} pont körül végezzük, a \mathbf{K}' pontot, valamint a spint egy-egy kettes szorzóval vehetjük figyelembe. A \tilde{k} hullámszámig

$$\Omega_0(\tilde{k}) = \frac{2N}{A_{Bz}} \tilde{k}^2 \pi \quad (1.16)$$

állapot esik a hullámtérbe, ahol N az elemi cellák száma a mintában, $A_{Bz} = \frac{8\pi^2}{3\sqrt{3}a^2} = \frac{16\pi^2}{27A_0}$ pedig a Brillouin-zóna elemi cellájának a területe, amit rögtön kifejeztünk az elemi cella A_0 területével. Felhasználva a diszperziós reláció (1.15) alakját az

$$\frac{d\Omega_0(\tilde{k})}{dE} = \frac{d\Omega_0(\tilde{k})}{d\tilde{k}} \frac{d\tilde{k}}{dE} = \frac{27NA_0}{4\pi\hbar^2v^2} E \quad (1.17)$$

összefüggésre jutunk, amiből közvetlenül adódik a

$$\rho(E) = 4 \frac{d\Omega_0(\tilde{E})}{d\tilde{E}} = \frac{27A}{\pi\hbar^2v^2} |E| \quad (1.18)$$

állapotsűrűség, ahol A jelöli a minta felületét. A kapott eredmény jellege a lineáris diszperziós reláció miatt eltér a kétdimenziós szabad elektrongáz esetén megszokott konstans állapotsűrűségtől.

A távolabbi potok közötti mátrixelemeket is figyelembe véve a diszperziós reláció kúp jellege továbbra is megmarad a Dirac-pontok környezetében, ám a v sebesség renormálódik. Ha az első három szomszéd közötti kölcsönhatási és átfedési integrálokat vesszük figyelembe, akkor a v sebességre $v \approx \frac{c}{380}$ körüli értéket kapunk [14].

Érdeemes meggondolni, hogy a legegyszerűbb közelítésben a diszperziós reláció – és így az állapotsűrűség – pozitív és negatív tartományát az egyik alrács $b(\mathbf{k})$ együtthatóinak negálása viszi egymásba. A másodsomszéd-kölcsönhatás sérti ezt a szimmetriát, viszont a Dirac-pontokban eltűnő tagokat hoz be a Hamilton-operátor diagonális elemeibe, így a Dirac-kúpok szerkezetét nem változtatja meg. A szomszédos atomok közötti átfedési integrálok pedig E -vel és E^2 -tel arányos, de a Dirac-pontokhoz közeledve eltűnő tagokat hoznak be a homogén lineáris egyenletrendszer determinánsába. Ezek a tagok is sértik az elektron-lyuk szimmetriát, de a Dirac-pontok közelében ők sem teszik tönkre a kúpszerkezetet.

Érdekes probléma, hogy homogén nyújtás milyen hatással van a Dirac-kúpok szerkezetére. A kérdést Neto, Peres és Pereira vizsgálta elméleti úton [22]. Úgy találták, hogy egyszerű nyújtás hatására a Dirac-pontok egymás felé vándorolnak, mígnem egy kritikus érték felett tiltott sáv alakul ki az energiaspektrumban. Gyenge nyújtás hatása legújabb kutatások szerint [23][24] helyettesíthető egy effektív mágneses térrel.

A szorosan kötött modell Hamilton-operátora általános esetben (de a spintől továbbra is eltekintve) a

$$H = - \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (1.19)$$

alakban adható meg másodkvantált formalizmusban, ahol i, j indexelik az atomokat, c_i^\dagger, c_i az i . atomhoz tartozó keltő és eltüntető operátorok, és $t_{ji}^* = t_{ij}$. Ha csak az első szomszédok közötti kölcsönhatást vesszük figyelembe, akkor az (1.19) kifejezés a

$$H = -t \sum_{i,j} c_i^\dagger c_j \quad (1.20)$$

képletre redukálódik, ahol $t = |\gamma_0|$.

1.1.3. Kvázirészecske kép

Az alábbi levezetés módosított változata megtalálható Cserti József MTA doktori dolgozatában [14], DiVincenzo és Mele [25], Ando és munkatársának [26], illetve Neto és munkatársainak [19] cikkeiben.

Az elektronehéj Dirac-pontok körüli dinamikájának kényelmes leírásához érdemes áttermünk kvázirészecske képre. Induljunk ki a Schrödinger-egyenlet (1.10) alakjából, ϵ_0 -t válasszuk 0-nak, γ_0 -t pedig negatív valóságnak. Vezessük be az $\mathbf{R}_1 = \{\mathbf{0}, -\mathbf{a}_1, -\mathbf{a}_2\}$ jelölést, használatával az egyenlet az

$$E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} b_A(\mathbf{k}) \\ b_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \gamma_0 \begin{pmatrix} 0 & \sum_{\mathbf{R}_1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} \\ \sum_{\mathbf{R}_1} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_A(\mathbf{k}) \\ b_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = 0 \quad (1.21)$$

alakba rendezhető. A számolást rögzített hullámszám mellett végezzük. Vezessük be a

$$\begin{aligned}\psi_{A,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} b_A(\mathbf{k}), \\ \psi_{B,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} b_B(\mathbf{k})\end{aligned}\quad (1.22)$$

valós térbeli hullámfüggvényeket. Szorozzuk be az egyenlet mindkét oldalát $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ -rel, az

$$\begin{aligned}E(\mathbf{k})\psi_{A,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \gamma_0 \sum_{\mathbf{R}} \psi_{B,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \\ E(\mathbf{k})\psi_{B,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \gamma_0 \sum_{\mathbf{R}} \psi_{A,\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R})\end{aligned}\quad (1.23)$$

egyenletrendszeret kapjuk. A Dirac-pontok közelében jelentkező $e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}$, illetve $e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}}$ fázisok leválasztása érdekében vezessük be a

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}, \\ \psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}}\end{aligned}\quad (1.24)$$

hullámfüggvényeket, melyek nyilvánvalóan Bloch-hullámok lesznek:

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \\ \psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= e^{i\mathbf{K}'\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (1.25)$$

majd állítsuk elő a $\psi_{A,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $\psi_{B,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ hullámfüggvényeket a közeli Dirac-ponthoz tartozó Bloch-hullám modulálásával:

$$\begin{aligned}|\mathbf{k} - \mathbf{K}| \ll \frac{1}{a} \rightarrow \quad & \psi_{A,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \\ & \psi_{B,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \\ |\mathbf{k} - \mathbf{K}'| \ll \frac{1}{a} \rightarrow \quad & \psi_{A,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\pi} \phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}), \\ & \psi_{B,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (1.26)$$

ahol a ϕ amplitúdókat burkolófüggvénynek nevezzük, a fázistolást pedig célszerűségi okokból vezetjük be.

A ϕ burkolófüggvényeket úgy vezettük be, hogy térben lassan változzanak, ezért sorba fejthetjük őket:

$$\begin{aligned}|\mathbf{k} - \mathbf{K}| \ll \frac{1}{a} \rightarrow \quad & \phi_{i,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \phi_{i,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) + \mathbf{R} \left. \frac{\partial \phi_{i,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}'} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} + \dots \quad i = A, B, \\ |\mathbf{k} - \mathbf{K}'| \ll \frac{1}{a} \rightarrow \quad & \phi_{i,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \phi_{i,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) + \mathbf{R} \left. \frac{\partial \phi_{i,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}'} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} + \dots \quad i = A, B.\end{aligned}\quad (1.27)$$

A sorfejtés első két tagját helyettesítsük be a Schrödinger-egyenlet (1.23) alakjába, így az

$$\begin{aligned}
|\mathbf{k} - \mathbf{K}| \ll \frac{1}{a} &\rightarrow E(\mathbf{k})\phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \gamma_0 \mathbf{g}(\mathbf{K}) \frac{\partial \phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}'} \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \\
E(\mathbf{k})\phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) &= -\gamma_0 \mathbf{g}(-\mathbf{K}) \frac{\partial \phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}'} \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \\
|\mathbf{k} - \mathbf{K}'| \ll \frac{1}{a} &\rightarrow e^{-i\pi} E(\mathbf{k})\phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) = \gamma_0 \mathbf{g}(\mathbf{K}') \frac{\partial \phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}'} \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}), \quad (1.28) \\
E(\mathbf{k})\phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) &= -\gamma_0 e^{-i\pi} \mathbf{g}(-\mathbf{K}') \frac{\partial \phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}'} \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})
\end{aligned}$$

egyenleteket kapjuk, ahol alkalmaztuk a $\sum_{\mathbf{R}_1} e^{\pm i\mathbf{K}\mathbf{R}_1} = \sum_{\mathbf{R}_1} e^{\pm i\mathbf{K}'\mathbf{R}_1} = 0$ összefüggéseket, illetve bevezettük a $\mathbf{g}(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\mathbf{R}_1} \mathbf{R}_1 e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_1}$ jelölést. Tovább egyszerűsítve az egyenleteket az alábbi alakot kapjuk:

$$\begin{aligned}
|\mathbf{k} - \mathbf{K}| \ll \frac{1}{a} &\rightarrow E(\mathbf{k})\phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = +\gamma_0 \mathbf{g}(\mathbf{K}) \partial_{\mathbf{r}} \phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \\
E(\mathbf{k})\phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) &= -\gamma_0 \mathbf{g}(-\mathbf{K}) \partial_{\mathbf{r}} \phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \\
|\mathbf{k} - \mathbf{K}| \ll \frac{1}{a} &\rightarrow E(\mathbf{k})\phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) = -\gamma_0 \mathbf{g}(\mathbf{K}') \partial_{\mathbf{r}} \phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}), \quad (1.29) \\
E(\mathbf{k})\phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) &= +\gamma_0 \mathbf{g}(-\mathbf{K}') \partial_{\mathbf{r}} \phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}).
\end{aligned}$$

Az 1.1.1. szakaszban rögzített \mathbf{K}, \mathbf{K}' értékek behelyettesítésével könnyen ellenőrizhető, hogy $\mathbf{g}(\pm\mathbf{K}) = \frac{3}{2}a(\mp i, 1)$ és $\mathbf{g}(\pm\mathbf{K}') = \frac{3}{2}a(\pm i, 1)$. Fejezzük ki az összefüggéseket a $\mathbf{p} = (p_x, p_y) = \frac{\hbar}{i}(\partial_x, \partial_y)$ impulzusoperátor és a (1.14) képlettel definiált v sebesség segítségével. Vegyük figyelembe, hogy alacsony energián általában mindkét Dirac-pont környezetéből jönnek a komponensek, így az összefüggést írjuk fel rögtön 4×4 -es mátrixegyenlet alakjában:

$$E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \\ \phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \\ \phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \\ \phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = v \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y & 0 & 0 \\ p_x + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_x + ip_y \\ 0 & 0 & p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \\ \phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \\ \phi_{A,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \\ \phi_{B,\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (1.30)$$

Vegyük észre, hogy a Hamilton-operátor alakja már nem függ expliciten a hullámszámtól, így ez lesz a keresett effektív Hamilton-operátor.

A jobb alsó blokk $H_- = v(p_x\sigma_x - p_y\sigma_y)$ alakban írható fel, a bal felső blokk pedig $H_+ = v(p_x\sigma_x + p_y\sigma_y) = v\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma}$ alakra egyszerűsödik a Pauli-mátrixokból felépített $\boldsymbol{\sigma} =$

(σ_x, σ_y) vektor használatával:

$$H = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix} = v \begin{pmatrix} p_x \sigma_x + p_y \sigma_y & 0 \\ 0 & p_x \sigma_x - p_y \sigma_y \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

Vegyük észre, hogy az alsó blokkot a $H_- = \sigma_x H_+ \sigma_x$ unitér transzformáció köti össze a felsővel, ennek következménye az alacsonyenergiás sajátfüggvények K és K' pont körüli degenerációja, ami a legtöbb számolásban egyszerűen egy 2-es faktoriall vehető figyelembe [14].

A H_+ Hamilton-operátor alakját tekintve hasonlít az $\frac{1}{2}$ spinű részecske relativisztikus Hamilton-operátorára, innen ered a K, K' Dirac-pontok elnevezése, valamint ezért hívjuk a Dirac-pontok közelében a diszperziós relációt Dirac-kúpoknak. A formai hasonlóság ellenére az (1.31) Hamilton-operátor nemrelativisztikus, a Pauli-mátrixok pedig nem a spintéren, hanem az úgynevezett pszeudospintéren hatnak, a kétkomponensű hullámfüggvények különböző alrácsokhoz köthető komponenseit transzformálják.

A Dirac-fermionok jelenlétét kísérleti úton is igazolták szögfelbontott fotoemissziós spektroszkópia (ARPES) útján [12][13].

1.1.4. Kétrétegű grafén

A kétrétegű grafén rétegei úgy helyezkednek el egymás felett, hogy az egyik réteg A-típusú atomjai éppen a másik réteg B-típusú atomja alá kerüljenek. Jelölje a felső réteg atomjait A és B , az alsó réteg atomjait A' és B' . A koordinátarendszert az egyrétegű esethez hasonlóan vesszük fel, azzal a plusz kikötéssel, hogy az A' -típusú atomok éppen y irányban csúszzanak el egy rácsállandónyit az A -típusú atomokhoz képest, ahogy az az 1.4. ábrán látható.

Az elemi cellát, az $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ bázisvektorokat, illetve a \mathbf{d} vektort teljesen azonos módon definiálhatjuk, mint azt az egyrétegű grafén esetén tettük. Ebből következően a Bravais-rács, a reciprokrács és a Brillouin-zóna szerkezete, így a $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{K}, \mathbf{K}'$ vektorok is egyezni fognak az 1.1–1.2. ábrákon látottakkal. Jelentős eltérést az előzőektől az okoz, hogy az elemi cella most négy atomot tartalmaz – minden típusból egyet-egyét. Ennek következményeként az (1.5) képletben négy φ_i hullámfüggvénnyel, és a hozzájuk tartozó négy $b_i(\mathbf{k})$ amplitúdóval kell számolnunk, ezért az (1.21) Schrödinger-egyenlet is egy 4×4 -es mátrixegyenlet alakjában áll elő.

A diszperziós relációnak elsősorban az alacsonyenergiás része érdekes, ezért számítását a K, K' pontok körüli effektív Hamilton-operátorok segítségével végezzük. Utóbbit a McCann és Fal'ko által javasolt [27] alakban vesszük fel a

$$H_{2,\text{eff}} = \xi \begin{pmatrix} 0 & vp_- & 0 & v_3 p_+ \\ vp_+ & 0 & \xi |\gamma_1| & 0 \\ 0 & \xi |\gamma_1| & 0 & vp_- \\ v_3 p_- & 0 & vp_+ & 0 \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

képlet szerint, ahol a mátrix bázisa $\phi_A, \phi_B, \phi_{A'}, \phi_{B'}$ a K' pont körül és $\phi_B, \phi_A, \phi_{B'}, \phi_{A'}$ a K pont körül, $\xi = \pm 1$ a K', K pontokra, $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$, $v = \frac{3}{2\hbar}a|\gamma_0|$ az (1.14) definíció szerint, $v_3 = \frac{3}{2\hbar}a|\gamma_3|$, γ_0 az egy rétegen belüli legközelebbi szomszédok közötti, γ_1 az egymás alatt elhelyezkedő A'- és B-típusú atomok közötti, γ_3 pedig az y egyenes mentén elhelyezkedő szomszédos A- és B'-típusú atomok közötti hopping-paraméterek.

A γ csatolások értékeit különböző mérések alapján becsülhetjük: $\gamma_0 = -3,16 \text{ eV}$ [26], $\gamma_1 = -0,39 \text{ eV}$ [28], $\gamma_3 = -0,31 \text{ eV}$ [29]. Azt mondhatjuk tehát, hogy γ_0 és γ_1, γ_3 között nagyságrendileg egy 10-es szorzó van [30].

Az (1.32) Hamilton-operátor sajátérték-egyenletének megoldása a K pont körül az

$$E_{\alpha}(k, \varphi) = \pm \gamma_1 \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \tilde{k}^2(\beta^2 + 2) + (-1)^{\alpha} \Gamma \right]} \quad (1.33)$$

diszperziós reláció [14][27], ahol

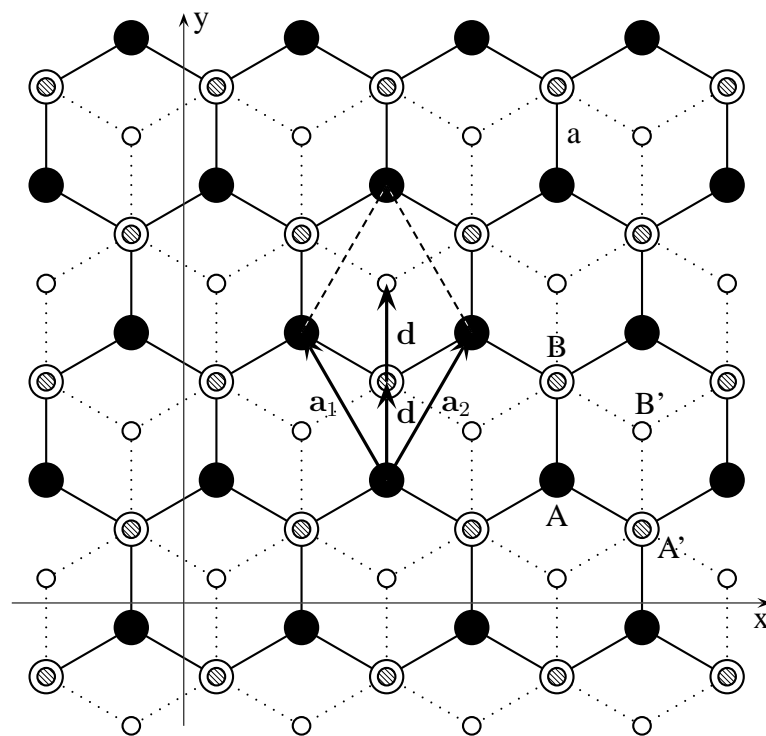
$$\Gamma = \sqrt{1 - 2\tilde{k}^2(\beta^2 - 2) + \tilde{k}^4\beta^2(\beta^2 + 4) + 8\tilde{k}^3\beta \cos 3\varphi}, \quad (1.34)$$

a $\mathbf{k} = k(\cos \varphi, k \sin \varphi)$ hullámszámot a K ponttól mérjük, $\tilde{k} = k \frac{\hbar v}{\gamma_1}$ az átskálázott hullámszám, $\beta = \frac{v_3}{v} \approx 0,1$, az α paraméter pedig az $\alpha = 1, 2$ értékeket veszi fel. A K' körüli diszperziós reláció hasonló alakú, ám abban $\cos 3\varphi$ ellenkező előjellel szerepel.

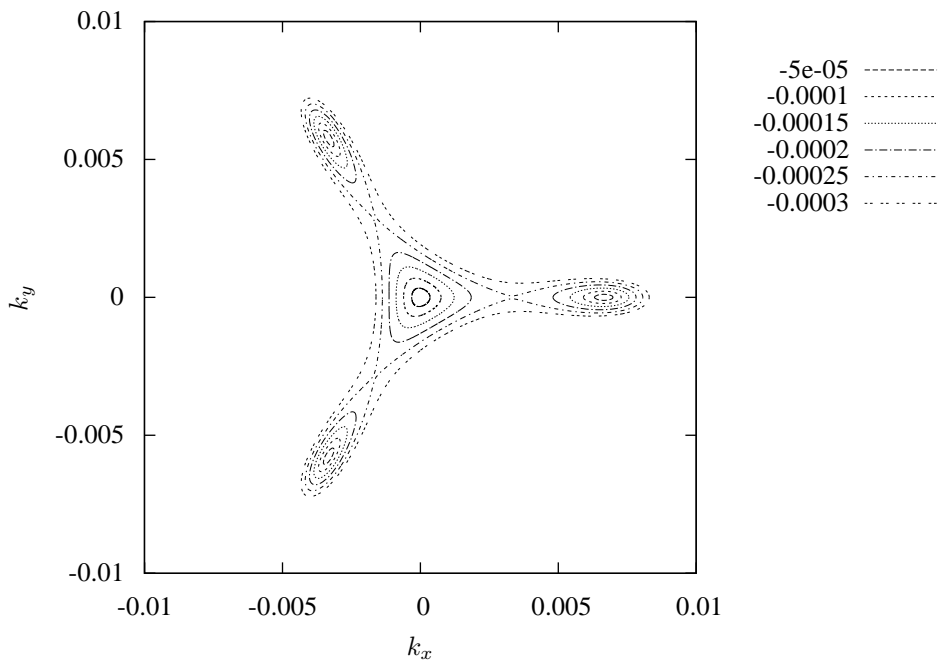
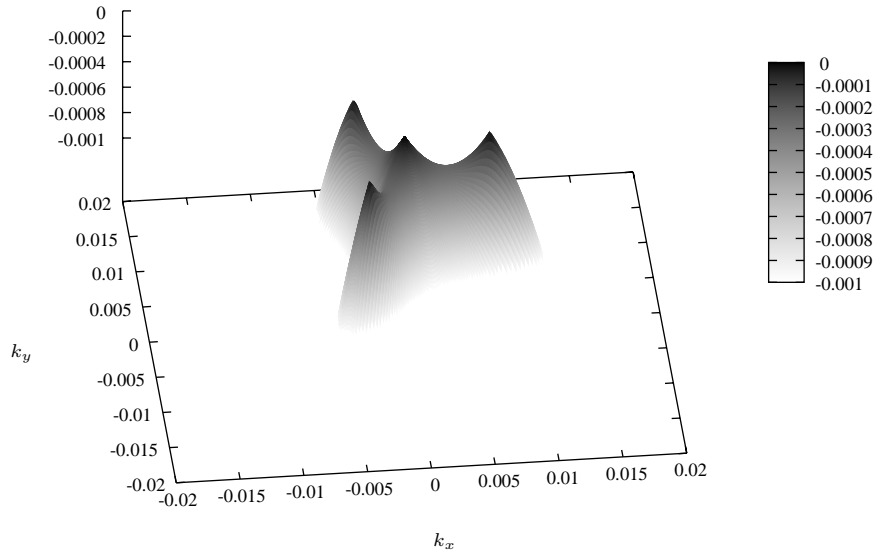
Az (1.33) felületek közül az E_1 az érdekesebb, mert ennek a jellegét torzítja jobban a β paraméter. Az E_2 felület kis k -ra egyszerűen két paraboloidból áll, melyek között $2|\gamma_1|$ gap van. Az E_1 felület ezzel szemben két, $E = 0$ -ra szimmetrikus felületből áll, melyek a $k_x = k_y = 0$ ponton kívül – a 120° -os forgatási szimmetria megtartásával – még három másik pontban érintkeznek, ahogy az az 1.5. ábrán is látható. A realisztikus $\beta = 0,1$ és $\frac{\gamma_1}{\gamma_0} = 0,1$ paraméterekkel készült ábráról leolvasható, hogy a négyszeres érintkezés okozta felhasadás egy szűk, $\approx 0,0005|\gamma_0|$ szélességű energiatartományban jelentkezik csak, az energia nullszintjétől távolodva parabola jellegűt kapunk.

A γ_3 csatolás elhanyagolásának megfelelő $\beta = 0$ paraméterválasztással a diszperziós reláció \mathbf{k} -ban izotróp jellege helyreáll, az E_1 felület két, $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ pontban érintkező paraboloidba megy át, ahogy az az 1.6. ábrán is látható. Látjuk, hogy durva energiefelbontás esetén a γ_3 paraméter figyelembevétele nem változtat a diszperziós reláció jellegén.

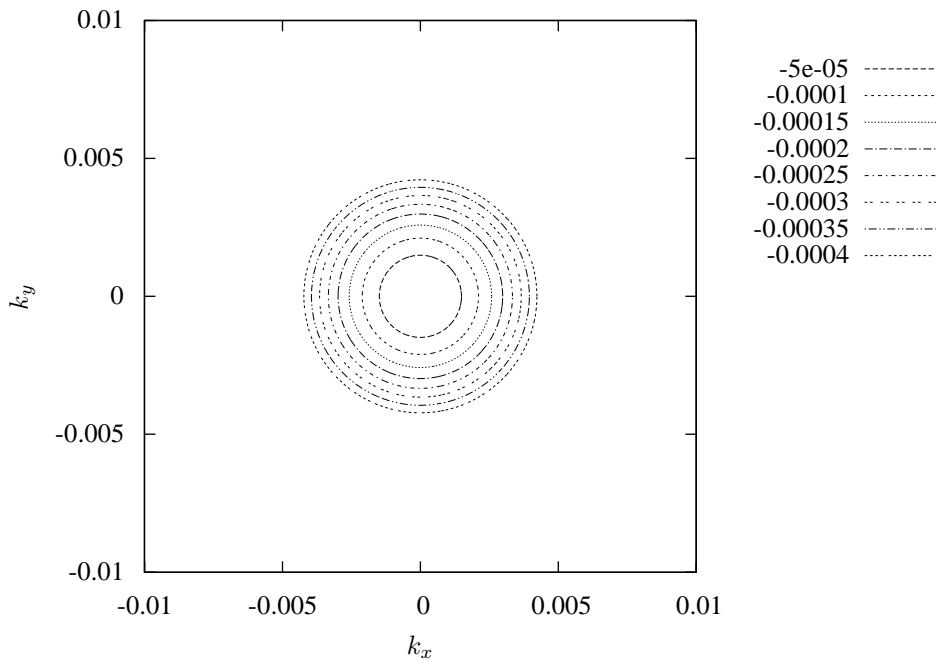
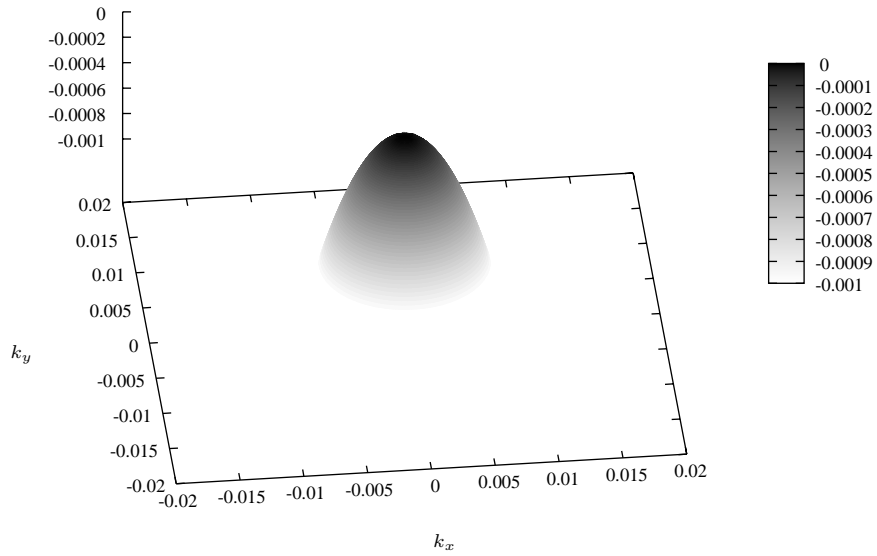
Ha kétrétegű grafént síkjára merőleges homogén elektromos mezőbe helyezzük, akkor ezzel megbontjuk a rétegei közötti szimmetriát, amit úgy írhatunk le, hogy az egyik réteg rácspontjaiban $+\epsilon_0$, a másik réteg rácspontjaiban pedig $-\epsilon_0$ onsite-energiát veszünk fel. A Hamilton-operátor diagonális elemeiben megjelenő $\pm\epsilon_0$ -ok hatására gap nyílik a pozitív és negatív energiájú tartomány közé. Amíg egyrétegű grafénban nehéz gap-et nyitni, addig kétrétegű esetben ez viszonylag könnyű dolog.



1.4. ábra. Kétrétegű grafén rácsszerkezete. A koordináta-rendszert hasonlóan választjuk, mint azt tettük az egyrétegű grafén esetén, de azt is kikötjük, hogy az „alsó” sík éppen az y -tengely irányában csúszson el egy ráczállandóval a „felső”-höz képest. Az egyes atomok típusát a felső síkon A és B, az alsón A' és B' jelöli. A szaggatott vonallal határolt elemi cella azonos az egy grafénréteg esetén kapottal, de itt négy atomot tartalmaz, minden típusból egyet-egyet.



1.5. ábra. Kétrétegű grafén E_1 diszperziós relációjának negatív fele a K pont körül a $\beta = 0,1$ és $\gamma_1 = 0,1 \cdot \gamma_0$ paraméterértékek mellett. Az energiát γ_0 , a hullámszámot $\frac{1}{a}$ egységekben mérjük. A diszperziós reláció pozitív tartományát a k_x, k_y síkra vett tükrözéssel kapjuk. Látható, hogy az egyrétegű esetben a Dirac-pontok környékén alacsony energián tapasztalt forgási szimmetria itt sérül, a két tartomány négy pontban érintkezik. A K' pont körüli diszperziós relációt a k_y egyenesre való tükrözéssel kaphatjuk meg.



1.6. ábra. Kétrétegű grafén E_1 diszperziós relációjának negatív fele a K, K' pont körül a $\beta = 0$ és $\gamma_1 = 0,1 \cdot \gamma_0$ paraméterértékek mellett. Az energiát γ_0 , a hullámszámot $\frac{1}{a}$ egységekben mérjük. A diszperziós reláció pozitív tartományát a k_x, k_y síkra vett tükrözéssel kapjuk. Látható, hogy a Dirac-pontok körüli diszperziós reláció forgási szimmetriája helyreáll a β paraméter eldobásával, de a diszperziós reláció jellege még mindig különbözik az egyrétegű esetben kapottól, nem lineárisan, hanem négyzetesen indul.

1.2. Kubo-formula

Az alábbiakban az elektromos vezetőképesség számításának alapjául szolgáló Kubo-formula [31] levezetését ismertetem $T = 0$ hőmérsékletre. A részletesebb levezetés megtalálható Mahan könyvében [32].

Induljunk ki homogén közegben ható,

$$\mathbf{E}^{\text{ext}} = \mathbf{E}_0^{\text{ext}} e^{i\mathbf{kr} - i\omega t} \quad (1.35)$$

módon változó külső elektromos terből. Nem túl nagy térerősség esetén feltételezhetjük az arányosságot a létrejövő $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ áramsűrűség, valamint a külső és indukált terek összegként előálló $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{kr} - i\omega t}$ elektromos tér között:

$$J_\alpha(\mathbf{r}, t) = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) E_{0,\beta} e^{i\mathbf{kr} - i\omega t}, \quad (1.36)$$

ahol a $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$ arányossági tényezőt vezetőképességnek nevezzük.

A rendszer teljes Hamilton-operátorát

$$H = H_0 + H' \quad (1.37)$$

alakban írhatjuk, ahol H' tartalmazza a töltések és a teljes elektromos tér közötti kölcsönhatást. Számoljunk nemrelativisztikusan, a $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ Coulomb-mérték rögzítésével. A φ skalárpotenciált válasszuk $\varphi = 0$ -nak a töltetlen mintában. A kölcsönhatási tag ekkor a

$$H' = -\frac{1}{c} \int d\mathbf{r} j_\alpha(\mathbf{r}) A_\alpha(\mathbf{r}, t) \quad (1.38)$$

alakban írható, ahol a vektorpotenciál

$$\frac{1}{c} A_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{-i}{\omega} E_\alpha(\mathbf{r}, t), \quad (1.39)$$

a $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ áramoperátor pedig

$$j_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \sum_i e_i [\mathbf{p}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{p}_i]_\alpha \quad (1.40)$$

alakú, ahol e_i , \mathbf{r}_i , \mathbf{p}_i rendre az i . részecske töltése, helyvektora és kanonikus impulzusa,

$$\mathbf{p}_i = m\mathbf{v}_i + \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i). \quad (1.41)$$

Az (1.37) Hamilton-operátorban H' alakja a Fourier-transzformált térben a

$$H' = \frac{i}{\omega} j_\alpha(\mathbf{q}) E_{0,\alpha} e^{-i\omega t} \quad (1.42)$$

alakot veszi fel, ahol az áramoperátor Fourier-transzformáltja

$$j_\alpha(\mathbf{q}) = \frac{1}{2m} \sum_i e_i [\mathbf{p}_i e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} + e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} \mathbf{p}_i]_\alpha. \quad (1.43)$$

A mérhető $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ áramsűrűséget a

$$J_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{V} \sum_i \langle v_{i,\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \rangle \quad (1.44)$$

képlettel írhatjuk fel, ahol felhasználtuk, hogy a töltéshordozók töltése azonos, v a rendszer térfogata, v_i az i . részecske sebessége. Helyettesítsük be a sebesség (1.41) összefüggésből kifejezett értékét az (1.44) egyenletbe, a

$$J_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{mV} \sum_i \langle p_{i,\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \rangle - \frac{e^2}{mcV} \sum_i A_\alpha(\mathbf{r}_i, t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (1.45)$$

összefüggésre jutunk. Ismerjük fel az első tagban az áramoperátor várható értékét, a második tagot pedig fejezzük ki a töltéshordozók n_0 sűrűsége és az $E_\alpha(\mathbf{r}, t)$ térerősség segítségével, alkalmazva az (1.39) összefüggést:

$$J_\alpha(\mathbf{r}, t) = \langle j_\alpha(\mathbf{r}, t) \rangle + i \frac{n_0 e^2}{m\omega} E_\alpha(\mathbf{r}, t). \quad (1.46)$$

Az előbbi kifejezés első tagját jelölje $\mathbf{J}^{(1)}$, második tagját pedig $\mathbf{J}^{(2)}$. A továbbiakban a $\mathbf{J}^{(1)}$ és $\mathbf{E}_0^{(1)}$ közötti arányossági tényező meghatározására törekszünk.

A számolást $T = 0$ hőmérsékleten végezzük. Heisenberg-képben felírva:

$$J_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \langle \psi' | e^{i(H_0+H')t} j_\alpha(\mathbf{r}) e^{-i(H_0+H')t} | \psi' \rangle. \quad (1.47)$$

Térjünk át kölcsönhatási képre, ennek érdekében vezessük be az

$$U(t) = e^{itH_0} e^{-it(H_0+H')} \quad (1.48)$$

operátort. Megmutatható, hogy a T időrendező operátor használatával az előbbi kifejezés az

$$U(t) = T \exp \left[-i \int_0^t dt' H'(t') \right] \quad (1.49)$$

alakba írható, ahol tetszőleges O operátorra bevezettük az

$$O(t) = e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t} \quad (1.50)$$

jelölést. Az $U(t)$ unitér operátor segítségével az (1.47) egyenlet

$$J_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \langle \psi' | U^\dagger(t) j_\alpha(\mathbf{r}, t) U(t) | \psi' \rangle. \quad (1.51)$$

alakja írható fel. A $t = 0$ -hoz tartozó $|\psi'\rangle$ hullámfüggvényekről egy újabb unitér transzformációval térjünk át a $t = -\infty$ -hez tartozó $|\psi\rangle$ hullámfüggvényekre:

$$|\psi\rangle = T \exp \left[-i \int_{-\infty}^0 dt' H'(t') \right] |\psi'\rangle, \quad (1.52)$$

majd vezessük be az

$$S(t_2, t_1) = T \exp \left[-i \int_{t_1}^{t_2} dt' H'(t') \right] \quad (1.53)$$

unitér operátorokat. Használatukkal az (1.51) egyenlet a

$$J_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \langle \psi | S^\dagger(t, -\infty) j_\alpha(\mathbf{r}, t) S(t, -\infty) | \psi \rangle \quad (1.54)$$

alakban áll elő.

Fejtsük sorba $S(t, -\infty)$ -t H' szerinti vezető rendig:

$$S(t_2, t_1) | \psi \rangle = \left[1 - i \int_{t_1}^{t_2} dt' H'(t') + \mathcal{O}(H'^2) \right] | \psi \rangle, \quad (1.55)$$

majd az eredményt helyettesítsük be az (1.51) várható értékbe. A

$$J_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}, t) = -i \int_{-\infty}^t dt' \langle \psi | [j_\alpha(\mathbf{r}, t), H'(t')] | \psi \rangle \quad (1.56)$$

kifejezésre jutunk, ahol kihasználtuk, hogy az áramoperátor várható értéke eltűnik külső tér hiányában:

$$\langle \psi | j_\alpha(\mathbf{r}, t) | \psi \rangle = 0. \quad (1.57)$$

A kommutátorból ki szeretnénk emelni $E_\alpha(\mathbf{r}, t)$ -t, ezért H' helyére írjuk be annak az (1.42) kifejtését:

$$[j_\alpha(\mathbf{r}, t), H'(t')] = \frac{i}{\omega} E_\beta(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} e^{i\omega(t-t')} [j_\alpha(\mathbf{r}, t), j_\beta(\mathbf{q}, t')], \quad (1.58)$$

itt felhasználtuk az \mathbf{E}_0 amplitúdó definícióját. Helyettesítsünk vissza az (1.56) kifejezésbe, eredményül a

$$J_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\omega} E_\beta(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega(t-t')} \langle \psi | [j_\alpha(\mathbf{r}, t), j_\beta(\mathbf{q}, t')] | \psi \rangle \quad (1.59)$$

összefüggést kapjuk. Ebből már kifejezhetjük az (1.36) vezetőképességet, értéke

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega(t-t')} \langle \psi | [j_\alpha(\mathbf{r}, t), j_\beta(\mathbf{q}, t')] | \psi \rangle + i \frac{n_0 e^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta}, \quad (1.60)$$

amely a térfogatra való kiátlagolás után a

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega V} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega(t-t')} \langle \psi | [j_\alpha(\mathbf{r}, t), j_\beta(\mathbf{q}, t')] | \psi \rangle + i \frac{n_0 e^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} \quad (1.61)$$

alakra hozható. Vegyük észre, hogy az integrál csak az időkülönbségtől függ, térjünk át a $(t - t')$ integrálási változóra. Alkalmazzuk az

$$\int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} j_\alpha(\mathbf{r}, t) = j_\alpha(-\mathbf{q}, t) = j_\alpha^\dagger(\mathbf{q}, t) \quad (1.62)$$

összefüggést. Eredményképpen a Kubo-formula

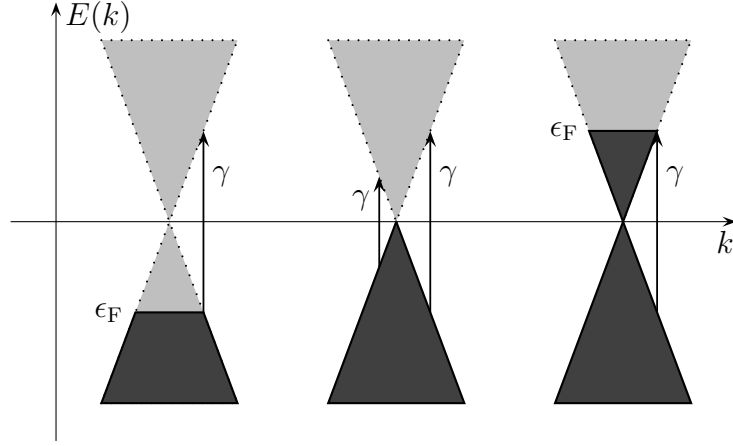
$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega v} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle \psi | [j_\alpha^\dagger(\mathbf{q}, t), j_\beta(\mathbf{q}, 0)] | \psi \rangle + i \frac{n_0 e^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} \quad (1.63)$$

alakját kapjuk, ahol $|\psi\rangle$ a sokrészesecske-rendszer alapállapota.

Az iménti levezetés csak $T = 0$ hőmérsékleten helytálló, de megmutatható, véges T hőmérsékleten is érvényes egy hasonló formula, valós részének alakja

$$\Re \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega V} \int_0^\infty dt \Re (e^{i\omega t} \langle [j_\alpha^\dagger(\mathbf{q}, t), j_\beta(\mathbf{q}, 0)] \rangle) \quad (1.64)$$

ahol a szinguláris tag járulékát elhagytuk, $\beta = \frac{1}{k_B T}$, a várható értéket pedig nem az alapállapotra, hanem a Gibbs-eloszlásra vonatkoztatva kell számolni.



1.7. ábra. Lehetséges optikai gerjesztések tiszta grafénban $T = 0$ hőmérsékleten. Az ábrán γ jelöli az elnyelt fotonok által létrehozott gerjesztéseket, melyek csak függőlegesek lehetnek. Látható, hogy a lehetséges optikai gerjesztések halmaza nem függ a Fermi-energia előjelétől, és az optikai vezetőképesség zérus a $0 < \omega < \frac{2|\epsilon_F|}{\hbar}$ frekvenciatartományban.

1.3. Optikai vezetőképesség grafénban

Ezen szakaszban röviden ismertetem a tiszta grafén optikai vezetőképességének néhány fontosabb jellemzőjét. Készítése során Peres [20] összefoglalójára támaszkodtam.

Láttuk, hogy egyrétegű tiszta grafénban a kvázirészecskék spektruma a foton diszperziós relációjához hasonlóan lineáris, ám az energia és a hullámszám közötti arányossági tényező $\hbar v \approx \frac{1}{380} \hbar c$ mintegy $\frac{1}{380}$ -ad része a fotonra felírt arányossági tényezőnek. Ennek következménye, hogy adott energiájú elemi gerjesztés hullámszáma mintegy 380-szorosa a foton megfelelő hullámszámának, tehát az (1.63), (1.64) Kubo-formulákban alkalmazhatjuk a $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ közelítést. Az optikai gerjesztések függőleges vonalakként jelennek meg az $E(k)$ állapottérben, ahogy az az 1.7. ábrán is látható.

$T = 0$ hőmérsékleten a Fermi-energia alatti állapotok teljesen betöltöttek, a Fermi-energia feletti pedig betöltetlenek. Ennek, az elektron-lyuk szimmetriának és a függőleges optikai gerjesztések következményeként ϵ_F Fermi-energia esetén a $0 < \omega < \frac{2|\epsilon_F|}{\hbar}$ frekvenciatartományban nem várunk optikai vezetést. Véges hőmérsékleten az állapotok betöltöttsége Fermi-Dirac-statisztikát követ, ekkor várunk vezetést az előbbi tartományban is, elsősorban annak felső határa közelében.

Az optikai vezetőképesség és a transzmissziós együttható egymáshoz szorosan kapcsolódó mennyiségek. Kapcsolatukat a

$$T = \left[1 + \frac{\sigma(\omega)}{2c\epsilon_0} \right]^{-2} \quad (1.65)$$

összefüggés írja le [33], a két mennyiség meghatározása tehát egyenértékű.

Peres, Stauber és Geim [33] vizsgálták a láthatótartomány-beli optikai vezetőképességet a diszperziós relációban másodrendig elmenve, a

$$\Re\sigma_{xx} = \sigma_0 \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{72} \frac{(\hbar\omega)^2}{\gamma_0^2} \right] \left(\tanh \frac{\hbar\omega + 2\epsilon_0}{4k_B T} + \tanh \frac{\hbar\omega - 2\epsilon_0}{4k_B T} \right) \quad (1.66)$$

eredményre jutottak, ahol $\sigma_0 = \frac{e^2}{4h}$ a minimális vezetőképesség. A fononok, rezonáns hibák hatásának figyelembevételére Peres, Stauber és Neto [34] végeztek számításokat. Katsnelson és társai numerikus szimulációval vizsgálták a rácshibák hatását [17][18]. Kravets és társai [35] rámutattak, hogy a Kubo-formulán alapuló számítások helyett a Fermi-féle aranyszabályból egyszerűbb módon származtatható a transzmissziós együttható az optikai tartományban, melynek kísérletek által megerősített értéke

$$T = 1 - \frac{W_{\text{abs}}}{W_{\text{i}}} = (1 - \pi\alpha)\theta(\omega - 2\epsilon_{\text{F}}) \approx 0,977, \quad (1.67)$$

ahol W_{i} a beeső és W_{abs} az elnyelt teljesítmény, α a finomszerkezeti állandó [15]. A Kramers-Krönig-reláció alapján az optikai vezetőképesség a látható tartományban az ($\epsilon_{\text{F}} > 0$) esetben a

$$\sigma(\omega) = \sigma_0\theta(\hbar\omega - 2\epsilon_{\text{F}}) + i\sigma_0\frac{4\epsilon_{\text{F}}}{\pi\hbar\omega} - i\frac{\sigma_0}{\pi}\ln\frac{\hbar\omega + 2\epsilon_{\text{F}}}{\hbar\omega - 2\epsilon_{\text{F}}} \quad (1.68)$$

alakot veszi fel [20]. Kétrétegű grafénre Abergel és Fal'ko [36], illetve Nicol és Carbotte [37] végeztek számításokat.

2. fejezet

A szimuláció bemutatása

Diplomamunkám részeként elkészítettem egy sokmagos implementációját a Katsnelson és társai [17][18] által javasolt numerikus módszereknek. Az alábbi fejezetben ismertetem a numerikus eljárást, illetve a futtatások során használt különböző grafén-modelleket.

2.1. A numerikus eljárás ismertetése

A szimulációs módszer a szoros kötésű közelítés általános (1.19) Hamilton-operátorát veszi alapul. Értékes optikaivezetőképesség-adatok meghatározásához viszonylag nagy rendszerre van szükség, a mai számítástechnikai erőforrásokkal ez mintegy 10^7 atomot jelent. A Hamilton-operátor nagyon ritka, mindössze $\mathcal{O}(N)$ elemet tartalmaz, ahol N az atomok száma. Szükség van tehát egy algoritmusra, amely $\mathcal{O}(N)$ -nel skálázva számítja ritka mátrixok sajátértéksűrűségét, illetve különböző eloszlású véletlen állapotok között vett várható értékét. A számításokat periodikus határfeltétel mellett végezzük, hogy elkerüljük az élek okozta effektusokat.

2.1.1. Állapotsűrűség számolása

Az állapotsűrűség számítására alkalmazott algoritmust Hams és De Raedt javasolta [38] nagyméretű mátrixok sajátérték-eloszlásának számítására. Részletes elemzése megtalálható a szerzőpáros cikkében.

Lényege, hogy $|\varphi(0)\rangle$ kezdőállapotot az $|i\rangle$ bázisállapotok véletlen fázisú szuperpozíciójaként állítjuk elő:

$$|\varphi(0)\rangle = \sum_i a_i |i\rangle, \quad (2.1)$$

ahol bevezettük az a_i véletlen komplex együtthatókat, a hullámfüggvényt pedig egyre normaljuk. Ezt követően egyenlő időközönként előállítjuk az időfüggő Schrödinger-egyenlet $|\varphi(t)\rangle$ megoldását, és minden időpontban kiszámoljuk a

$$\langle\varphi(0)|\varphi(t)\rangle = \langle\varphi(0)|e^{-iHt}|\varphi(0)\rangle$$

korrelációs függvényt, ahol éltünk a $\hbar = 1$ egységrendszer választásával. A korrelációs függvény ismeretében a lokális állapotsűrűséget a

$$d(\epsilon) = \sum_i \delta(\epsilon_i - \epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\epsilon t} \langle\varphi(0)|e^{-iHt}|\varphi(0)\rangle \quad (2.2)$$

képlet szerint számolhatnánk. Most azonban csak véges sok, egymást egyforma időközökkel követő pontban ismert a függvényérték, ezért a fenti integrált diszkrét Fourier-transzformációval közelítjük:

$$d(k\Delta\epsilon) = \frac{\Delta t}{2\pi} \sum_{n=-\frac{M-1}{2}}^{\frac{M-1}{2}} e^{i2\pi\frac{nk}{M}} \langle \varphi(0) | e^{-iHn\Delta t} | \varphi(0) \rangle, \quad (2.3)$$

ahol $k = -\frac{M-1}{2} \dots \frac{M-1}{2}$, és teljesül az $\frac{M\Delta\epsilon\Delta t}{2\pi} = 1$ összefüggés. Utóbbi következménye, hogy az energiafelbontást a teljes szimulációs idő határozza meg, a Δt időlépésnek pedig elegendően kicsinynek kell lennie, hogy a teljes energiaspektrum beleférjen a vizsgálatba. Belátható, hogy a véletlenszerű kezdőállapotokra számolt lokális állapotsűrűségeket kiátlagolva éppen a keresett állapotsűrűséget kapjuk:

$$D(\epsilon) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i(\epsilon). \quad (2.4)$$

Kellően nagy, $N \approx \mathcal{O}(10^7)$ méretű rendszereknél az átlagolást elhagyhatjuk, mert

$$D(\epsilon) \approx d(\epsilon). \quad (2.5)$$

eleve teljesül [38].

Nem ejtettünk még szót az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldási menetéről. Az alkalmazott módszer az e^{-iHt} időfejllesztő operátor Csebisev-kifejtésén alapul. Előnye hogy gyorsan konvergál, elég figyelembe venni az első néhány tagot. Tekintsük az e^{-izx} függvényt az $x \in [-1, 1]$ intervallum felett értelmezve. Csebisev-sora

$$e^{-izx} = J_0(z) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-i)^k J_k(z) T_k(x), \quad (2.6)$$

ahol J_k a k -adrendű Bessel-függvény, T_k pedig a k . Csebisev-polinom, melyet a

$$T_{k+1}(x) = -T_{k-1}(x) + 2xT_k(x) \quad (2.7)$$

rekurzív összefüggésen keresztül definiálunk $T_0 = 1, T_1 = x$ kezdőértékek mellett. Jelölje $\|H\|$ a H Hamilton-operátor normáját. Vezessük be a normált $\hat{H} = \frac{H}{\|H\|}, \hat{t} = t \cdot \|H\|$ mennyiségeket. Belátható (például a Hamilton-operátor diagonalizálásával), hogy az időfejllesztő operátor Csebisev-sora a (2.6) mintájára írható fel:

$$e^{-i\hat{t}\hat{H}} = J_0(\hat{t})I + 2 \sum_{k=1}^{\infty} J_k(\hat{t}) \tilde{T}_k(\hat{H}), \quad (2.8)$$

ahol bevezettük a $\tilde{T}_k(x) = (-i)^k T_k(x)$ módosított Csebisev-polinomokat, melyeket a $\tilde{T}_0(x) = 1, \tilde{T}_1(x) = -ix$ kezdőértékek mellett a

$$T_{k+1}(x) = T_{k-1}(x) - 2ixT_k(x) \quad (2.9)$$

rekurziós egyenlet definiál. A (2.9) rekurziós egyenleten keresztül egyszerűen felírhatjuk a \hat{H} Hamilton-operátor Csebisev-polinomjainak tetszőleges $|\psi\rangle$ hullámfüggvényen felvett értékét: $T_0(\hat{H})|\psi\rangle = |\psi\rangle, T_1(\hat{H})|\psi\rangle = -i\hat{H}|\psi\rangle$ és

$$T_{k+1}(\hat{H})|\psi\rangle = T_{k-1}(\hat{H})|\psi\rangle - 2i\hat{H}T_k(\hat{H})|\psi\rangle. \quad (2.10)$$

Az e^{-iHt} időfejlesztő operátor tetszőleges $|\psi\rangle$ hullámfüggvényen való hatását a (2.10) rekurziós képletet keresztül számoljuk. Az állapotsűrűségben az elektron spinjének hatását a számolás végén egyszerűen egy kettes szorzóval vesszük figyelembe.

Az időfejlesztést a Csebisev-sor 20. tagjáig elmenve, $\hat{t} = 0,5$ renormált lépésközzel számoltuk. Tapasztalataink szerint egy lépésköz alatt $\mathcal{O}(10^{-16})$ -os relatív hibát okozunk ezzel a normában, amely lényegében megegyezik a lebegőpontos változó relatív pontosságával.

2.1.2. Optikai vezetőképesség számolása

Az optikai vezetőképesség számításánál a Kubo-formula (1.64) alakjából $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ helyettesítéssel kapott képletéből indulunk ki:

$$\Re\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{\omega V} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle [j_\alpha^\dagger(t), j_\beta(0)] \rangle, \quad (2.11)$$

ahol a képletet a konvergenciát biztosító $\omega \rightarrow \omega + i\epsilon$ előírással értelmezzük az ϵ paraméter $\epsilon \rightarrow 0$ limeszében, a Drude-tag járulékat már elhagytuk, v a minta térfogata, \mathbf{j} pedig az áramoperátor, melyet a

$$\mathbf{P} = e \sum_i \mathbf{r}_i c_i^\dagger c_i \quad (2.12)$$

polarizációs operátor segítségével definiálhatunk a

$$\mathbf{j} = \dot{\mathbf{P}} = i[\mathbf{P}, H] \quad (2.13)$$

összefüggésen keresztül, ahol H a rendszer Hamilton-operátora szoros kötésű közelítésben, e az elektron töltése, a számolást pedig $\hbar = 1$ egységrendszerben végezzük. A szoros kötésű közelítés Hamilton-operátorának általános (1.19) alakját behelyettesítve a kommutátorba az áramoperátor

$$\mathbf{j} = i[\mathbf{P}, H] = -ie \sum_{i,j} t_{ij} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) c_i^\dagger c_j \quad (2.14)$$

kifejezését kapjuk. Megmutatható [39], hogy a (2.11) Kubo-formula a

$$\Re\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1 - e^{-\beta\omega}}{2\omega V} \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \sin \omega t \times \\ \times 2\Im \langle \varphi | f(H) j_\alpha^\dagger(t) (1 - f(H)) j_\beta(0) | \varphi \rangle \quad (2.15)$$

alakra hozható, ahol a várható értéket már a $|\varphi\rangle$ hullámfüggvényre számoljuk, melyet a bázisállapotok véletlen fázisú szuperpozíciójaként állítunk elő, illetve bevezettük a Dirac-Fermi-eloszlás

$$f(H) = \frac{1}{e^{\beta(H-\mu)} + 1} \quad (2.16)$$

operátorát. Vezessük be továbbá a

$$|\varphi_1(t)\rangle_x = e^{-iHt} [1 - f(H)] j_x | \varphi \rangle \quad (2.17)$$

$$|\varphi_1(t)\rangle_y = e^{-iHt} [1 - f(H)] j_y | \varphi \rangle \quad (2.18)$$

$$|\varphi_2(t)\rangle = e^{-iHt} f(H) | \varphi \rangle \quad (2.19)$$

hullámfüggvényeket. Ezek segítségével a (2.15) Kubo-formula átírható a

$$\Re\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1 - e^{-\beta\omega}}{2\omega V} \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \sin \omega t \times 2\Im \langle \varphi_2(t) | j_\alpha^\dagger | \varphi_1(t) \rangle_\beta \quad (2.20)$$

képletté, amely alapján ténylegesen számoljuk az optikai vezetőképességet. Elsőként a $|\varphi_1(0)\rangle_x, |\varphi_1(0)\rangle_y, |\varphi_2(0)\rangle$ hullámfüggvényeket határozzuk meg, ezt követően minden isőlépésben kiszámoljuk új értéküket az előző szakaszban írtak szerint, végül meghatározzuk a j_α operátor mátrixelemeit.

A numerikus integrálást diszkrét szinusztranszformációval végeztük, ekkor az $e^{-\epsilon t}$ -s tagnak nincs szerepe a konvergencia biztosításában, ablakfüggvény szerepét tölti be, ezért ettől eltekintettünk, és helyette ahol szükséges volt, utólagosan Gauss-simítást alkalmaztunk.

Hátravan még a $|\varphi_1(0)\rangle_x, |\varphi_1(0)\rangle_y, |\varphi_2(0)\rangle$ hullámfüggvények meghatározása, ehhez nem hiányzik más, mint a Dirac-Fermi-eloszlás operátorának meghatározása, melyet Csebisev-sorfejtéssel végzünk. Általában a $[-1, 1]$ intervallumban értelmezett $f(x)$ függvény Csebisev-során az

$$f(x) = \frac{1}{2}c_0T_0(x) + \sum_{i=1}^{\infty} c_iT_i(x) \quad (2.21)$$

sort értjük, ahol a c_i együtthatók egyértelműek és a

$$c_i = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 dx \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} f(x)T_i(x) \quad (2.22)$$

képlettel adhatóak meg. Alkalmazzuk a $x = \cos \theta$ változócserét. Ekkor az együtthatók a

$$c_k = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi d\theta f(\cos \theta) \cos(k\theta) = \Re \left[\frac{2}{n} \sum_{m=0}^{n-1} f \left(\cos \left(\frac{2\pi m}{n} \right) \right) e^{i2\pi \frac{mk}{N}} \right] \quad (2.23)$$

alakban jelennek meg, ami számolható diszkrét Fourier-transzformációval.

A Fermi-Dirac-operátor esetében is hasonlóan járhatunk el. Vezessük be először a renormált mennyiségeket: $\hat{H} = \frac{H}{\|H\|}$, $\hat{\beta} = \beta \cdot \|H\|$, $\hat{\mu} = \frac{\mu}{\|H\|}$, ahol a használt norma az operátornorma. \hat{H} sajátértékei már a $[-1, 1]$ intervallumba esnek, így (beláthatjuk pl. a Hamilton-operátor diagonalizálásával) alkalmazhatjuk az előbbi sorfejtést:

$$f(H) = \frac{e^{\hat{\beta}(\hat{\mu} - i\hat{H})}}{e^{\hat{\beta}(\hat{\mu} - \hat{H})} + 1} = \frac{1}{2}c_0T_0(\hat{H}) + \sum_{i=1}^{\infty} c_iT_i(\hat{H}), \quad (2.24)$$

ahol a c_i együtthatók megkaphatóak, mint az

$$f(x) = \frac{e^{\hat{\beta}(\hat{\mu} - x)}}{e^{\hat{\beta}(\hat{\mu} - \hat{x})} + 1} \quad (2.25)$$

függvény Csebisev-együtthatói.

A szimulációban a sorfejtés 3000. tagjáig mentünk el. Erre azért volt szükség, hogy $T = 0$ hőmérsékleten is megfelelő legyen a (2.25) függvény Csebisev-sora.

A spint itt is csak egy kettes faktorialis vevük figyelembe.

2.2. Grafén-modellek

Az alábbi szakaszban az egy- és kétrétegű grafénra, a vizsgált rácshibákra, illetve a homogén nyújtás hatásaira alkalmazott fizikai modellt ismertetem. A rács görbületétől eltekintettünk. Minden esetben periodikus határfeltétellel számoltunk, hogy elkerüljük a szabad élek állapotsűrűsége és optikai vezetőképessége kifejtett hatását.

2.2.1. Tiszta grafén

Az egy- illetve kétrétegű grafént a lehető legegyszerűbb szorosan kötött modellekkel vettük figyelembe. Az átfedési integrálokat elhanyagoltuk, az egy rétegen belüli hopping-tagok közül pedig csak a legközelebbi szomszédok között haladókat vettük figyelembe. Az egyrétegű grafént tehát az (1.20) alakú Hamilton-operátorral modelleztük:

$$H = -|\gamma_0| \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j, \quad (2.26)$$

ahol az $\langle i, j \rangle$ összegzés a rácsszomszédokra történik. Választásunkat az indokolja, hogy a Dirac-kúpszerkezet a realiztikusabb modellek mellett is megmarad, így jelentős új fizikát a pontosabb modellektől sem várunk a kimérhető tartományban.

Kétrétegű grafén esetén ehhez még hozzájönnek a rétegeket összekötő hopping-tagok. Ezek közül csak az egymás felett elhelyezkedő, az 1.4. ábrán A'-vel és B'-vel jelölt atomok közötti γ_1 paraméterű hopping-tagokat vesszük figyelembe. Ezt azzal indokoljuk, hogy a további tagok (elsősorban a γ_1 -gyel egy nagyságrendben lévő γ_3 hopping-paraméterű tagok, melyek az 1.4. ábrán az A-típusú atomokat a tőlük egy rácsállandónnyival az y tengely irányában elhelyezkedő B'-típusú atomokkal kötik össze) által behozott fizikai jelenségek az általunk vizsgálnál finomabb energiafelbontás mellett jelentkeznek. A kétrétegű grafént tehát a

$$H = -|\gamma_0| \left(\sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + \sum_{\langle i',j' \rangle} d_{i'}^\dagger d_{j'} \right) - |\gamma_1| \left(\sum_{\langle i',j \rangle} d_{i'}^\dagger c_j + \sum_{\langle i,j' \rangle} c_i^\dagger d_{j'} \right) \quad (2.27)$$

Hamilton-operátorral vesszük figyelembe, ahol i, j indexeli az egyik, i', j' a másik réteg atomjait, c^\dagger, c az egyik réteg, d^\dagger, d a másik réteg keltő és eltüntető operátorai, $\langle i, j \rangle$ pedig a szomszédos illetve egymáson elhelyezkedő atompárokra való összegzést jelöli.

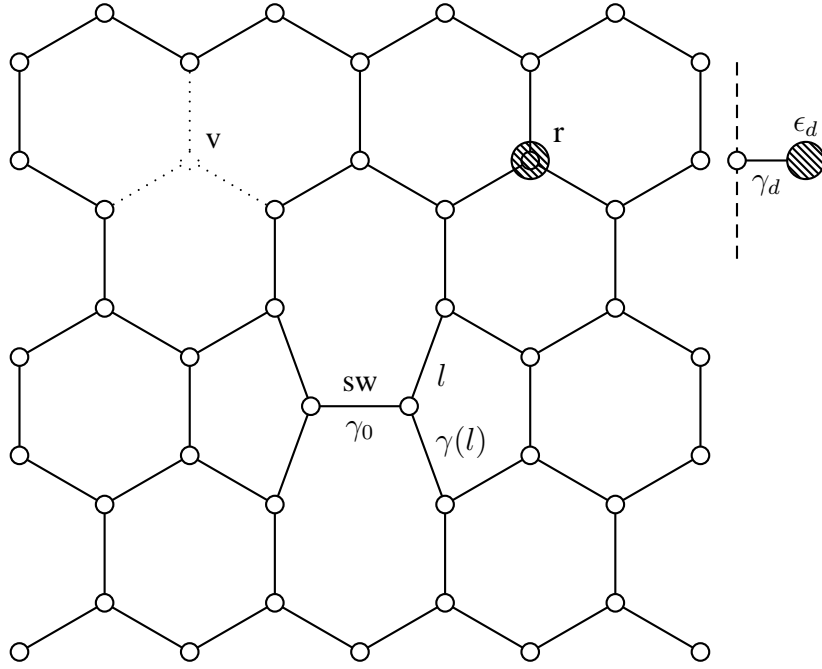
$|\gamma_0|$ és $|\gamma_1|$ hányadosát a mérések eredményeiből [26][28][29] számolható $\frac{\gamma_1}{\gamma_0} \approx 0,13$ -nak vettük.

2.2.2. Rácshibák

Háromféle rácshibát vizsgáltunk: vakanciát, rezonáns hibát és Stone-Wales-hibát. Az egyes hibatípusok grafikus szemléltetése látható a 2.1. ábrán.

Vakanciáról akkor beszélünk, ha a rácsból hiányzik egy szénatom. Ezt úgy vettük figyelembe, hogy az adott szénatomot és a Hamilton-operátorhoz adott járulékait kivettük a rendszerből, a környező rácsszerkezetben okozott deformációk leírásától eltekintettünk.

Rezonáns hibát kapunk, ha a rács egy szénatomja kötést létesít egy idegen gyökkel. Ezt úgy vesszük figyelembe, hogy hozzáadtunk a rendszerhez egy új rácspontot, melynek



2.1. ábra. A vizsgált rácshibák grafikus szemléltetése. Az ábrán v jelöli a vakanciát, r a rezonáns hibát, sw pedig a Stone-Wales-hibát. ϵ_d a rezonáns hiba rácspontjához társított onsite-energia, γ_d a rezonáns atomot bekötő hopping-paraméter. A Stone-Wales-hibára alkalmazott egyszerű modellünk esetén a 90° -kal elforgatott él hossza nem változik, így az élhez társított hopping-paraméter γ_0 marad, a bekötő élek hopping-paramétere viszont renormálódik a (2.29) összefüggésnek megfelelően.

koordinátái megegyeznek a hozzá kapcsolódó szénatom koordinátaival, majd az admolekulához hozzárendeltünk egy onsite-energiát és egy hopping-paraméterrel összekötöttük a hozzá tartozó szénatommal. Tehát a rezonáns hibák Hamilton-operátorhoz adott járuléka

$$H' = \epsilon_d \sum_{i'} b_{i'}^\dagger b_{i'} + \gamma_d \sum_{\langle i', j \rangle} \left(b_{i'}^\dagger c_j + c_j^\dagger b_{i'} \right), \quad (2.28)$$

ahol a c^\dagger, c a grafén szénatomjaihoz, b^\dagger, b pedig az admolekulákhoz tartozó keltő és el-tüntető operátorok, $\langle i', j \rangle$ pedig a rácshibákban résztvevő rácspontpárokra való összegzést jelöli. Ahol azt másképpen nem mondjuk a hidrogénezés hatását vizsgáljuk, melynek paraméterei $\epsilon_d = -0,0625|\gamma_0|$ és $\gamma_d = -2|\gamma_0|$ [40].

A Stone-Wales-hibát [41] úgy definiálhatjuk, hogy kiragadunk egy élet a grafénrétegből, majd a réteg síkjában felezőpontja körül 90° -kal elforgatjuk, végül mindenkét atomot az elforgatott helyzetükben hozzájuk közelebb eső szénatomokhoz kötjük be, létrehozva ezáltal két darab öt szénatomból és két darab hét szénatomból álló gyűrűt. A hibát egy egyszerű modellben vizsgáltuk: feltettük, hogy az elforgatott szénatomok egymástól mért távolsága nem változik, így az ezeket összekötő hopping-paramétert γ_0 -nak választottuk, az őket a rács szénatomjaihoz bekötő hopping-paramétereket viszont renormáltuk a

$$\gamma(l) = \gamma_0 e^{-3,37\left(\frac{l}{a}-1\right)} \quad (2.29)$$

összefüggésnek megfelelően [42], Pereira, Neto és Peres javaslatát követve [22]. Az elforgatott éleket véletlenszerűen helyeztük el, ügyelve arra, hogy ne legyen olyan pont,

amely kettő vagy több hibához kapcsolódik.

Ezen modellünk nem számol sem a hibák környezetének deformációjával, sem a rács görbületével, melyek topologikus hibák esetén jelentősek lehetnek [43][44][45][46], de a Stone-Wales-hiba hatásának vizsgálatához jó közelítés első rendben.

2.2.3. Homogén nyújtás leírása

Ezen szakaszban homogén nyújtás Hamilton-operátorra kifejtett hatását tárgyaljuk. A grafénban ébredő homogén feszültséget két paraméterrel jellemezhetjük: θ szögével és T nagyságával. Szimmetriai megfontolások útján belátható [22], hogy a feszültség hatására ébredő deformációs tenzor az

$$\epsilon'_T = \epsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\sigma \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

alakot veszi fel a feszültség irányához rögzített koordináta-rendszerben, ahol a σ paraméter a Poisson-tényező, melyet a grafitbeli $\sigma = 0,165$ értékkel becsülünk. Az eredeti koordináta-rendszerbe visszatérve a deformációs tenzor az

$$\epsilon_T = \epsilon \begin{pmatrix} \cos^2 \theta - \sigma \sin^2 \theta & (1 + \sigma) \cos \theta \sin \theta \\ (1 + \sigma) \cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta - \sigma \cos^2 \theta \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

alakban írható, ahol a deformáció θ szöge és ϵ nagysága a releváns paraméterek.

Adott $\delta^0 = (\delta_1^0, \delta_2^0)$ élvektor a deformáció hatására a

$$\delta_\alpha = \delta_\alpha^0 + \epsilon_{T,\alpha\beta} \delta_\beta^0 \quad (2.32)$$

képlet szerint változik. Az $|\delta|$ hosszúság és a már említett (2.29) képlet alapján számoljuk ki az élhez tartozó renormált hopping-paramétert.

Homogén nyújtás és rácshibák együttes vizsgálatakor feltettük, hogy a rácshibák sűrűsége kellőképpen alacsony ahhoz, hogy a Poisson-együttható értéke ne változzon.

2.3. A program bemutatása

Diplomamunkám során kiterjedt, részletes numerikus vizsgálatot folytattam. Az elvégzett munka egy része programozásból állt, ezért ezen szakaszban röviden bemutatom a programot.

A program C++ nyelven íródott az MPI API használatával. A program alapja egy saját készítésű, alapvető műveleteket tartalmazó lineáris algebrai könyvtár, amely abban az esetben hatásos, ha egyetlen, térbeli szerkezettel rendelkező $N \times N$ -es ritka mátrixszal (ilyen pl. a szomszéd, másodsomszéd, stb. kölcsönhatásokat figyelembe vevő Hamilton-operátor) számos szorzást akarunk elvégezni.

Alapgondolata, hogy a lineáris tér bázisát szétesztjük a magok között, és az egyes magokon elkészítjük a bázishoz tartozó lokális $m_i \times n_i$ -es mátrixot úgy, hogy az m_i hosszúságú végeredmény első n_i eleme a lokális báziselemekhez tartozzon, a továbbiak pedig blokkokba rendeződve a „szomszédos” magokhoz. A szomszédos magokról küldött adatblokkok pedig egy tárhelyre érkeznek, ahonnan egy korábban eltárolt kulcs segítségével

hozzáadjuk értéküket a megfelelő komponenshez. Az adatforgalom nemblokkoló módon történik, ha egy mag megkapta az összes szomszédos bloktól a komponenseket, akkor elvégzi azok összegzését.

Az eképpen implementált sokmagos lineáris algebra teljesítménye akkor jó, ha a magok között egyenletesen oszlik meg a bázisok száma, minél kevesebb a magok közötti kommunikáció mennyisége, és minél kevesebb a szomszédos (egymással kommunikáló) magok száma. A mátrix partícionálására időigényes algoritmust is alkalmazhatunk, ha utána elég sokszor akarjuk használni. A kód a partícionálást a Minnesotai egyetemen fejlesztett `PARMETIS` könyvtár használatával végzi. A kód $\mathcal{O}(10^7)$ -es rácspont esetén az eddig futtatott legnagyobb, 240-es magszámig szuperlineárisan skálázik, ami a jó partícionáló algoritmusnak, illetve annak köszönhető, hogy az egyes magokon csak a lokális adatok vannak tárolva, így elég nagy magszám esetén a cache felgyorsíthatja a számolást.

A program működése számos paraméter értékén keresztül vezérelhető. Minden paraméternek van egy alapértelmezett értéke, melyet parancssorból, vagy konfigurációs fájlból módosíthatunk, így könnyen szkriptelhető. A Hamilton-operátort, illetve a koordináta-adatokat megadhatjuk fájlból is, de az I/O műveletek lecsökkentése érdekében a vizsgált modelleket futás közben is generálhatjuk.

3. fejezet

Eredmények bemutatása

Ebben a fejezetben ismertetem numerikus vizsgálataink eredményeit. Érdeklődésünk középpontjában elsősorban három terület állt: a szennyezők megkülönböztethetőségének kérdése, az elméleti úton kevésbé vizsgált Stone-Wales-hiba jellemzése, illetve a rácshibák jelenlétében történő homogén nyújtás optikai vezetőképességre gyakorolt hatása. Munkánk során a kvalitatív jellemzésre, a jelenségek kimutatására törekedtünk, a szimulációs időt (és ezáltal az energiafelbontást) ennek megfelelően választottuk.

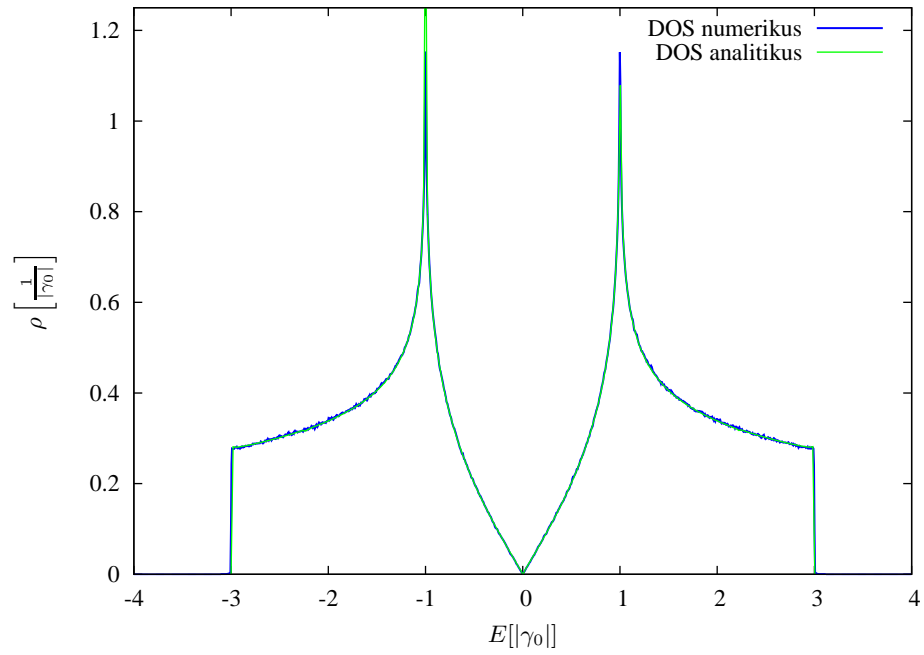
A szimulációkat $T = 0$ hőmérsékleten végeztük, hogy a véges hőmérséklet ne rontsa le a minket érdeklő jelenségek kimutathatóságát. Mivel a rácshibák vizsgálatára törekedtünk, ezért szimulációink nagy részét a még realiztikus $\mu = 0,1|\gamma_0|$ kémiai potenciál mellett futtattuk, mert ezen körülmények között a $[0, 2|\mu|]$ tartományában jelentkező optikai vezetőképesség teljes mértékben a szennyezők hatásának tudható be.

Modellünk nem veszi figyelembe a Coulomb-kölcsönhatás, illetve a fononok optikai vezetőképességben játszott szerepét, ugyanakkor az ezekkel kapcsolatos elméleti számítások [34][47] nem jelzik azok jelentős hatását a vizsgált $[0, 2|\mu|]$ tartománybeli vezetőképességben, zérus hőmérsékleten.

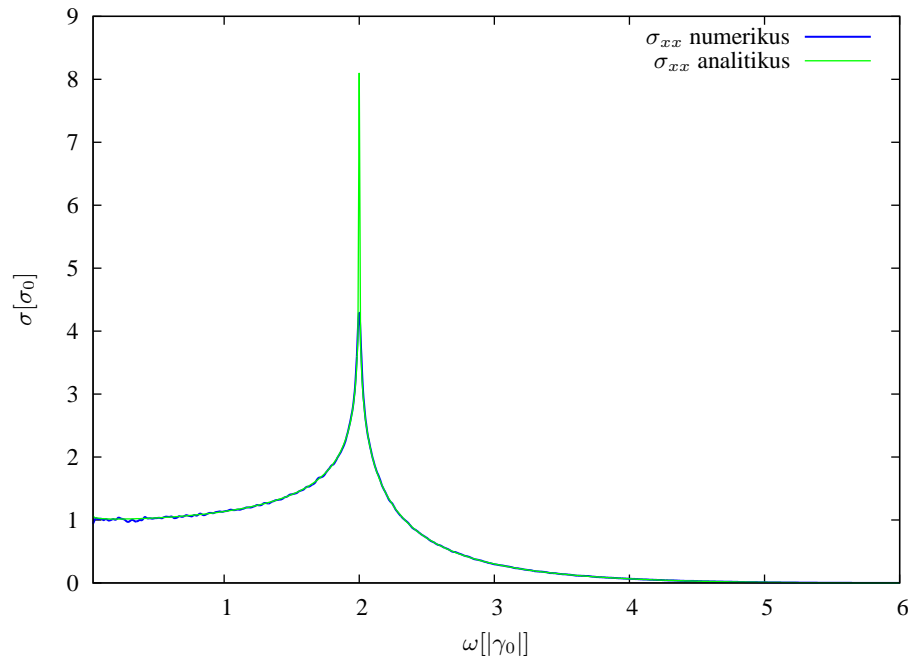
3.1. Kalibráció

Az alábbi szakaszban végzem a szimuláció hitelesítését. Elsőként a mechanikai feszültség nélküli tiszta grafén állapotosságára és optikai vezetőképességére kapott numerikus eredményeket vetjük össze a függelékben lejegyzett analitikus módszer görbéivel. A numerikus és analitikus eredmények nagyon jó egyezésben vannak, ahogy az a 3.1–3.2. ábrákról leolvasható. Az optikai vezetőképesség numerikus adatsorában alacsony frekvenciákon jelentkező megnövekedett szórás a Kubo-formula nevezőjében szereplő ω faktor következménye. Nagyobb szimulációs idő választásával, majd az adatsor simításával a kisméretű zaj csökkenthető.

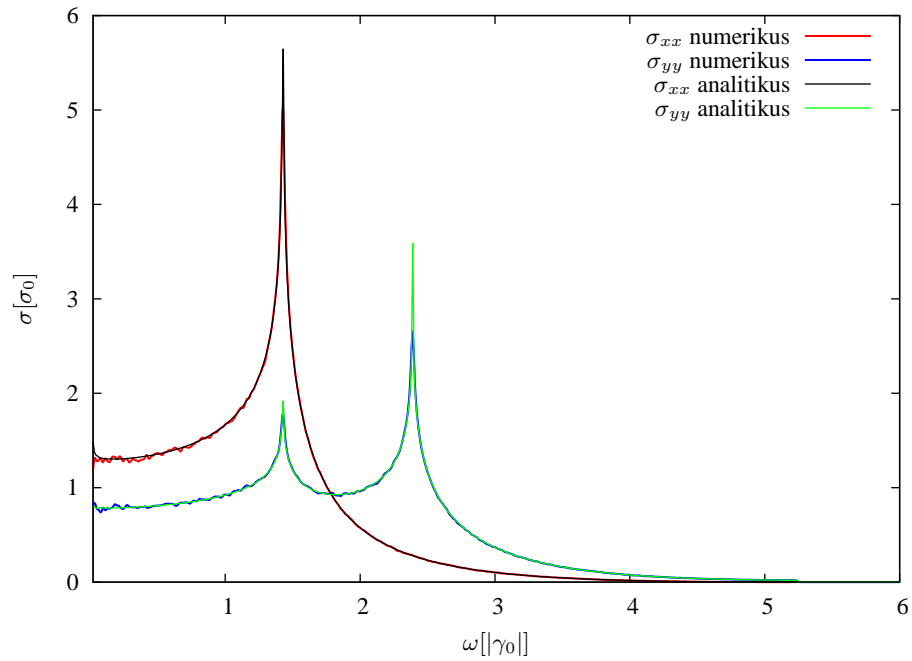
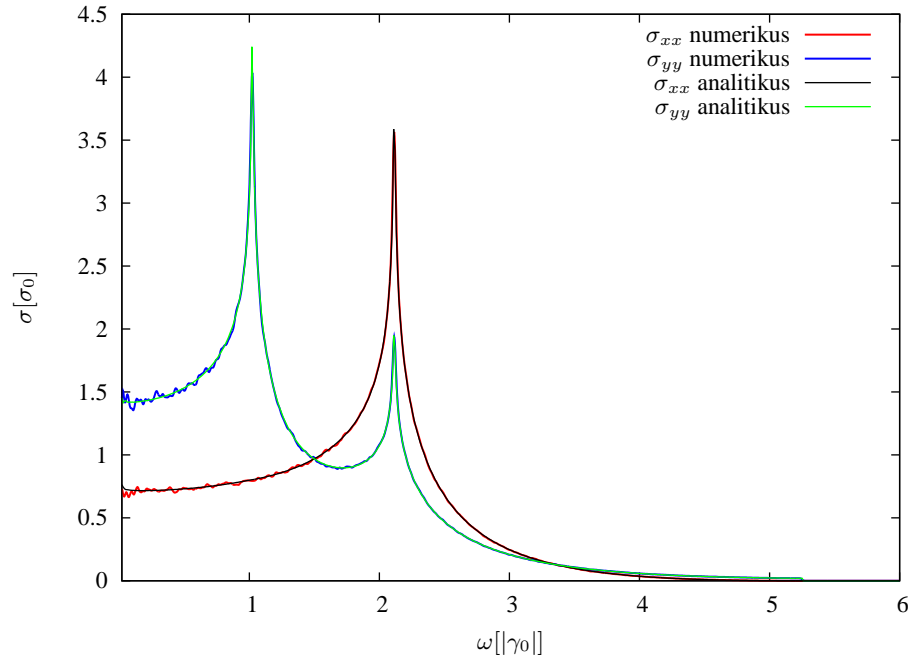
Grafénban az optikai vezetőképesség a rács szimmetriáinak következtében izotróp, $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ és $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$. Tekintsük ugyanis a rácsnak a rácspontokon áthaladó x, y tengelyekre vett tükrözéseit. Ezen transzformációk a rácsot önmagába viszik, és a Hamilton-operátor alakja is változatlan marad, így a vezetőképesség-tenzor offdiagonális elemei eltűnnek: $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$. A rácspontok körüli 120° -os forgatások szintén szimmetriái a rácsnak és az (1.20) Hamilton-operátornak, így felírhatjuk, hogy $\sigma_{nn} = \sigma_{xx}$, ahol n az x tengellyel 120° -os szöget zár be. Alkalmazzuk a kétindexes tenzorok transz-



3.1. ábra. Tiszta grafén állapotűrűsége az atomok számára normálva. Jól látható a numerikus és analitikus görbék pontos illeszkedése.



3.2. ábra. Tiszta grafén optikai vezetőképessége $T = 0$ hőmérsékleten, $\mu = 0$ kémiai potenciál mellett. Szimmetriai okok miatt a vezetőképesség σ_{xx} és σ_{yy} komponensei megegyeznek, az offdiagonális komponensek pedig eltűnnek: $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$.



3.3. ábra. Tiszta grafén optikai vezetőképessége x -irányú, illetve y -irányú $\epsilon = 0,1$ paraméterű homogén nyújtás mellett, $T = 0$, $\mu = 0$. $\sigma_0 = \frac{e^2}{4h}$ a minimális vezetőképesség. A szűk csúcsok közelében lévő eltérés az energiafelbontás megválasztásának és a numerikus eredmények simításának következménye. A kis frekvenciákon jelentkező szórás a Kubo-formula nevezőjében lévő ω faktornak tudható be, nagyobb szimulációs idő választásával lecsökkenthető. Az analitikus görbék a függelékben bemutatott analitikus módszer eredményei. A vezetőképesség offdiagonális komponensei itt is eltűnnek: $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$.

formációs képletét, majd használjuk ki, hogy az offdiagonális elemek eltűnnek. A

$$\sigma_{xx} \cos^2\left(\frac{2\pi}{3}\right) + \sigma_{yy} \sin^2\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \sigma_{xx} \quad (3.1)$$

egyenletre jutunk, melynek megoldása $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$.

Érdemes megjegyezni, hogy az optikai vezetőképesség izotróp marad a tárgyalt szennyezők jelenlétében is. Ennek oka, hogy a szennyezőket teljesen véletlenszerűen helyeztük el a grafénon, valamint egyik rácshiba sem tüntet ki külső irányt, ezért a transzformációk eredményeként a szennyezők azonos eloszlású szerkezetét kapjuk, amely termodinamikai határesetben azonos vezetőképességgel jár. Szimulációs eredményeink tükrözik ezt a szimmetriát. A továbbiakban izotróp esetben egyszerűen σ -val jelöljük a vezetőképességet.

A grafén megnyújtásával optikai vezetőképessége anizotróppá válik. A 3.3. ábrán látható az x majd y irányban $\epsilon = 0,1$ paraméterű homogén nyújtásnak kitett tiszta grafén optikai vezetőképességére kapott numerikus eredményeink összevetése az analitikus számolással. Látható, hogy a kapott görbék jól illeszkednek egymásra. Az éles csúcsoknál jelentkező apróbb eltérések az energiafelbontás, illetve a simítás következményei. A vizsgált speciális irányú nyújtások esetén a rendszer x és y tengelyre való tükrözési szimmetriája megmarad, így a $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$ összefüggés továbbra is érvényben marad. Homogén nyújtás mellett készített szimulációs eredményeink tükrözik ezt a szimmetriát.

A hitelesítés részeként a tiszta kétrétegű grafén optikai vezetőképességére kapott numerikus eredményeinket Abergel és Fal'ko számításaival [36] vetettük össze és jó egyezést állapítottunk meg a kettő között.

A vakanciák és rezonáns szennyezők állapotsűrűsége és zésus kémiai potenciál mellett optikai vezetőképességre kifejtett hatását Katsnelson és társai [17][18] eredményeivel hasonlítottuk össze, az eredményeket itt is egyezőnek találtuk. A szennyezők véges kémiai potenciál mellett az optikai vezetőképességben okozott hatását pedig Stauber, Peres és Neto számításaival [34] vetettük össze, és állapítottunk meg hasonlóságot.

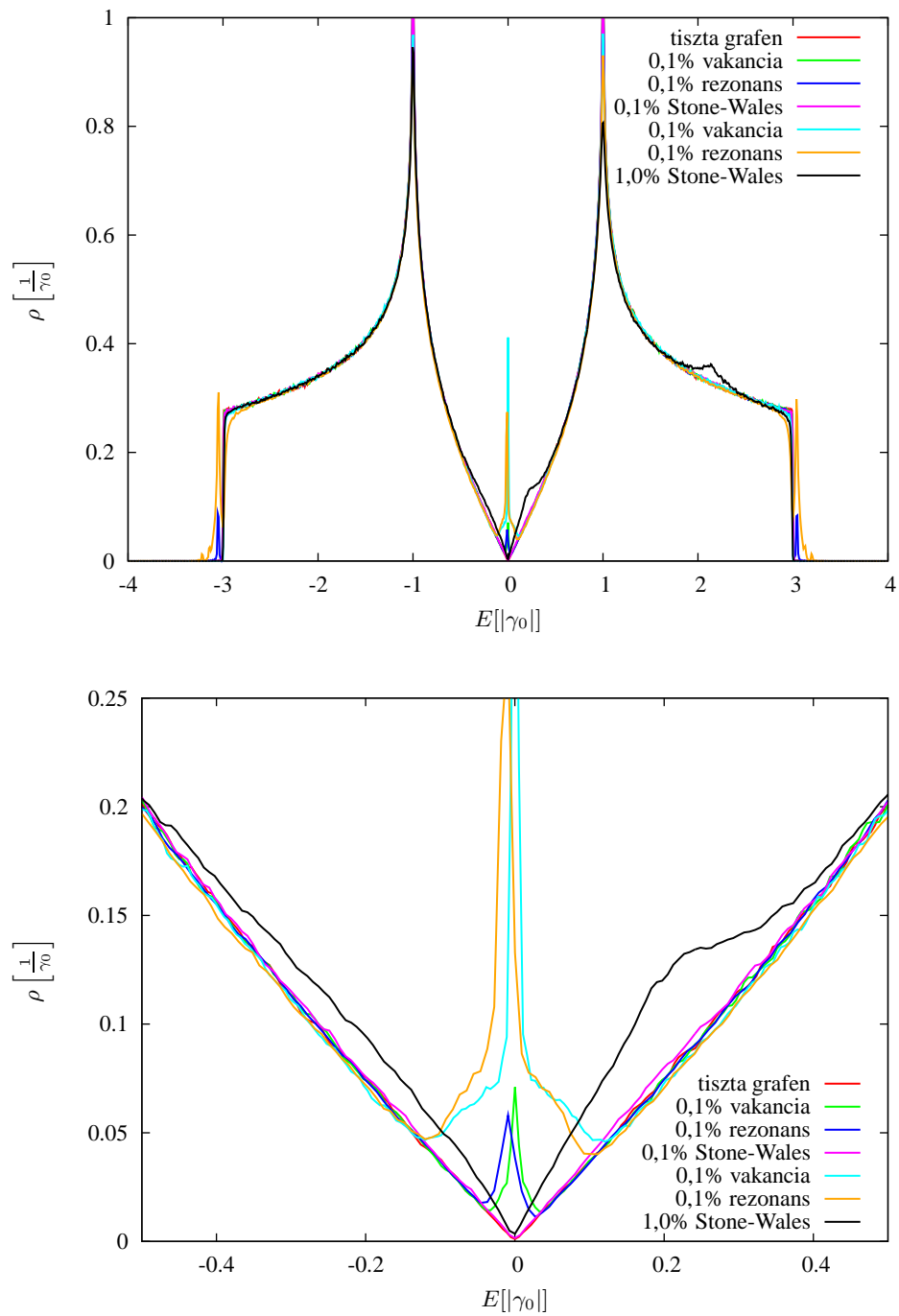
3.2. Szennyezők hatásának általános vizsgálata, különös tekintettel az állapotsűrűsége

Az alábbi szakaszban az egyes rácshibák állapotsűrűségének és optikai vezetőképességének jellemzőit vizsgálom, külön figyelmet fordítva a Stone-Wales-hiba jellemzésére. A szakasz végén kitérek a rácshibák optikai vezetőképességbeli jellemzők alapján törtépnő megkülönböztethetőségének kérdésére.

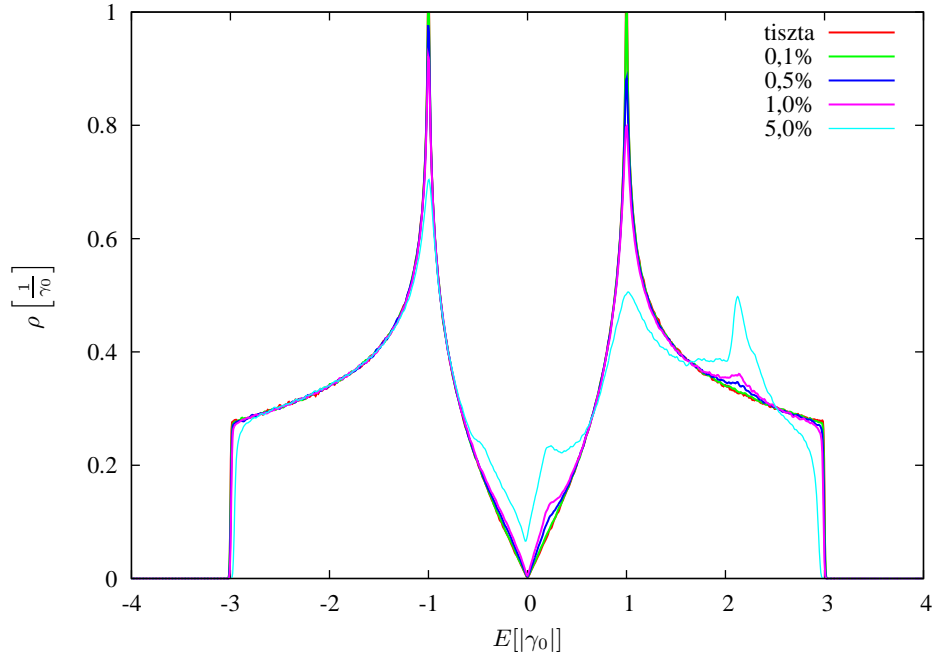
Ezen szakaszban és a fejezet további részeiben a rácshibák százalékban kifejezett gyakoriságát a grafén szénatomjainak számára vonatkoztatjuk.

A 3.1. ábrára tekintve láthatjuk, hogy tiszta grafén állapotsűrűsége szimmetrikus az energia nullnívjára. Ez a grafénban jelenlévő elektron-lyuk szimmetria következménye. Korábban láttuk, hogy tiszta grafénban a spektrum pozitív és negatív tartományát az egyik alrácshoz tartozó hullámfüggvény negálása viszi egymásba.

A vakanciák leírására alkalmazott modellünkben ez a transzformáció továbbra is egymásba viszi a spektrum pozitív és negatív tartományát, ezért itt is jelentkezik az elektron-lyuk szimmetria. Ennek következményeként szimmetrikus állapotsűrűséget várunk, amit a különböző szennyezők állapotsűrűségben okozott hatását vizsgáló 3.4. ábráról leolvas-



3.4. ábra. Szennyezett grafén atomszámra vonatkoztatott állapotossűrűsége. Az ábrán vakanciák, hidrogénezés ($\epsilon_d = -0,0625|\gamma_0|$, $\gamma_d = -2|\gamma_0|$) és Stone-Wales hibák kétféle gyakoriság mellett okozott hatása látható egyrétegű grafénban.



3.5. ábra. Különböző koncentrációjú Stone-Wales-hibák hatása az egyrétegű grafén állapotosságban. Az állapotosság az atomok számára vonatkoztatjuk.

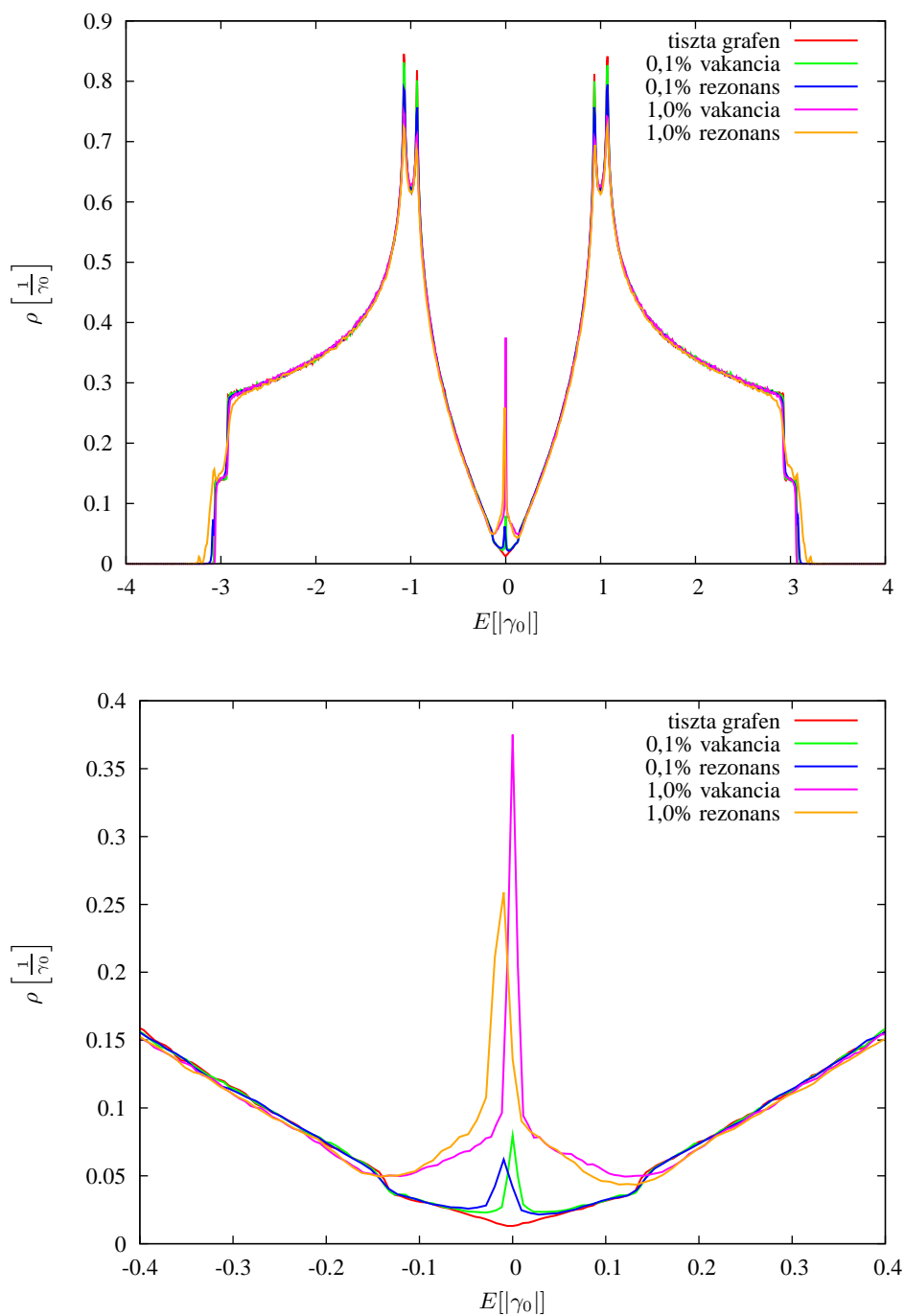
ható numerikus eredmények megerősítenek. Láthatjuk az ábrán az állapotosság alacsony energián történő felduzzadását, ami a vakanciák ismert jellemzője.

Rezonáns szennyezők esetében az onsite-energia jelenléte miatt az előbbihez hasonló transzformáció nem köti össze az energiaspektrum pozitív és negatív felét, az elektron-lyuk szimmetria sérül, ez tisztán leolvasható az ábráról is. Látható az is, hogy rezonáns szennyezők esetén az állapotosság nem zérus energia körül, hanem egy, elsősorban az ϵ_d energia által meghatározott energia körül dúsul fel. A csúcs helye nem mutat jelentős függést a szennyező gyakoriságától.

Az ábrán látható a Stone-Wales-hiba állapotosságban okozott hatásaira kapott szimulációs eredményünk is. Látható, hogy azonos koncentrációban lényegesen kisebb eltérést okoz az állapotosságban, mint a vakanciák és rezonáns hibák. Megállapítható, hogy a hiba hatására sérül az elektron-lyuk szimmetria, illetve az is, hogy a pozitív energiatartománybeli állapotosságban jobban érvényesülnek a deformációk.

Ezen jelenségek nem olyan meglepőek, ha meggondoljuk, hogy a Stone-Wales-hiba körül létrejövő öt és hét szénatomból álló gyűrűk miatt nem tudjuk egzaktul definiálni az alrácokat, így nincs jelen az elektron-lyuk szimmetriáért felelős transzformáció sem. A pozitív tartományban sokkal jelentősebb hatás pedig azzal magyarázható, hogy grafénban a negatív energiás állapotok hullámfüggvényének szomszédos atomokon felvett fázisa pozitívan korrelál, addig a pozitív energiás állapotok hullámfüggvényei esetében negatív korreláció figyelhető meg, amit a Stone-Wales-hiba öt és hét szénatomból álló gyűrűje korlátoz. Tovább gondolva azt várjuk, hogy a hiba koncentrációjának növekedésével az energiaspektrum $3|\gamma_0|$ körüli tartományában el kell fogynia az állapotoknak, ami jól látható a nagyobb koncentrációban jelenlévő hibák hatását is mutató 3.5. ábrán.

Ezen az ábrán az is jól kivehető, hogy a hibák által preferált állapotok néhány lapos domb formájában jelentkeznek az állapotosságban. Fontos még megjegyezni, hogy a Stone-Wales-hiba kis mértékben sérti a szimmetriát az állapotosság alacsonyenergiás



3.6. ábra. Szennyezett grafén atomszámra vonatkoztatott állapotsűrűsége. Az ábrán különböző koncentrációban jelen lévő vakanciák és hidrogénezés ($\epsilon_d = -0,0625|\gamma_0|$, $\gamma_d = -2|\gamma_0|$) hatása látható kétrétegű grafénban.

tartományában is, de a zérus energia közvetlen közelében csökkenő mértékben hoz be sajátállapotokat.

Kétrétegű grafénban a Stone-Wales-hibák esetében a γ_1 hopping-paraméterű tagok elhelyezésével kapcsolatos nehézségek miatt csak a rezonáns hibák és a vakanciák szerepét vizsgáltuk. Az állapotsűrűségben nagyon hasonló változást okoznak, mint azt az egyrétegű esetben láttuk, a jelentős különbséget az egyrétegű esethez képest a kétrétegű grafén két pár parabolából álló diszperziós relációja okozza. A kapott kétrétegű állapotsűrűségek a 3.6. ábrán láthatók.

3.3. Az optikai vezetőképesség vizsgálata

Térjünk át az optikai vezetőképesség tárgyalására. A szimulációkat $\mu = 0,1|\gamma_0|$ kémiai potenciálon végeztük. Láttuk, hogy tiszta grafén esetén a $0 < \omega < 2|\mu|$ tartomány tiltott sáv, itt nem jelentkezik optikai jel.

Rács hibák vagy szennyezők jelenlétében a k hullámszám már nem jó kvantumszám, a reciprokrács-térben az állapotok a Dirac-kúpok közelében, ámde jóval elkentebben találhatóak, ennek eredményeként megjelenik a tiltott sávban a hibák típusára jellemző vezetés.

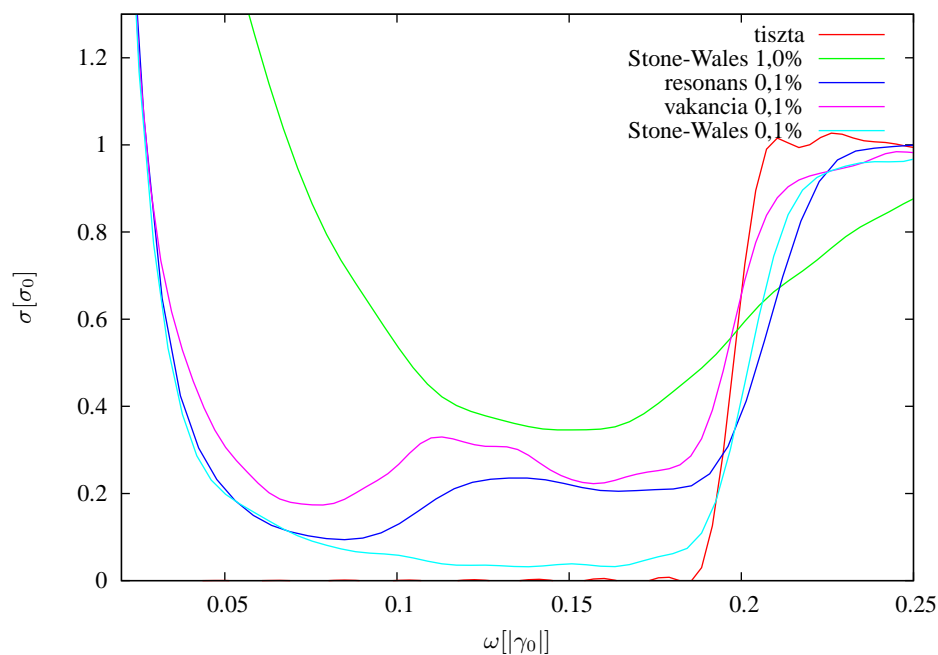
Az egyes hibatípusok egyrétegű grafénban jelentkező hatásai láthatóak a 3.7. ábrán. Megfigyelhetjük, hogy vakanciák esetén a zérus energia környékén feldúsult állapotoknak köszönhetően egy csúcs jelenik meg a $0 < \omega < 2|\mu|$ sáv közepe felé. Az elektron-lyuk szimmetria miatt a $\pm\mu$ kémiai potenciálon felvett vezetési görbék megegyeznek. Rezonáns szennyezők esetén szintén megjelenik egy csúcs a tartományban, ám az előzőhöz képest eltolva. Pozitív onsite-energiák esetén a csúcs az alacsonyabb energiák felé, negatív onsite-paraméter esetén pedig a magasabb energiák felé tolódik. Stone-Wales-hibák esetén nem jelenik meg látványos csúcs a tartományban, egyenletesen változó vezetőképességet tapasztalunk.

A vakanciák és rezonáns hibák kétrétegű grafén vezetőképességében okozott hatása látható a 3.9. ábrán. Fontos különbség az egyrétegű esethez képest, hogy tiszta grafén esetén az $0 < \omega < 2|\mu|$ tartományban egy éles csúcs tapasztalható, éppen γ_1 -nél. A csúcs azzal magyarázható, hogy a kémiai potenciált nem sokkal, de alacsonyabbra választottuk, mint a szimulációk során $|\gamma_1| = 0,136|\gamma_0|$ -nak tekintett hopping paraméter, így a vizsgált tartományban megmarad az (1.33) diszperziós reláció E_1 felületének alacsonyenergiás részéről a pozitív energiájú E_2 felületre történő gerjesztés. Megfigyelhetjük, hogy a csúcs jósági tényezője érzékeny a rezonáns szennyezők és vakanciák jelenlétére.

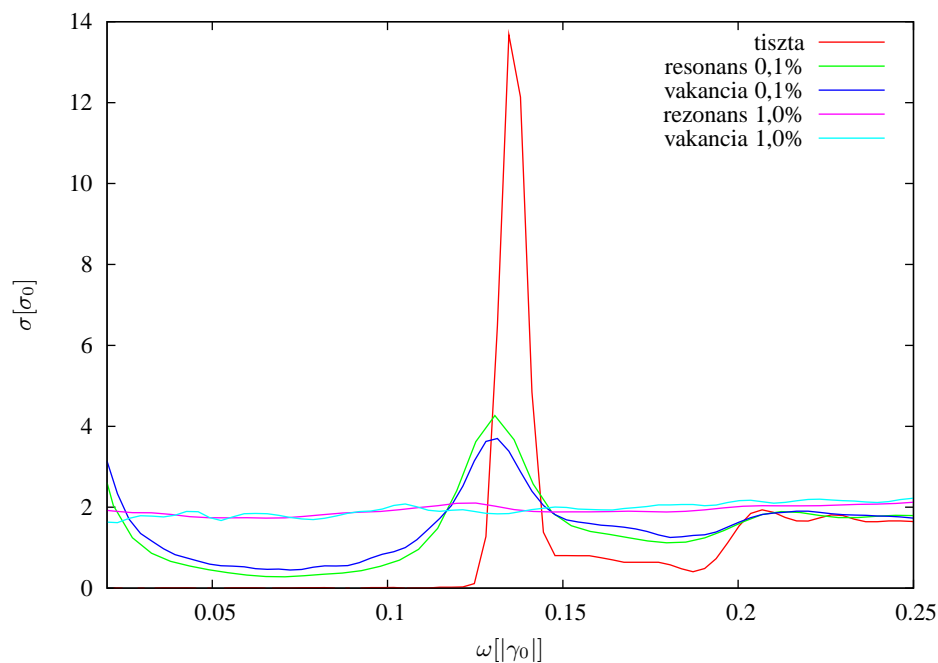
Az alább következő alfejezetekben részletesebben tárgyaljuk a rezonáns szennyezők, illetve a Stone-Wales-hibák esetét.

3.3.1. Rezonáns szennyezők vizsgálata

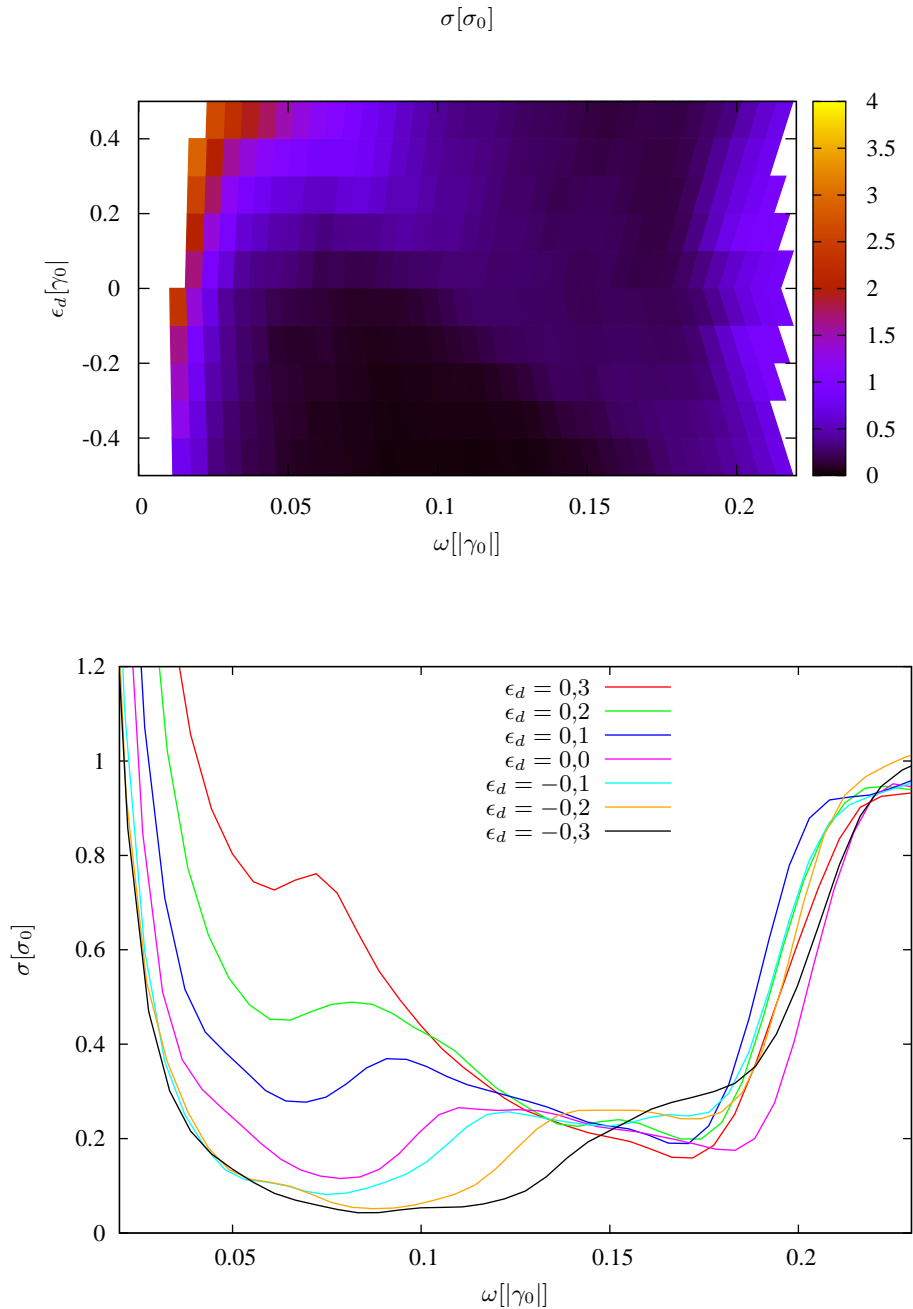
E szakaszban az onsite-energia értékének kimutathatóságát vizsgálom. Ehhez motivációt a kémiai detektálás lehetősége ad: a grafén egy szénatomjával kovalens kapcsolatot létesített szennyező két paraméterrel, a csatolás erősségét mutató γ_d paraméterrel, és az ϵ_d onsite-energiával jellemezhető. Vizsgálatok szerint γ_d a szennyezés típusától függetlenül $2\gamma_0$ körüli érték, ϵ_d viszont a szennyező anyagra jellemző állandó [48][40]. A cikkek szerzői pár gyök ϵ_d onsite-paraméterét határozták meg, és úgy találták, hogy azok párszor $0,1|\gamma_0|$ körüli értékűek.



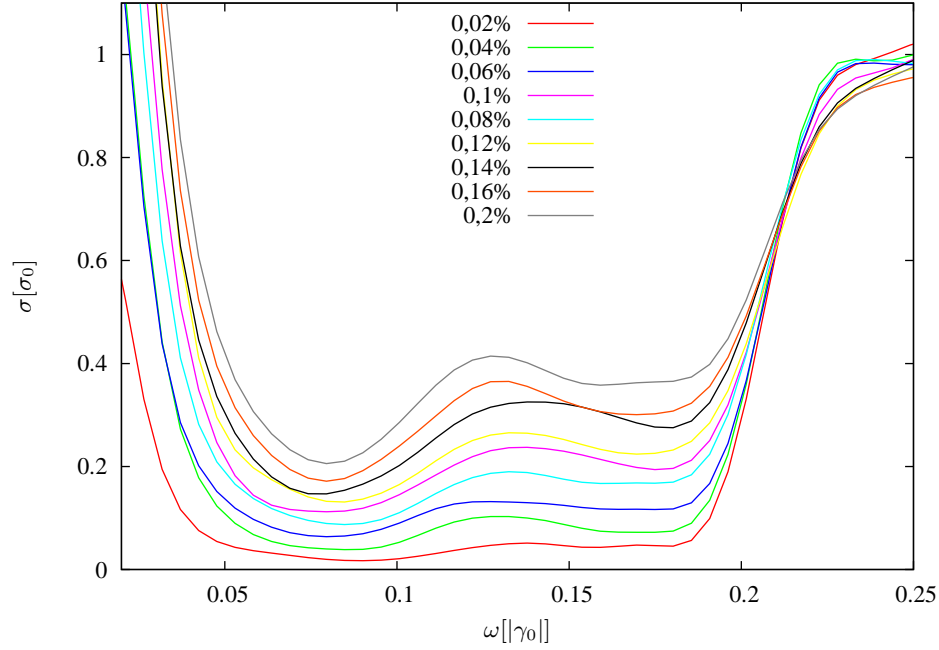
3.7. ábra. A különböző típusú szennyezők hatása az egyrétegű grafén optikai vezetőképességére a kémiai potenciál $\mu = 0,1|\gamma_0|$ értéke mellett vizsgálódva. Az ábrán 0,1%-os koncentrációban jelen lévő vakanciák és hidrogénezés ($\epsilon_d = -0,0625|\gamma_0|$, $\gamma_d = -2|\gamma_0|$), valamint 0,1%-os és 1,0%-os gyakoriságú Stone-Wales-hibák hatása szerepel.



3.8. ábra. Vakanciák és rezonáns szennyezők hatása kétrétegű grafén optikai vezetőképességére a kémiai potenciál $\mu = 0,1|\gamma_0|$ értéke mellett vizsgálódva. Az ábrán 0,1%-os, illetve 1,0%-os koncentrációban jelen lévő vakanciák és hidrogénezés ($\epsilon_d = -0,0625|\gamma_0|$, $\gamma_d = -2|\gamma_0|$), hatása látható.



3.9. ábra. Az optikai vezetőképesség onsite-paramétertől való függése a $0 < \omega < 2\mu$ tartományban. A görbék felvétele a $\gamma_d = 2\gamma_0$, $T = 0$, $\mu = 0,1|\gamma_0|$ értékek, valamint 0,1%-os szennyezés mellett történt. Látható, hogy a rezonáns szennyezők hatására létrejövő csúcs helye jó közelítéssel lineárisan változik az onsite-energia függvényében.



3.10. ábra. Az optikai vezetőképesség rezonáns szennyezők koncentrációjától való függése a $0 < \omega < 2\mu$ tartományban, egyrétegű grafén esetén. A görbék felvétele a $\gamma_d = 2\gamma_0$, $T = 0$, $\mu = 0,1|\gamma_0|$, $\epsilon_d = -0,062|\gamma_0|$ értékek mellett történt. Látható, hogy a rezonáns szennyezők hatására létrejövő csúcs helye csak kevéssé változik a koncentráció függvényében.

A $\gamma_d = 2,0\gamma_0$ feltételezéssel élve különböző onsite-paraméterek mellett felvettem az optikai vezetőképesség görbéjét a $0 < \omega < 2|\mu|$ tartományban egyrétegű grafénra, 0,1%-os szennyezés mellett. Az eredmények a 3.9. ábrán láthatóak. A színárnyalatos ábráról leolvasható, hogy a rezonáns szennyezők hatására az optikai vezetőképességben megjelenő csúcs helye jó közelítéssel lineárisan függ az onsite-paraméter értékétől, ezért a csúcs helyének mérésén keresztül széles tartományban meghatározható az onsite-paraméter.

Az iménti mérési eljárás akkor alkalmazható a gyakorlatban is, ha a rezonáns csúcs helye kevéssé függ a szennyezők koncentrációjától. Egy koncentrációtól való gyenge függésre ugyanis könnyen korrigálhatunk, például a $0 < \omega < 2|\mu|$ tartománybeli átlagos vezetőképesség becslésével.

Ennek vizsgálatára felvettem egyrétegű grafén optikai vezetőképességének görbéit különböző koncentrációjú hidrogén-szennyezések ($\epsilon_d = -0,062|\gamma_0|$) mellett. A kapott görbék a 3.10. ábrán láthatók. Megállapíthatjuk, hogy a csúcs helye a koncentráció egy nagyságrendjét átfogva sem mozdult el jelentősen, így a módszer alkalmas lehet az onsite-paraméter meghatározására.

Érdeemes megemlíteni, hogy rezonáns szennyezők esetében is definiálhatunk két alrácst (a szennyező atomokat is a rács részének tekintve), melyek együttesen kiadják a teljes rácsot, és hopping-tagok csak a két alrác között haladnak. Láttuk, hogy a hullámfüggvény egyik alrácson felvett értékeinek negálása nem teremt kapcsolatot a pozitív és a negatív tartománybeli sajátállapotok között. Igaz viszont, hogy ezen transzformáció összekapcsolja az ϵ_d onsite-paraméterű pozitív energiájú állapotokat a $-\epsilon_d$ onsite-paraméterű negatív energiájú állapotokkal, és viszont. Ennek következménye, hogy a kémiai potenciál és az onsite-paraméter együttes negálása nem változtat az optikai vezetőképesség ábráján,

azaz a kémiai potenciál előjelének megfelelő választásával elérhetjük, hogy a 3.9. ábra nagyobb kontrasztot biztosít felében mérjünk.

Végezzük el a vizsgálatot kétrétegű grafénra is. A kapott eredményeket a 3.11. ábra foglalja össze. Azt látjuk, hogy a kétrétegű grafénban γ_1 -nél jelentkező csúcspólusági tényezője a szennyezőknek nem csak a koncentrációjára, hanem onsite-paraméterére is rendkívül érzékeny. Ez a mérés önmagában nem alkalmas az onsite-paraméter meghatározására, de jó kiegészítője lehet az egyrétegű grafénon végzett mérésnek, segítségével javítható a mérés pontossága, illetve megbecsülhető a szennyezők koncentrációja is.

3.3.2. A Stone-Wales-hiba vizsgálata

A szakaszban a Stone-Wales-hibák kimutathatóságával kapcsolatos eredményeket ismertetem.

Láttuk, hogy a Stone-Wales-hibák jelenléte alacsony energián is sérti az elektron-lyuk szimmetriát. Ez lehetővé teszi a szimmetria sérülésének kimutatását az optikai vezetőképesség vizsgálatával.

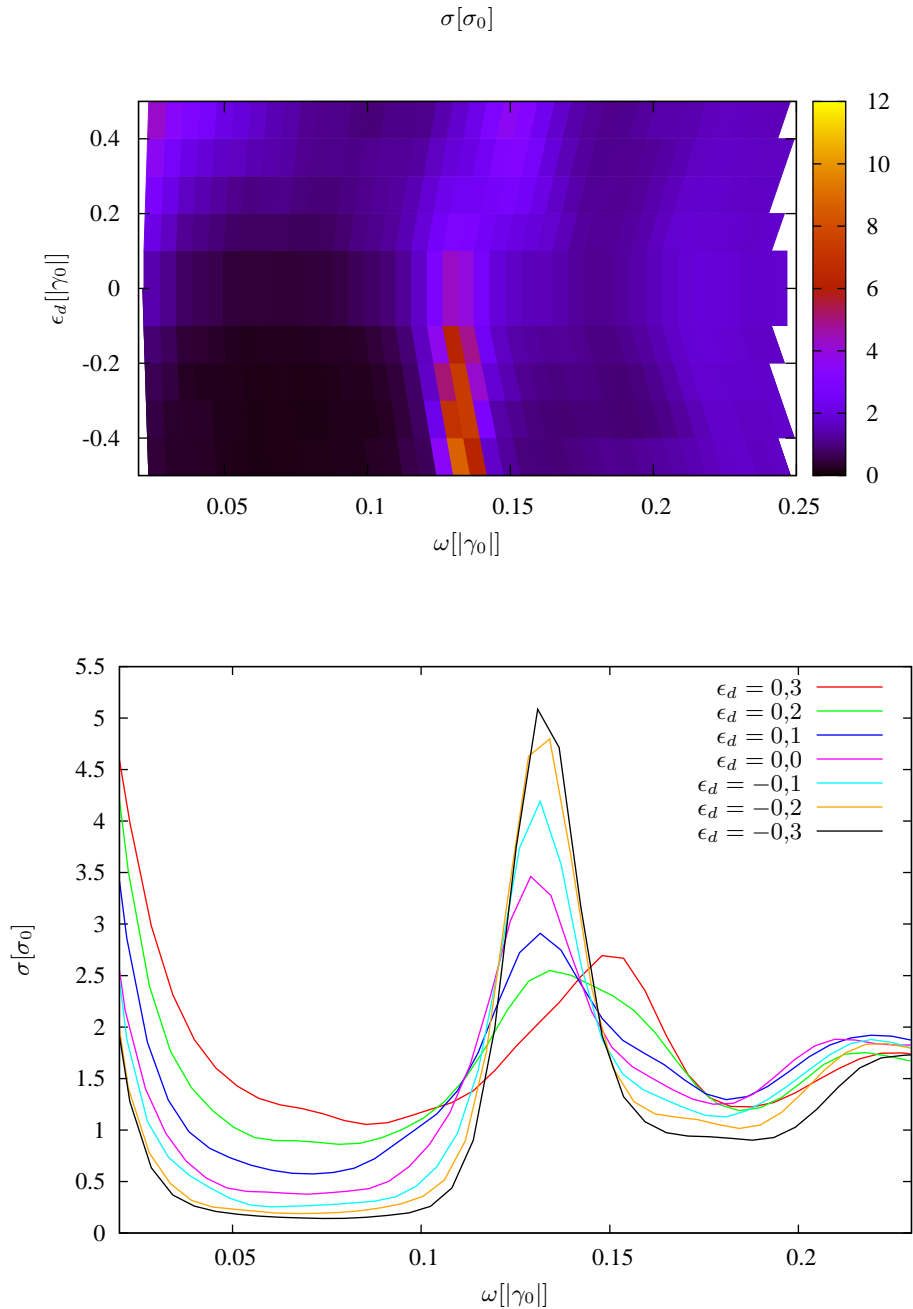
Vegyük fel az optikai vezetőképesség görbéit egyrétegű grafén 0,5%-os Stone-Wales-szennyezése mellett, $\pm\mu_i$ kémiai potenciál-párokban. Elektron-lyuk szimmetria esetén a görbék tökéletesen fednék egymást. A szimulációs eredmények a 3.12. ábrán láthatók. A görbepárok között csak kis eltérés tapasztalható, de az szisztematikus, mindegyik görbepárra azonos jelleget mutat, ezzel kimutattuk az elektron-lyuk aszimmetriát optikai vezetőképességen keresztül is.

Vizsgáljuk mechanikai deformáció optikai vezetőképességben okozott hatását vakanciák és Stone-Wales-hibák jelenlétében. Mechanikai deformáció hiányában a forgatási és tükrözési szimmetriák következtében mindkét esetben izotróp lesz a vezetőképesség. Deformáció hatására mindkét esetben anizotróp lesz a vezetőképesség.

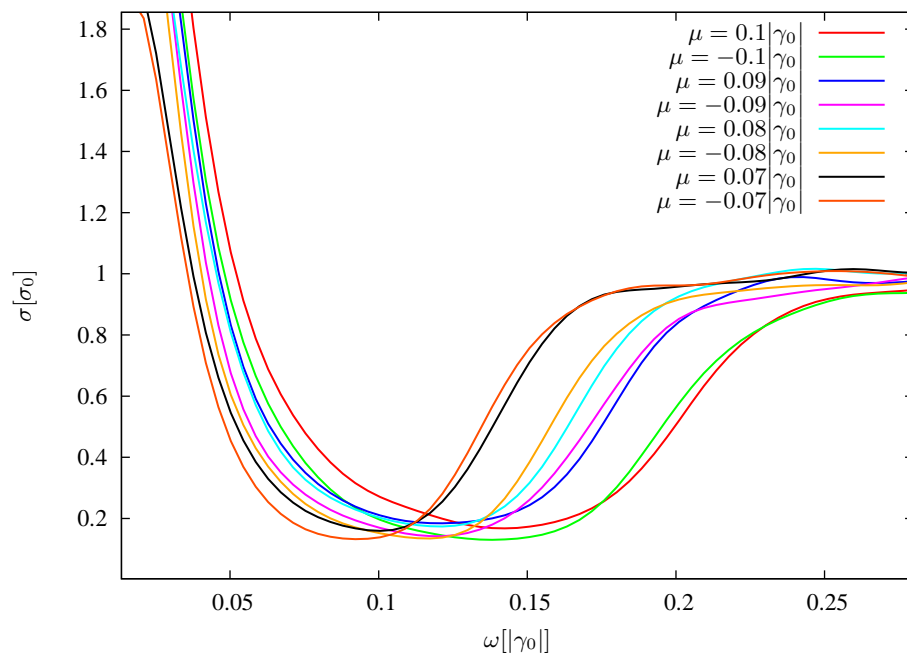
A különböző jelleg kimutatása érdekében nyújtjuk meg azonos, $\epsilon = 0,1$ deformációval a kétféleképpen szennyezett rácsot adott szögközönként, majd számítsuk ki a vezetőképesség-tenzor x' -tengelyű nyújtás irányában felvett $\sigma_{x'x'}$ komponensét. A vizsgálatot elegendő egy 60° -os szögtartományra elvégezni, a 60° -os forgási szimmetriák meghatározzák a további jelleget. A vizsgálatot 3° -onként haladva végeztük el 0,1%-os koncentrációjú vakanciákra és 0,5%-os Stone-Wales-hibákra $\mu = 0,1|\gamma_0|$ kémiai potenciál mellett. Eredményeinket a 3.13. ábra összesíti.

Látható, hogy vakanciák esetén a nyújtás irányú vezetőképességben végig azonos frekvencián helyezkedik el a „tiltott sáv” határa, míg Stone-Wales-hibák esetén ez a határ jelentős irányfüggést mutat.

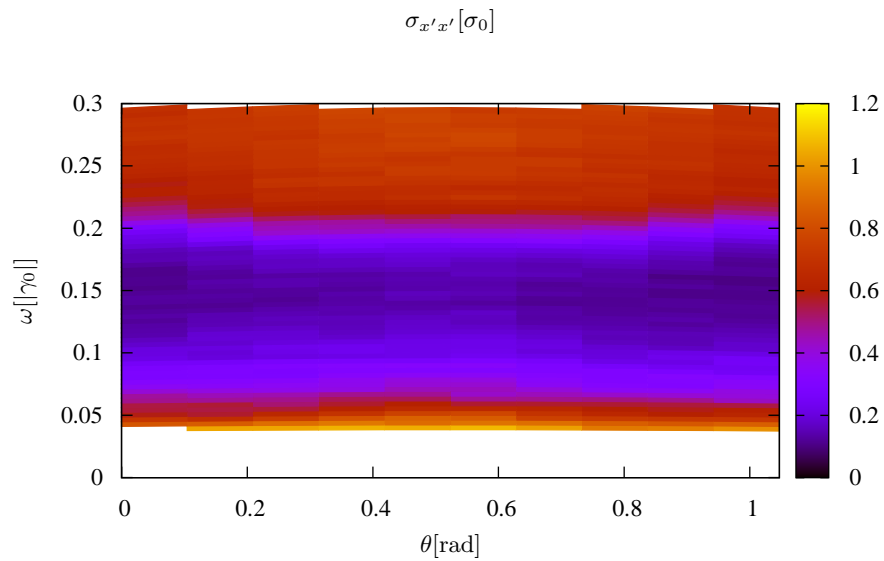
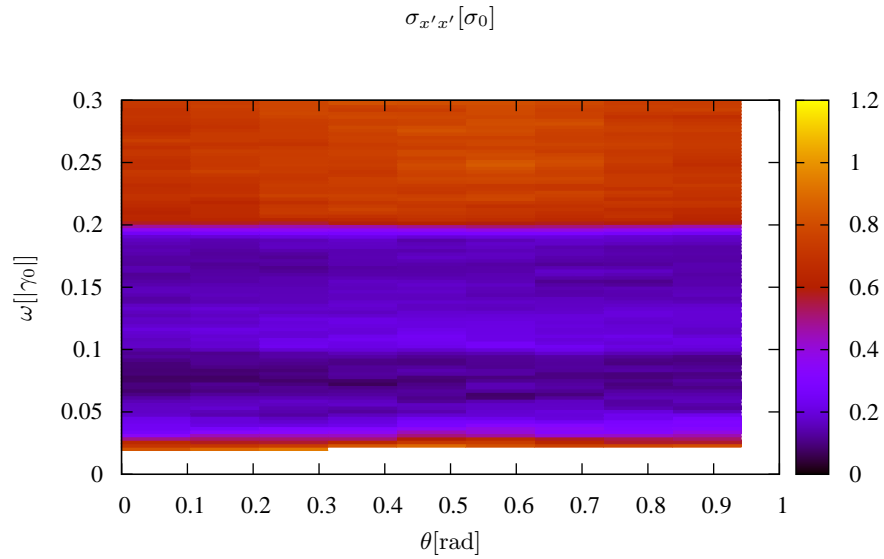
A jelenséget azzal magyarázhatjuk, hogy mechanikai deformáció hatására a grafén vezetőképességének olyan sajátosságát, mint a „tiltott sáv” határa, a rács szimmetriái határozzák meg. Topologikus hibák jelenlétében a rács szimmetriái sérülnek, ez pedig jellegbeli különbségeket hoz be.



3.11. ábra. Az optikai vezetőképesség onsite-paramétertől való függése a $0 < \omega < 2\mu$ tartományban kétrétegű grafén esetén. A görbék felvétele a $\gamma_d = 2\gamma_0$, $T = 0$, $\mu = 0,1|\gamma_0|$ értékek, valamint 0,1%-os szennyezés mellett történt. Látható, hogy a kétrétegű grafénban γ_1 -nél jelentkező csúcs jósági tényezője erősen függ az onsite-paramétre értékétől.



3.12. ábra. Optikai vezetőképesség egyrétegű grafénban $T = 0$ hőmérsékleten 0,5%-os Stone-Wales koncentráció mellett, különböző kémiai potenciálokon vizsgálva.



3.13. ábra. Optikai vezetőképesség egyenletes nyújtás irányú értéke a nyújtás szögének függvényében, egyrétegű grafénban. Mindkét ábrán $T = 0$, $\epsilon = 0,1|\gamma_0|$, $\mu = 0,1|\gamma_0|$. A fenti ábra 0,1%-os koncentrációjú vakanciákkal szennyezett, amíg a lenti 0,5%-os Stone-Wales-hibát tartalmazó grafén vizsgálatának eredményeit tartalmazza. A tiltott sáv határának változásán keresztül megfigyelhető a topologikus hiba által behozott jelleg.

Összefoglalás

Diplomamunkám során grafén minták optikai vezetőképességét vizsgáltam numerikus módszerekkel.

Az alkalmazott eljárás alapja az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása rendkívül sok szabadsági fokot tartalmazó nemkölcsonható rendszerre, hatásos implementációját diplomamunkám keretében készítettem el sokmagos rendszerekre.

A dolgozatban tárgyalt eredmények, melyeket az alábbiakban foglalok össze, különböző típusú szennyezők és rácshibák szerepéhez kötődnek.

Megmutattam, hogy rezonáns szennyezők onsite-energiája egyértelműen meghatározható véges kémiai potenciálon végzett optikai vizsgálatokkal egyrétegű grafén esetén. Ezen vizsgálatokat jól kiegészítik a kétrétegű grafénon történt mérések, melyeken keresztül pontosabb eredmények adhatók az onsite-paraméterre, illetve meghatározható belőlük a szennyező koncentrációja.

Vizsgáltam a Stone-Wales-rácshibák hatására kialakuló elektron-lyuk aszimmetriát. Megállapítottam, hogy mértéke meghatározható a kémiai potenciál változtatásával. Megmutattam, hogy mechanikai deformáció hatására a Stone-Wales-hibák jellegzetes hatásokat produkálnak az optikai vezetőképességben.

A diplomamunkában ismertetett vizsgálatokon túl a jövőben tervezzük a program alkalmazását bonyolultabb rácshiba- illetve szennyezőstruktúrákra, valamint egyéb, manapság aktívan kutatott rendszerekre, például topologikus szigetelőkre.

Függelék

Röviden vázolom a szimuláció hitelesítéséhez használt analitikus megoldás előállításának módját [32][49].

Tekintsünk $\mu = 0$ kémiai potenciálon egy kétsavas elektron-lyuk szimmetriával rendelkező rendszert, melynek diszperziós relációja

$$E_a = (-1)^a \epsilon_{\mathbf{k}}, \quad (a = \pm 1). \quad (3.2)$$

A

$$\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{i}{V} \int_{-\infty}^{\infty} d\theta(t-t') e^{i\omega(t-t')} \langle [j_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{q}, t), j_{\beta}(\mathbf{q}, t')] \rangle \quad (3.3)$$

áram-áram korrelációs függvény nemkölsönható rendszerre a

$$\Pi_{xx}(z) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{a,b} K_{ab}(z) T_{ab}(\mathbf{k}) \quad (3.4)$$

alakban áll elő, ahol

$$K_{ab}(z) = \frac{n_F(E_a - \mu) - n_F(E_b - \mu)}{z - E_a - E_b}, \quad (3.5)$$

$$T_{ab}(\mathbf{k}) = \text{Tr}[J_x Q_a J_x Q_b], \quad (3.6)$$

V a térfogat, az n_F a Fermi-eloszlás, Q_{\pm} a Hamilton-operátor sajátvektoraiba projektáló operátor:

$$Q_a = \prod_{b \neq a} \frac{H - E_b \cdot I}{E_a - E_b}, \quad (3.7)$$

\mathbf{J} pedig az áramoperátor. Megjegyezzük, hogy számlálójának definíciója miatt $K_{aa} = K_{bb} = 0$.

A Brillouin-zónára való összegzésről térjünk át az energia szerinti, valamint az adott energiájú felületen vett integrálra:

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \equiv \frac{1}{2\pi^2 \hbar} \int dE \oint \frac{dS}{v_{\mathbf{k}}}, \quad (3.8)$$

ahol v a csoportsebesség. Belátható, hogy a

$$\sigma_{xx}(\omega) = -\frac{1}{\omega} \lim_{\mu \rightarrow +0} \Im [\Pi_{xx}(\hbar\omega + i\mu)] \quad (3.9)$$

képlettel felírható optikai vezetőképességhez csak T_{+-} ad járulékot:

$$\sigma_{xx}(\omega) = -\frac{1}{4\pi \hbar \omega} \left[\oint \frac{dS}{v_{\mathbf{k}}} T_{+-}(\mathbf{k}) \right] \Big|_{\hbar\omega = \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (3.10)$$

Tekintsük a

$$H_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \\ e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} & 0 \end{pmatrix} = f_{\mathbf{k}} (\sigma_x \cos \varphi_{\mathbf{k}} + \sigma_y \sin \varphi_{\mathbf{k}}) \equiv f_{\mathbf{k}} \mathbf{n}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.11)$$

Hamilton-operátorral leírható rendszert, melynek áramoperátora

$$J_x = e \frac{1}{\hbar} \partial_{k_x} H = \frac{e}{\hbar} (f'_{\mathbf{k}} \mathbf{n}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} + f_{\mathbf{k}} \mathbf{n}'_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (3.12)$$

ahol a ' a k_x szerinti deriválást jelöli. Megmutatható, hogy T_{+-} értéke

$$T_{+-} = \frac{e^2}{2\hbar^2} (f_{\mathbf{k}} \varphi'_{\mathbf{k}})^2. \quad (3.13)$$

Ezt behelyettesítve a (3.10) egyenletbe a körintegrál numerikus elvégzése után a kívánt eredményt kapjuk.

Az egyszerű tömeg nélküli H_+ Dirac-Hamilton-operátor (1.31) alakjára

$$T_{+-} = e^2 v^2 \sin^2 \varphi_{\mathbf{k}}, \quad (3.14)$$

melynek segítségével a vezetőképesség grafénban a

$$\sigma_0 = 2 \cdot 2 \cdot \frac{e^2 \pi}{h 8} \quad (3.15)$$

alakban áll elő, ahol a két kettes faktor a spin és két Dirac-kúp hatását veszi figyelembe.

Köszönetnyilvánítás

Mindenekelőtt köszönettel tartozom témavezetőimnek, Cserti Józsefnek és Oroszlány Lászlónak az érdekes téma felvetésért, valamint a közös munka és a dolgozat elkészítése során nyújtott önzetlen segítségükért.

Szeretnék köszönetet mondani szüleimnek és kedvesemnek az elmúlt időszakban Tőlük kapott segítségért és erkölcsi támogatásért.

Szeretném megköszönni Horváth Zoltánnak a diplomamunka elkészítésében nyújtott tanácsait és emberi támogatását.

Irodalomjegyzék

- [1] J. Sólyom, *A modern szilárdtestfizika alapjai I. kötet, A szilárd testek szerkezete és dinamikája* (ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 2002).
- [2] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, „C₆₀: Buckminsterfullerene,” *Nature* **318**, 162 (1985).
- [3] S. Iijima, „Helical microtubules of graphitic carbon,” *Nature* **354**, 56 (1991).
- [4] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes* (Imperial College Press, London, 1998).
- [5] S. Reich, C. Thomsen, and J. Maultzsch, *Carbon nanotubes, Basic Concepts, and Physical Properties* (Wiley-VCH, Berlin, 2004).
- [6] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, „Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films,” *Science* **306**, 666–669 (2004).
- [7] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, „Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene,” *Nature* **438**, 197 (2005).
- [8] Y. Zhang, J. P. Small, M. E. S. Amori, and P. Kim, „Electric Field Modulation of Galvanomagnetic Properties of Mesoscopic Graphite,” *Phys. Rev. Lett.* **94**, 176803 (2005).
- [9] Y. Zhang, Y. W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, „Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene,” *Nature* **438**, 201 (2005).
- [10] www.nobelprize.org, „Scientific background on the Nobel Prize in Physics 2010 GRAPHENE,”.
- [11] P. R. Wallace, „The Band Theory of Graphite,” *Phys. Rev.* **71**, 622–634 (1947).
- [12] A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, „Quasiparticle dynamics in graphene,” *Nature Physics* **3**, 36 (2007).
- [13] A. Bostwick, T. Ohta, J. L. McChesney, K. V. Emtsev, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, „Symmetry breaking in few layer graphene films,” *New Journal of Physics* **9**, 385 (2007).
- [14] J. Cserti, *Kétdimenziós kvantumrendszerek nanoszerkezetekben* (MTA doktori dolgozat, 2009).

- [15] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim, „Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene,” *Science* **320**, 1308 (2008).
- [16] N. D. Mermin and H. Wagner, „Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models,” *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133–1136 (1966).
- [17] S. Yuan, H. De Raedt, and M. I. Katsnelson, „Modeling electronic structure and transport properties of graphene with resonant scattering centers,” *Phys. Rev. B* **82**, 115448 (2010).
- [18] S. Yuan, H. De Raedt, and M. I. Katsnelson, „Electronic transport in disordered bilayer and trilayer graphene,” *Phys. Rev. B* **82**, 235409 (2010).
- [19] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, „The electronic properties of graphene,” *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109–162 (2009).
- [20] N. M. R. Peres, „Colloquium: The transport properties of graphene: An introduction,” *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2673–2700 (2010).
- [21] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejón, „Tight-binding description of graphene,” *Phys. Rev. B* **66**, 035412 (2002).
- [22] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, „Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene,” *Phys. Rev. B* **80**, 045401 (2009).
- [23] N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. C. Neto, and M. F. Crommie, „Strain-Induced Pseudo-Magnetic Fields Greater Than 300 Tesla in Graphene Nanobubbles,” *Science* **329**, 544–547 (2010).
- [24] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, „Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering,” *Nature Physics* **6**, 30 (2009).
- [25] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, „Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds,” *Phys. Rev. B* **29**, 1685–1694 (1984).
- [26] T. Ando and T. Nakanishi, „Impurity Scattering in Carbon Nanotubes – Absence of Back Scattering –,” *Journal of the Physical Society of Japan* **67**, 1704–1713 (1998).
- [27] E. McCann and V. I. Fal’ko, „Landau-Level Degeneracy and Quantum Hall Effect in a Graphite Bilayer,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 086805 (2006).
- [28] A. Misu, E. E. Mendez, and M. S. Dresselhaus, „Near Infrared Reflectivity of Graphite under Hydrostatic Pressure. I. Experiment,” *Journal of the Physical Society of Japan* **47**, 199–207 (1979).
- [29] R. E. Doezema, W. R. Datars, H. Schaber, and A. Van Schyndel, „Far-infrared magnetospectroscopy of the Landau-level structure in graphite,” *Phys. Rev. B* **19**, 4224–4230 (1979).

- [30] P. Rakyta, A. Kormányos, and J. Cserti, „Trigonal warping and anisotropic band splitting in monolayer graphene due to Rashba spin-orbit coupling,” *Phys. Rev. B* **82**, 113405 (2010).
- [31] R. Kubo, „Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems,” *Journal of the Physical Society of Japan* **12**, 570–586 (1957).
- [32] G. D. Mahan, *Many-particle physics* (Plenum Press, New York, 1996).
- [33] T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim, „Optical conductivity of graphene in the visible region of the spectrum,” *Phys. Rev. B* **78**, 085432 (2008).
- [34] T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, „Conductivity of suspended and non-suspended graphene at finite gate voltage,” *Phys. Rev. B* **78**, 085418 (2008).
- [35] V. G. Kravets, A. N. Grigorenko, R. R. Nair, P. Blake, S. Anissimova, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, „Spectroscopic ellipsometry of graphene and an exciton-shifted van Hove peak in absorption,” *Phys. Rev. B* **81**, 155413 (2010).
- [36] D. S. L. Abergel and V. I. Fal’ko, „Optical and magneto-optical far-infrared properties of bilayer graphene,” *Phys. Rev. B* **75**, 155430 (2007).
- [37] E. J. Nicol and J. P. Carbotte, „Optical conductivity of bilayer graphene with and without an asymmetry gap,” *Phys. Rev. B* **77**, 155409 (2008).
- [38] A. Hams and H. De Raedt, „Fast algorithm for finding the eigenvalue distribution of very large matrices,” *Phys. Rev. E* **62**, 4365–4377 (2000).
- [39] T. Iitaka, S. Nomura, H. Hirayama, X. Zhao, Y. Aoyagi, and T. Sugano, „Calculating the linear response functions of noninteracting electrons with a time-dependent Schrödinger equation,” *Phys. Rev. E* **56**, 1222–1229 (1997).
- [40] T. O. Wehling, S. Yuan, A. I. Lichtenstein, A. K. Geim, and M. I. Katsnelson, „Resonant Scattering by Realistic Impurities in Graphene,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 056802 (2010).
- [41] A. Stone and D. Wales, „Theoretical studies of icosahedral C₆₀ and some related species,” *Chemical Physics Letters* **128**, 501 – 503 (1986).
- [42] D. A. Papaconstantopoulos, M. J. Mehl, S. C. Erwin, and M. R. Pederson, *Tight-Binding Approach to Computational Materials Science* (Materials Research Society, Pittsburgh, 1998).
- [43] M. T. Lusk and L. D. Carr, „Nanoengineering Defect Structures on Graphene,” *Phys. Rev. Lett.* **100**, 175503 (2008).
- [44] J. Ma, D. Alfè, A. Michaelides, and E. Wang, „Stone-Wales defects in graphene and other planar *sp*² -bonded materials,” *Phys. Rev. B* **80**, 033407 (2009).
- [45] A. Cortijo and M. A. Vozmediano, „Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene,” *Nuclear Physics B* **763**, 293 – 308 (2007).

- [46] E. J. Duplock, M. Scheffler, and P. J. D. Lindan, „Hallmark of Perfect Graphene,” *Phys. Rev. Lett.* **92**, 225502 (2004).
- [47] N. M. R. Peres, R. M. Ribeiro, and A. H. Castro Neto, „Excitonic Effects in the Optical Conductivity of Gated Graphene,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 055501 (2010).
- [48] J. P. Robinson, H. Schomerus, L. Oroszlány, and V. I. Fal’ko, „Adsorbate-Limited Conductivity of Graphene,” *Phys. Rev. Lett.* **101**, 196803 (2008).
- [49] J. Cserti and G. Dávid, „Relation between Zitterbewegung and the charge conductivity, Berry curvature, and the Chern number of multiband systems,” *Phys. Rev. B* **82**, 201405 (2010).

Nyilatkozat

Név: Németh Adrián

ELTE Természettudományi Kar, szak: fizikus

ETR azonosító: NEAMACT.ELTE

Diplomamunka címe: Grafén optikai vezetőképességének vizsgálata különös tekintettel a rácshibák és szennyezők hatására

A **diplomamunka** szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló munkám eredménye, saját szellemi termékem, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest, 2011. június 3.

a hallgató aláírása