

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского  
Национальный исследовательский университет

Физический факультет  
Кафедра теоретической физики

Г.М. Максимова, В.А. Бурдов

# **КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ГРАФЕНА**

учебно-методическое пособие

Нижний Новгород

2019

УДК 538.915  
ББК 22.31  
М-90

Рецензент:  
Кандидат физико-математических наук, доцент А.И. Малышев

**М-90 Максимова Г.М., Бурдов В.А. Квантовая механика графена:** Учебно-методическое пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2019.

Излагаются основы волновой физики графена – первого истинно двумерного материала. Обсуждаются, как свободный, бесщелевой, графен, так и его щелевая модификация. Получены спектр электронов в графене в приближении сильной связи и уравнение для огибающих функций, на основе которого рассматриваются некоторые традиционные задачи квантовой механики: туннелирование через потенциальные барьеры; стационарные состояния в магнитном поле; эффект Ааронова-Бома и персистентные токи в мезоскопических одномерных кольцах. После каждого раздела приводятся задания разного уровня сложности для самопроверки. Наиболее сложные из них сопровождаются ответами или решениями.

Пособие предназначено для студентов и аспирантов, специализирующихся в области физики конденсированного состояния и физики полупроводников и полупроводниковых структур.

ББК 22.31

© Г.М. Максимова, В.А. Бурдов, 2019  
© Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2019

## Содержание

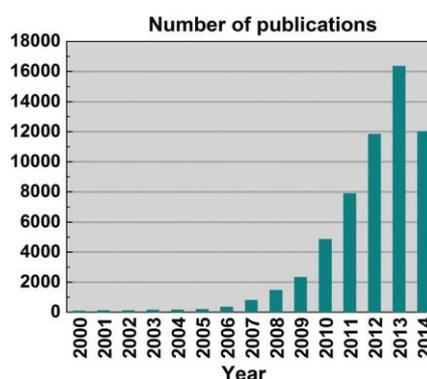
|   |    |
|---|----|
| Введение .....                                    | 4  |
| 1. Кристаллическая структура графена .....        | 5  |
| 2. Электронная структура графена .....            | 7  |
| 3. Уравнение для огибающих в графене .....        | 12 |
| 4. Клейновское туннелирование .....               | 16 |
| 5. Уровни Ландау .....                            | 20 |
| 6. Эффект Ааронова-Бома и персистентный ток ..... | 23 |
| 7. Персистентные токи в графеновых кольцах .....  | 29 |
| Литература .....                                  | 35 |

## Введение

Графен – это плоский моноатомный слой углерода, выстроенных в двумерную кристаллическую структуру по образу и подобию пчелиных сот (*honeycomb structure*). Активное изучение графена началось в 2004 году, когда он был получен К.С. Новосёловым, А.К. Геймом, С.В. Морозовым и др. [1] с помощью метода микромеханического расслоения (метода «клеякой ленты»). С этого момента число работ, посвященных этому материалу, являющемуся первым истинно двумерным атомным кристаллом, начало расти лавинообразно (рис. 1). Такой ажиотаж связан с выдающимися свойствами графена, многие из которых уникальны. И, что еще более важно, все эти свойства объединены в одном материале. Так, прозрачность – проводимость – эластичность могут быть востребованы в гибкой электронике, высокая подвижность и практически нулевая толщина структуры – в эффективных транзисторах для радиочастотных применений и т.д. Список таких комбинаций постоянно растет. На основе графена могут быть реализованы принципиально новые технологии, такие, как так называемая «валлейтроника» (*valleytronics*), которая использует своеобразный «изоспин» носителей заряда как степень свободы для переноса информации.

Создание вертикальных структур на основе графена знаменует собой новый подход к разработке приборов функциональной электроники [2]. Известно, что использование монослойного графена для создания транзисторов затруднительно из-за отсутствия щели в спектре, что приводит к невозможности управления током в канале посредством изменения затворного напряжения. Это ограничение снимается в вертикальной конструкции транзистора, включающей в себя два слоя графена, разделенных туннельно-прозрачным слоем NB или MoS<sub>2</sub> [3,4]. Первые созданные гетероструктуры включали в себя слои гексагонального нитрида бора (h-BN) и графена. В настоящее время исследуются также гетероструктуры, использующие слои дихалькогенидов переходных металлов (NbSe<sub>2</sub>, MoS<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub>, WSe<sub>2</sub>, TaS<sub>2</sub> и др.). Основное достоинство разрабатываемых гетероструктур заключается в демонстрации возможностей новых физических подходов и новых принципов организации приборных структур, отличающихся от традиционных подходов в кремниевой электронике.

**Рисунок 1.**  
Публикации по тематике графена с 2000-го года по август 2014-го (из обзора [4]).



Но графен привлекателен не только с точки зрения его возможных применений, но и с фундаментальной точки зрения. Главная особенность электронной структуры графена заключается в «релятивистском» законе дисперсии носителей, что позволяет провести определенные параллели с квантовой электродинамикой. «Аналогом» скорости света в графене является некая предельная скорость, называемая обычно скоростью Ферми, имеющая значение примерно в 300 раз меньше скорости света. Соответственно, все

энергетические масштабы в графене оказываются на несколько порядков меньше, чем в квантовой электродинамике. Это обстоятельство делает возможным экспериментальное наблюдение на графене различных эффектов, предсказываемых квантовой электродинамикой, «недоступных» для прямого детектирования в силу слишком больших энергий, необходимых для реализации того или иного процесса. Таким образом, графен может выступать в качестве своеобразного тестового материала для демонстрации законов квантовой электродинамики. Чтобы подчеркнуть аналогию между графеном и квантовой электродинамикой, электроны в графене часто называют дираковскими фермионами.

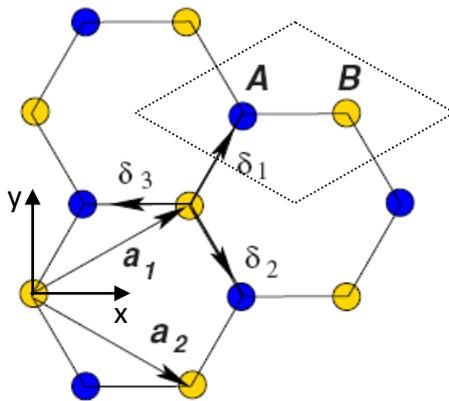
Квантовая механика дираковских фермионов заметно отличается от более привычной нерелятивистской квантовой механики, в основу которой положено волновое уравнение Шредингера. В частности, одним из наиболее ярких проявлений релятивистского характера дираковских фермионов в графене является их способность с единичной вероятностью туннелировать через потенциальные барьеры, что, фактически, означает невозможность локализовать их какими-либо потенциальными полями – явление, известное как парадокс Клейна [5-7]. Другим существенным отличием электронов в графене от электронов, описываемых уравнением Шредингера, является независимость абсолютного значения их скорости от энергии или импульса, т.е. все электроны, движущиеся в некотором произвольно заданном направлении, имеют одинаковую скорость независимо от их энергии. Поведение дираковских фермионов в магнитном поле также заметным образом отличается от динамики «обычных» шредингеровских электронов. Более подробно с различными аспектами электроники графена можно познакомиться, например, по монографии [8], а также по детальным обзорам [4,9-11].

Целью настоящего пособия является первичное знакомство читателя с особенностями квантовой динамики электронов в графене, которое могло бы служить основой для последующего более глубокого изучения физических свойств этого уникального материала. В пособии обсуждается электронная структура графена, получается волновое уравнение для электронов и, с его помощью, решаются некоторые традиционные задачи квантовой механики.

## 1. Кристаллическая структура графена

Хорошо известно, что углерод, являясь одним из самых распространённых в природе химических элементов, отличается большим числом своих модификаций. Это связано со способностью углеродных атомов образовывать различные  $sp$ -гибридизованные связи: тетраэдрические ( $sp^3$  – алмаз), тригональные ( $sp^2$  – графит, фуллерен, нанотрубки) или линейные ( $sp$  – карбин). Наиболее привычная форма углерода – графит – представляет собой слоистую структуру, в которой взаимодействие между слоями осуществляется слабыми Ван-дер-ваальсовыми связями. При этом энергия связи между атомами в слое более чем в десять раз превышает энергию взаимодействия между слоями, что обуславливает как физические и химические свойства графита, так и возможность разделения на отдельные слои, каждый из которых и представляет собой графен. Таким образом, графен можно рассматривать как монослой графита, в котором атомы углерода собраны в идеальную гексагональную кристаллическую структуру, как показано на рис. 2. Эта структура

образована двумя эквивалентными треугольными подрешетками – в одной атомы «сорта»  $A$ , а в другой – атомы «сорта»  $B$ . В данном случае сорт атома является условной характеристикой, поскольку и атомы  $A$ , и атомы  $B$  – это неразличимые между собой атомы углерода. Разные символы для них введены лишь затем, чтобы обозначить их принадлежность к «своей» подрешетке.



**Рисунок 2.**

Кристаллическая структура графена: атомы углерода образуют две треугольные подрешетки, взаимно проникающие друг в друга. Атомы одной подрешетки (синие кружки) обозначены буквой  $A$ , а атомы другой подрешетки (желтые кружки) обозначены буквой  $B$ . Показаны два вектора элементарных трансляций  $a_1$  и  $a_2$  и примитивная ячейка – ромб (пунктиром) – построенная на этих векторах, а также векторы  $\delta_{1,2,3}$ , соединяющие данный атом углерода из одной подрешетки с тремя ближайшими соседями, принадлежащими другой подрешетке. Любой из векторов  $\delta_j$  переводит подрешетку  $B$  в подрешетку  $A$ .

Два вектора элементарных трансляций могут быть выбраны так, как показано на рис. 2:

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где параметр  $a = 1.42 \text{ \AA}$  представляет собой расстояние между любыми двумя ближайшими атомами углерода, т.е. сторону правильного шестиугольника. На векторах (1), длины которых равны  $a\sqrt{3}$ , можно построить примитивную ячейку – ромб, стороны которого будут соединять четыре «желтых» атома. При этом внутри ромба обязательно окажется один «синий» атом, т.е. всего на каждую примитивную ячейку будет приходиться два атома. Для удобства этот ромб можно сдвинуть, выбрав его симметричным относительно атомов обеих подрешеток образом – как показано на рис. 2 – тогда центр ромба будет располагаться посередине между двумя атомами, которые будут находиться внутри примитивной ячейки. Три ближайших соседа к данному атому будут иметь радиус-векторы  $\delta_j$ , определяемые следующим образом:

$$\delta_1 = a \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad \delta_2 = a \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad \delta_3 = -a(1 \ 0). \quad (2)$$

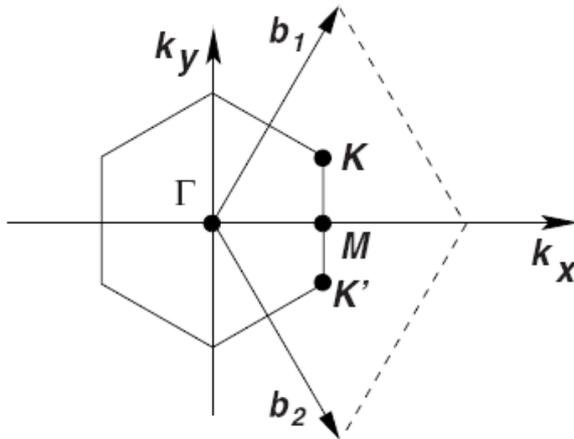
Отсчет координат векторов  $\delta_j$  ведем от выбранного атома сорта  $B$ .

Векторы обратной решетки будут равны

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

Они так же, как и векторы  $a_{1,2}$ , образуют ромбическую примитивную ячейку, а зона Бриллюэна может быть выбрана в виде правильного шестиугольника, изображенного на рис. 3. Центр зоны Бриллюэна принято обозначать буквой  $\Gamma$ , а вершины шестиугольника – буквами  $K$  и  $K'$ . При этом точки  $K$  и  $K'$  чередуются. Все три  $K$ -точки связаны между собой векторами обратной решетки и потому являются эквивалентными (аналогично – все три точки  $K'$ ). Вместе с тем, ни одну из трех  $K$ -точек нельзя связать вектором обратной решетки ни с одной из трех  $K'$ -точек.

Соответственно, эти точки эквивалентными не являются.



**Рисунок 3.**

Векторы обратной решетки  $b_{1,2}$ , на которых построена примитивная ячейка обратной решетки, и зона Бриллюэна, представляющая собой правильный шестиугольник. Показаны некоторые точки высокой симметрии:  $\Gamma$  – центр зоны;  $K$  и  $K'$  – так называемые «дираковские» точки в углах зоны Бриллюэна;  $M$  лежит в центре стороны шестиугольника.

Две соседние точки  $K$  и  $K'$ , показанные на рис. 3, имеют следующие координаты:

$$K: \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}(\sqrt{3} \ 1), \quad K': \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}(\sqrt{3} \ -1). \quad (4)$$

Эти точки принято называть «дираковскими» в силу конических особенностей закона дисперсии носителей в этих точках. Как будет ясно из последующего изложения, именно эти точки (и некоторая их окрестность) главным образом будут определять электронные свойства графена. Рассмотрим далее вопрос об электронном законе дисперсии в графене, и в том числе, в окрестности дираковских точек, более подробно.

### **Вопросы и задания:**

1. Вычислить сумму  $\sum_{n=1}^3 \exp(i\mathbf{k}\delta_n)$ . Чему она равна в точках  $K$  и  $K'$ ?

2. Убедиться, что  $K$ -точка (4) действительно переводится в две другие эквивалентные ей  $K$ -точки на границе зоны Бриллюэна посредством векторов обратной решетки. Найти эти векторы.

## **2. Электронная структура графена**

Известно, что три из четырех валентных электронов каждого атома углерода в графене ответственны за формирование решетки, т.е. каждый атом сильно связывается со своими тремя ближайшими соседями посредством этих трех электронов, находящихся в  $sp^2$ -гибридизованных состояниях, и формирует химические связи. Это означает, что электронные волновые функции представляют собой некоторую линейную комбинацию функций  $2s$ ,  $2p_x$  и  $2p_y$  атомных состояний.  $sp^2$ -гибридизованные электроны образуют полностью заполненную глубокую валентную зону. Четвертый валентный электрон оказывается, таким образом, как бы, свободным. Он находится в  $2p_z$ -состоянии (ось  $z$  перпендикулярна плоскости графена) и может участвовать в процессах переноса электрического заряда, а также и в оптических переходах. Обозначим нормированную волновую функцию  $2p_z$ -электрона в атоме углерода через  $\chi(\mathbf{r})$  и воспользуемся моделью сильной связи для нахождения блоховской волновой функции

электрона в графене. Этот подход был впервые применен в работе [12] для поиска электронной волновой функции в моноатомном слое графита.

Запишем ненормированную волновую функцию в виде суперпозиции нормированных функций, отвечающих каждой из подрешеток:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \left( \sum_A \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) \exp[i\mathbf{k}\mathbf{r}_A] + C \sum_B \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) \exp[i\mathbf{k}\mathbf{r}_B] \right) = \varphi_A + C\varphi_B, \quad (5)$$

где  $N$  – полное число элементарных ячеек двумерного кристалла графена, а  $C$  – параметр, подлежащий определению в ходе решения уравнения на собственные функции и собственные значения:

$$\hat{H}\Phi = \varepsilon(\mathbf{k})\Phi. \quad (6)$$

Оператор Гамильтона представляется в следующем виде:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \sum_A V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) + \sum_B V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где  $V_a(\mathbf{r})$  – потенциальная энергия электрона в изолированном атоме, а  $V_0(\mathbf{r})$  – полная потенциальная энергия электрона в периодической решетке.

Заметим, что мы не учитываем в гамильтониане (7) спин-орбитального взаимодействия. Известно, что в графене оно очень слабое, и его вклад в формирование электронных состояний пренебрежимо мал. В результате, электронный гамильтониан (7) не содержит спиновых операторов, что позволяет говорить о сохранении проекции спина на заданную ось, например, на ось  $z$ . Как следствие, энергетический спектр электрона оказывается двукратно вырожденным по спину. Это вырождение, конечно же, будет сниматься при наложении внешнего магнитного поля.

Выполняя далее стандартную процедуру (подстановка (5) в (6), домножение (6) на  $\varphi_A^*$  и  $\varphi_B^*$  с последующим интегрированием по координатам) и пренебрегая интегралами перекрытия атомных функций на разных узлах, получим систему двух уравнений:

$$\begin{cases} H_{AA} + CH_{AB} = \varepsilon \\ H_{BA} + CH_{BB} = \varepsilon C \end{cases} \quad (8)$$

Здесь введены матричные элементы:

$$H_{AA} = \langle \varphi_A | \hat{H} | \varphi_A \rangle, \quad H_{BB} = \langle \varphi_B | \hat{H} | \varphi_B \rangle, \quad H_{AB} = \langle \varphi_A | \hat{H} | \varphi_B \rangle.$$

Из симметрии кристаллической структуры непосредственно следует  $H_{AA} = H_{BB}$ , что приводит к следующему выражению для энергии после исключения  $C$  из (8):

$$\varepsilon = H_{AA} \pm |H_{AB}|. \quad (9)$$

В схеме расширенных зон знак «+» соответствует волновым векторам, выходящим за пределы первой зоны Бриллюэна, а знак «−» отвечает внутренней области зоны. Таким образом, при пересечении границы зоны Бриллюэна энергия испытывает скачок, равный  $2|H_{AB}|$ . В схеме приведенных зон, знаки «+» и «−» соответствуют верхней и нижней зонам соответственно. По аналогии с объемными полупроводниками верхнюю, полностью свободную, зону можно назвать зоной проводимости, а нижнюю, полностью заполненную, зону – валентной (эта зона не является такой глубокой как валентная зона, полученная в результате  $sp^2$ -гибридизации). В этом случае можно

говорить о наличии энергетической щели – запрещенной зоны – величиной  $2|H_{AB}|$  между зонами проводимости и валентной.

Непосредственное вычисление матричных элементов наиболее просто выполнить, если сохранять в них вклады только от ближайших соседей из обеих подрешеток, что дает:

$$H_{AA} = H_{BB} = \varepsilon_0 - 2W \left( \cos(\sqrt{3}k_y a) + 2 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) \right),$$

$$H_{AB} = -U \left( e^{-ik_x a} + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a/2) e^{ik_x a/2} \right), \quad H_{BA} = H_{AB}^*, \quad (10)$$

$$|H_{AB}|^2 = U^2 \left( 1 + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + 4 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) \right),$$

где введена энергия  $2p_z$ -состояния в атоме углерода

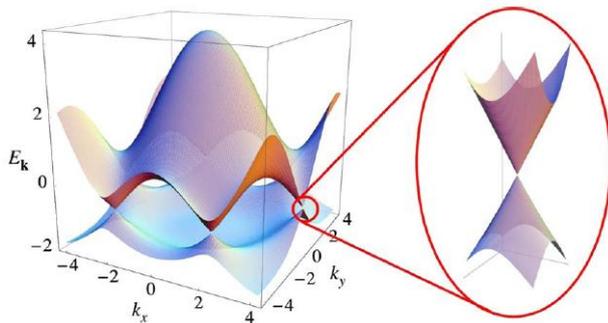
$$\varepsilon_0 = \int \chi(\mathbf{r}) \hat{H} \chi(\mathbf{r}) d^3 r, \quad (11)$$

а также «обменные» интегралы:

$$W = - \int \chi(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1) \hat{H} \chi(\mathbf{r}) d^3 r = \int \chi(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1) (V_a(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})) \chi(\mathbf{r}) d^3 r, \quad (12)$$

$$U = \int \chi(\mathbf{r} - \delta_1) (V_a(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})) \chi(\mathbf{r}) d^3 r.$$

Матричный элемент  $W$  описывает туннельную связь между ближайшими соседями из одной подрешетки, а матричный элемент  $U$  – из разных.



**Рисунок 4.**

Энергия в верхней и нижней зонах как функция волнового вектора. В увеличенном масштабе справа показан фрагмент спектра в окрестности одной из  $K$ -точек на границе зоны Бриллюэна.

Зависимость энергий в зонах от волнового вектора представлена на рис. 4. Видно, что верхняя и нижняя зоны соприкасаются в точках  $K$  и  $K'$ , образуя конусы, касающиеся друг друга своими вершинами. Если перенести начало отсчета энергии и волнового вектора в одну из точек касания и разложить зависимость  $\varepsilon(\mathbf{k})$  в (9) в ряд по малым волновым векторам до линейных членов, получим:  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm 3Uka/2$ . Обычно, принято вводить в законе дисперсии «фермиевскую» скорость посредством соотношения

$$\hbar v_F = 3Ua/2. \quad (13)$$

В результате будем иметь

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F k. \quad (14)$$

Как следует из соотношений (13) и (14), в окрестности дираковской точки, называемой обычно  $K$ - или  $K'$ -долиной, в главном (линейном по  $k$ ) приближении электронная дисперсия определяется интегралом  $U$ , т.е. туннельными переходами электронов между двумя подрешетками. Параметр  $W$  появляется в следующем, квадратичном по волновому вектору, порядке. Здесь, однако, мы не будем обсуждать никакие эффекты,

обусловленные квадратичными слагаемыми в энергетическом спектре графена, ограничившись законом дисперсии в виде (14).

Ранее уже говорилось о том, что электронные свойства графена будут определяться в основном дираковскими точками и их окрестностями. Теперь, после того как мы получили представление о зонной структуре графена, это утверждение становится более понятным. Действительно, как хорошо известно, основной вклад в какие-либо электронные процессы в различных материалах вносят состояния, энергии которых близки к границе между заполненными и незаполненными состояниями. Так, в металлах, это будет достаточно узкий слой состояний в непосредственной окрестности ферми-поверхности. В полупроводниках определяющую роль будут играть состояния, близкие к запрещенной зоне, разделяющей заполненную валентную зону и свободную зону проводимости. Как известно, количество состояний в энергетической зоне кристалла, с учетом спина, определяется удвоенным числом различных значений волнового вектора в зоне Бриллюэна, совпадающим с числом элементарных ячеек кристалла. Соответственно, если лист графена состоит из  $N$  элементарных ячеек, число состояний в зоне (с учетом спина) будет равно  $2N$ . Но и число электронов также равно  $2N$ , т.к. каждая ячейка содержит два атома. Таким образом, нижняя, валентная зона оказывается полностью занятой электронами, а это значит, что граница между заполненными и незаполненными состояниями проходит через дираковские точки. По этой причине сами дираковские точки и некоторая их окрестность и представляет наибольший интерес.

Заметим также, что касание зон в  $K$ -точках делает возможным переход электрона из нижней зоны в верхнюю за счет бесконечно малого увеличения его энергии. В этом смысле графен можно назвать металлом, у которого уровень Ферми проходит через дираковскую точку. Вместе с тем, если посчитать плотность электронных состояний  $g(\varepsilon)$  в окрестности уровня Ферми согласно (14), то она окажется пропорциональной модулю электронной энергии (напомним, что отсчет энергии в (14) ведется от дираковской точки, т.е., от уровня Ферми):  $g(\varepsilon) \sim |\varepsilon|$ . Это значит, что на самом уровне Ферми плотность состояний обращается в нуль, чего не бывает в металлах, но зато бывает в бесщелевых полупроводниках. Соответственно, графен, в определенном смысле, может рассматриваться и как некая разновидность полупроводника.

Обратимся теперь к блоховским волновым функциям в верхней и нижней зонах, для чего найдем коэффициент  $C$  из (8), подставив туда (9). В результате получим следующие (нормированные) волновые функции в валентной зоне ( $\Phi_v$ ) и в зоне проводимости ( $\Phi_c$ ):

$$\Phi_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \frac{H_{AB}}{H_{BA}} \right)^{\frac{1}{4}} \varphi_A - \left( \frac{H_{BA}}{H_{AB}} \right)^{\frac{1}{4}} \varphi_B \right], \quad \Phi_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \frac{H_{AB}}{H_{BA}} \right)^{\frac{1}{4}} \varphi_A + \left( \frac{H_{BA}}{H_{AB}} \right)^{\frac{1}{4}} \varphi_B \right]. \quad (15)$$

Как следует из полученных выражений, обе подрешетки вносят равный вклад в формирование блоховских состояний в нижней и верхней зонах, поскольку коэффициенты, стоящие перед блоховскими функциями подрешеток, есть не что иное, как фазовые множители – модуль каждого из них равен единице. Соотношения (15) можно рассматривать как унитарное преобразование от базиса блоховских функций

подрешеток  $\varphi_{A,B}$  к базису блоховских функций зон  $\Phi_{v,c}$ :

$$\begin{pmatrix} \Phi_c \\ \Phi_v \end{pmatrix} = \hat{U} \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix},$$

где унитарный оператор преобразования

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \left(\frac{H_{AB}}{H_{BA}}\right)^{1/4} & \left(\frac{H_{BA}}{H_{AB}}\right)^{1/4} \\ \left(\frac{H_{AB}}{H_{BA}}\right)^{1/4} & -\left(\frac{H_{BA}}{H_{AB}}\right)^{1/4} \end{pmatrix}, \quad (16)$$

а сами матричные элементы  $H_{AB}$  и  $H_{BA}$  определяются выражениями (10).

Здесь, однако, следует иметь в виду, что в самих дираковских точках  $H_{AB} = H_{BA} = 0$ , и оператор (16) становится неопределенным. Эта неопределенность является следствием двукратного (без учета спина) вырождения спектра (9) в дираковской точке, в результате чего выбор коэффициента  $C$  в (5) и (8) становится неоднозначным, и, следовательно, вместо функций (15) в точке  $K$  (или  $K'$ ) можно взять любые две взаимно ортогональные линейные комбинации функций  $\varphi_A$  и  $\varphi_B$ . В частности, можно взять и сами эти функции.

Теперь обратимся к ситуации, когда две подрешетки в графене не эквивалентны. До сих пор, рассматривая лист графена, мы, не оговаривая это явно, подразумевали их полную идентичность, что выглядело вполне естественно, если иметь в виду свободный и полностью изолированный от контактов с какими-либо другими телами графен. Прямым следствием идентичности подрешеток было, в частности, равенство  $H_{AA} = H_{BB}$ , которое использовалось при определении спектра электронов (9), (14), а также блоховских функций в зонах (15). Если теперь предположить, что лист графена лежит на некоторой подложке, то может оказаться, что атомы подрешетки  $A$  будут находиться в условиях, отличных от тех, в которых находятся атомы подрешетки  $B$ . Такое возможно, например, если подложка имеет кристаллическую структуру, и в какой-то из кристаллографических плоскостей ее атомы «уложены» в такую же гексагональную решетку, как и в листе графена. Если, при этом, материал подложки представляет собой соединение атомов двух химических элементов  $X$  и  $Y$ , и графен наращивается именно на такой плоскости, то атомы углерода из одной подрешетки будут находиться рядом с атомами  $X$ , в то время как атомы другой подрешетки – рядом с атомами  $Y$ . Взаимодействие с атомами подложки определенным образом модифицирует волновые функции  $2p_z$ -состояний атомов углерода, причем по-разному в атомах типа  $A$  и  $B$ . Соответственно, атомные волновые функции  $\chi(\mathbf{r})$ , энергии  $\varepsilon_0$  и матричные элементы  $W$  «приобретут» индексы « $A$ » и « $B$ », что, в конечном итоге, приведет к неравенству  $H_{AA} \neq H_{BB}$ .

Будем далее считать, что  $H_{AA} > H_{BB}$  и положим:  $H_{AA} = \varepsilon_0 + \Delta$ ,  $H_{BB} = \varepsilon_0 - \Delta$ . Рассматривая малую окрестность дираковской точки (для определенности будем далее говорить о  $K$ -долине), можно отбросить в диагональных матричных элементах (см. (10)) слагаемое, пропорциональное  $W$ , тогда  $2\Delta$  будет иметь смысл

относительного сдвига уровня энергии  $2p_z$ -состояния в атомах углерода, принадлежащих разным подрешеткам. В этом случае решение уравнения (8) приобретает следующий вид (вместо (9)):

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + |H_{AB}|^2}. \quad (17)$$

Как мы уже знаем, вблизи  $K$ -точки  $|H_{AB}| = \hbar v_F k$  ( $k$  отсчитывается в этом выражении от  $K$ -точки), поэтому теперь даже в самой  $K$ -точке касания зон не будет – конусы заменятся на гиперболоиды, между которыми возникнет энергетический зазор ширины  $2\Delta$ . Таким образом графен в этом случае становится щелевым в отличие от свободного графена.

Подстановка решений (17) в систему (8) позволяет однозначно (с точностью до фазового множителя) найти блоховские функции  $\Phi_v$  и  $\Phi_c$  в валентной зоне и зоне проводимости соответственно, в том числе и в самой  $K$ -точке:

$$\begin{aligned} \Phi_v &= \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + |H_{AB}|^2}} \right)} \varphi_B - \left( \frac{H_{AB}}{H_{BA}} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + |H_{AB}|^2}} \right)} \varphi_A, \\ \Phi_c &= \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + |H_{AB}|^2}} \right)} \varphi_A + \left( \frac{H_{BA}}{H_{AB}} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + |H_{AB}|^2}} \right)} \varphi_B. \end{aligned} \quad (18)$$

Как видно из выражений (18), при подходе к  $K$ -точке (т.е. при  $|H_{AB}| \rightarrow 0$ ) никакой неопределенности в выражениях для  $\Phi_v$  и  $\Phi_c$  теперь не возникает, несмотря на неопределенность отношения  $H_{AB}/H_{BA}$ : блоховская функция потолка валентной зоны совпадает с  $\varphi_B$ , в то время как блоховская функция дна зоны проводимости – с  $\varphi_A$ .

### **Вопросы и задания:**

1. Почему уровень Ферми в графене проходит через дираковские точки?
2. Каким получился бы закон дисперсии электронов в графене, если бы вместо атомных функций  $p_z$ -типа он формировался  $s$ -функциями?
3. Получить разложение закона дисперсии в окрестности  $K$ -точки до членов второго порядка по малому отклонению волнового вектора от нее. Сохранится ли изотропия закона дисперсии во втором порядке?
4. Оценить эффективную массу электрона вблизи дна зоны проводимости для щелевого графена, полагая  $\Delta = 26.5$  мэВ, а  $v_F = 10^6$  см/с.

### **3. Уравнение для огибающих в графене**

Если лист графена помещен в какие-то макроскопические внешние поля, то трансляционная симметрия в такой системе пропадает, и электрон приобретает дополнительную трансляционно-неинвариантную добавку  $V(\mathbf{r})$  к потенциальной (или

кинетической, в случае магнитного поля) энергии. В том случае, когда характерный пространственный масштаб изменения внешнего поля значительно превышает размер элементарной ячейки (это условие, как правило, выполняется), для решения одноэлектронного уравнения Шредингера можно использовать приближение огибающей волновой функции или, как его часто называют более кратко – просто, приближение огибающей – как это обычно и делается в объемных кристаллических материалах.

Суть данного подхода заключается в том, что волновая функция ищется в виде суперпозиции атомных волновых функций, подобно тому, как это делалось для графена в отсутствие внешних полей, однако теперь «вес» каждой из атомных функций модулируется плавно меняющейся огибающей. Мы начнем со случая бесщелевого графена и модифицируем выражение (5) для волновой функции электрона:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{S} \left( \sum_A \psi_A(\mathbf{r}_A) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) e^{i(\mathbf{K}\mathbf{r}_A + \frac{\pi}{12})} + \sum_B \psi_B(\mathbf{r}_B) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) e^{i(\mathbf{K}\mathbf{r}_B - \frac{\pi}{12})} \right). \quad (19)$$

Здесь  $\psi_{A,B}(\mathbf{r})$  – плавные огибающие с характерным масштабом, значительно превышающим  $a$ , и поскольку нас интересует непосредственная окрестность дираковской точки, волновой вектор  $\mathbf{k}$  берется именно в ней (обозначаем этот вектор через  $\mathbf{K}$ ). Снова, для определенности, будем рассматривать состояния в окрестности  $K$ -точки, тогда координаты вектора  $\mathbf{K}$  будут задаваться первым из соотношений (4). Фазовые сдвиги  $\pm\pi/12$  введены для удобства, а нормировочный множитель  $\sqrt{S} = \sqrt{a_1 \cdot a_2} = a\sqrt{3}/2$  подобран так, чтобы огибающие функции при переходе к непрерывному аргументу нормировались на единицу:

$$\int_S (|\psi_A(\mathbf{r})|^2 + |\psi_B(\mathbf{r})|^2) d^2r = 1,$$

где интегрирование ведется в плоскости листа графена.

Рассмотрим случай потенциального внешнего поля  $V(\mathbf{r})$ , остающегося почти неизменным при переходе от любой произвольно выбранной элементарной ячейки к соседней. Запишем уравнение Шредингера для волновой функции (19):

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \Psi(\mathbf{r}), \quad (20)$$

и попытаемся получить из него уравнения для огибающих функций. Подстановка (19) в (20) приводит к следующему уравнению:

$$\begin{aligned} & \sum_A \psi_A(\mathbf{r}_A) (\varepsilon_0 - \varepsilon + V_0(\mathbf{r}) - V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) + V(\mathbf{r})) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) \exp\{i(\mathbf{K}\mathbf{r}_A + \pi/12)\} + \\ & \sum_B \psi_B(\mathbf{r}_B) (\varepsilon_0 - \varepsilon + V_0(\mathbf{r}) - V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) + V(\mathbf{r})) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) \exp\{i(\mathbf{K}\mathbf{r}_B - \pi/12)\} = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Домножим это уравнение поочередно на  $\chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A'})$  и  $\chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{B'})$ , проинтегрируем по всему пространству, сохраняя в суммах только ближайших соседей (как и в отсутствие внешних полей), и учтем, что в этом случае

$$\sum_A \psi_A(\mathbf{r}_A) e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_{A'})} \int (V_0(\mathbf{r}) - V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A)) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A'}) d^3r = 3W\psi_A(\mathbf{r}_{A'})$$

(и такое же соотношение для аналогичной суммы по  $B$ ), и

$$\sum_B \psi_B(\mathbf{r}_B) e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_{A'})} \int (V_0(\mathbf{r}) - V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B)) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{A'}) d^3r = -U \sum_{j=1}^3 \psi_B(\mathbf{r}_{A'} - \boldsymbol{\delta}_j) e^{-i\mathbf{K}\boldsymbol{\delta}_j},$$

$$\sum_A \psi_A(\mathbf{r}_A) e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_{B'})} \int (V_0(\mathbf{r}) - V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A)) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{B'}) d^3r = -U \sum_{j=1}^3 \psi_A(\mathbf{r}_{B'} + \boldsymbol{\delta}_j) e^{i\mathbf{K}\boldsymbol{\delta}_j}.$$

Учитывая плавность огибающих функций, разложим их в ряд до линейных по  $\boldsymbol{\delta}_j$  слагаемых (учтем при этом, что  $\sum_n \exp(\pm i\mathbf{K}\boldsymbol{\delta}_n) = 0$ , см. задачу 1 к разделу 1), в результате чего придем к системе уравнений вида (убираем штрихи у индексов подрешеток):

$$\begin{cases} (V(\mathbf{r}_A) - \varepsilon) \psi_A(\mathbf{r}_A) - i\hbar v_F \left( \frac{\partial \psi_B}{\partial x_A} - i \frac{\partial \psi_B}{\partial y_A} \right) = 0, \\ (V(\mathbf{r}_B) - \varepsilon) \psi_B(\mathbf{r}_B) - i\hbar v_F \left( \frac{\partial \psi_A}{\partial x_B} + i \frac{\partial \psi_A}{\partial y_B} \right) = 0. \end{cases} \quad (22)$$

Если теперь «превратить» дискретную координату атома в непрерывную, то окончательно получим следующее матричное дифференциальное уравнение для огибающих:

$$(V(\mathbf{r}) - i\hbar v_F \hat{\boldsymbol{\sigma}} \nabla) \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{r}) \\ \psi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{r}) \\ \psi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (23)$$

где введены двумерные векторы матриц Паули  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y)$  и градиента  $\nabla(\partial/\partial x \partial/\partial y)$ .

Отыскав решения уравнения (23), можно записать полную волновую функцию (19), взяв огибающие в положениях соответствующих атомов. Можно, однако, записать функцию (19) в более удобной форме, если вспомнить, что подрешетки  $A$  и  $B$  переходят друг в друга при любой из несобственных трансляций  $\boldsymbol{\delta}_j$ . Выберем в качестве такой трансляции, например,  $\boldsymbol{\delta}_3 = \boldsymbol{\delta} = -a(1 \ 0)$ . Тогда  $\mathbf{r}_A = \mathbf{r}_B + \boldsymbol{\delta}$ , и если ввести радиус-вектор элементарной ячейки соотношением  $\mathbf{r}_n = (\mathbf{r}_A + \mathbf{r}_B)/2 = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$ , придем к следующему выражению для волновой функции:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{S} \sum_n e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_n} \left( \psi_A(\mathbf{r}_n) \chi\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n - \frac{\boldsymbol{\delta}}{2}\right) e^{-i\frac{\pi}{4}} + \psi_B(\mathbf{r}_n) \chi\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n + \frac{\boldsymbol{\delta}}{2}\right) e^{i\frac{\pi}{4}} \right). \quad (24)$$

Здесь, в аргументах огибающих функций мы пренебрегли сдвигами на  $\pm \boldsymbol{\delta}/2$ .

Заметим, что если бы мы вместо точки  $K$  рассмотрели точку  $K'$ , уравнение для огибающих получилось бы из (23) заменой  $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \rightarrow \hat{\boldsymbol{\sigma}}^*(\hat{\sigma}_x \ -\hat{\sigma}_y)$ .

Обсуждаемое выше уравнение (23) – это уравнение на собственные функции и собственные значения, в котором волновая функция является двухкомпонентным столбцом

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{r}) \\ \psi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix},$$

а эффективный гамильтониан

$$\hat{H} = v_F \hat{\sigma} \hat{p} + V(\mathbf{r}). \quad (25)$$

В отсутствии внешнего поля ( $V(\mathbf{r})=0$ ) этот гамильтониан представляет собой двумерный аналог дираковского гамильтониана для свободных безмассовых фермионов, в котором в роли скорости света  $c$  выступает параметр  $v_F \approx 10^6 \text{ м/с} \approx c/300$ . Подтверждение того, что электроны в графене ведут себя как безмассовые дираковские частицы, было получено уже в первых экспериментах, выполненных в группе А. Гейма. Как уже было отмечено во введении, формальная аналогия между ультрарелятивистскими частицами и электронами в графене делает его полигоном для изучения различных квантовых релятивистских эффектов.

Внутренняя степень свободы, которой является спин для истинных дираковских фермионов, в случае графена представляет собой индекс подрешетки. Двухкомпонентная волновая функция  $\psi(\mathbf{r})$  состоит здесь из компонент, описывающих распределение электронов в подрешетках  $A$  и  $B$ . Это квантовое число называют *псевдоспином*, так что псевдоспин «вверх» означает принадлежность электрона подрешетке  $A$ , а псевдоспин «вниз» – подрешетке  $B$ . Соответственно, матрицы  $\hat{\sigma}$  в гамильтониане (25) называются матрицами псевдоспина.

Определим еще одно понятие – *киральность* – означающее проекцию псевдоспина на направление импульса. При  $V(\mathbf{r})=0$  собственная функция гамильтониана (25), отвечающая частице с импульсом  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ , равна  $\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}}$ , где спинор  $\phi_{\mathbf{k}}$  определяется уравнением  $\hbar v_F \mathbf{k} \hat{\sigma} \phi_{\mathbf{k}} = \varepsilon \phi_{\mathbf{k}}$ . Здесь  $\varepsilon = \hbar v_F k$  соответствует энергии электронного состояния, а  $\varepsilon = -\hbar v_F k$  – дырочного. Таким образом, для электронного состояния имеем  $\mathbf{k} \hat{\sigma} / k \phi_{\mathbf{k}} = \phi_{\mathbf{k}}$ , а для дырочного:  $\mathbf{k} \hat{\sigma} / k \phi_{\mathbf{k}} = -\phi_{\mathbf{k}}$ . Это означает, что носители в графене имеют определенное направление псевдоспина, а именно, параллельное (для электронов) или антипараллельное (для дырок) направлению движения. Такие состояния называют *киральными*. Оператор  $\hat{\Lambda} = \mathbf{k} \hat{\sigma} / k$  называют оператором киральности, а его собственные значения  $\lambda = \pm 1$  – киральностью данного состояния. Заметим, что кроме псевдоспина, у квазичастицы в графене есть еще две внутренних степени свободы: долинный индекс, фиксирующий принадлежность её  $K$ - или  $K'$ -долине; и реальный спин.

Для щелевого графена вывод уравнения для огибающих аналогичен приведённому выше. В этом случае эффективный гамильтониан в окрестности  $K$ -точки имеет вид

$$\hat{H} = v_F \hat{\sigma} \hat{p} + V(\mathbf{r}) + \Delta \hat{\sigma}_z. \quad (26)$$

Этот гамильтониан также имеет дираковский вид, но теперь он описывает частицы с массой  $m$  (массивные дираковские фермионы):  $\Delta = m v_F^2$ . Таким образом, нарушение симметрии между подрешетками  $A$  и  $B$  приводит к возникновению массы у дираковских частиц в графене. Релятивистский закон дисперсии, определяемый гамильтонианами (25), (26), приводит к новым интересным особенностям в квантовой динамике квазичастиц в графене, которые и будут рассмотрены далее. В частности, одним из примеров, иллюстрирующим необычные свойства электронов в графене, является туннелирование через потенциальные барьеры.

### Вопросы и задания:

1. Каким основным свойством должно обладать накладываемое на систему внешнее поле, чтобы можно было использовать приближение огибающей? Где это проявляется при выводе уравнений для огибающих?

2. Изменится ли вид уравнения для огибающих (23), если его получить в окрестности другой  $K$ -точки? Получить уравнение для огибающих в окрестности точки  $K'$ .

3. Рассмотреть классическое движение свободного электрона в графене с начальным импульсом  $\mathbf{p}_0 = (p_{0x} \ p_{0y})$  в постоянном электрическом поле  $\mathbf{E} = (E \ 0)$ .

4. Найти оператор скорости  $\hat{v}$  для квазичастицы в графене. Вычислить среднее значение скорости для свободного электрона в графене с импульсом  $\mathbf{p}$ .

Ответ: а)  $\hat{v} = v_F \hat{\sigma}$ ; б)  $\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{v_F^2 \mathbf{p}}{\varepsilon(\mathbf{p})}$ .

5.  $p$ - $n$  переход в графене можно создать, прикладывая электроды различной полярности к листу графена. Пусть, создаваемый ими потенциал равен  $V(x) = V_0 \operatorname{sgn}(x)$ . Найти концентрацию носителей (электронов и дырок) по обе стороны от границы  $x = 0$  при заданном значении энергии Ферми  $\varepsilon_F$  ( $-V_0 < \varepsilon_F < V_0$ ).

Ответ:  $n = \frac{(\varepsilon_F + V_0)^2}{\pi \hbar^2 v_F^2}$ ,  $p = \frac{(\varepsilon_F - V_0)^2}{\pi \hbar^2 v_F^2}$ .

## 4. Клейновское туннелирование

Рассмотрим прохождение дираковских частиц через прямоугольный потенциальный барьер

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & (0 < x < d) \\ 0, & (x < 0; x > d) \end{cases} \quad (27)$$

Двухкомпонентная волновая функция (в дальнейшем не будем более акцентировать внимание на двухкомпонентности, называя ее просто волновой функцией) вне и внутри барьера удовлетворяет уравнению

$$(v_F \hat{\sigma} \hat{p} + V(x) + \Delta \hat{\sigma}_z) \psi(x, y) = \varepsilon \psi(x, y), \quad (28)$$

решение которого может быть представлено в виде  $\psi(x, y) = \psi(x) \exp(ik_y y)$  с

$$\psi(x) = A e^{iQx} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F (Q + ik_y)}{\varepsilon - V(x) + \Delta} \end{pmatrix} + B e^{-iQx} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F (-Q + ik_y)}{\varepsilon - V(x) + \Delta} \end{pmatrix}. \quad (29)$$

Здесь введен волновой вектор  $Q$ , равный:

$$Q = \begin{cases} q_x = \sqrt{((\varepsilon - V_0)^2 - \Delta^2) / \hbar^2 v_F^2 - k_y^2}, & (0 < x < d) \\ k_x = \sqrt{(\varepsilon^2 - \Delta^2) / \hbar^2 v_F^2 - k_y^2}, & (x < 0; x > d) \end{cases} \quad (30)$$

Вне барьера, при  $x < 0$ , это решение представляется суперпозицией падающей и отраженной волн с амплитудами  $A = 1$ ,  $B = r$  соответственно; в области  $x > d$  есть только прошедшая волна с амплитудой  $A = t$  ( $B = 0$ ). Используя условия непрерывности функции на границах  $x = 0$ ;  $d$ , найдём неизвестные  $A$ ,  $B$ ,  $r$  и  $t$ . В частности, амплитуды  $r$  и  $t$  для электронов, падающих на барьер под углом  $\theta$ , определяются формулами

$$\frac{1}{t} = \cos \beta + i \frac{\varepsilon V_0 + \Delta^2 - \varepsilon^2 + \hbar^2 v_F^2 k_y^2}{\hbar^2 v_F^2 k_x q_x} \sin \beta, \quad (31)$$

$$\frac{r}{t} = -i \sin \beta e^{i\theta} V_0 \frac{k_x \Delta - i k_y \varepsilon}{\hbar^2 v_F^2 k_x q_x}, \quad (32)$$

где  $\beta = q_x d$ ,  $k = \sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2} / (\hbar v_F)$  – волновой вектор вне барьера,  $\text{tg} \theta = k_y / k_x$ . Таким образом, коэффициент прохождения частиц через барьер равен

$$T(\varepsilon, k_y) = |t|^2 = \left(1 + (f^2(\varepsilon, k_y) - 1) \sin^2 \beta\right)^{-1}, \quad (33)$$

где

$$f(\varepsilon, k_y) = \frac{\varepsilon V_0 - \hbar^2 v_F^2 k_x^2}{\hbar^2 v_F^2 k_x q_x}.$$

Как следует из (33), вероятность прохождения через барьер является осциллирующей функцией энергии (или угла падения), но это справедливо только для тех значений  $\varepsilon$  и  $\theta$ , при которых проекция волнового вектора внутри барьера  $q_x$  является действительной:

$$\sin^2 \theta < \frac{(\varepsilon - V_0)^2 - \Delta^2}{\varepsilon^2 - \Delta^2}. \quad (34)$$

Отсюда легко показать, что для барьера с высотой  $V_0 > 2\Delta$  осциллирующее решение (33) сохраняется при всех углах падения  $\theta$  для частиц с энергиями  $\Delta < \varepsilon < V_0/2$  и при  $\theta \leq \theta_c$  для энергий, лежащих в интервалах  $V_0/2 < \varepsilon < V_0 - \Delta$  и  $\varepsilon > V_0 + \Delta$ . Здесь

$$\sin \theta_c = \sqrt{\frac{(\varepsilon - V_0)^2 - \Delta^2}{\varepsilon^2 - \Delta^2}}. \quad (35)$$

Одним из следствий (33) являются резонансы, аналогичные резонансам Фабри-Перо в оптике – полное прохождение барьерной области ( $T = 1$ ) при выполнении условий  $q_x d = \pi n$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$

Для частиц, падающих на барьер под углами  $\theta > \theta_c$  (в соответствующем диапазоне энергий),  $q_x$  становится чисто мнимым, что соответствует так называемым «эванесцентным» (т.е. неосциллирующим) решениям в области барьера. При этом

$q_x \rightarrow i\kappa$ , где  $\kappa = \sqrt{(\hbar v_F k_y)^2 - (\varepsilon - V_0)^2 + \Delta^2} / (\hbar v_F)$ , так что

$$T(\varepsilon, k_y) = \left(1 + (\tilde{f}^2(\varepsilon, k_y) + 1) \text{sh}^2 \kappa d\right)^{-1} \quad (36)$$

и

$$\tilde{f}(\varepsilon, k_y) = \frac{\varepsilon V_0 - \hbar^2 v_F^2 k_x^2}{\hbar^2 v_F^2 k_x \kappa}.$$

Соответственно, при  $\kappa d > 1$  вероятность туннелирования экспоненциально мала. Эта же формула справедлива для произвольных углов  $\theta$ , если энергия частиц попадает в щель в области барьера, т.е.:  $V_0 - \Delta < \varepsilon < V_0 + \Delta$ .

Рассмотрим, в частности, коэффициент прохождения через очень высокий барьер для нормально падающих электронов с энергиями  $\Delta < \varepsilon < V_0 - \Delta$  (так называемая клейновская зона). В этом интервале энергий границы барьера разделяют электронные и дырочные состояния вне и внутри барьера соответственно. При  $k_y = 0$  и  $V_0 \gg \Delta; \varepsilon$  из формулы (33) получим

$$T(\varepsilon, 0) = \left( 1 + \frac{\Delta^2}{\varepsilon^2 - \Delta^2} \sin^2 \left( \frac{V_0 d}{\hbar v_F} \right) \right)^{-1}. \quad (37)$$

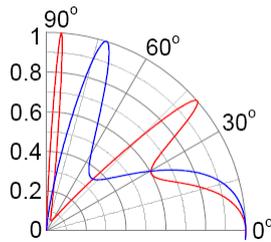
Как видим, эта величина вполне конечна, и при энергиях вдали от граничного значения  $\Delta$  коэффициент прохождения  $T \approx 1$ , т.е. прозрачность барьера является почти идеальной, что разительно контрастирует с обычным туннелированием частиц с параболическим законом дисперсии, для которых  $T$  экспоненциально убывает с ростом высоты барьера.

Такое аномальное проникновение через высокий потенциальный барьер, получившее название парадокса Клейна, впервые было предсказано для релятивистских электронов, подчиняющихся уравнению Дирака. При этом для них необходимо выполнение условия  $V_0 > 2mc^2$  (где  $m$  – масса электрона, а  $c$  – скорость света). Такой высокий барьер, поляризуя вакуум, “подтягивает” вверх по энергии состояния внутри барьерной области, т.е. задача фактически становится многочастичной. Клейновский парадокс для релятивистских электронов не получил экспериментального подтверждения, поскольку его наблюдение требует резкого изменения потенциала  $\Delta V \sim mc^2$  на масштабах порядка комптоновской длины  $\hbar/mc$ , что соответствует огромным электрическим полям, превышающим значения порядка  $10^{16}$  В/см.

В свободном графене носители заряда являются безмассовыми ( $\Delta = 0$ ) и формула (33) приобретает простой вид

$$T(\varepsilon, k_y) = \left( 1 + \frac{V_0^2 k_y^2}{\hbar^2 v_F^2 k_x^2 q_x^2} \sin^2 q_x d \right)^{-1} \quad (38)$$

(в области параметров, где  $q_x$  становится мнимым, в (38) нужно сделать замену  $q_x^{-2} \sin^2 q_x d \rightarrow \kappa^{-2} \text{sh}^2 \kappa d$ ). Как следует из этого выражения, вероятность пройти через прямоугольный барьер равна единице при выполнении резонансных условий, так же как для массивных частиц, но, помимо этого, независимо от резонансных условий, барьер любой высоты и любой ширины оказывается *полностью* прозрачен для нормально падающих *безмассовых* электронов и почти прозрачен при углах падения, близких к нулевому (рис. 5).

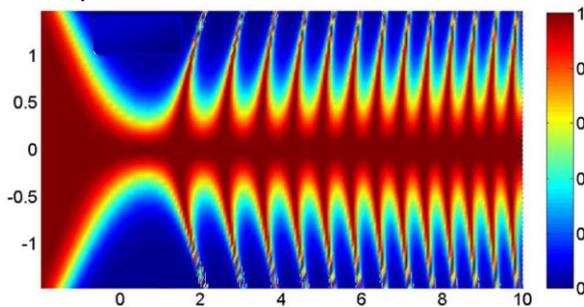


**Рисунок 5.**

Угловая зависимость вероятности туннельного прохождения  $T$  через потенциальный барьер ширины 100 нм при  $\varepsilon = 80$  мэВ,  $V_0 = 200$  мэВ (красная линия) и  $V_0 = 285$  мэВ (синяя линия) – по данным работы [6].

По сути, рассматриваемое явление есть не что иное, как прохождение электрона через  $n$ - $p$ - $n$  переход, при котором он трансформируется в дырку в области перехода и затем снова в электрон. Отсутствие обратного рассеяния для электронов, падающих нормально на прямоугольный барьер, может быть объяснено сохранением проекции псевдоспина на направление движения.

В работе [13] рассматривался параболический потенциал  $V(x) = sx^2 - g$ , ( $s, g > 0$ ), для которого  $p$ - $n$  границы определяются соотношениями  $x^* = \pm\sqrt{g/s}$ . Коэффициент прохождения через такую структуру, полученный с помощью численного решения уравнения Шредингера, представлен на рис. 6. Как видно, стопроцентное прохождение частиц при  $p_y = 0$  наблюдается и в этом случае – гладкого потенциала – что свидетельствует об универсальной природе данного явления, не связанной с каким-либо резонансным условием, а вытекающей из релятивистского характера движения электронов.



**Рисунок 6.**

Коэффициент прохождения через  $p$ - $n$ - $p$  структуру [13]. По вертикальной оси отложена компонента импульса  $p_y$ , измеряемая в единицах  $v_F/g^*$ ; по горизонтальной – глубина потенциала  $g/g^*$ ,  $g^* = (s\hbar^2 v_F^2)^{1/3}$ .

Вследствие клейновского туннелирования невозможно локализовать частицы электростатическим потенциалом, что является препятствием для технологического использования графена в качестве элемента для нанoeлектронных устройств. Впервые клейновское туннелирование в графене было теоретически рассмотрено в работе [6]. Там же обсуждалась и возможность его экспериментального наблюдения. В 2009 году были выполнены эксперименты [14], подтвердившие эффект идеального прохождения через электростатический барьер в графене для нормально падающих электронов.

**Вопросы и задания:**

1. Каково принципиальное отличие туннелирования через потенциальный барьер для электронов в графене и для электронов с обычным квадратичным законом дисперсии?
2. Построить угловую зависимость коэффициента прохождения для бесщелевого графена в случае потенциальной ямы ( $V_0 < 0$ ), сравнить со случаем потенциального барьера (формула (38) и рис. 5).

3. Гамильтониан структуры (графена, топологического изолятора) с пространственно-неоднородной щелью имеет вид:  $\hat{H} = v_F \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} + \Delta(x) \sigma_z$ , где

$$\Delta(x) = \begin{cases} -\Delta_1, & x < 0 \\ \Delta_2, & x > 0 \end{cases},$$

и  $\Delta_{1,2} > 0$ . Найти состояния с  $p_y = 0$ , локализованные на интерфейсе  $x = 0$ .

### Решение

Локализованное решение уравнения

$$\hat{H}\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \quad (1)$$

в области  $x < 0$  ищем в виде

$$\psi_1(x) = e^{\lambda_1 x} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Подстановка (2) в (1) дает

$$\psi_1(x) = b_1 e^{\lambda_1 x} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{\Delta_1^2 - \varepsilon^2}}{\Delta_1 + \varepsilon} \\ i \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где  $\lambda_1 = \sqrt{\Delta_1^2 - \varepsilon^2} / \hbar v_F$ . Аналогично находим решение в области  $x > 0$

$$\psi_2(x) = b_2 e^{-\lambda_2 x} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{\Delta_2^2 - \varepsilon^2}}{\Delta_2 - \varepsilon} \\ i \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Используя условия равенства компонент функций  $\psi_{1,2}(x)$  при  $x = 0$ , получим уравнение для значений энергии, при которых существуют интерфейсные состояния:

$$\frac{\sqrt{\Delta_1^2 - \varepsilon^2}}{\Delta_1 + \varepsilon} = \frac{\sqrt{\Delta_2^2 - \varepsilon^2}}{\Delta_2 - \varepsilon}. \quad (5)$$

Единственным решением (5) является  $\varepsilon = 0$ . Соответствующая волновая функция имеет вид

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{\Delta_1 \Delta_2}{\hbar v_F (\Delta_1 + \Delta_2)}} \exp\left(-\frac{|\Delta(x)x|}{\hbar v_F}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Это решение существует и при  $\Delta_2 \rightarrow \infty$ . В этом случае  $\psi(x) \rightarrow 0$  для  $x > 0$ , но на интерфейсе  $x = 0$  волновая функция не равна нулю.

## 5. Уровни Ландау

Пусть теперь электронный газ в графене помещен в однородное и постоянное магнитное поле, перпендикулярное листу графена. Как известно, в обычном полупроводнике энергетический спектр 2D нерелятивистского электронного газа, находящегося в перпендикулярном магнитном поле  $\mathbf{B}$ , образует уровни Ландау

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_c (n+1/2), \quad (39)$$

где  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $\omega_c = eB/mc$  – циклотронная частота,  $m$  – эффективная масса электрона, а его заряд равен  $-e$ . Характерной особенностью этого спектра является его эквидистантность. В отличие от (39), в графене, как будет показано ниже, уровни Ландау распределены неравномерно. Оператор Гамильтона в магнитном поле может быть получен из гамильтониана для свободных частиц с помощью подстановки Пайерлса  $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}/c$ , где  $\mathbf{A}$  – векторный потенциал:  $\mathbf{B} = \text{rot}(\mathbf{A}) = (0 \ 0 \ B)$ , так что вблизи точки  $K$  для бесщелевого графена (25) имеем :

$$\hat{H} = v_F (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}/c) \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (40)$$

В калибровке  $\mathbf{A} = (0 \ Bx \ 0)$  компонента импульса  $p_y$  есть интеграл движения, соответственно собственная функция оператора Гамильтона (40) может быть представлена в виде  $\psi(x, y) = \psi(x) \exp(ik_y y) / \sqrt{L_y}$ , где  $\psi(x) = (\varphi_1(x) \ \varphi_2(x))^T$  ( $T$  – символ транспонирования), а  $L_y$  представляет собой размер листа графена в направлении оси  $y$ . При этом компоненты волновой функции  $\varphi_{1,2}(x)$  удовлетворяют системе связанных уравнений

$$\begin{aligned} \left[ \hat{p}_x - \frac{ieB}{c}(x+x_0) \right] \varphi_2(x) &= \frac{\varepsilon \varphi_1(x)}{v_F} \\ \left[ \hat{p}_x + \frac{ieB}{c}(x+x_0) \right] \varphi_1(x) &= \frac{\varepsilon \varphi_2(x)}{v_F} \end{aligned} \quad (41)$$

Исключая из (41) одну из функций, например,  $\varphi_2(x)$ , получим уравнение для  $\varphi_1(x)$ , которое удобно представить в виде, аналогичном уравнению Шредингера для линейного осциллятора с центром осцилляции в точке с координатой  $x_0 = cp_y/eB$ :

$$\left[ \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega_c^2}{2}(x+x_0)^2 + \frac{\hbar\omega_c}{2} \right] \varphi_1(x) = \frac{\varepsilon^2}{2mv_F^2} \varphi_1(x). \quad (42)$$

В (42), чтобы подчеркнуть аналогию, мы ввели некую фиктивную массу  $m$ , которая не входит в окончательные формулы. Отсюда, используя решение для осциллятора, получим уровни Ландау в графене в магнитном поле, энергии которых могут быть как положительными, так и отрицательными:

$$\varepsilon_n = \pm \frac{\hbar v_F}{\ell} \sqrt{2n}, \quad (43)$$

Здесь  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $\ell = \sqrt{\hbar c/eB}$  – магнитная длина, положительные значения отвечают зоне проводимости, а отрицательные – валентной зоне. Выражение (43) показывает, что, в отличие от обычного 2D электронного газа, уровни Ландау в графене образуют неэквидистантный спектр. Наибольшей оказывается разность энергий между нулевым ( $n = 0$ ) и первым ( $n = \pm 1$ ) уровнями:  $\Delta\varepsilon \approx 400\sqrt{B}$  (здесь энергия вычисляется в градусах Кельвина, если магнитное поле брать в теслах), и для  $B = 20$  Тл,  $\Delta\varepsilon \approx 1800\text{K}$ . Такой большой разрыв энергий электронов позволяет наблюдать квантовый эффект Холла в графене, даже при комнатной температуре.

Верхняя компонента волновой функции, отвечающая энергии  $\varepsilon_n$ , для  $n \geq 1$ , как следует из (42), равна

$$\varphi_1(x) = C\Phi_{n-1}(\xi), \quad (44)$$

где  $\xi = (x + x_0)/\ell$ ,  $C$  – нормировочная постоянная, а  $\Phi_{n-1}(\xi) = A_{n-1}H_{n-1}(\xi)\exp(-\xi^2/2)$  – собственная функция гармонического осциллятора ( $H_{n-1}(\xi)$  – полином Эрмита). Нижняя компонента волновой функции  $\varphi_2(x)$  определяется найденным выше решением (44) и вторым уравнением системы (41). Представим её в более удобном виде, используя операторы уничтожения ( $\hat{a}$ ) и рождения ( $\hat{a}^+$ ):

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{c}{2\hbar eB}} \left( \frac{eB}{c}(x + x_0) + i\hat{p}_x \right), \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{c}{2\hbar eB}} \left( \frac{eB}{c}(x + x_0) - i\hat{p}_x \right), \quad (45)$$

В результате, получим вместо (41)

$$\begin{aligned} \frac{\hbar v_F}{\ell} \hat{a} \varphi_2(x) &= i\varepsilon \varphi_1(x), \\ \frac{\hbar v_F}{\ell} \hat{a}^+ \varphi_1(x) &= -i\varepsilon \varphi_2(x). \end{aligned} \quad (46)$$

Теперь, из (43), (44) и (46) легко показать, что  $\varphi_2(x) = \pm i\Phi_n(\xi)$ , так что для частицы с энергией  $\varepsilon_n$ , для  $n = 1, 2, \dots$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Phi_{n-1}(\xi) \\ \pm i\Phi_n(\xi) \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Для  $\varepsilon_0 = 0$ , как несложно видеть, уравнение (42) не может иметь решений, отличных от нуля, т.е.  $\varphi_1(x) = 0$ , в то время как компонента  $\varphi_2(x)$  определяется из первого уравнения системы (46). Соответственно,

$$\psi_0(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ \Phi_0(\xi) \end{pmatrix}. \quad (48)$$

Заметим, что в (47) знаки « $\pm$ » отвечают, как и в (43), верхней и нижней зонам.

Решение, приведённое выше, справедливо вблизи точки Дирака  $K$ . В окрестности точки  $K'$  гамильтониан, как уже указывалось в предыдущем разделе, можно представить в виде  $\hat{H} = v_F(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}/c)\hat{\sigma}^*$ . Соответственно, вместо (47) и (48) будем иметь:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Phi_{n-1}(\xi) \\ \mp i\Phi_n(\xi) \end{pmatrix}, \quad n = 1, 2, \dots; \quad \psi_0(x) = \begin{pmatrix} \Phi_0(\xi) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (49)$$

Здесь уже знак « $\rightarrow$ » относится к зоне проводимости, а « $\leftarrow$ » – к валентной зоне. Нулевой уровень является общим для электронов и дырок, причем носители с  $\varepsilon_0 = 0$ , как следует из (48), (49), принадлежат только подрешетке  $B$  (для  $K$ -долины) и подрешетке  $A$  (для  $K'$ -долины).

Основные экспериментальные методы прямого детектирования уровней Ландау основаны на явлении циклотронного резонанса. В этих экспериментах наблюдаются оптические переходы между уровнями. При этом в отличие от нерелятивистской системы, в которой частоты всех оптических переходов равны одной циклотронной частоте, в графене они отличаются друг от друга, что обусловлено неэквидистантностью спектра. Это позволяет однозначно определить пару уровней, между которыми совершается переход. Уровни Ландау наблюдаются также посредством измерения туннельного тока в сканирующем туннельном микроскопе.

### Вопросы и задания:

1. Для щелевого графена закон дисперсии вблизи краев верхней и нижней зон будет квадратичным. При каких значениях индукции магнитного поля спектр электрона в этой области энергий будет эквидистантным?

2. Вычислить коммутатор операторов  $x$ - и  $y$ -компонент кинематического импульса  $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla + e\mathbf{A}/c$  в однородном и постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси  $z$ . Зависит ли результат от выбора калибровки?

3. Используя квазиклассическое условие квантования Лифшица-Онсагера

$$S(\varepsilon) = \frac{2\pi eB}{\hbar c} (n + \nu), \quad n = 0, 1, \dots,$$

где  $S(\varepsilon)$  – площадь в  $\mathbf{k}$ -пространстве, охватываемая линией постоянной энергии  $\varepsilon(k_x, k_y) = \varepsilon$ , найти уровни Ландау для:

а) нерелятивистского двумерного электрона (параметр  $\nu = 1/2$ );

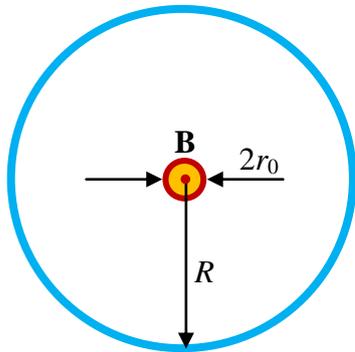
б) квазичастицы в графене (параметр  $\nu = 0$ ).

## **6. Эффект Ааронова-Бома и персистентный ток**

В классической физике, как хорошо известно, векторный потенциал не является наблюдаемой физической величиной. Он не определяется однозначно и может быть подвергнут калибровочному преобразованию без какого-либо ущерба для реальных наблюдаемых – напряженностей электрического и магнитного полей, которые не зависят от выбора калибровки. Динамика классической заряженной частицы в магнитном поле также определяется лишь напряженностью поля и нечувствительна к калибровочным преобразованиям. Квантовая частица ведет себя иначе. Оказывается, что ее состояние в магнитном поле непосредственно зависит от векторного потенциала. Более того, эта зависимость имеет место даже в том случае, когда частица движется в области, где напряженность магнитного поля равна нулю (но при этом отличен от нуля векторный потенциал), т.е. на классическую частицу сила Лоренца в этой области бы не действовала, и частица двигалась бы совершенно свободно. Этот эффект носит имена двух ученых, его предсказавших – Ааронова и Бома [15]. Ниже мы кратко обсудим этот эффект и рассмотрим его специфику в графене. Вначале, однако, проведем его рассмотрение для электронов с «обычным», квадратичным, законом дисперсии. Более подробное изложение этих вопросов можно найти в монографии [16].

Для иллюстрации эффекта Ааронова-Бома рассмотрим простейшую модель одномерного кольца радиуса  $R$ , пронизанного постоянным по времени магнитным полем  $B$ , направленным вдоль оси кольца. Будем считать, что магнитное поле создается очень узким и очень длинным соленоидом (радиус соленоида  $r_0 \ll R$ , а его длина  $L_0 \gg R$ ), расположенным в центре кольца. Тогда поле будет отлично от нуля, фактически, лишь вблизи оси кольца, при  $\rho \leq r_0$ , а в самом кольце – там, где движутся электроны – магнитное поле будет полностью отсутствовать, как показано на рис. 7.

Само кольцо можно считать одномерным, т.е. бесконечно тонким, при условии, что его толщина гораздо меньше радиуса. Далее будем предполагать все вышеперечисленные условия выполненными и перейдем к анализу квантовой динамики электронов в такой системе.



**Рисунок 7.**

Тонкое кольцо, внутрь которого вставлен узкий соленоид радиуса  $r_0$ , создающий магнитное поле, перпендикулярное плоскости кольца. В пространстве между соленоидом и кольцом магнитное поле отсутствует.

Выберем ось  $z$  совпадающей с осью кольца, тогда движение электрона в кольце будет описываться единственной координатой – углом поворота  $\varphi$  вокруг этой оси. Магнитное поле будет отлично от нуля только внутри соленоида, и его  $z$ -проекция  $B_z = B$ , а  $B_\varphi = B_\rho = 0$  как внутри, так и вне соленоида. Для векторного потенциала выберем калибровку, в которой  $A_z = A_\rho = 0$ , а  $\varphi$ -компоненту (вне соленоида) определим с помощью теоремы Стокса, в которой контур интегрирования в виде окружности с центром, совпадающим с центром кольца, проложим вне соленоида ( $\rho > r_0$ ):

$$\oint A_\varphi \rho d\varphi = \iint B_z dS = B\pi r_0^2 = \Phi,$$

что дает  $A_\varphi = \Phi/2\pi\rho$ , где  $\Phi$  – полный магнитный поток через кольцо, не зависящий от координат. Следовательно, везде в области  $\rho > r_0$ , магнитное поле

$$B_z = \frac{1}{\rho} \frac{\partial(\rho A_\varphi)}{\partial\rho} = 0,$$

как и должно быть. Это равенство выполняется и в точках самого кольца, в то время как векторный потенциал при  $\rho = R$  имеет вид:

$$A_\varphi = \frac{\Phi}{2\pi R}, \quad (50)$$

т.е. в самом кольце векторный потенциал отличен от нуля.

Найдем спектр электронов в таком кольце. После замены  $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}/c$  уравнение Шредингера для электрона в кольце приобретает вид:

$$\frac{1}{2mR^2} (\hat{\ell}_z + \hbar\phi)^2 \psi = \varepsilon\psi, \quad (51)$$

где  $\hat{\ell}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$  – оператор  $z$ -проекции момента, а  $\phi = \Phi/\Phi_0$  – безразмерный магнитный поток, вычисленный в единицах кванта магнитного потока  $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e$ .

Решением уравнения (51) является волновая функция

$$\psi_n(\varphi) = \frac{\exp(in\varphi)}{\sqrt{2\pi}}, \quad (52)$$

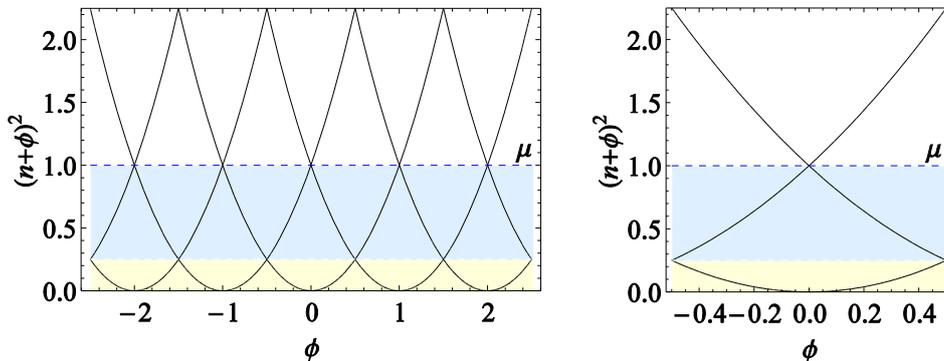
не зависящая от магнитного потока, и энергия

$$\varepsilon_n(\phi) = \frac{\hbar^2 (n + \phi)^2}{2mR^2}, \quad (53)$$

которая от магнитного потока зависит.

Результат (53), собственно, и выражает суть эффекта Ааронова-Бома. Энергия электрона, находящегося в  $n$ -ом стационарном состоянии, зависит от напряженности (индукции) магнитного поля, которое существует в области, где нет электрона. На электрон при его движении по кольцу никакая магнитная сила не действует – напряженность (индукция) магнитного поля в точках самого кольца равна нулю! Вместе с тем в кольце отличен от нуля векторный потенциал магнитного поля – именно он и порождает зависимость энергии от потока. Это означает, что квантовая система чувствительна не только к напряженности магнитного поля, но и к векторному потенциалу!

Появление зависимости энергии стационарного состояния от магнитного поля приводит к важному следствию – снятию двукратного вырождения уровней. В отсутствие магнитного поля, когда  $\phi = 0$ , состояния с квантовыми числами  $n$  и  $-n$  отвечают одной и той же энергии (исключение составляет только основное состояние, являющееся, как обычно, в одномерной системе, невырожденным). При отличном от нуля потоке  $\varepsilon_n \neq \varepsilon_{-n}$ , причем разность этих энергий нарастает с номером  $n$ :  $\varepsilon_n - \varepsilon_{-n} = n(2\hbar^2\phi/mR^2)$ .



**Рисунок 8.** Безразмерная энергия  $2mR^2\varepsilon_n/\hbar^2$  в зависимости от безразмерного магнитного потока через кольцо. Показаны три нижних подзоны энергий в схеме расширенных зон (слева), в формировании которых участвуют уровни с  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ , и в схеме приведенных зон (справа). Штриховая линия показывает уровень химпотенциала  $\mu$ . Две заполненные энергетические зоны закрашены разными цветами. Верхняя свободная зона не закрашена.

Зависимость энергий стационарных состояний от потока (53) показана на рис. 8. Как мы видим, совокупность парабол с разными  $n$  на левой панели образует картину схожую с картиной энергетических зон в кристаллах. При этом поток аналогичен квазиимпульсу. Пользуясь этой аналогией, мы будем называть энергетические уровни в магнитном поле магнитными подзонами (при этом зонами, как и прежде, называем зону проводимости или валентную). На рис. 8 эти подзоны показаны полосами разных цветов. При этом в каждой из подзон энергия оказывается периодической функцией потока. Следовательно, можно воспользоваться схемой приведенных зон, ограничив значения магнитного потока интервалом  $|\phi| < 1/2$ , который мы назовем, исходя все из

той же аналогии, зоной Бриллюэна магнитного потока или, просто, зоной Бриллюэна, как показано на рис. 8 справа.

Периодичность энергий по потоку проще всего понять, приняв во внимание многоэлектронную картину и статистику заполнения уровней. Как известно, при нуле температуры все уровни энергии, лежащие ниже уровня химпотенциала  $\mu$ , заполнены электронами, а уровни с энергиями выше  $\mu$  – свободны. Пусть химпотенциал расположен так, как показано на рис. 8. Тогда, если при изменении потока уровень с каким-то  $n$  пересекает  $n+1$ -й (или  $n-1$ -й) уровень, становясь выше него и выше уровня химпотенциала, то электрон с такой энергией уходит в резервуар, а из резервуара приходит другой электрон, занимая  $n+1$ -й (или  $n-1$ -й) уровень, лежащий при данном значении потока ниже уровня химпотенциала. В этом смысле можно говорить об энергетических магнитных подзонах и периодической зависимости энергии от потока в данной подзоне. При этом, кстати, и полная энергия системы, являющаяся суммой энергий всех заполненных уровней, будет периодична по магнитному потоку  $\phi$  с единичным периодом. В размерных единицах период равен кванту магнитного потока  $\Phi_0$ .

Эффект Ааронова-Бома в мезоскопических кольцах приводит к явлению, известному под названием «персистентного тока» (persistent current), также имеющему чисто квантовую природу. Чтобы понять суть этого явления, попробуем вычислить электрический ток, создаваемый одним электроном, находящимся в  $n$ -ом стационарном состоянии. Воспользуемся для этого следующими качественными соображениями, приводящими, однако, к правильному результату.

Будем интерпретировать выражение (53) в духе стандартного закона дисперсии свободно движущейся частицы:  $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ ; с той лишь поправкой, что волновой вектор теперь квантуется и принимает дискретные значения  $k_n = (n + \phi) / R$ . Скорость частицы вдоль кольца определяется производной от энергии по импульсу  $\hbar k$ , что дает также дискретный ряд значений:  $v_n = \hbar(n + \phi) / mR$ . Частота обращения заряда по кольцу, обратная периоду вращения, равна  $v_n / 2\pi R$ . Соответственно, заряд, протекающий по кольцу в единицу времени (т.е. электрический ток) есть

$$J_n = -\frac{e\hbar(n + \phi)}{2\pi m R^2}. \quad (54)$$

Нетрудно заметить, что этот же результат можно получить, если взять производную от энергии по потоку с обратным знаком:

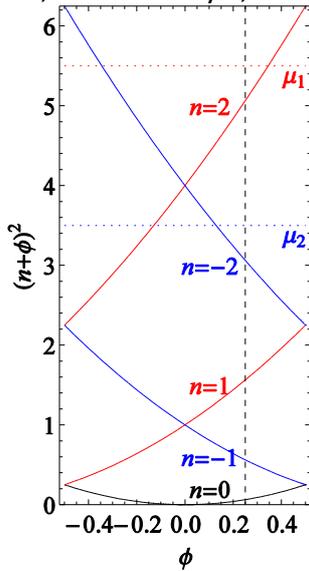
$$J_n = -c \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \Phi} = -\frac{e}{2\pi\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \phi}. \quad (55)$$

В таком виде это выражение очень удобно для использования, т.к. не требует знания волновой функции, а предполагает лишь знание энергии данного стационарного состояния.

Рассчитаем теперь полный ток в кольце, создаваемый всеми заполненными уровнями. Для этого нам нужно просуммировать вклады (54), или (55), от всех состояний, заселенных электронами. Зафиксируем какое-то значение  $\phi$  в зоне Бриллюэна и просуммируем по  $n$ :

$$J = -\frac{e\hbar}{2\pi mR^2} \sum_n (n + \phi). \quad (56)$$

При суммировании положительные и отрицательные  $n$  будут чередоваться, как показано схематично на рис. 9, и так же будут чередоваться по знаку вклады от уровней энергии. При этом, вклад от каждого следующего вышележащего уровня будет по абсолютной величине больше вклада от предыдущего и *больше суммарного вклада от всех нижележащих уровней*. Здесь мы, для простоты, не принимаем во внимание спин электрона и считаем, что на каждом уровне может находиться не более одной частицы. Таким образом, можно сказать, что вклад в полный ток самого последнего (самого высокого) заполненного уровня является определяющим – он задает, как минимум, знак полного тока в кольце.



**Рисунок 9.**

Электронный закон дисперсии в кольце в схеме приведенных зон. Показаны пять нижних зон, образованных пятью параболоми (53) с квантовыми числами, указанными на рисунке. При заданном значении потока ( $\phi = 0.25$ ), отмеченном вертикальной штриховой линией, вклад в полный ток дают все пять уровней, если химпотенциал (красный пунктир)  $\mu = \mu_1$ , и только четыре уровня при  $\mu = \mu_2$  (синий пунктир). Видно, что производная  $\partial \varepsilon_n / \partial \phi$ , взятая в точках пересечения дисперсионных кривых и вертикальной штриховой линии, всякий раз меняет знак и увеличивается по абсолютной величине при переходе снизу вверх от одной точки пересечения к соседней.

Сумма в (56) легко считается. Если количество слагаемых в ней с положительными и отрицательными  $n$  одинаково при заданном  $\phi$  (например, уровень Ферми совпадает с  $\mu_1$  на рис. 9, а значение  $\phi$  выбрано таким, как показано вертикальной штриховой линией), то полный ток будет создаваться  $2N_F + 1$  уровнями, где  $N_F$  – абсолютное значение номера последнего, самого высокого, заполненного уровня. В результате, для тока будем иметь:

$$J^{(\text{odd})} = -\frac{e\hbar(N_F + 1/2)\phi}{\pi mR^2}. \quad (57)$$

Если же ток создается четным числом ( $2N_F$ ) уровнями (если, например, уровень Ферми совпадает с  $\mu_2$  на рис. 9 при том же выборе величины магнитного потока), его значение при  $\phi \neq 0$  равно

$$J^{(\text{even})} = \text{sgn}(\phi) \frac{e\hbar N_F}{\pi mR^2} \left( \frac{1}{2} - |\phi| \right). \quad (58)$$

Сравнивая (57) и (58), видим, что, как это и было отмечено несколькими строками выше, полный ток меняет знак при добавлении (или удалении) одного верхнего заселенного уровня.

Принципиальным моментом, выраженным формулами (57) и (58), является то, что в кольце, пронизанном магнитным потоком, существует отличный от нуля ток! Ток этот

является равновесным – для его поддержания не требуется электродвижущая сила (напомним, что на электроны в кольце не действует сила Лоренца, которая могла бы заставить их двигаться по окружности). Кроме того, он не затухает со временем, т.е. является бездиссипативным – при его протекании по кольцу не выделяется джоулево тепло. Это и есть так называемый персистентный ток, возникающий из-за нескомпенсированности токов отдельных электронов в (56) при  $\phi \neq 0$ . Если же взять кольцо без магнитного потока, то, конечно же, токи частиц, двигающихся по кольцу в одном направлении, будут полностью скомпенсированными точно такими же токами, текущими в обратную сторону, что и дают выражения (57) и (58) при  $\phi = 0$  (в (58) в этом случае надо считать  $\text{sgn}(\phi)$  антисимметричной функцией и положить ее равной нулю в нуле).

Таким образом, полный персистентный ток в кольце не может быть больше тока одного (самого высокоэнергетического) электрона, и в этом смысле его можно назвать одноэлектронным током. Прямое измерение этого тока (например, амперметром, встроенным в кольцо) невозможно, но можно измерить магнитный момент, создаваемый кольцом с током, оценка которого, как произведения характерной силы тока на площадь кольца, дает:  $M \sim J\pi R^2$ . Получается, что магнитный момент пропорционален номеру уровня  $N_F$ , который, в свою очередь, при заданном уровне химпотенциала, пропорционален  $R$ . Соответственно, увеличивая радиус кольца, можно было бы увеличить его магнитный момент, что облегчило бы его измерение. Такое увеличение, однако, не может продолжаться неограниченно – различные процессы рассеяния нарушат когерентность в системе, в результате чего квантовое состояние с током будет разрушено.

### **Вопросы и задания:**

1. Для частицы с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\ell}_z + \hbar\phi)^2}{2mR^2}$$

найти выражение для тока вероятности.

Ответ:  $J_\phi = \frac{i\hbar}{2mR^2} \left( \psi \frac{d\psi^*}{d\phi} - \psi^* \frac{d\psi}{d\phi} \right) + \frac{\hbar|\psi|^2}{mR^2} \phi$ .

2. Чему будет равен полный персистентный ток в кольце в случаях четного и нечетного числа полностью заполненных уровней, если на каждом уровне может находиться не один, а два электрона? Будет ли полный ток менять знак при добавлении одного электрона на уровень, следующий за последним, полностью заполненным, уровнем?

3. Как будет зависеть от радиуса кольца (при заданном значении магнитного поля) энергия произвольного  $n$ -го стационарного состояния, если кольцо поместить в перпендикулярное магнитное поле, однородное во всем пространстве? Сравнить со случаем эффекта Ааронова-Бома, когда поле существует только внутри узкого соленоида, вставленного в кольцо (формула (53)).

## 7. Персистентные токи в графеновых кольцах

Теперь обратимся к кольцу, сделанному из графена. Существует довольно обширная научная литература, посвященная как теоретическому рассмотрению персистентных токов в графеновых кольцах (см., например, работы [17-25]), так и экспериментальным наблюдениям эффекта Ааронова-Бома в них [26-31]. Первое наблюдение осцилляций проводимости Ааронова-Бома с ожидаемым периодом, соответствующим кванту магнитного потока  $\Phi_0$ , было выполнено в графеновом кольце в 2008 году [26]. Последующие эксперименты подтвердили существование осцилляций проводимости Ааронова-Бома для различных геометрий устройства. Теоретическое рассмотрение колец Ааронова-Бома на основе графена было впервые выполнено в [17]. Авторы использовали модель кольца конечной ширины и предсказали долинную поляризацию персистентных токов в круглом кольце при ненулевом магнитном потоке. В то же время, тонкие кольца с радиусами, значительно превышающими их ширину (1D модель), можно рассматривать как идеальные структуры, в которых радиальная степень свободы «заморожена», а движение носителей возможно только вдоль кольца [21,30,31]. Такая же 1D модель была использованная нами выше для неграфеновых колец. Ее же мы используем и в этом разделе для описания персистентных токов в квантовых кольцах на основе графена.

Эффективный одномерный гамильтониан для дираковских электронов в бесщелевом графене в присутствии однородного перпендикулярного магнитного поля определяется выражением (40). Здесь, однако, мы рассмотрим более общий случай щелевого графена, представив, при этом, гамильтониан электрона в виде, пригодном для использования его как в  $K$ -, так и в  $K'$ -точках:

$$\hat{H} = v_F \left( \hat{p}_x + \frac{eA_x}{c} \right) \hat{\sigma}_x - v_F \eta \left( \hat{p}_y + \frac{eA_y}{c} \right) \hat{\sigma}_y + \Delta \hat{\sigma}_z, \quad (59)$$

где  $\eta$  – долинный индекс, обозначающий принадлежность электронов к  $K$  ( $\eta = 1$ ) или  $K'$  ( $\eta = -1$ ) долине в зоне Бриллюэна.

В полярной системе координат  $\rho, \varphi$  гамильтониан одномерного кольца преобразуется к виду

$$\hat{H} = \frac{\hbar v_F}{R} \left( \hat{\sigma}_\varphi \left( i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \phi \right) + i \frac{\hat{\sigma}_\rho}{2} \right) + \hat{\sigma}_z \Delta, \quad (60)$$

где

$$\hat{\sigma}_\rho = \hat{\sigma}_x \cos \varphi - \eta \hat{\sigma}_y \sin \varphi, \quad \hat{\sigma}_\varphi = \hat{\sigma}_x \sin \varphi + \eta \hat{\sigma}_y \cos \varphi. \quad (61)$$

Периодические по углу  $\varphi$  собственные функции гамильтониана (60) имеют вид

$$\psi_{j\eta}(\varphi) = e^{i(j+\frac{\eta}{2})\varphi} \sqrt{\frac{\varepsilon_j + \Delta}{2\varepsilon_j}} \begin{pmatrix} 1 \\ i\eta \frac{R(\Delta - \varepsilon_j)}{\hbar v_F (j + \phi)} e^{-i\eta\varphi} \end{pmatrix}, \quad (62)$$

где полуцелые числа  $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \dots$  – собственные значения оператора  $-i\partial/\partial\varphi - \eta\hat{\sigma}_z/2$ , коммутирующего с гамильтонианом. Соответствующие собственные значения энергии периодичны по потоку  $\phi$  с единичным периодом и равны

$$\varepsilon_j(\phi) = \pm \sqrt{\Delta^2 + \frac{\hbar^2 v_F^2}{R^2} (j + \phi)^2}. \quad (63)$$

Как мы видим, энергетические уровни (63) не зависят от индекса долины, поэтому при произвольном магнитном потоке  $\phi$  каждое значение энергии вырождено четырехкратно, если принять во внимание спин электрона. Позднее, при обсуждении степени заселенности уровней энергии, которая влияет на полный персистентный ток в кольце, мы будем учитывать и спиновое вырождение в электронном спектре. Заметим, что при  $\phi = 0, \pm 1/2$  возникает дополнительное вырождение, связанное с кроссингами уровней с различными  $j$ :  $\varepsilon_j(0) = \varepsilon_{-j}(0)$ ;  $\varepsilon_{j_1}(\pm 1/2) = \varepsilon_{j_2}(\pm 1/2)$ ,  $j_1 + j_2 = \mp 1$ .

Персистентный ток в кольце (при нулевой температуре) в соответствии с выражением (55) определяется как

$$J(\phi) = -\frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{j,\eta,s} n_{j\eta s} \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial \phi}, \quad (64)$$

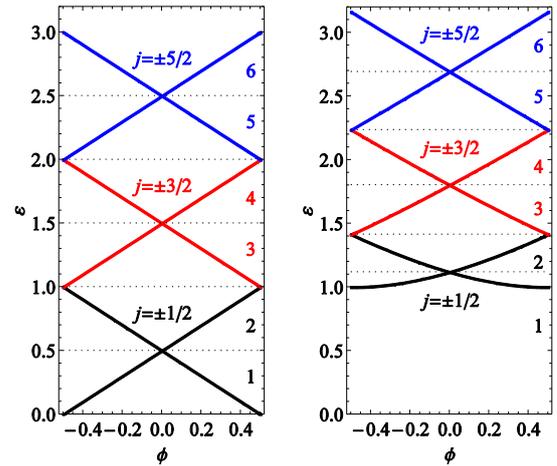
где  $n_{j\eta s}$  – числа заполнения, а  $s$  – спиновый индекс. Далее в расчетах нам будет удобнее пользоваться безразмерными величинами, измеряя ток в единицах  $e v_F / (2\pi R)$ , а энергии (в том числе и щель) – в единицах  $\hbar v_F / R$ . Тогда (64) преобразуется к более простому виду:

$$J(\phi) = -\sum_{j,\eta,s} n_{j\eta s} \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial \phi}. \quad (65)$$

Вычислим ток для кольца с радиусом  $R = 25$  нм, создаваемый верхней зоной – зоной проводимости. Соответственно, суммирование будем выполнять по всем занятым состояниям с положительными энергиями (выше щели). При этом значение  $\Delta$  примем равным 26.5 мэВ [32], что в безразмерных единицах дает  $\Delta = 1$ .

**Рисунок 10.**

Зависимость безразмерных энергий от магнитного потока в схеме приведенных зон для бесщелевого ( $\Delta = 0$ , левая панель) и щелевого ( $\Delta = 1$ , правая панель) графена. Приведены по шесть нижних энергетических магнитных подзон в зоне проводимости (они разделены пунктиром и пронумерованы цифрами от 1 до 6), образованных шестью ветвями спектра, с индексами  $j$ , указанными на рисунке. Разными цветами отображены ветви с противоположными знаками индекса  $j$ , образующие пары.



Зависимость безразмерной энергии  $\varepsilon_j(\phi) = \pm \sqrt{1 + (j + \phi)^2}$  от магнитного потока в пределах зоны Бриллюэна представлена на рис. 10 для бесщелевого ( $\Delta = 0$ , слева) и щелевого ( $\Delta = 1$ , справа) графена. Видно, что с ростом энергии дисперсионные кривые для щелевого и бесщелевого графена становятся все более похожими друг на друга – щель играет все меньшую роль. Как и в случае кольца с квадратичным законом дисперсии носителей, в центре и на краях магнитной зоны Бриллюэна имеют место

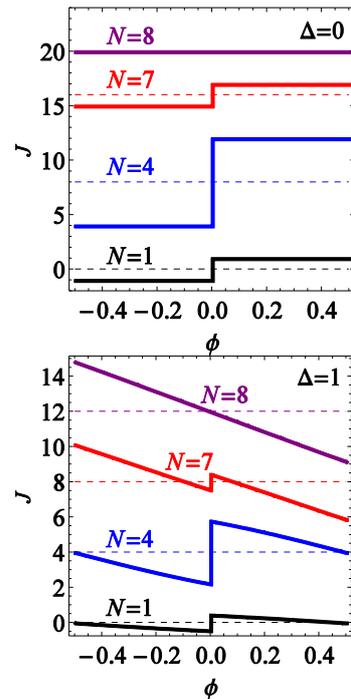
кроссинги уровней, указывающие положение границ энергетических магнитных подзон в электронном спектре. Однако теперь, абсолютный минимум энергии приходится уже не на центр, а на границу зоны Бриллюэна.

Из формулы (65) очевидно, что наличие кроссингов уровней энергии будет порождать скачки персистентного тока при  $\phi = 0; \pm 1/2$ . При этом ясно также, что персистентные токи должны сильно зависеть от степени заполнения энергетических уровней электронами [33]. Обсудим эту ситуацию более подробно и проследим за поведением персистентного тока при увеличении числа электронов  $N$  на уровнях, сопровождаемом постепенным заполнением магнитных подзон.

Пусть в зоне проводимости полностью заселен нижний уровень (первая магнитная подзона), а остальные уровни – свободны. Это значит, что на этом уровне есть четыре электрона (по одному из каждой долины с разными проекциями спина), вносящих одинаковый вклад в ток (65). Очевидно, в этом случае персистентный ток как функция потока будет претерпевать разрыв в центре зоны Бриллюэна, как показано на рис. 11, поскольку функция  $\varepsilon_j(\phi)$  испытывает «излом» в этой точке. При этом, для бесщелевого графена скачок тока больше, поскольку излом более сильный. Заметим, что если бы на уровне было не 4 электрона, а 1, 2 или 3 – ток (а вместе с ним и разрыв в нуле) был бы соответственно в 4, 2 или 4/3 раза меньше. Обратим также внимание на то, что на границах зоны Бриллюэна в бесщелевом графене тоже появляется скачок тока, поскольку производные  $\partial\varepsilon_j/\partial\phi$  на левой и правой границах в первой энергетической подзоне (нижние черные прямые на левой панели рис. 10) противоположны по знаку. В щелевом графене скачки тока на краях зоны Бриллюэна не возникают (рис. 11, внизу,  $N = 1, 4$ ), т.к. функция  $\varepsilon_j(\phi)$  в первой энергетической подзоне имеет горизонтальную касательную в этих точках, как видно на рис. 10, справа, т.е.:  $J(\phi = 1/2) = J(\phi = -1/2) = 0$ .

**Рисунок 11.**

Персистентный ток в графеновом кольце с  $\Delta = 0$  (верхняя панель) и  $\Delta = 1$  (нижняя панель) при разном количестве электронов в зоне. Для удобства визуального восприятия графики сдвинуты вверх друг относительно друга. Цифры на оси тока иллюстрируют только цену деления шкалы. Штрихи показывают уровень нуля тока в каждом случае.  $N = 1$ : нижний уровень (первая подзона на рис. 10) заселен на четверть, скачок тока в центре зоны Бриллюэна в 4 раза меньше, чем в случае полного заселения ( $N = 4$ ).  $N = 7$ : нижний уровень заселен полностью, а до полного заселения следующего уровня (вторая подзона на рис. 10) не хватает одного электрона – скачок тока в центре такой же, как при  $N = 1$ .  $N = 8$ : оба нижних уровня полностью заселены, скачка тока в центре нет. На краях зоны Бриллюэна скачок тока в кольце из бесщелевого графена всегда такой же как в центре зоны. В кольце из щелевого графена скачок тока на краях равен нулю при частичном или полном заполнении первой подзоны ( $N = 1, 2, 3, 4$ ) и отличен от нуля при заполнении второй подзоны ( $N = 5, 6, 7, 8$ ).



Если теперь увеличить количество электронов до восьми, полностью заселенными окажутся уже два нижних уровня (первая и вторая подзоны, показанные черными линиями на рис. 10). Эти уровни подходят к точке своего пересечения  $\phi = 0$  сверху и снизу, с четырьмя электронами каждый, и дают противоположные вклады в персистентный ток, полностью компенсируя друг друга. Точка пересечения такого типа никак не проявляется на зависимости персистентного тока от магнитного потока, как показано на рис. 11 при  $N = 8$ . Если число электронов на верхнем уровне (т.е. во второй подзоне) будет меньше четырех, а на нижнем (в первой подзоне) – четыре, полная компенсация невозможна, и величина скачка тока в нуле будет отлична от нуля. При этом ситуации с заполнением второй подзоны одним электроном и нехваткой одного электрона до ее полного заполнения оказываются абсолютно симметричными – скачок тока при  $\phi = 0$  в этих случаях одинаков, как показано на рис. 11 для  $N = 1$  и  $N = 7$ . Вместе с тем, в щелевом графене при  $N > 4$ , возникают скачки на краях зоны Бриллюэна, поскольку производные  $\partial \varepsilon_j / \partial \phi$  на левой и правой границах во второй энергетической подзоне (верхняя черная кривая на правой панели рис. 10) теперь конечны и противоположны по знаку, т.е.  $J(\phi = 1/2 - 0) \neq J(\phi = -1/2 + 0)$ . В бесщелевом графене, при  $N = 5, 6, 7$ , скачок тока на краях зоны Бриллюэна также есть, а вот при  $N = 8$  скачка уже не будет, поскольку первая и вторая энергетические подзоны в этом случае полностью компенсируют друг друга.

Вообще, для колец из бесщелевого графена верхняя панель на рис. 11 представляет собой, по сути, период – дальнейшее увеличение количества электронов приведет к полному повторению всей картины, что, конечно же, является следствием идеальной повторяемости энергетических магнитных подзон (рис. 10, слева). При этом ток будет обращаться в нуль всякий раз, когда будет полностью заполняться четное число уровней. Добавление одного заселенного (частично или полностью) уровня приводит к возникновению тока. Таким образом, зона с нечетным числом заселенных уровней (из которых верхний уровень может быть заселен и не полностью, в то время как все нижележащие уровни заполнены целиком) в бесщелевом графене генерирует ток, равный персистентному току одного, частично или полностью заполненного энергетического уровня. В случае, когда с верхнего полностью заполненного уровня, имеющего четный номер, убирается какое-то число электронов, то полный ток будет совпадать с током кольца, в котором к полностью заполненному четному числу уровней добавили такое же количество электронов.

Для кольца на основе щелевого графена, полной повторяемости фрагмента, изображенного на нижней панели рис. 11, не будет, поскольку при  $\Delta \neq 0$  нет повторяемости и в картине энергетических подзон (рис. 10, справа). Тем не менее, некоторая воспроизводимость картины персистентного тока будет иметь место и здесь. Снова, рассмотрим вначале полное заполнение четного числа энергетических уровней. В этом случае (65) трансформируется в следующее выражение с учетом электронного закона дисперсии:

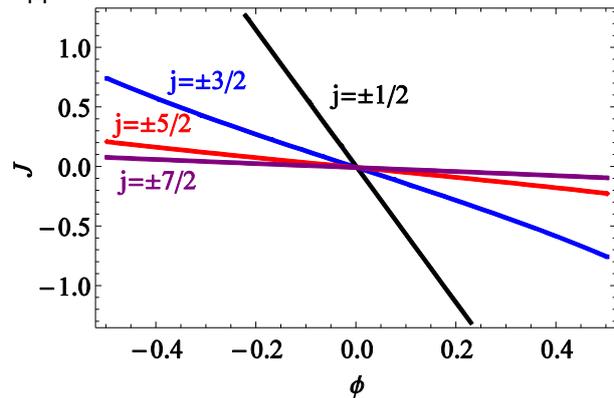
$$J(\phi) = -4 \sum_{j=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} \frac{j + \phi}{\sqrt{1 + (j + \phi)^2}}. \quad (66)$$

Парные парциальные вклады в персистентный ток (66), образованные слагаемыми с

индексами  $j$  противоположного знака, показаны на рис. 12. Видно, что наибольший вклад в ток дает первая пара (слагаемые в (66) с  $j = \pm 1/2$ ), тогда как каждая следующая пара порождает меньший ток, чем предыдущая. Это обусловлено тем, что с ростом номера  $j$  слагаемые в (66) становятся все ближе к 1 или  $-1$ , как это имеет место для бесщелевого графена. Таким образом пары, составленные из слагаемых с противоположными  $j$  в сумме (66), образуют сходящуюся последовательность, дающую при суммировании некоторое конечное значение полного персистентного тока зоны. Это означает, что в кольце из щелевого графена, в *противоположность* кольцу с квадратичным законом дисперсии, ток в действительности обусловлен несколькими нижними уровнями зоны вблизи щели, в то время как верхняя часть спектра практически не вносит никакого вклада.

**Рисунок 12.**

Парциальные вклады в персистентный ток от четырех пар полностью заполненных нижних энергетических уровней, лежащих выше щели в графеновом кольце, при  $\Delta = 1$  [33]. Первая пара соответствует энергетическим уровням с  $j = \pm 1/2$ , вторая – с  $j = \pm 3/2$  и т.д.



Если же заполнено полностью нечетное число уровней, то к полученному току от четного их числа добавится ток одного уровня. При этом результат, конечно же, изменится, однако вывод о том, что полный ток в основном создается несколькими уровнями над щелью, сохраняется. Действительно, можно начать суммирование слагаемых в (65) не с нижних, а с верхних уровней, также объединив их в пары. Если заселено большое количество уровней, то верхние пары снова будут давать вклад, близкий к нулю. И только по мере приближения к щели компенсация в парах будет постепенно исчезать, и этот нескомпенсированный парный ток в совокупности с током последнего (самого низкого) неспаренного уровня даст полный персистентный ток в кольце.

Аналогично, при неполном заполнении самого последнего (высокого) уровня, вклад в ток от находящихся на нем электронов будет компенсироваться таким же количеством электронов с уровня, лежащего под ним. Причем, компенсация будет тем полнее, чем выше расположены эти уровни на оси энергий. Вклад от оставшихся на предпоследнем уровне электронов будет компенсироваться таким же количеством электронов с уровня, предшествующего предпоследнему, и т.д. По мере снижения, компенсация будет все менее полной. В итоге, опять полный ток в кольце будет получен от нескольких нижних уровней.

**Вопросы и задания:**

1. Записать гамильтониан  $\hat{H}_{2D}$  двумерного графенового кольца Ааронова-Бома (с векторным потенциалом в калибровке (50)) в полярной системе координат  $(\rho, \phi)$ .

2. Для одномерного кольца  $\rho = R$ , и  $\hat{H}_{2D} \rightarrow \hat{H}_{1D}$ , где

$$\hat{H}_{1D} = \frac{\hbar v_F}{R} \hat{\sigma}_\phi \left( i \frac{\partial}{\partial \phi} - \phi \right) + \hat{\sigma}_z \Delta,$$

а  $\hat{\sigma}_\phi$  определяется (61). Является ли  $\hat{H}_{1D}$  эрмитовым оператором? Найти  $\hat{H}_{1D}^+$ . Показать, что  $\hat{H}$ , определенный формулой (60), является эрмитовой частью оператора  $\hat{H}_{1D}$ :  $\hat{H} = (\hat{H}_{1D} + \hat{H}_{1D}^+)/2$ .

3. Как полный персистентный ток в кольце на основе щелевого графена зависит от величины щели? Почему? Как это можно объяснить, приняв во внимание сделанный вывод о том, что ток в графеновом кольце с  $\Delta \neq 0$  создается, в основном, нижними уровнями вблизи щели?

4. Чем будет отличаться зависимость персистентного тока от потока для щелевого графена при  $N = 9$  от изображенной на рис. 11 для  $N = 1$ ?

5. В графеновом кольце при наличии магнитного потока  $\varepsilon_j(\phi) \neq \varepsilon_{-j}(\phi)$ . Как будет с ростом номера  $j$  меняться степень асимметрии спектра? Сравнить со случаем квадратичного закона дисперсии электронов.

## Литература

1. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
2. К.С. Новоселов, УФН, **181**, 1299 (2011).
3. L. Britnell, R.V. Gorbachev, R. Jalil, B.D. Belle, F. Schedin, A. Mishchenko, T. Georgiou, M.I. Katsnelson, L. Eaves, S.V. Morozov, N.M.R. Peres, J. Leist, A.K. Geim, K.S. Novoselov, L.A. Ponomarenko, *Science*, **335**, 947 (2012).
4. A.C. Ferrari, F. Bonaccorso, V. Fal'ko, K.S. Novoselov, S. Roche, P. Bøggild, S. Borini, F.H.L. Koppens, V. Palermo, N. Pugno, J.A. Garrido, R. Sordan, A. Bianco, L. Ballerini, M. Prato, E. Lidorikis, J. Kivioja, C. Marinelli, T. Ryhänen, A. Morpurgo, J.N. Coleman, V. Nicolosi, L. Colombo, A. Fert, M. Garcia-Hernandez, A. Bachtold, G.F. Schneider, F. Guinea, C. Dekker, M. Barbone, Z. Sun, C. Galiotis, A.N. Grigorenko, G. Konstantatos, A. Kis, M. Katsnelson, L. Vandersypen, A. Loiseau, V. Morandi, D. Neumaier, E. Treossi, V. Pellegrini, M. Polini, A. Tredicucci, G.M. Williams, B.H. Hong, J.-H. Ahn, J.M. Kim, H. Zirath, B.J. van Wees, H. van der Zant, L. Occhipinti, A. Di Matteo, I.A. Kinloch, T. Seyller, E. Quesnel, X. Feng, K. Teo, N. Rupesinghe, P. Hakonen, S.R.T. Neil, Q. Tannock, T. Löfwander, J. Kinaret, *Nanoscale* **7**, 4598 (2015).
5. A. Calogeracos, N. Dombey, *Contemp. Phys.* **40**, 313 (1999).
6. M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, A.K. Geim, *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
7. S. De Leo, P. Rotelli, *J. Phys. A: Math. Theor.* **44**, 475305 (2011).
8. A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
9. S. Das Sarma, S. Adam, E.H. Hwang, E. Rossi, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 407 (2011).
10. D. Bischoff, A. Varlet, P. Simonet, M. Eich, H.C. Overweg, T. Ihn, K. Ensslin, *Appl. Phys. Rev.* **2**, 031301 (2015).
11. M.I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, New York: Cambridge University Press (2012).
12. P.R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
13. A.V. Shytov, M.S. Rudner, L.S. Levitov, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 156804 (2008).
14. A. Young, P. Kim, *Nat. Phys.* **5**, 222(2009).
15. Y. Aharonov, D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
16. М.В. Москалец, *Основы мезоскопической физики*, Харьков: НТУ ХПИ (2010).
17. P. Recher, B. Trauzettel, A. Rycerz, Ya.M. Blanter, C.W.J. Beenakker, A.F. Morpurgo, *Phys. Rev. B* **76**, 235404 (2007).
18. D.R. da Costa, A. Chaves, M. Zarenia, J.M. Pereira, G.A. Farias, F.M. Peeters, *Phys. Rev. B* **89**, 075418 (2014).
19. J. Schelter, D. Bohr, B. Trauzettel, *Phys. Rev. B* **81**, 195441 (2010).
20. C.-H. Yan, L.-F. Wei, *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 295503 (2010).
21. M. Zarenia, J.M. Pereira, A. Chaves, F.M. Peeters, G.A. Farias, *Phys. Rev. B* **81**, 045431 (2010).
22. D.A. Bahamon, A.L.C. Pereira, P.A. Schulz, *Phys. Rev. B* **79**, 125414 (2009).
23. J. Wurm, M. Wimmer, H.U. Baranger, K. Richter, *Semicond. Sci. Technol.* **25**, 034003 (2010).
24. D.S.L. Abergel, V.M. Apalkov, T. Chakraborty, *Phys. Rev. B* **78**, 193405 (2008).
25. L.J.P. Xavier, D.R. da Costa, A. Chaves (Jr.), J.M. Pereira, G.A. Farias, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 505501 (2016).
26. S. Russo, J.B. Oostinga, D. Wehenkel, H.B. Heersche, S. Sobhani, L.M.K. Vandersypen, A.F.

- Morpurgo, Phys. Rev. B **77**, 085413 (2008).
27. D. Smirnov, H.R. Schmidt, J. Haug, Appl. Phys. Lett. **100**, 203114 (2012).
28. A. Rahman, J.W. Guikema, S.H. Lee, N. Markovic, Phys. Rev. B **87**, 081401(R) (2013).
29. M. Huefner, F. Molitor, A. Jacobsen, A. Pioda, C. Stampfer, K. Ensslin, T. Ihn, Phys. Status Solidi B **246**, 2756 (2009).
30. M. Huefner, F. Molitor, A. Jacobsen, A. Pioda, C. Stampfer, K. Ensslin, T. Ihn, New J. Phys. **12**, 043054 (2010).
31. Y. Hu, M. Ruan, Z. Guo, R. Dong, J. Palmer, J. Hankinson, C. Berger, W.A. de Heer, J. Phys. D: Appl. Phys. **45**, 154010 (2012).
32. G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, P.J. Kelly, J. van den Brink, Phys. Rev. B **76**, 073103 (2007).
33. E.S. Azarova, G.M. Maksimova, V.A. Burdov, Physica E **106**, 140 (2019).

Галина Михайловна **Максимова**

Владимир Анатольевич **Бурдов**

**Квантовая механика графена**

*Учебно-методическое пособие*