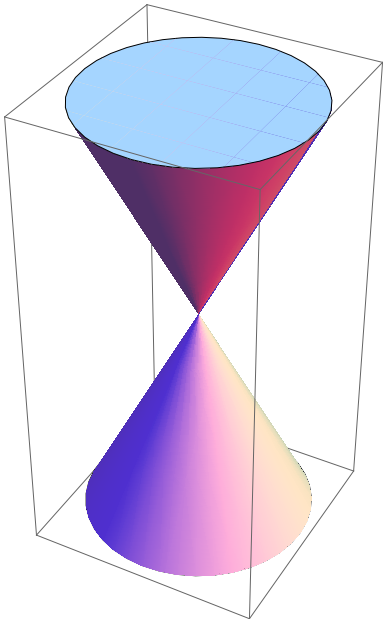
ОСНОВИ ФІЗИКИ ГРАФЕНУ

НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК

Е. В. ГОРБАР, С. Г. ШАРАПОВ



НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ
ім. М.М. БОГОЛЮБОВА

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Е. В. Горбар, С. Г. Шарапов

Основи фізики графену

Навчальний посібник

Київ 2013

УДК: 530.145, 538.9

Едуард Володимирович Горбар
Сергій Геннадійович Шарапов

Основи фізики графену. Навчальний посібник. – Київ, 2013. – 118 с.

Викладено основні положення фізики графену. Дано опис графену у моделі сильного зв'язку на гратці і отримано ефективну низькоенергетичну дираківську теорію для електронних квазічастинкових збуджень. Проаналізовано симетрії цієї теорії такі, як кіральність, $U(4)$ симетрія спін-долина-підгратка, просторова інверсія, обернення часу, частинково-дірочна симетрія.

Розглянуто розв'язки рівняння Дірака для квазічастинкових збуджень в графені у зовнішньому магнітному полі. Вивчено парадокс Клейна і тунелювання крізь потенційний бар'єр. Досліджено явище падіння на центр і нестабільність дираківського вакууму для електронів в графені у полі надкритичного кулонівського центру. Показано, що ця нестабільність є безпороговою для безмасових електронів у зовнішньому магнітному полі.

Затверджено до друку Вченою радою
Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України
та Вченою радою фізичного факультету
Київського Національного університету
імені Тараса Шевченка

Рецензенти:

О.В. Гомонай – доктор фіз.-мат. наук, професор

В.П. Гусинін – член кореспондент НАН України,
доктор фіз.-мат. наук, професор

ISBN 978-966-02-6776-3

© Е.В. Горбар, С.Г. Шарапов, 2013

Зміст

1 Вступ **6**

1.1 Історія отримання графену 6
1.2 Особливості електронної фізики графену 9
1.2.1 Квантовий ефект Холла в графені 12
1.3 "Релятивістська" теорія конденсованого стану 15
1.4 Література 16
1.5 Задачі 16
1.5.1 Деякі інтернет ресурси з графену 16
1.6 Подяки 17

2 Графен: від моделі сильного зв'язку до теорії Дірака **18**

2.1 Опис графену у моделі на гратці 19
2.2 Спінорне представлення невзаємодіючого гамільтоніана 22
2.2.1 Одночастинкова функція Гріна 24
2.3 Дискретні симетрії гамільтоніана на гратці 25
2.3.1 Просторова інверсія $\mathcal{P}$ 25
2.3.2 Обернення часу $\mathcal{T}$ 27
2.3.3 Частинково-дірочна симетрія і стабільність Фермі точки 28
2.4 Низькоенергетичний ефективний лагранжіан графену 29
2.4.1 Гамільтоніан графену без взаємодії 29
2.4.2 Лагражіан графену 31
2.4.3 Підсумки 34
2.5 Задачі 35

3 Властивості ефективного низькоенергетичного квантово-польового опису графену **39**
3.1 Неперервні симетрії ефективної низькоенергетичної моделі квазічастинкових збуджень в графені 40
3.1.1 $U(2)$ долинно-підграткова симетрія 40
3.1.2 $U(4)$ симетрія спін-долина-підгратка та її порушення зеєманівським членом 41
3.2 Кіральність квазічастинок в графені та її відмінність від кіральності у КЕД$_{3+1}$ 41
3.3 Дискретні симетрії 45
3.3.1 Просторова інверсія $\mathcal{P}$ 45
3.3.2 Обернення часу $\mathcal{T}$ 46
3.3.3 Зарядове спряження $\mathcal{C}$ 47
3.4 Різниця між квазічастинками в графені та безмасовими нейтрино 48
3.5 Порушення симетрії в графені: дираківські маси, їхні трансформаційні властивості при $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$, $\mathcal{C}$ перетвореннях 49
3.5.1 Фізичний зміст дираківських мас 50
3.5.2 Трансформаційні властивості дираківських мас . 51
3.6 Дираківські рівні Ландау 53
3.7 Задачі 55

4 Клейнівське тунелювання **60**
4.1 Парадокс Клейна в квантовій релятивістській фізиці . 60
4.2 Тунелювання крізь потенціальний бар'єр в графені . . 62
4.3 Електронні властивості і транспорт крізь n-p перехід в графені 66
4.3.1 Квазікласичне наближення 67
4.3.2 Точно розв'язувана задача 71
4.4 Задачі 75

5 Нестабільність дираківського вакууму для електронів в графені у зовнішніх полях **76**
5.1 Потенціальна яма 80
5.2 Надкритичний кулоніський центр 82
5.3 Потенціальна яма у зовнішньому магнітному полі. . . . 92

5.4 Безпорогова нестабільность для кулонівського центру індукована зовнішнім магнітним полем 98

Бібліоґрафія **103**

A Рівняння Дірака у зовнішньому магнітному полі: калібрування Ландау **107**

B Рівняння Дірака у зовнішньому магнітному полі: симетрична калібрування **113**

Покажчик **116**

Розділ 1

Вступ

1.1 Історія отримання графену

У той час, коли сучасні передові наукові дослідження вельми затратні та складні (згадаймо хоча б Великий адронний колайдер, інші прискорювачі, телескопи тощо), здається дивовижним, що серйозне фундаментальне досягнення у фізиці могло бути зроблено за допомогою простого і навіть дотепного методу — прямим застосуванням звичайного скотчу. Але у 2004 р. Костянтин Новосьолов (Konstantin Novoselov) і Андрій Гейм (Andre Geim) із колегами саме за допомогою цієї липкої стрічки змогли зробити своє відкриття, що дуже швидко стало загально визнаним та істотно вплинуло на ситуацію у фізиці конденсованого стану [1]. Почавши працювати з графітовими зразками завтовшки приблизно 1 мм і добре знаючи про дуже слабку міжшарову взаємодію в графіті, вони поставили за мету отримати якомога тонші графітові шари. Для цього ці зразки приклеювали до звичайного скотчу, і від них суто механічно відривали ще тонші шари, що в певній кількості так чи інакше утворювались на скотчі. Потім останній обережно видаляли з налиплими тонкими фрагментами графіту, які, зрозуміло, виявлялись різношаровими. Після декількох повторень цієї нескладної процедури деякі шари графіту виявлялись настільки тонкими, що могли вміщувати всього кілька атомних шарів, в тому числі — один (!), що наперед не було очевидним і вимагало спеціальної перевірки.

Одержані таким ручним способом плівкові шматочки зі скінченим і достатньо малим числом шарів і були бажаними зразками *графену*,

які тепер так і звуться: одно-, дво-, тришарові і т.д. графенові плівки. Для подальшого дослідження – зокрема, встановлення істинної товщини – їх розміщали на підкладці з кремнію, верхній шар якої був ізолятором з оксиду кремнію SiO_2. Якщо товсті плівки з графіту (товщиною більше 3 нм та розміром, що перевищує 100 мікрон) можна побачити навіть неозброєним оком (фактично вони складають слід на папері від будь-якого чорного олівця[1]), то справжній графен, плівки якого за розміром не перевищували 10 мікрон, можна побачити лише за допомогою оптичного мікроскопу. Більше того, через явище інтерференції світла спостереження графену сильно залежить не тільки від його товщини, а й від того, якої товщини є верхній ізоляційний шар підкладки. Як було з'ясовано пізніше, саме те, що товщина шару з оксиду кремнію дорівнювала приблизно 300 нм, виявилось неабиякою вдачею, оскільки саме така товщина найбільш сприятлива з точки зору оптичних спостережень.

Для електричних вимірювань цього, звичайно, замало, і до отриманих графенових плівочок довжиною у декілька мікрон треба було підвести металеві контакти, тобто виконати дії, які вимагають використання електронно-променевої літографії – методики, що добре розроблена і широко використовується у виробництві напівпровідникових мікросхем. Проте мали місце і певні експериментальні труднощі, бо в даному випадку йшлося про поки що невідомі для літографії плівкові зразки, товщиною в один атом.

Графен є першим прикладом справжнього двовимірного кристалу. Слід відзначити, що сам факт існування двовимірного кристала є викликом з точки зору теоретичної фізики. Дослідження таких всесвітньо відомих теоретиків, як Лев Давидович Ландау та Рудольф Пайерлс (Rudolf Peierls) показали, що двовимірні кристали не можуть бути термодинамічно стабільними, що, в свою чергу, повністю забороняє їх існування. Дійсно, нескладний розрахунок (див. §137 книги [2]), переконливо демонструє, що теплові флуктуації кристалічної гратки швидко призводять до таких зміщень атомів з положень їх рівноваги, які по порядку величини співпадають з міжатомною відстанню у вихідній гратці. Між тим графен, отриманий, нехай і дещо кустарно, з експериментальною вишуканістю достойною успадкування, існував як суто двовимірне фізичне середовище, а отже, перед фахівцями постало питання – чому?

Це питання отримало і експериментальну, і теоретичну відповіді, які полягали у наступному: як з'ясувалося пізніше, вільний графен, будучи в цілому дійсно плоским, має трохи нерівну, "зім'яту" поверх-

[1]Саме слово "графіт" запропоноване у 1789 р. німецьким геологом Абраамом Готлобом Вернером походить від грецького слова $\gamma\rho\alpha\phi\omega$ (малювати, писати).

ню, тобто атоми не лежать в одній площині, а виходять з неї на невеликі відстані, залишаючись при цьому дуже сильно зв'язаними між собою саме в просторі площини. Іншими словами, поверхня графену вкрита, образно кажучи, випадково розташованими пагорбами і долинами, які отримали назву риплів (ripples). Якщо строго, то останні будучи наслідками спонтанних зміщень атомів вуглецю у третій вимір, створюють ефективну "товщину" одноатомних шарів, яка, в свою чергу, породжує їх поперечну відносно площини механічну жорсткість, і тим самим забезпечує уникнення обмеження Ландау-Пайєрлса, що залишається справедливим для виключно двовимірних систем. Водночас, що яскраво довели численні експерименти, одношаровий графен, незважаючи на згадану деяку тривимірність, у майже всіх своїх проявах поводить себе як суто двовимірний кристал.

Серед найбільш вражаючих властивостей графену можна, насамперед, відзначити те, що він найміцніший серед відомих кристалічних речовин, його теплопровідність на порядок вища за теплопровідність міді, а електрони у графені більш чутливі до прикладеного електричного поля ніж у всіх відомих напівпровідниках. Причому – і це теж вельми важливо – його електронні властивості мають глибокі аналогії з фізикою елементарних частинок і квантовою теорією поля.

З теоретичного погляду, одношарова стільникова структура графена, яка насправді відповідає бджолиним стільникам, робить його "прабатьком" майже усіх сполук, що базуються на вуглеці і мають хімічні зв'язки, близькі до sp^2 (див. Рис. 1.1): *графіт* – це фактично стос великої кількості шарів графену; *вуглецеві нанотрубки* є утвореннями зі згорнутого у рулони різного діаметру одного чи декількох шарів графену; *фулерени*, або "бакіболи",[2] – ніщо інше, ніж нанорозмірні сфероподібні молекули, поверхня яких також фактично складається з графенових площин. Усі ці алотропні форми вуглецю були винайдені і непогано вивчені набагато раніше за графен, але теоретичне розуміння більшості їх електричних, магнітних та механічних властивостей базується на розумінні відповідних властивостей графену, який як суто теоретичний об'єкт досліджувався набагато раніше свого фактичного створення.

Оскільки головним предметом цього посібника є властивості графену, пов'язані з поведінкою електронів у ньому, далі ми зробимо короткий огляд саме цих властивостей.

[2]Ця назва і термін "бакиболи" були вигадані на честь американського архітектора та інженера Бакмінстера Фуллера (Buckminster Fuller), котрий дослідив такі форми ще до відкриття цих форм вуглецю.

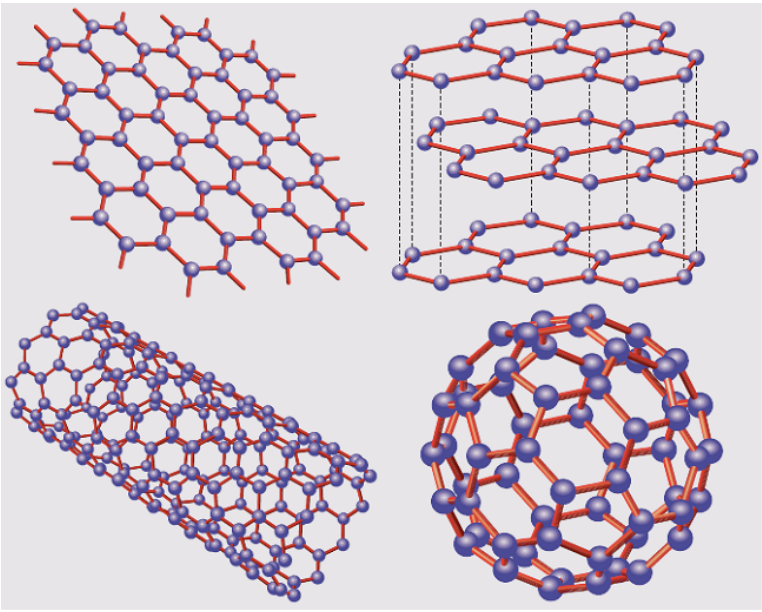


Рис. 1.1: Графен, графіт, вуглецева нанотрубка, фулерен (рисунок з [3]).

1.2 Особливості електронної фізики графену

Переважна більшість унікальних властивостей графену виникає з поведінки в ньому електронів. У цьому випадку їх рух в стільниковій гратці, що має два нееквівалентні атоми в елементарній комірці, призводить до того, що в кристалі виникає дві зони[3] π і π^* – валентна

[3]Якщо бути історично коректним, то можна стверджувати, що структура графену є окремим і вельми простим випадком молекулярних кристалів з декількома молекулами в комірці, ще у 40-ві роки минулого століття всебічно вивченими українськими фізиками - експериментатором А.Ф. Прихотько і теоретиком О.С. Давидовим, а виникаючі в графені енергетичні зони є, з точки зору загальної теорії молекулярних кристалів, розсунутими на величину давидовського розщеплення. У наближенні найближчих сусідів такі зони на границі зони Бріллюена, де $\mathbf{k} = \mathbf{K}$, завжди змикаються. Проте треба зауважити, що таке змикання є не-

зона і зона провідності, відповідно (див. Рис. 1.2).

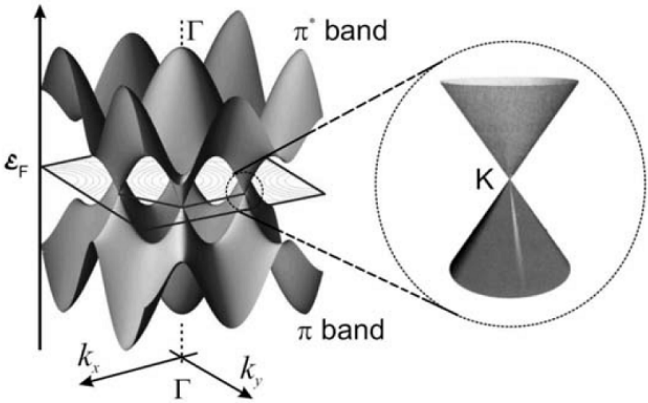


Рис. 1.2: Зонна структура графену та формування конусу Дірака. Показані напрями хвильового вектору $\mathbf{k}$ в площині, та положення рівня Фермі ϵ_F в точках $\mathbf{K}$ перетину, або змикання, зон (рисунок з [4]).

Ці зони заповнюються вільними π-електронами, які у відповідності до принципу Паулі, повинні відрізнятися величиною хвильового вектора і двома значеннями проекції спіну. Оскільки кількість станів у кожній зоні дорівнює кількості електронів, валентна зона виявляється заповненою повністю, в той час як зона провідності залишається пустою. Рівень Фермі ϵ_F, як видно з Рис. 1.2, розташовується в точках $\mathbf{K}$, що отримали назву дираківських. Закон дисперсії $\epsilon(\mathbf{k})$ в околі цих точок у графені виявляється лінійним: $\epsilon(\mathbf{k}) = \pm\hbar v_F|\mathbf{k}|$, де нахил дираківських конусів задається швидкістю Фермі v_F ($\hbar = h/2\pi$, де h – стала Планка).

Вперше безмасовий характер дисперсії електронів у графені був встановлений у 1947 р. канадським теоретиком Філіпом Расселом Уоллесом (Philip Russell Wallace). Проте у ті часи ніхто не сумнівався, що впорядковане конденсоване середовище завтовшки в один атомний шар не може існувати. Саме тому Р. Уоллес розглядав стільникову площину як вихідну модель для вивчення електронних властивостей графіту [5], які були суттєвою складовою конче актуальних дослі-

обхідною, але далеко не достатньою умовою формування дираківського спектру, чому сприяє стільникова гратка графену.

джень різноманітних ядерних реакторів, де як уповільнювач використовувався саме цей матеріал.

Набагато пізніше, лише у 1984 р., тобто рівно за 20 років до фактичного отримання графену, інший канадський теоретик Гордон Семенофф (Gordon Semenoff) довів [6], що його електронний спектр, або спектр двовимірної стільникової гратки, має конусоподібний вигляд і добре описується за допомогою двовимірного безмасового рівняння Дірака, якщо перейти до довгохвильового (континуального) наближення. Як неважко здогадатися, швидкість світла c, яка входить у це рівняння, має бути замінена на швидкість Фермі v_F. Такий результат випливав безпосередньо з теоретичних розрахунків, які не викликали заперечень, але спиралися на модель невзаємодіючих електронів (одноелектронне наближення). Вона не була наперед очевидною, а крім того, не виключалось, що, скажімо, міжелектронна взаємодія могла змінити спектр, породивши в ньому щілину, що, іншою мовою, відповідає появі, або генерації, маси квазічастинок. Тому перед творцями графену постала експериментальна проблема перевірити, якими є електрони в графені, що зводилося до знаходження відповідей на питання:

1. Чи дійсно вони безмасові, а їх рух описується рівнянням Дірака-Вейля за допомогою якого описують рух нейтрино у фізиці високих енергій?

2. Чи незважаючи на теоретичні передбачення, рух квазічастинок у графені, як у більшості твердих тіл, описується нерелятивістською квантовою механікою?

Саме це й змогли незалежно встановити А. Гейм з К. Новосьоловим та їх співавтори [7], а також група Філіпа Кіма (Philip Kim) з університету Колумбії (США), що теж експериментувала з одношаровим графеном [8]. Пропускаючи електричний струм через графенові стрічки, експериментатори встановили, що рухливість носіїв у графені майже на два порядки перевищує рухливість у найбільш використовуваних в електроніці кремнієвих напівпровідниках. В абсолютних цифрах рухливість чистого (без домішок) графену може досягти $2 \times 10^5 \text{см}^2/\text{В} \cdot \text{сек}$, що робить його найперспективнішим матеріалом для створення на його основі електронних пристроїв високої частоти.

Ще однією перевагою графену і приладів, які вже створюються і створюватимуться на його основі, до чого також приклалися А. Гейм і К. Новосьолов, є те, що положенням рівня Фермі в ньому дуже зручно керувати зовнішньою електричною напругою, прикладеною до підкладки з напівпровідника (зокрема, кремнію з шаром ізолятору),

на якій лежить графеновий зразок (польовий транзисторний ефект). Цим легко інжектувати в графен носії необхідного знаку (див. Задачу 2 з Розділу 2.5).

Проте навіть цих, безперечно, цікавих і важливих результатів, які, відкривали певні перспективи для зародження вуглецевої наноелектроніки, було замало для з'ясування одного з ключових, зазначених вище, питань: яким же, врешті-решт, рівнянням описується рух електронів у графені. Відповідь на нього була знайдена, коли до графенових зразків було разом з електричним, прикладене ще одне зовнішнє поле – магнітне.

1.2.1 Квантовий ефект Холла в графені

Фактично мова йшла про вивчення в графені ефекту Холла, який створює додаткові можливості для вимірювання фізичних характеристик квазічастинок. Зокрема, інформацію про властивості електронів можна діставати, вивчаючи залежність електричного опору від магнітного поля $\mathbf{H}$ (чи магнітної індукції $\mathbf{B}$), або, у випадку графену, від густини додаткових електронів/дірок. Як ми вже відзначали цю густину дуже просто змінювати, прикладаючи електричну напругу того чи іншого знаку до підкладки з кремнію, на якій лежить графеновий зразок.

В результаті проведених детальних експериментів головною ознакою різниці між графеном та звичайними напівпровідниками стала саме незвичайна картина ефекту Холла, який спостерігався у графені. Нагадаємо, що класичний ефект Холла, відкритий у 1879 р., полягає у тому, що струм, який тече у провіднику в присутності перпендикулярного до напрямку струму магнітного поля, призводить до появи напруги вздовж напрямку перпендикулярного до напрямків струму і поля. Відношення цієї напруги до струму в цьому ж напрямку зветься опором Холла R_H. Більше ніж через століття німецький експериментатор Клаус фон Клітцинг (Klaus von Klitzing – Нобелівська премія з фізики 1985 р.) несподівано встановив, що у напівпровіднику з двовимірним електронним газом при температурах, близьких до абсолютного нуля, холлівський опір виявляється квантованим, приймаючи значення $R_H = h/\nu e^2$, де e - заряд електрона, а ν — додатне ціле число, або так званий фактор заповнення. Холлівське квантування виявилось настільки точним, що цей, вже цілочисельний квантовий ефект Холла (КЕХ), стали використовувати в якості стандарту для прецизійних вимірювань опору.

У той час, коли групи Гейма-Новосьолова та Ф. Кіма досліджували КЕХ у графені, В.П. Гусинін та С.Г. Шарапов, спираючись на

дослідження, що велися в Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України з так званого ефекту магнітного каталізу в квантовій теорії поля, вивчали холлівську провідність саме графену. З розрахунків випливало, що для дираківських електронів у графені на відміну від звичайних напівпровідників, фактор заповнення має бути не довільним цілим, а тільки подвоєним непарним, тобто $\nu = 2(2n+1)$, де $n = 0, 1, 2, \ldots$ [10]. Це пов'язано з тим, що у зовнішньому магнітному полі послідовність рівнів Ландау у графені, $E_n = \pm\sqrt{2n\hbar v_F^2 eB/c}$ з $n = 0, 1, 2, \ldots$, суттєво відрізняється від відповідної послідовності у звичайних металах і напівпровідниках, де для двовимірного нерелятивістського електронного газу їх енергії згідно формули Ландау дорівнюють $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$ ($\omega_c = eB/(mc)$ – циклотронна частота, m – ефективна маса носіїв у нерелятивістському електронному газі). Якщо в останніх рівні енергії еквідистантні, як для квантово-механічної частинки у осциляторному потенціалі, то у дираківському випадку — це не так. (Див. Рис. 1.3)

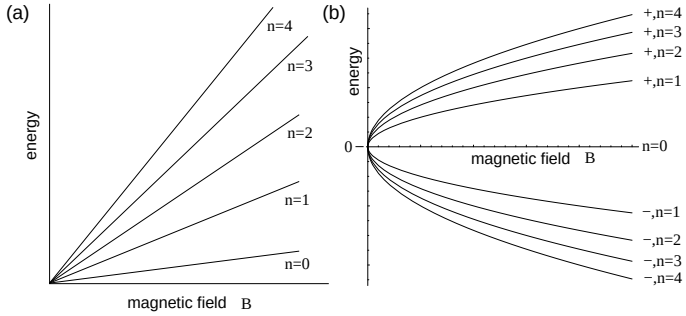


Рис. 1.3: Залежність енергії рівнів Ландау від магнітного поля. (a) Нерелятивістський випадок з $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2) \propto B(n + 1/2)$. (b) Релятивістський випадок з $E_n = \pm\sqrt{2n\hbar v_F^2 eB/c} \propto \pm\sqrt{Bn}$ (рисунок з [9]).

Іншою унікальною властивістю графену є присутність в спектрі рівня з нульовою енергією, який належить одночасно обом – і валентній, і провідній – зонам, саме існування якого і обумовлює нестандартний КЕХ у графені. Ще одна міжнародна група теоретиків у складі американця Антоніо Кастро Нето (Antonio Castro Neto), іспанця Франціско Гуінея (Francisco Guinea) і португальця Нуно Мігуель Переша (Nuno Miguel Peres) незалежно прийшла до того ж висновку щодо аномального КЕХ у графені, розглядаючи поведінку так званої

фази Беррі.

Передбачена поведінка холлівського опору була дійсно спостережена експериментальними групами Гейма [7] і Кіма [8]. Як приклад, на Рис. 1.4 наведено залежність $R_H(B)$ з роботи [8], де видно характерні полички, що відповідають холлівським плато з $\nu = 2, 6, 10$. Цим були усунуті будь-які сумніви щодо того, якими квазічастинками

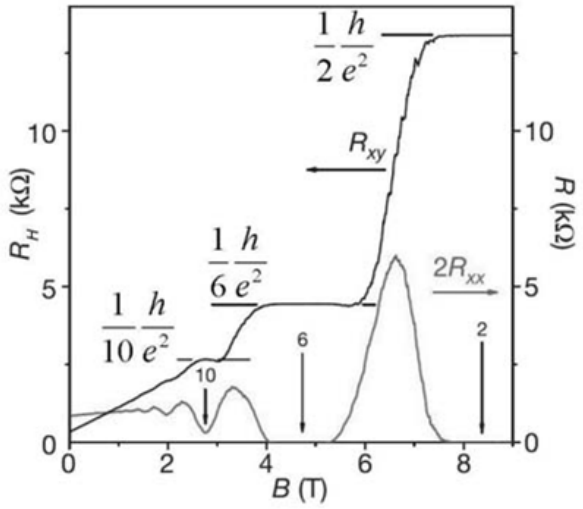


Рис. 1.4: Залежність холлівського опору R_H від магнітного поля B (рисунок з [8]).

є електрони у одношаровому графені, оскільки навіть у двошаровому графені квантування цієї провідності має зовсім інший характер. Тому тепер кожний з графенів (маються на увазі графени, що відрізняються числом шарів) розглядається як окремий оригінальний об'єкт, властивості якого дуже активно досліджується на предмет порівняння один з одним і можливого оптимального застосування в техніці. Щодо інших двох доказів дираківської природи квазічастинок у графені, ми пропонуємо читачу власноруч перевірити їх теоретичну базу, розв'язавши Задачі 4 та 5 із Розділу 3.7).

Далі у спільній роботі обох згаданих експериментальних груп у 2007 р. було продемонстровано, що КЕХ у графені можна спостерігати навіть при кімнатних температурах, що вражає уяву навіть

фахівців, бо зазвичай КЕХ вимагає не стільки низьких, скільки наднизьких температур. Така властивість графену є ще одним прямим наслідком релятивістської поведінки його електронів, забезпечуючи велику відстань між рівнями Ландау, тобто того, що у графені величина $\sqrt{\hbar v_F^2 eB/c}$ у тисячі (!) разів більше, ніж циклотронна енергія $\hbar\omega_c$ у звичайних матеріалах.

1.3 "Релятивістська" теорія конденсованого стану

Ще одна властивість графену має суттєве значення. В звичайних матеріалах домішки розсіюють електрони, що призводить до енергетичних втрат і збільшення опору. Виявляється, що у випадку рівняння Дірака розсіяння електронів назад на домішці дорівнює нулю. Це призводить до того, що електрони в графені можуть рухатись на відстані в багато мікронів без суттєвого розсіяння назад, що робить графен майже ідеальним матеріалом для створення так званого балістичного транзистора.

Хоча можна бути певним у реальності застосувань тільки тоді, коли з'явилися комерційні продукти, важливість графену для фундаментальної фізики не потребує вже подальших доказів. Через свій незвичайний електронний спектр графен призвів до нової парадигми "релятивістської" теорії конденсованої матерії, де релятивістські квантові явища, деякі з котрих не спостерігались навіть у фізиці високих енергій, можуть бути імітовані та спостережені в настільних експериментах. Яскравим прикладом цього став передбачений ще у 1929 р. парадокс Клейна (Oscar Klein), або аномально високої ймовірності туннелювання релятивістських частинок крізь потенціальні бар'єри, який експериментально спостерігався у 2009 р. групою Ф. Кіма. Чекає на своє спостереження ефект Швінгера (Julian Schwinger), який полягає у народженні з вакууму пар релятивістських частинок у присутності електричного поля.

Відзначимо також, що графен є надзвичайно цікавим матеріалом стосовно порушення симетрії. Як ми побачимо далі, в континуальному наближенні гамільтоніан для квазічастинок в графені, які взаємодіють за рахунок кулонівської взаємодії, має $U(4)$ симетрію пов'язану із спіном і псевдоспіном (цей новий ступінь свободи є зв'язаним з підгратками стільникової гратки графену). Генерація щілини порушує цю симетрію. В достатньо сильних магнітних полях спостерігаються нові плато в холлівській провідності. Ці плато відповідають генерації щілин, які повністю порушують $U(4)$ симетрію. Крім того, нещодав-

но спостерігався і дробовий КЕХ в графені для теоретичного опису якого необхідно використовувати топологічні параметри порядку.

Наприкінці відзначимо, що тут ми навмисно не зупинялися на можливих практичних застосуваннях графену, відсилаючи читача до огляду рекомендованої літератури.

1.4 Література

Підбір цитованої літератури не претендує на вичерпність, наведені посилання лише на ті джерела, з яких позичений відповідний матеріал, при цьому перевага віддавалась роботам оглядового та учбового характеру. Відповідно, посилання на роботи пріоритетного характеру, за винятком наведеного вище історичного огляду, практично відсутні, в найбільш важливих випадках такого роду ми посилаємося на прізвища авторів.

Хоча й вже з'явилися підручники, присвячені графену, наприклад, [11], не втратили актуальності огляди присвячені різноманітним явищам у графені. Зокрема, цей посібник написано на основі огляду [12]. Для подальшого ознайомлення можна порадити загальні огляди [13, 14, 15], а також огляди, присвячені більш конкретним питанням [16, 17, 18].

1.5 Задачі

Власний і педагогічний досвід свідчать, що справжнє розуміння виникає тільки коли новий матеріал супроводжується розв'язком задач. Томи ми вирішили додати у цей посібник задачі. Більшість задач є дуже простими, більш того, їх умови фактично містять і схеми розв'язку з відповідями. Зміст задач доповнює матеріал основного тексту, а більш складні задачі позначені зірочкою.

1.5.1 Деякі інтернет ресурси з графену

Стаття у Вікіпедії: http://en.wikipedia.org/wiki/Graphene

Ресурси та новини з графена (у тому числі практичні застосування): http://www.graphene-info.com/

Nanotechnology Image Gallery: http://www.ewels.info/img/science/

Сторінка групи А.К. Гейма у Манчестері:
http://onnes.ph.man.ac.uk/nano/
На ній також викладені статті, які в Україні може бути важко одержати.

Сторінка групи Ф. Кіма з університету Колумбії (США):
http://pico.phys.columbia.edu/

Сторінка групи М. Кроммі (Michael Crommie) з університету Каліфорнії, Берклі (США):
http://www.physics.berkeley.edu/research/crommie/research:carbon-nanostructures та одна з його доповідей "Graphene and Related Two Dimensional Materials":
http://www.youtube.com/watch?v=OPL-FH3ixck

1.6 Подяки

Авторам приємно висловити подяку В.П. Гусиніну, В.М. Локтєву, В.А. Міранському та І.А. Шовковому а також Хансу Беку (Hans Beck), Джулсу Карботте (Jules P. Carbotte), Ларі Бенфатто (Lara Benfatto), О.В. Гамаюну, Джунджі Джіа (Junji Jia) та А.О. Слободенюку за плідну співпрацю і обговорення різних аспектів фізики графену. Також ми щиро вдячні за критичні зауваження студентам 2-го курсу магістрів групи КТП: І. Іванченко, Р. Коробка, І. Руденок, С. Сучек та О. Штанько.

Розділ 2

Графен: від моделі сильного зв'язку до теорії Дірака

Існує досить багато конденсованих систем, зокрема і двовимірних, низькоенергетичні збудження у яких мають лінійний закон дисперсії. Зокрема, таку дисперсію мають у надпровідному стані високотемпературні d-хвильові надпровідники. Але без сумнівів, найбільш відомим прикладом системи, яка не тільки має у низькоенергетичній границі квазічастинкові збудження з лінійним законом дисперсії, але й дуже добре описується за допомогою (2+1)-вимірного рівняння Дірака (також і при наявності зовнішнього електромагнітного поля) є графен.

Як вже згадувалось у попередньому розділі, так зветься один шар атомів вуглецю, упакований у 2D стільникову гратку. Також вважається, що подібні гексагональні структури можуть виникати з атомів, які знаходяться у періодичній таблиці прямо під вуглецем - силіцієм та германієм. Відповідні сполуки вже отримали назву силіцен та германін. Отримати їх набагато складніше ніж графен, оскільки на відміну від вуглецю, ці елементи не утворюють аналогу графіту, який можна було б розшаровувати за допомогою скотчу. Проте, у 2012 р. з'явилися повідомлення, що силіцен таки вдалося отримати на підкладці із срібла.

У подальшому для конкретності ми будемо говорити про графен, але відповідний розгляд матиме пряме застосування до силіцену та

германіну. У цьому розділі ми детально розглянемо теоретичний зв'язок між твердотільним описом графену на гратці та його наближеним описом у континуальній моделі.

2.1 Опис графену у моделі на гратці

Вершини стільникової структури не утворюють гратку Браве (с. 78 книги [19]), але така структура може бути описана у термінах двох трикутних підграток Браве, A та B (див. Рис. 2.1 a). Елементарна комірка містить два атоми типів A і B. Показані вектори

$$\mathbf{a}_1 = a(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}), \quad \mathbf{a}_2 = a(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}), \tag{2.1}$$

є примітивними трансляціями, де постійна гратки $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3}a_{CC}$ та a_{CC} є відстанню між найближчими атомами вуглецю. Відповідні вектори оберненої гратки $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 1/\sqrt{3})$ та $\mathbf{b}_2 =$

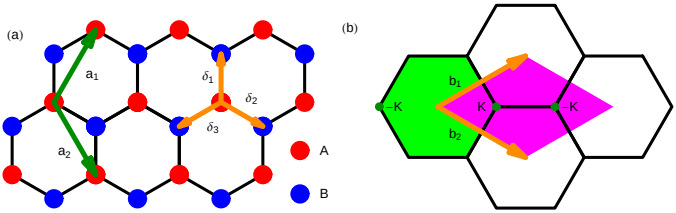


Рис. 2.1: (a) Гексагональна гратка графену сконструйована як суперпозиція двох трикутних граток A і B, з базисними векторами $\mathbf{a}_{1,2}$ для гратки A і векторами $\boldsymbol{\delta}_i$ з $i = 1, 2, 3$, що з'єднують A з B. (b) Зелений гексагон – це зона Бріллюена та рожевий ромб – це розширена зона Бріллюена для стільникової гратки. $\mathbf{b}_1$ і $\mathbf{b}_2$ – це вектори оберненої гратки.

$\frac{2\pi}{a}(1, -1/\sqrt{3})$ показані на Рис. 2.1 b разом зі звичайною та розширеною зонами Бріллюена. Вектори оберненої гратки задовольняють умові $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Безумовно, розгляд зонної структури графена у рамках розширеної, або альтернативної, зони Бріллюена [20] дає такі ж самі результати як і розгляд за допомогою гексакональної зони, але першою набагато зручніше користуватися, оскільки важливі для

подальшого розгляду $\mathbf{K}$ точки розташовані не по краях, а усередині зони.

Будь-який A атом з розташуванням $\mathbf{n} = \mathbf{a}_1 n_1 + \mathbf{a}_2 n_2$, де n_1, n_2 є цілими, зв'язаний зі своїми сусідами на B позиціях трьома векторами $\boldsymbol{\delta}_i$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\delta}_1 = (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)/3, \qquad \boldsymbol{\delta}_2 = \mathbf{a}_1/3 + 2\mathbf{a}_2/3, \\ \boldsymbol{\delta}_3 = -\boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_2 = -2\mathbf{a}_1/3 - \mathbf{a}_2/3. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Окрім трансляцій, група симетрій стільникової гратки (див. роботу [21]) включає обертання (R і R^{-1}) на $\pm 2\pi/3$ і дзеркальні відображення (Y_1, Y_2, Y_3) довкола площин, що проходять через центр і три вершини гексагона. Разом обертання і відображення формують неабелеву групу C_{3v} з 6 елементами. Їхнє явне матричне зображення може бути визначене матрицями, що перетворюють базисні вектори $\mathbf{a}_1$ і $\mathbf{a}_2$,

$$\begin{aligned} E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, R = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, R^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, \\ Y_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, Y_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, Y_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Крім того, є віддзеркалення у площині (змінює $\mathbf{a}_i \to -\mathbf{a}_i$, за яким слідує трансляція на один з векторів $\boldsymbol{\delta}_i$) і, відповідно, комбінації Z з будь-якою з вищезгаданих дій. Всі ці дії не переставляють атоми A- і B-типів. Одноелектронні власні функції можуть бути класифіковані згідно підгрупи (E, Z) в залежності від того, чи стани є парними (σ стани), або непарними (π стани) при віддзеркаленні Z. Є також операції, які обмінюють A і B атоми, наприклад, віддзеркалення X_1, X_2, X_3 у дзеркальних площинах, що перпендикулярні до відповідних площин Y_i. Вони є операціями симетрії, коли супроводжуються певними дробовими трансляціями.

Операції обертання і обертання-віддзеркалення утворюють точкову групу графену, яка містить 12 елементів. Ефект дії групової операції G на функції координат визначається так: $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(G^{-1}\mathbf{r}) = T(G)\psi(\mathbf{r})$. Це дозволяє визначати незвідні представлення для графену. Зокрема, відзначимо, що підгрупа (2.3) має двовимірне спінорне представлення, яке буде використане нижче.

Вуглецеві атоми у графеновій площині зв'язані сильними ковалентними σ-зв'язками завдяки sp^2 гібридизації атомних $2s, 2p_x, 2p_y$ орбіталей. $2p_z$ (π) орбіталі є перпендикулярними до площини і мають слабке перекриття. Тому ми почнемо з найпростішого опису для π

орбіталей вуглецю за допомогою гамільтоніана

$$H = -t \sum_{\mathbf{n},\boldsymbol{\delta}_i,\sigma} \left[a^\dagger_{\mathbf{n},\sigma} \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \boldsymbol{\delta}_i \mathbf{A} \right) b_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}_i,\sigma} + \text{c.c.} \right], \tag{2.4}$$

де t є параметром перескоку для найближчих сусідів, $a_{\mathbf{n},\sigma}$ та $b_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}_i,\sigma}$ є операторами знищення для електронів зі спіном $\sigma = \uparrow, \downarrow$ на A і B підгратках, відповідно. Для розгляду лінійного відгуку, векторний потенціал $\mathbf{A}$ введено у гамільтоніан (2.4) за допомогою заміни Пайерлсу (Peierls) $a^\dagger_{\mathbf{n},\sigma} b_{\mathbf{m},\sigma} \to a^\dagger_{\mathbf{n},\sigma} \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} \int_{\mathbf{m}}^{\mathbf{n}} \mathbf{A} d\mathbf{r}\right) b_{\mathbf{m},\sigma}$ яка вносить фазовий фактор $\exp(\frac{ie}{\hbar c} \boldsymbol{\delta}_i \mathbf{A})$ у член з перескоками. Ми утримали постійну Планка $\hbar$ і швидкість світла c, але встановили $k_B = 1$. Заряд електрона є $-e < 0$. Відзначимо, що ми розглядаємо модель у площині, незважаючи на те, що графен утворює рипли (див. Розділ 1). Незважаючи на це, рух електронів, які ми зараз розглядаємо, залишається двовимірним, а наявність риплів призводить до їх додаткового розсіяння.

Розкладаючи гамільтоніан (2.4) до другого порядку по векторному потенціалу, одержуємо

$$H = H_0 - \sum_{\mathbf{n}} \left[\frac{1}{c} \mathbf{A}(\mathbf{n}) \mathbf{j}^P(\mathbf{n}) - \frac{1}{2c^2} A_\alpha(\mathbf{n}) \tau_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) A_\beta(\mathbf{n}) \right], \tag{2.5}$$

де $\alpha, \beta = 1, 2$. Оператор повного струму одержано з диференціювання рівняння (2.5) по $A_\alpha(\mathbf{n})$,

$$j_\alpha(\mathbf{n}) = -\frac{\partial H}{\partial (A_\alpha/c)} = j^P_\alpha(\mathbf{n}) - \tau_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) A_\beta(\mathbf{n})/c, \tag{2.6}$$

та складається зі звичайної парамагнітної частини,

$$j^P_\alpha(\mathbf{n}) = \frac{ite}{\hbar} \sum_{\boldsymbol{\delta}_i,\sigma} (\delta_i)_\alpha \left[a^\dagger_{\mathbf{n},\sigma} b_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}_i,\sigma} - b^\dagger_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}_i,\sigma} a_{\mathbf{n},\sigma} \right], \tag{2.7}$$

і діамагнітної частини,

$$\begin{aligned} \tau_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) &= \frac{\partial^2 H}{\partial (A_\alpha/c)\, \partial (A_\beta/c)} \\ &= \frac{te^2}{\hbar^2} \sum_{\boldsymbol{\delta}_i,\sigma} (\delta_i)_\alpha (\delta_i)_\beta \left[a^\dagger_{\mathbf{n},\sigma} b_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}_i,\sigma} + b^\dagger_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\delta}_i,\sigma} a_{\mathbf{n},\sigma} \right]. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Зауважимо, що для отримання правильних виразів для парамагнітного струму (2.7) і діамагнітної частини (2.8), заміну Пайерлсу треба робити у первинному гамільтоніані (2.4) або його імпульсному представленні (див. (2.9) нижче), а не після того, як його діагоналізовано. Зараз розглянемо детальніше невзаємодіючий гамільтоніан H_0.

2.2 Спінорне представлення невзаємодіючого гамільтоніана

В імпульсному представленні гамільтоніан H_0 записується

$$H_0 = \sum_\sigma \int_{BZ} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Upsilon^\dagger_\sigma(\mathbf{k}) \mathcal{H}_0 \Upsilon_\sigma(\mathbf{k}), \qquad \mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} 0 & \phi(\mathbf{k}) \\ \phi^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

з $\phi(\mathbf{k}) = -t\sum_{\boldsymbol{\delta}_i} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}_i} \equiv -\epsilon(\mathbf{k}) e^{i\varphi(\mathbf{k})}$. У базисі (2.1) одержуємо

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{k}) &= -te^{i\mathbf{k}(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)/3}\left[1 + e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1}\right] \\ &= -t\left[\exp\left(i\frac{k_y a}{\sqrt{3}}\right) + \exp\left(-i\frac{k_y a}{2\sqrt{3}}\right) 2\cos\frac{k_x a}{2}\right] \end{aligned} \tag{2.10}$$

і

$$\epsilon(\mathbf{k}) = t\sqrt{1 + 4\cos^2\frac{k_x a}{2} + 4\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}}. \tag{2.11}$$

Відповідно, через те що графенова структура містить два атоми в елементарній комірці (дві підгратки), спектр квазічастинкових збуджень має дві гілки (зони) з дисперсією $E_\pm = \pm\epsilon(\mathbf{k})$ показані на Рис. 2.2. У рівнянні (2.9) ми ввели спінори

$$\Upsilon_\sigma(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} a_\sigma(\mathbf{k}) \\ b_\sigma(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \tag{2.12}$$

з оператором $\Upsilon_\sigma(\mathbf{k})$, який є Фурьє перетворенням спінору $\Upsilon_\sigma(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{n},\sigma} \\ b_{\mathbf{n},\sigma} \end{pmatrix}$:

$$\Upsilon_\sigma(\mathbf{n}) = \sqrt{S}\int_{BZ} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}} \Upsilon_\sigma(\mathbf{k}). \tag{2.13}$$

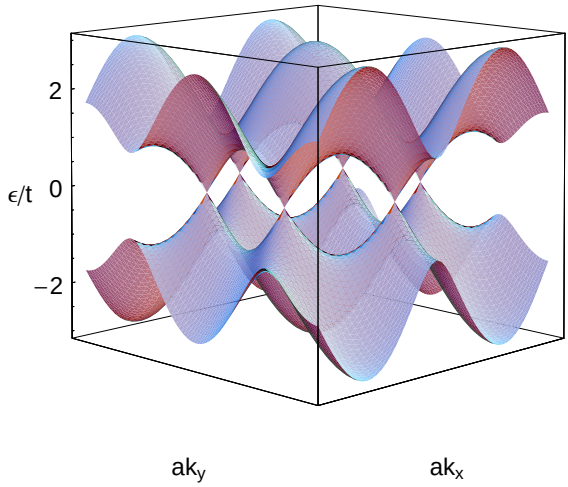


Рис. 2.2: Енергетична зонна структура графену. Валентна зона та зона провідності зустрічаються у шести **K** точках.

Тут $S = \sqrt{3}a^2/2$ є площиною елементарної комірки. Інтегрування в (2.9) і (2.13) ведеться по розширеній ромбічній зоні Бріллюена (BZ) (див. Рис. 2.1 b).

Для розгляду на основі великого канонічного ансамблю до H_0 відразу зручно додати член

$$H_\mu = -\sum_\sigma \mu \int_{BZ} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Upsilon^\dagger_\sigma(\mathbf{k})\Upsilon_\sigma(\mathbf{k}) \tag{2.14}$$

з хімічним потенціалом μ. Зонна структура нейтрального, тобто без інжектованих додатково носіїв, графену складається з цілком заповненої валентної зони та порожньої провідної зони (див. Рис. 1.2), тобто $\mu = 0$. Як вже відзначалось у Вступі, положенням рівня Фермі, тобто значенням μ в графені дуже зручно керувати зовнішньою електричною напругою, прикладеною до підкладки з напівпровідника (зокрема, кремнію з шаром ізолятору), на якій лежить графеновий зразок.

Якщо ж до системи прикладене зовнішнє магнітне поле, то завдяки зеєманівському розщепленню енергія електронів буде залежати від напряму їх спіну по відношенню до зовнішнього поля. Останнє

дуже легко враховується заміною хімічного потенціалу μ на $\mu_\sigma = \mu - \sigma g/2\mu_B B$, де $\mu_B = e\hbar/(2m_e c)$ є магнетоном Бору, і g є фактором Ланде.

2.2.1 Одночастинкова функція Гріна

Корисно навести електронну функція Гріна, яка відповідає гамільтоніану $H_0 + H_\mu$. У формалізмі уявного часу [22] вона визначається як середнє по великому канонічному ансамблю

$$G_\sigma(\tau_1 - \tau_2, \mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2) = -\langle T_\tau \Upsilon_\sigma(\tau_1, \mathbf{n}_1)\Upsilon^\dagger_\sigma(\tau_2, \mathbf{n}_2)\rangle. \tag{2.15}$$

Відповідно, її Фурьє перетворення дорівнює

$$\begin{aligned} &G_\sigma(\tau_1 - \tau_2, \mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2) = \\ &ST\sum_n \int_{BZ} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) \exp[-i\omega_n(\tau_1 - \tau_2) + i\mathbf{k}(\mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2)], \end{aligned} \tag{2.16}$$

де $\omega_n = \pi(2n+1)T$ ($\hbar = k_B = 1$) – непарна (ферміонна) мацубарівська частота, а сама функція Гріна у частотно-імпульсному представленні має вид

$$G_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) = \frac{(i\omega_n + \mu_\sigma)\tau_0 + \tau_+\phi(\mathbf{k}) + \tau_-\phi^*(\mathbf{k})}{(i\omega_n + \mu_\sigma)^2 - \epsilon^2(\mathbf{k})}. \tag{2.17}$$

При записі (2.17) ми використали матриці $\tau_\pm = (\tau_1 \pm i\tau_2)/2$ та одиничну матрицю τ_0. Легко бачити, що функція Гріна (2.17) описує електронні та діркові збудження з енергією $E_\pm(\mathbf{k}) = \pm\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_\sigma$, відповідно.

Дисперсія $\epsilon(\mathbf{k})$ поблизу шести $\mathbf{K}$ точок $\pm 2\pi/a(1/3, 1/\sqrt{3})$, $\pm 2\pi/a(2/3, 0)$, $\pm 2\pi/a(1/3, -1/\sqrt{3})$ у кутах гексагональної зони Бріллюена (BZ) (див. Рис. 2.2 та 1.2) є лінійною, $E_\pm(\mathbf{p}) = \pm\hbar v_F|\mathbf{p}| - \mu_\sigma$, де хвильовий вектор $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ відраховується від $\mathbf{K}$ точок, і швидкість Фермі дорівнює $v_F = \sqrt{3}ta/(2\hbar)$. Її експериментальна величина дорівнює $v_F \approx 10^6$ m/s. З шести $\mathbf{K}$ точок тільки дві точки є нееквівалентними, оскільки з іншими чотирма $\mathbf{K}$ точками вони пов'язані векторами оберненої гратки. Тому ми обираємо їх таким чином, щоб вони були розташовані у середині розширеної зони Бріллюена, $\mathbf{K}_\pm = \pm 2\pi/a(2/3, 0)$ (див. Рис. 2.1 b). Вироджения двох $\mathbf{K}_\pm$ точок, які також називають дираківськими, захищено групою точкових симетрій гексагональної гратки.

Таким чином, у континуальному наближенні провідна та валентна зони мають конічну форму з вершинами, що зустрічаються у точці Дірака. Ця наближена модель, яка заснована на континуальній границі зонної моделі, може адекватно описати низькоенергетичні явища, тобто при енергіях набагато менших, ніж ширина зони. Відхилення від простих конусів можуть стати важливими при великих енергіях і тоді буде потрібно розглядати додаткові деталі повного спектру. Прикладом необхідності йти поза межі континуального наближення є одержання оптичного правила сум (див. Розділ 2.5 Задачу 3), яке потребує інтегрування оптичної провідності (або пов'язаних з нею характеристик) по всій енергетичній зоні. Наприкінці відзначимо, що врахування поправок, таких як інтеграл перекриття призводить до того, що швидкості електронів та дірок у графені трохи відрізняються, що і спостерігається на експерименті.

2.3 Дискретні симетрії гамільтоніана на гратці

$\mathbf{K}_\pm$ точки у єдиному шарі графену стійкі проти збурень, що зберігають дискретну просторово-часову симетрію інверсії і які не змішують $\mathbf{K}_\pm$ точки. Ми розглянемо ці симетрії для моделі на гратці і визначимо нижче відповідні дискретні операції симетрії для ефективної низькоенергетичної теорії графену (див. Розділ 3.3), а також обговоримо стабільність появи безмасових дираківських ферміонів з топологічної точки зору.

2.3.1 Просторова інверсія $\mathcal{P}$

Вибираючи центр симетрії так, щоб він був і центром гексагону з Рис. 2.1 а, ми бачимо, що просторова інверсія $\mathcal{P}$: $(x, y) \to (-x, -y)$ буде симетрією системи, якщо A і B атоми також обмінюються місцями, тобто

$$a_{\mathbf{n},\sigma} \to \mathcal{P} a_{\mathbf{n},\sigma} \mathcal{P}^{-1} = b_{-\mathbf{n},\sigma} \qquad b_{\mathbf{n},\sigma} \to \mathcal{P} b_{\mathbf{n},\sigma} \mathcal{P}^{-1} = a_{-\mathbf{n},\sigma}. \tag{2.18}$$

Як буде обговорено у Розділі 3.3, таке означення $\mathcal{P}$ відрізняється від широковживаного означення у квантовій електродинаміці у (2+1)-вимірному просторі-часі. В імпульсному просторі $\mathcal{P}$ діє наступним чином

$$a_\sigma(\mathbf{k}) \to \mathcal{P} a_\sigma(\mathbf{k}) \mathcal{P}^{-1} = b_\sigma(-\mathbf{k}), \qquad b_\sigma(\mathbf{k}) \to \mathcal{P} b_\sigma(\mathbf{k}) \mathcal{P}^{-1} = a_\sigma(-\mathbf{k}), \tag{2.19}$$

тобто змінює знак імпульса $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$ і обмінює $\mathbf{K}$ точки. На спінорах $\Upsilon_\sigma(\mathbf{k})$, дія $\mathcal{P}$ визначається так

$$\Upsilon_\sigma(\mathbf{k}) \longrightarrow \mathcal{P}\Upsilon_\sigma(\mathbf{k})\mathcal{P}^{-1} = \tau_1\Upsilon_\sigma(-\mathbf{k}). \tag{2.20}$$

Можна легко перевірити, що невзаємодіючий гамільтоніан H_0 є інваріантним при $\mathcal{P}$ перетворенні

$$H_0 \longrightarrow \mathcal{P}H_0\mathcal{P}^{-1} = H_0 \tag{2.21}$$

тому що гамільтонова густина $\mathcal{H}_0$ задовольняє умові

$$\tau_1\mathcal{H}_0(\mathbf{k})\tau_1 = \mathcal{H}_0(-\mathbf{k}). \tag{2.22}$$

Проте, якщо припустити, що густина частинок на A і B підгратках відрізняється, тобто, що

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_\sigma \int_{BZ} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2}[m_a a^\dagger_\sigma(\mathbf{k})a_\sigma(\mathbf{k}) + m_b b^\dagger_\sigma(\mathbf{k})b_\sigma(\mathbf{k})] \\ &= \sum_\sigma \int_{BZ} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2}\Upsilon^\dagger_\sigma(\mathbf{k})[m_+\,\tau_0 + m_-\,\tau_3]\Upsilon_\sigma(\mathbf{k}), \end{aligned} \tag{2.23}$$

де $m_+ = (m_a + m_b)/2$ та $m_- = (m_a - m_b)/2$, то такий член буде порушувати симетрію відносно інверсії обміном вже нееквівалентних підграток:

$$H_1 \longrightarrow \mathcal{P}H_1\mathcal{P}^{-1} = \sum_\sigma \int_{BZ} \frac{d^2k}{(2\pi)^2}[m_b a^\dagger_\sigma(\mathbf{k})a_\sigma(\mathbf{k}) + m_a b^\dagger_\sigma(\mathbf{k})b_\sigma(\mathbf{k})], \tag{2.24}$$

або в спінорних позначеннях

$$H_1 \longrightarrow \mathcal{P}H_1\mathcal{P}^{-1} = \sum_\sigma \int_{BZ} \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\Upsilon^\dagger_\sigma(\mathbf{k})(m_+\tau_0 - m_-\tau_3)\Upsilon_\sigma(\mathbf{k}). \tag{2.25}$$

Можна побачити, що член з m_+, який відповідає одній і тій самій густині носіїв на A і B підгратках, може бути поглинений у хімічний потенціал μ, а член з дисбалансом носіїв m_- є порушуючим парність. Коли $m_- \neq 0$, то енергетичний спектр нагадує вже масивну релятивістську частинку, $E_\pm(\mathbf{p}) = \pm\sqrt{\hbar^2 v_F^2\mathbf{p}^2 + m_-^2} - \mu_\sigma$.

Було запропоновано, що можна штучно відкривати щілину у спектрі графена, тобто призводити до появи члена з масою, поклавши

лист графену на підкладку, зроблену з нітріду бора, який теж має гексагональну структуру з майже таким розміром гратки. У цьому випадку дві вуглецеві підгратки стають нееквівалентними через їхню взаємодію із підкладкою. До сьогоднішнього часу у графені, довільно покладеному на підкладку з нітріду бора щілина не спостерігалась. Однак, експериментальні дослідження фотоемісійної спектроскопії з кутовим вирішенням (ARPES) зроблені на епітаксіальному графені, вирощеному на SiC субстраті, показали наявність щілини $\sim 0.26\,\mathrm{eV}$. Дослідження за допомогою скануючої тунельної спектроскопії також виявили присутність щілини поблизу від дираківської точки у одношаровому графені, який знаходиться на графіті.

2.3.2 Обернення часу $\mathcal{T}$

Операція обернення часу $t \to -t$ змінює знаки імпульса та спіна, залишаючи знак координат незмінним [23]:

$$\begin{pmatrix} a_+(\mathbf{k}) \\ a_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \to \mathcal{T} \begin{pmatrix} a_+(\mathbf{k}) \\ a_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \mathcal{T}^{-1} = \begin{pmatrix} a_-(-\mathbf{k}) \\ -a_+(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} = i\sigma_2 \begin{pmatrix} a_+(-\mathbf{k}) \\ a_-(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \tag{2.26}$$

Оператор $b_\pm(\mathbf{k})$ підлягає тому ж самому правилу, і $a^\dagger_\pm(\mathbf{k})$, $b^\dagger_\pm(\mathbf{k})$ перетворюються, як вказано нижче,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a^\dagger_+(\mathbf{k}) & a^\dagger_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \to \mathcal{T} \begin{pmatrix} a^\dagger_+(\mathbf{k}) & a^\dagger_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \mathcal{T}^{-1} \\ = \begin{pmatrix} a^\dagger_+(\mathbf{k}) & a^\dagger_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} (-i\sigma_2). \end{aligned} \tag{2.27}$$

Щоб обернути напрям часу, оператор $\mathcal{T}$ має бути антиунітарним. Дія $\mathcal{T}$ на підграткові спінори задається так

$$\Upsilon(\mathbf{k}) \longrightarrow \mathcal{T}\Upsilon(\mathbf{k})\mathcal{T}^{-1} = i\sigma_2\Upsilon(-\mathbf{k}), \tag{2.28}$$

де σ_2 діє на спінові індекси спінору $\Upsilon_\sigma(\mathbf{k})$. Можна перевірити, що невзаємодіючий гамільтоніан H_0 є інваріантним при $\mathcal{T}$ перетворенні

$$H_0 \longrightarrow \mathcal{T}H_0\mathcal{T}^{-1} = H_0 \tag{2.29}$$

через те, що $\mathcal{H}_0$ задовільняє умові

$$\mathcal{H}^*_0(\mathbf{k}) = \mathcal{H}_0(-\mathbf{k}). \tag{2.30}$$

Оскільки фіксоване зовнішнє магнітне поле порушує симетрію обернення часу, гамільтоніан (2.4), в який входить це поле, і член

Зеємана (2.14) порушують її. З іншого боку, гамільтоніан H_1, заданий рівнянням (2.23), є інваріантним при оберненні часу, але якщо ми розглянемо залежні від спіну маси $m_{b,\sigma}$, то також порушимо цю симетрію.

Присутність комбінованої $\mathcal{PT}$ симетрії призводить до умови на $\mathcal{H}_0$:

$$\tau_1 \mathcal{H}_0^*(\mathbf{k})\tau_1 = \mathcal{H}_0(\mathbf{k}) \tag{2.31}$$

або для матричних елементів: $\mathcal{H}_0^{11} = \mathcal{H}_0^{22}$ і $\mathcal{H}_0^{12} = \mathcal{H}_0^{21*}$. Можна сказати, що перша рівність забороняє $m_-\tau_3$ члени в гамільтоніані, захищаючи $\mathbf{K}_\pm$ точки, якщо вони не перемішані. Енергетичний спектр дається співвідношенням $E = \mathcal{H}_0^{11} \pm |\mathcal{H}_0^{12}|$. Для $\mathcal{H}_0^{11} = \text{const}$, постійний член може бути поглинений у хімічному потенціалі. Таким чином $\mathcal{PT}$ симетрія призводить до симетрії спектру так само, як і співвідношення (2.32), що розглядається нижче.

2.3.3 Частинково-дірочна симетрія і стабільність Фермі точки

Гамільтоніан $\mathcal{H}_0(\mathbf{k})$ також задовольняє двом наступним співвідношенням

$$\tau_3 \mathcal{H}_0(\mathbf{k})\tau_3 = -\mathcal{H}_0(\mathbf{k}) \tag{2.32}$$

та

$$\tau_2 \mathcal{H}_0^*(\mathbf{k})\tau_2 = -\mathcal{H}_0(\mathbf{k}). \tag{2.33}$$

Легко перевірити, що вони гарантують, що, якщо є стан $|\psi\rangle$ з енергією E, то стани $\tau_3|\psi\rangle$ і $\tau_2|\psi\rangle^*$ відповідають енергії $-E$, а це означає, що енергетичні зони симетричні відносно $E = 0$. Ми відзначимо, що в той час, коли порушуючий парність член $m_-\Upsilon^\dagger\tau_3\Upsilon$, очевидно, порушує умову (2.32), більш загальна умова (2.33) все ще задовольняється. Дійсно, навіть для $m_- \neq 0$ спектр симетричний відносно $E = 0$: $E(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{m_-^2 + |\phi(\mathbf{k})|^2}$. Для того, щоб Фермі точка $E(\mathbf{k} = 0) = 0$ існувала, ми повинні вимагати виконання співвідношення (2.32), яке є необхідною, але недостатньою, умовою для її існування. Існування і стабільність точки Фермі диктується топологією в імпульсному просторі [24], тобто відмінним від нуля топологічним інваріантом (числом обертів) який виражається аналітично як

$$N = \oint_C \frac{d\mathbf{k}}{4\pi i} \mathrm{tr}[\tau_3 H^{-1}(\mathbf{k})\partial_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k})]. \tag{2.34}$$

Тут інтеграл береться довкола довільного контуру C навкруги однієї з $\mathbf{K}_\pm$ точок and tr – це слід по індексам підграток. Для гамільтоніана $\mathcal{H}_0$ заданого рівнянням (2.9) топологічний інваріант може бути переписано у формі

$$N = \frac{1}{4\pi i} \oint_C \frac{\phi(\mathbf{k}) d\phi^*(\mathbf{k}) - \phi^*(\mathbf{k}) d\phi(\mathbf{k})}{|\phi(\mathbf{k})|^2}. \tag{2.35}$$

Для $\mathbf{K}_\pm$ точок це дає $N(\mathbf{K}_\pm) = \pm 1$. З іншого боку, коли у спектрі відкривається щілина, топологічний інваріант $N = 0$. Відкриття щілини можливо тому, що повний топологічний заряд двох $\mathbf{K}_\pm$ точок $N = 0$. Тривіальний повний топологічний заряд поверхонь Фермі дозволяє їх анігіляцію, яка відбувається, коли спектр енергії має щілину.

2.4 Низькоенергетичний ефективний лагранжіан графену

2.4.1 Гамільтоніан графену без взаємодії

Поблизу двох нееквівалентних $\mathbf{K}_\pm$ точок, де $\epsilon(\mathbf{K}_\pm) = 0$, функція (2.10) може бути розкладена так $\phi(\mathbf{K}_\pm + \mathbf{p}) = \pm \hbar v_F (p_1 \mp i p_2)$, що гамільтоніан (2.9) лінеаризується

$$\begin{aligned} H_0 = \sum_\sigma \int_{DC} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \big[&\Upsilon_\sigma^\dagger(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) \mathcal{H}_{\mathbf{K}_+}(\mathbf{p}) \Upsilon_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) \\ &+ \Upsilon_\sigma^\dagger(\mathbf{K}_- + \mathbf{p}) \mathcal{H}_{\mathbf{K}_-}(\mathbf{p}) \Upsilon_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p}) \big], \end{aligned} \tag{2.36}$$

з гамільтоновою густиною для $\mathbf{K}_\pm$ точок

$$\mathcal{H}_{\mathbf{K}_+} = \hbar v_F (\tau_1 p_1 + \tau_2 p_2), \qquad \mathcal{H}_{\mathbf{K}_-} = \hbar v_F (-\tau_1 p_1 + \tau_2 p_2). \tag{2.37}$$

Інтегрування в (2.36) проводиться по дираківському конусу (DC) з обрізанням по енергії, зробленим таким чином, що повне число станів зберігається

$$W = \hbar v_F \sqrt{\frac{\Omega_B}{2\pi}} = \frac{\hbar v_F}{a} \sqrt{\frac{4\pi}{\sqrt{3}}} = \sqrt{\pi\sqrt{3}} t \approx 2.33t, \tag{2.38}$$

де $\Omega_B = (2\pi)^2/S$ є площею зони Бріллюена.

Дуже зручно перейти до 4-компонентних спінорів $\Psi_\sigma(\mathbf{p})$, які утворені зі спінорів для $\mathbf{K}_\pm$ точок. Комбінуючи спінори $\Upsilon_\sigma(\mathbf{K}_\pm+\mathbf{p})$ разом, ми переставляємо підгратки в спінорі для $\mathbf{K}_-$ точки,[1] так що

$$\Psi_\sigma(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{K}_+,\sigma}(\mathbf{p}) \\ \psi_{\mathbf{K}_-,\sigma}(\mathbf{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) \\ b_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) \\ b_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p}) \\ a_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p}) \end{pmatrix}. \tag{2.39}$$

Відповідно, гамільтоніан (2.36) приймає форму

$$\begin{aligned} H_0 &= \hbar v_F \sum_\sigma \int_{DC} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \\ &\begin{array}{cccc} K_+A & K_+B & K_-B & K_-A \end{array} \\ &\times \Psi^\dagger_\sigma(\mathbf{p}) \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y & 0 & 0 \\ p_x + ip_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p_x + ip_y \\ 0 & 0 & -p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix} \Psi_\sigma(\mathbf{p}) \\ &= \sum_\sigma \int_{DC} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \Psi^\dagger_\sigma(\mathbf{p}) \mathcal{H}_0(\mathbf{p}) \Psi_\sigma(\mathbf{p}), \quad \mathcal{H}_0(\mathbf{p}) = \hbar v_F(\alpha^1 p_1 + \alpha^2 p_2). \end{aligned} \tag{2.40}$$

Тут 4×4 матриці $\alpha^{1,2}$ є першими двома α матрицями з трьох α^i $(i = 1, 2, 3)$ матриць

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3) = \tilde{\tau}_3 \otimes (\tau_1, \tau_2, \tau_3) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\tau} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\tau} \end{pmatrix} \tag{2.41}$$

які антикомутують між собою та з матрицею β:

$$\beta = \tilde{\tau}_1 \otimes I_2 = \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.42}$$

Незвідне представлення діраківської алгебри у (2+1) вимірі задається 2×2 матрицями. Взагалі існує два таких незвідних представлення, які відрізняються знаком. Вони обидва використані у (2.40), відображаючи те, що на додаток до двох ступенів свободи, пов'язаних з A і B

[1] Це дозволяє використовувати один і той же з точністю до загального знаку гамільтоніан для обидвох $\mathbf{K}$ точок, тобто $\mathcal{H}_{\mathbf{K}_\pm} = \pm\hbar v_F(\tau_1 p_1 + \tau_2 p_2)$ і одержати стандартне представлення для гамма матриць.

підгратками, треба також взяти до уваги ферміони з двох різних $\mathbf{K}_\pm$ точок. Ці ступені свободи описуються $\tilde{\tau}$ матрицями, які діють у долинному ($\mathbf{K}_\pm$) підпросторі і, в результаті, ми використовуємо 4×4 звідне (у $2+1$ вимірі) представлення дираківських матриць.

2.4.2 Лагражіан графену

Для того, щоб ефективний низькоенергетичний опис графена прийняв форму $2+1$-вимірної теорії Дірака, нам залишається ввести γ матриці та включити зовнішнє електромагнітне поле. Ми вибираємо

$$\gamma^0 = \beta, \qquad \boldsymbol{\gamma} = \beta\boldsymbol{\alpha} = -i\tilde{\tau}_2 \otimes (\tau_1, \tau_2, \tau_3) = \begin{pmatrix} 0 & -\boldsymbol{\tau} \\ \boldsymbol{\tau} & 0 \end{pmatrix} \tag{2.43}$$

і вводимо дираківський спряжений спінор $\bar{\Psi}_\sigma(\mathbf{p}) = \Psi^\dagger_\sigma(\mathbf{p})\gamma^0$. Матриці γ^ν з $\nu = 0, 1, 2, 3$ задовольняють звичайним антикомутаційним співвідношенням

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} I_4, \quad g^{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1), \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3. \tag{2.44}$$

Зауважимо, що матриця γ^3 не використовується у дираківському представленні гамільтоніана

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_\sigma \int_{DC} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \bar{\Psi}_\sigma(\mathbf{p}) \mathcal{H}_0^D(\mathbf{p}) \Psi_\sigma(\mathbf{p}), \\ \mathcal{H}_0^D(\mathbf{p}) &= \gamma^0 \mathcal{H}_0(\mathbf{p}) = \hbar v_F (\gamma^1 p_1 + \gamma^2 p_2). \end{aligned} \tag{2.45}$$

Представлення (2.43) називається вейлевським або кіральним представленням γ матриць. І через те, що ці матриці 4×4, є можливість сконструювати кіральну γ^5 матрицю

$$\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \tag{2.46}$$

яка комутує з α^i та антикомутує з γ^ν. Відзначимо, що кіральне представлення (2.43) за допомогою матриці

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & \tau_3 \\ I & -\tau_3 \end{pmatrix}, \qquad S^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & I \\ \tau_3 & -\tau_3 \end{pmatrix}, \tag{2.47}$$

переходить в інше представлення

$$\begin{aligned}\gamma^\nu &= \tilde{\tau}_3 \otimes (\tau_3, i\tau_2, -i\tau_1) \\ &= \begin{pmatrix} \hat{\gamma}^0 & 0 \\ 0 & \bar{\gamma}^0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \hat{\gamma}^1 & 0 \\ 0 & \bar{\gamma}^1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \hat{\gamma}^2 & 0 \\ 0 & \bar{\gamma}^2 \end{pmatrix}, \\ \gamma^3 &= \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix},\end{aligned} \tag{2.48}$$

яке також широко використовується в літературі. У (2.48) ми ввели 2×2 матриці $\hat{\gamma}$ та $\bar{\gamma}$, які утворюють два нееквівалентних представлення алгебри Дірака у $2+1$-вимірному просторі (див. Розділ 3.2, рівняння (3.16) нижче).

Відзначимо, що в літературі з графену використовуються різні представлення дираківської алгебри – це дещо ускладнює її вивчення. Як і в теорії поля, остаточні результати не повинні залежати від представлення, але фізичний зміст результатів є тісно пов'язаним зі структурою блохівських компонент 4-спінорів (2.39) і відображає належність певних збуджень до конкретної підгратки, або долини. Наш вибір кірального представлення γ матриць в (2.43) мотивується тим фактом, що в цьому представленні спінори з певною кіральністю є власними станами γ^5, що робить фізичну інтерпретацію квантового числа кіральності в графені більш прозорою (див. Розділ 3.2).

З рівняння (2.7) можна одержати повний електричний струм

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{n}} j_\alpha(\mathbf{n}) &= e \int_{BZ} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \sum_{\boldsymbol{\delta}_i, \sigma} \Upsilon^\dagger_\sigma(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_\alpha} \frac{t}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}_i} \\ e^{-i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}_i} & 0 \end{pmatrix} \Upsilon_\sigma(\mathbf{k}) \\ &\simeq -ev_F \sum_\sigma \int_{DC} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \bar{\Psi}_\sigma(\mathbf{p}) \gamma^\alpha \Psi_\sigma(\mathbf{p}),\end{aligned} \tag{2.49}$$

де у другому рядку ми розклали матрицю поблизу $\mathbf{K}_\pm$ точок та ввели 4-компонентні спінори $\Psi_\sigma(\mathbf{p})$ і $\bar{\Psi}_\sigma(\mathbf{p})$. Можна побачити, що форма оператора електричного струму та зв'язок останнього з векторним потенціалом $\mathbf{A}$ у рівнянні (2.7) є стандартними для квантової електродинаміки.

Об'єднуючи гамільтоніан (2.45) з членом взаємодії $\mathbf{A}(\mathbf{n})\mathbf{j}(\mathbf{n})$ (див. рівняння (2.5)), де густина струму $\mathbf{j}(\mathbf{n})$ відповідає оператору струму в (2.49), ми приходимо до ефективного низькоенергетичного лагран-

жіану для квазічастинкових збуджень в графені

$$\mathcal{L} = \sum_{\sigma=\pm 1} \bar{\Psi}_\sigma(t,\mathbf{r}) \left[i\gamma^0(\hbar\partial_t - i\mu_\sigma) + i\hbar v_F \gamma^1 D_x + i\hbar v_F \gamma^2 D_y \right] \Psi_\sigma(t,\mathbf{r}) \tag{2.50}$$

з

$$D_\alpha = \partial_\alpha + ie/\hbar c A_\alpha, \qquad \alpha = x, y \tag{2.51}$$

записаному в координатному представленні. Відзначимо, що у більш загальному випадку, число спінових компонент N_f може розглядатися як індекс, який пов'язаний з ароматом, при цьому фізичному випадку відповідає величина $N_f = 2$.

В дослідженнях квантового ефекту Холла в графені зовнішнє постійне магнітне поле $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ прикладено перпендикулярно до площини графену вздовж позитивного напрямку z осі. Магнітне поле також входить до зеєманівського члену, котрий введений через μ_σ. Якщо поле $\mathbf{B}$ не перпендикулярне до площини, то до зеєманівського члену все одно входить його повна величина, тоді як орбітальний член залежить лише від його перпендикулярної компоненти.

Для теоретичного пояснення базових експериментів, які довели, що дираківські квазічастинки існують в графені, достатньо використовувати дираківський лагранжіан (2.50). Хоча низькоенергетичні квазічастинкові збудження, що описуються лагранжіаном (2.50) є невзаємодіючими, цей лагранжіан фіксує дираківську природу квазічастинок. Окрім цього, у невеликих магнітних полях нема необхідності включати член Зеємана і достатньо розглядати тільки орбітальний ефект магнітного поля. Проте останнім часом відкрито ряд ефектів, найяскравішим серед яких є дробовий квантовий ефект Холла, розуміння яких вже потребує врахування взаємодії між квазічастинками в графені.

Як вже згадувалось у Вступі, теоретико-польовий опис графену було запропоновано за 20 років до його фактичного відкриття [6]. Ці дослідження були мотивовані теоретичним дослідженням можливості реалізації аномалії парності у конденсованому стані речовини, а також непертурбативної динаміки, пов'язаної з генерацією екситонної щілини. Все це вже потребує врахування кулонівської взаємодії між квазічастинками. Гамільтоніан далекодіючої кулонівської взаємодії має вигляд

$$H_C = \frac{\hbar v_F}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \int d^2\mathbf{r} d^2\mathbf{r}' \bar{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) \gamma^0 \Psi_\sigma(\mathbf{r}) \frac{g}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \bar{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \gamma^0 \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}'), \tag{2.52}$$

з константою зв'язку $g = e^2/\kappa\hbar v_F = \alpha c/\kappa v_F$, де $\alpha \simeq 1/137$ – це постійна тонкої структури, а κ – константа діелектричної проникності.

У випадку підвішеного графена $\kappa = 1$, що відповідає $g \approx 2.19$. Таке велике значення, очевидно, суперечить умові слабкого зв'язку, $g \ll 1$, яка б могла спростити теоретичний аналіз. Все це пояснює, чому роль кулонівської взаємодії в графені є актуальним предметом сучасних досліджень.

2.4.3 Підсумки

Підсумовуючи, ми хотіли б зробити наголос, що твердження, що ефективна низькоенергетична теорія графену — це безмасова квантова електродинаміка у (2+1)-вимірному просторі-часі базується на трьох нетривіальних фактах:

1. Низькоенергетичні збудження в графені є безмасовими квазічастинками з лінійною дисперсією, яка має додатню та від'ємну гілки, $\pm\hbar v_F|\mathbf{p}|$.

2. Якісно нова особливість графену полягає в тому, що власні функції низькоенергетичних квазічастинкових збуджень описуються рівнянням Дірака. Як ми побачили, спінорна структура хвильової функції є загальним наслідком стільникової гратчатої структури графену з двома вуглецевими атомами в елементарній комірці.

3. Дуже важливо, що взаємодія квазічастинок у графені із зовнішнім електромагнітним полем вводиться за допомогою принципу мінімального зв'язку, як у квантовій теорії поля.

Треба також пам'ятати про важливі відмінності рівняння для електронів в графені від рівняння для звичайних релятивістських ферміонів:

1. Рівняння Дірака, що описує рух квазічастинок у графені є двовимірним.

2. Лагранжіан (2.50) є придатним до застосування тільки при малих хвильових векторах, які набагато менші за вектори оберненої гратки, та, відповідно, у зовнішніх полях, що змінюються плавно.

3. Лагранжіан (2.50) придатний до застосування у системі спокою гратки і не інваріантний ні відносно перетворень Галілея, ні відносно перетворень Лоренца.

Останній пункт треба дещо пояснити. Ефективне рівняння для електронів у графені виводиться у наближенні ефективної маси з нерелятивістського рівняння Шрьодінгера, яке інваріантне відносно перетворень Галілея (і тому описує нерелятивістські електрони). При виводі (2.50) ця інваріантність втрачається. Що стосується перетворень Лоренца, то при переході у систему відліку, яка рухається, координатний вектор x^μ перетворюється по закону, в якому фігурує швидкість світла c. Ця ж сама швидкість входить і до калібрувально інваріантного принципу мінімального зв'язку $\mathbf{p} \to \mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}$ у (2.50), який необхідний для опису графену в магнітному полі. У той же самий час просторова та часова компоненти вектора імпульсу p_μ пов'язані через швидкість Фермі $v_F \approx c/300$. Таке неспівпадіння швидкостей призводить до порушення релятивістської інваріантності.

2.5 Задачі

1. (a) Показати, що густина станів у двовимірному електронному газі дорівнює $N(E) = m/(\pi\hbar^2)$.

   (b) Показати, що у лінійному наближенні густина станів у графені (з урахуванням виродження по спінам та долинам) дорівнює
   $$N(E) = \frac{2|E|}{\pi\hbar^2 v_F^2}.$$

   (c) Узагальнити цей результат на випадок масивного спектру $E(\mathbf{p}) = \pm\sqrt{\hbar^2 v_F^2 \mathbf{p}^2 + \Delta^2} - \mu$ і показати, що у цьому випадку
   $$N(E) = \frac{2|E+\mu|}{\pi\hbar^2 v_F^2}\theta[(E+\mu)^2/\Delta^2 - 1].$$

2. (a) Показати, що для D-вимірного електронного газу ([25] с. 108) з квадратичним законом дисперсії співвідношення між густиною носіїв та хімічним потенціалом має вигляд
   $$\begin{aligned} n(\epsilon_F, T=0) &= 2\int \frac{d^D k}{(2\pi)^D}\theta\left(\epsilon_F - \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}\right) \\ &= \frac{2\Omega_D}{(2\pi)^D D}\left(\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2}\right)^{D/2}, \end{aligned}$$
   де Ω_D – площа поверхні D-вимірної сфери одиничного радіусу, $\Omega_1 = 1$, $\Omega_2 = 2\pi$, $\Omega_2 = 4\pi$.

(b) Показати, що у чистому графені у лінійному наближенні до закона дисперсії співвідношення між густиною носіїв (точніше, різницею між густинами електронів та дірок) та хімічним потенціалом має вигляд

$$n = \frac{\mu^2 \mathrm{sgn}\mu}{\pi\hbar^2 v_F^2}. \tag{2.53}$$

Як це відрізняється від 2-вимірного електронного газу?

(c) У експериментах [7, 8] напруга V_g на затворі польового транзистора призводить до появи носіїв у графені. Відношення $n/V_g = \varepsilon_0\varepsilon/de \equiv \alpha$, де ε_0 та ϵ, відповідно, діелектричні сприйнятливості вакууму та SiO_2, а $d = 300\,\mathrm{nm}$ – товщина шару SiO_2 на підкладці з Si. Експериментальне значення α близьке до теоретичного і дорівнює $\alpha \approx 7.3 \times 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-2}\mathrm{V}^{-1}$. Показати, що з цього випливає наступне співвідношення

$$\mu[\mathrm{K}] \approx 365\, v_F[\times 10^6 \mathrm{m/s}]\,\mathrm{sgn}\,(V_g)\sqrt{|V_g[\mathrm{V}]|}.$$

3. * Показати, що у чистому графені у наближенні найближчих сусідів густина станів дорівнює [J.P. Hobson and W.A. Nierenberg, Phys. Rev. **89**, 662 (1953)]

$$N(E) = \begin{cases} \frac{2E}{t^2\pi^2}\frac{1}{\sqrt{F(E/t)}}\mathbf{K}\left(\frac{4E/t}{F(E/t)}\right) & 0 < E < t \\ \frac{2E}{t^2\pi^2}\frac{1}{\sqrt{4E/t}}\mathbf{K}\left(\frac{F(E/t)}{4E/t}\right) & t < E < 3t, \end{cases}$$

де функція $F(x)$ має вигляд

$$F(x) = (1+x)^2 - \frac{(x^2-1)^2}{4},$$

а $\mathbf{K}(m)$ еліптичний інтеграл першого типу,

$$\mathbf{K}(m) = \int_0^1 dx[(1-x^2)(1-mx^2)]^{-1/2}.$$

Побудувати цю залежність за допомогою Matematica та порівняти з результатом, одержаним у задачі 2.

4. * **Оптичне правило сум для діагональної провідності.** Розібрати вивід так званого обмеженого правила сум для діагональної провідності. Чи можна його одержати у континуальному наближенні?

Залежний від частоти Ω тензор електричної провідності $\sigma_{\alpha\beta}(\Omega)$ одержується за допомогою формули Кубо (див. підручник [22] Розділ 7)

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(\Omega) &= \frac{K_{\alpha\beta}(\Omega + i0)}{-i(\Omega + i0)}, \\ K_{\alpha\beta}(\Omega + i0) &= \frac{\langle \tau_{\alpha\beta} \rangle}{V} + \frac{\Pi^R_{\alpha\beta}(\Omega + i0)}{\hbar V}, \end{aligned} \tag{2.54}$$

де запізнювальна кореляційна функція струмів дорівнює

$$\begin{aligned} \Pi^R_{\alpha\beta}(\Omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\Omega t} \Pi^R_{\alpha\beta}(t), \\ \Pi^R_{\alpha\beta}(t) &= -i\theta(t) \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}[J_\alpha(t), J_\beta(0)]\right), \end{aligned} \tag{2.55}$$

V є об'ємом (площиною) системи, $\hat{\rho} = \exp(-\beta H_0)/Z$ є матрицею густини у великому канонічному ансамблі, $\beta = 1/T$ - обернена температура, $Z = \mathrm{Tr}\exp(-\beta H_0)$ - статистична сума, та J_α є операторами повного парамагнітного струму

$$J_\alpha(t) = e^{iHt/\hbar} J_\alpha(0) e^{-iHt/\hbar}, \qquad J_\alpha(t) = \sum_{\mathbf{n}} j^P_\alpha(t, \mathbf{n}), \tag{2.56}$$

який пов'язаний з густиною парамагнітного струму (2.7). Діамагнітний тензор $\langle \tau_{\alpha\beta} \rangle$ у формулі Кубо (2.54) є температурним усередненням діамагнітного члену (2.8):

$$\langle \tau_{\alpha\beta} \rangle = \left\langle \sum_{\mathbf{n}} \tau_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) \right\rangle. \tag{2.57}$$

Оптичне правило сум є наслідком калібрувальної інваріантності та причинності. Калібрувальна інваріантність диктує шлях, яким векторний потенціал входить до (2.4) та, відповідно, визначає діамагнітний та парамагнітний члени у розкладі (2.5),

як і форму формули Кубо (2.54). Причинність призводить до того, що провідність (2.54) задовольняє співвідношенню Крамерса-Кроніга (Kramers-Krönig) (KK)

$$\sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{1}{\pi i}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega\,\sigma_{\alpha\beta}(\omega)}{\omega-\Omega}. \tag{2.58}$$

Скомбінувавши разом високочастотну границю співвідношення KK (2.58),

$$\mathrm{Im}\sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{1}{\pi\Omega}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\mathrm{Re}\sigma_{\alpha\beta}(\omega), \qquad \Omega\to\infty, \tag{2.59}$$

та асимптотику

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{iV\Omega}\left\{-\langle\tau_{xx}\rangle + O\left(\frac{1}{(\hbar\Omega)^2}\right)\right\}, \tag{2.60}$$

ми приходимо до правила сум

$$\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\Omega\mathrm{Re}\sigma_{xx}(\Omega) = \frac{\langle\tau_{xx}\rangle}{V}. \tag{2.61}$$

Розділ 3

Властивості ефективного низькоенергетичного квантово-польового опису графену

В цьому розділі ми зосередимося на симетріях, які має модель вільних дираківських ферміонів, і наслідках можливого порушення таких симетрій. Зокрема розглянемо просторову інверсію, обернення часу, зарядове спряження і неперервну $U(4)$ симетрію. Ми пояснимо різницю між 2D дираківськими ферміонами в графені і 3D дираківськими ферміонами, які вивчаються у звичайній КЕД$_{3+1}$. Крім того є різниця у фізичному змісті такого важливого квантового числа, як *кіральність (chirality)* в (2+1)-вимірних і (3+1)-вимірних теоріях. Через це і завдяки факту, що поняття кіральності є зараз широко вживаним у літературі з графену, ми вирішили, що буде корисним пояснити схожість і відмінності цього поняття в теорії поля і в графені. Наприкінці, у Розділі 3.6 (див. також Додаток A) ми обговорюємо властивості дираківських рівнів Ландау.

3.1 Неперервні симетрії ефективної низькоенергетичної моделі квазічастинкових збуджень в графені

У відсутності зеєманівського розщеплення, коли $\mu_\sigma = \mu$ ефективний лагранжіан (2.50) має глобальну $U(4)$ симетрію. Ця симетрія оперує у просторі долина-підгратка та спіновому просторі. Для початку корисно знехтувати спіновим простором і роздивитись уважніше глобальну $U(2)$ симетрію для 4-компонентних спінорів у просторі долина-підгратка.

3.1.1 $U(2)$ долинно-підграткова симетрія

Можна перевірити, що матриці

$$T_1 = \frac{1}{2} i\gamma^3 = \frac{1}{2}\tilde{\tau}_2 \otimes \tau_3, \quad T_2 = \frac{1}{2}\gamma^5 = \frac{1}{2}\tilde{\tau}_3 \otimes \tau_0, \quad T_3 = \frac{1}{2}\gamma^3\gamma^5 = \frac{1}{2}\tilde{\tau}_1 \otimes \tau_3 \tag{3.1}$$

комутують з Гамільтоніаном (2.40) та задовольняють комутаційним співвідношенням $SU(2)$ алгебри

$$[T_i, T_j] = i\epsilon_{ijk} T_k, \tag{3.2}$$

де ϵ_{ijk} є символом Леві-Чівіти. Разом з одиничною матрицею ($T_0 = I_4/2$), вони призводять до $U(2)$ симетрії, яка діє у просторах долинних та підграткових індексів. Ми будемо називати цю ефективну симетрію для низькоенергетичного опису графену кіральною, оскільки вона містить γ^5 матрицю і нагадує кіральні симетрії для безмасових частинок у фізиці високих енергій (див. далі спеціальний Розділ 3.2 присвячений цьому). Через наявність кіральної $SU(2)$ симетрії існує квантове число кіральність, яке зберігається. Це число характеризується власними величинами діагонального генератору $T_2 = \gamma^5/2$. Оскільки є дві власних величини $+1/2$ і $-1/2$ діагонального оператора T_2, чотирьохкомпонетний спінор Ψ_σ перетворюється по звідному представленню групи $SU(2)$. Збереження числа кіральності грає важливу роль та призводить до відсутності зворотного розсіяння у присутності домішок, які не порушують цю симетрію.

3.1.2 $U(4)$ симетрія спін-долина-підгратка та її порушення зеєманівським членом

Тепер можна легко узагальнити результати, викладені вище і розглянути також і обертання у спіновому просторі. 16 генераторів $U(4)$, які оперують у спіновому та долинно-пігратковому просторах, дорівнюють

$$\frac{\sigma_\kappa}{2}\otimes I_4,\quad \frac{\sigma_\kappa}{2}\otimes i\gamma^3,\quad \frac{\sigma_\kappa}{2}\otimes\gamma^5,\quad \text{та}\quad \frac{\sigma_\kappa}{2}\otimes\frac{1}{2}[\gamma^3,\gamma^5], \tag{3.3}$$

де I_4 – одинична 4×4 матриця та σ_κ з $\kappa=0,1,2,3$ – чотири матриці Паулі, пов'язані зі спіновим ступенем свободи [σ_0 – одинична 2×2 матриця]. Легко перевірити, що коли $B=0$ і зеєманівське розщеплення відсутнє, лагранжіан (2.50) та член взаємодії (2.52) інваріантні при перетвореннях глобальної $U(4)$ групи, які генеруються цими 16 генераторами.

Найпростіший приклад порушення симетрії надається зеєманівським членом, $\Psi^\dagger\sigma_3\Psi=\bar\Psi\gamma^0\sigma_3\Psi$, де σ_3 діє на спінові індекси σ дираківських спінорів. Він явно порушує $U(4)$ симетрію до $U(2)_a\times U(2)_b$ з генераторами

$$\frac{\sigma_{\kappa'}}{2}\otimes I_4,\quad \frac{\sigma_{\kappa'}}{2}\otimes i\gamma^3,\quad \frac{\sigma_{\kappa'}}{2}\otimes\gamma^5,\quad \text{та}\quad \frac{\sigma_{\kappa'}}{2}\otimes\frac{1}{2}[\gamma^3,\gamma^5], \tag{3.4}$$

де $\kappa'=0,3$. Ми обговоримо інші члени, що порушують симетрію далі у Розділі 3.5.

3.2 Кіральність квазічастинок в графені та її відмінність від кіральності у КЕД$_{3+1}$

Відзначимо, що під кіральністю у теорії конденсованого стану, а саме теорії квантового ефекту Холла та у фізиці частинок розуміють різні речі. У першому випадку, холлівський дрейф електронів у одному напрямку на краю зразка зветься кіральністю крайового стану [9]. У цьому ж розділі ми розглянемо фізичний зміст кіральності у графені по аналогії з кіральністю у фізиці елементарних частинок.

Оскільки у безмасовій теорії Дірака γ^5 комутує з гамільтоніаном (2.40) (антикомутує з H_0^D, який заданий (2.45)), це вводить квантове число *кіральність*, яке відповідає долинному індексу. Дійсно, спінори

$$\Psi_{\mathbf{K}_+}=\begin{pmatrix}\psi_{\mathbf{K}_+}\\0\end{pmatrix},\qquad \Psi_{\mathbf{K}_-}=\begin{pmatrix}0\\\psi_{\mathbf{K}_-}\end{pmatrix}, \tag{3.5}$$

які описують квазічастинкові збудження у $\mathbf{K}_\pm$ точках, є власними станами γ^5:

$$\gamma^5\Psi_{\mathbf{K}_+} = \Psi_{\mathbf{K}_+}, \qquad \gamma^5\Psi_{\mathbf{K}_-} = -\Psi_{\mathbf{K}_-}. \tag{3.6}$$

Маркування $\mathbf{K}_\pm$ точок власними станами кірального оператора γ^5 є перевагою кірального представлення (2.43) для γ матриць. В іншому часто використовуваному базисі (2.48) з діагональною γ^0 ця властивість відсутня.

Для безмасових частинок у $3+1$ вимірі квантове число кіральності відповідає *спіральності*, яка характеризує проекцію її спіну на напрямок імпульсу. У $2+1$ вимірі звичайна концепція спіральності для безмасових частинок не має сенсу, і можна говорити тільки про псевдоспіральність.

Зараз ми це проілюструємо, розглянувши рівняння Дірака, яке слідує з лагранжіану (2.50) у найпростішому випадку нейтрального графена у відсутності зовнішнього магнітного поля, $B = \mu = 0$, а також опустивши спіновий індекс. Ми розглядаємо розв'язки з додатньою та від'ємною енергією з визначеною кіральністю

$$\Psi^e_{\mathbf{K}_\pm}(t,\mathbf{r}) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}+i\mathbf{rp}}U^e_{\mathbf{K}_\pm}(E,\mathbf{p}), \quad \Psi^h_{\mathbf{K}_\pm}(t,\mathbf{r}) = e^{i\frac{Et}{\hbar}+i\mathbf{rp}}U^h_{\mathbf{K}_\pm}(E,\mathbf{p}) \tag{3.7}$$

з $E = \hbar v_F|\mathbf{p}|$, які відповідають електронам і діркам з $\mathbf{K}_\pm$ долин, відповідно. Підставивши (3.7) у рівняння Дірака, ми одержуємо, що спінори

$$U^{e,h}_{\mathbf{K}_+}(E,\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \psi^{e,h}_{\mathbf{K}_+}(E,\mathbf{p}) \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad U^{e,h}_{\mathbf{K}_-}(E,\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi^{e,h}_{\mathbf{K}_-}(E,\mathbf{p}) \end{pmatrix} \tag{3.8}$$

задовільняють рівнянню Вейля, $\mathcal{H}_0(\mathbf{p})U^{e,h}(\mathbf{p}) = \pm EU^{e,h}(\mathbf{p})$ або, для двокомпонентних спінорів,

$$\begin{aligned} \hbar v_F(\tau_1 p_1 + \tau_2 p_2)\psi^{e,h}_{\mathbf{K}_+} &= \pm E\psi^{e,h}_{\mathbf{K}_+}, \\ -\hbar v_F(\tau_1 p_1 + \tau_2 p_2)\psi^{e,h}_{\mathbf{K}_-} &= \pm E\psi^{e,h}_{\mathbf{K}_-}, \end{aligned} \tag{3.9}$$

де, відповідно, верхній знак відповідає електронам, а нижній – діркам. Ми підкреслимо, що у нашому випадку вектор $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ знаходиться у площині графену. Формально рівняння (3.9) виглядають подібно до рівнянь Дірака-Вейля, які описують безмасові нейтрино

$$\hbar c\mathbf{p}\boldsymbol{\alpha}\Psi = \hbar c \begin{pmatrix} \mathbf{p}\boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\mathbf{p}\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}\Psi = p_0\Psi, \tag{3.10}$$

проте, в останньому випадку простір є 3D. Це дозволяє ввести для безмасових частинок у $3+1$ вимірі оператор *спіральності*

$$\Lambda = \frac{\mathbf{p}\boldsymbol{\Sigma}}{|\mathbf{p}|}, \qquad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

який комутує з дираківським гамільтоніаном $\hbar c\mathbf{p}\boldsymbol{\alpha}$ та характеризує проекцію спіна частинки на напрямок її імпульсу. Домноживши (3.10) на γ^5 та прийнявши до уваги, що безмасові частинки (античастинки) мають дисперсію $p_0 = \pm\hbar c|\mathbf{p}|$, ми одержуємо, що $\gamma^5\Psi = \pm\mathbf{p}\boldsymbol{\Sigma}/|\mathbf{p}|\Psi$. Це ілюструє, що для безмасових частинок спіральність співпадає з кіральністю, тоді як для античастинок вона має протилежний до кіральності знак.

А зараз розглянемо розв'язки (3.9) для $\mathbf{K}_+$ точки

$$\psi^e_{\mathbf{K}_+}(E,\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{p_x+ip_y}{|\mathbf{p}|} \end{pmatrix}, \qquad \psi^h_{\mathbf{K}_+}(E,\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \frac{-p_x+ip_y}{|\mathbf{p}|} \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{3.12}$$

та для $\mathbf{K}_-$ точки

$$\psi^e_{\mathbf{K}_-}(E,\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{p_x+ip_y}{|\mathbf{p}|} \end{pmatrix}, \qquad \psi^h_{\mathbf{K}_-}(E,\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \frac{p_x-ip_y}{|\mathbf{p}|} \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{3.13}$$

4-компонентні спінори (3.5) утворені з розв'язків (3.12), (3.13) є взаємноортогональними власними станами гамільтоніана $\mathcal{H}_0(\mathbf{p})$ і оператора γ^5:

$$\Psi^{i*}_r(\mathbf{p})\Psi^j_s(\mathbf{p}) = \delta^{ij}\delta_{rs}, \qquad i,j = e,h, \qquad r,s = \mathbf{K}_+,\mathbf{K}_-. \tag{3.14}$$

У $2+1$ вимірному випадку нема можливості зробити обертання навколо напрямку імпульсу $\mathbf{p}$, що знаходиться у 2D площині, і оператор $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1,\tau_2)$ не має фізичного змісту звичайного спінового оператору. Таким чином, концепція спіральності для безмасових частинок, яка зв'язана з групою Лоренца та обертаннями у звичайному просторі, у цьому випадку не має сенсу. Далі, оскільки є тільки один генератор кутового моменту τ_3, не існує неабелевої алгебри, яка б могла обмежити можливі значення власних величин, що призводить до можливості існування екзотичних статистик. Розв'язки (3.12) і (3.13) є двозначними при обертаннях $R(\theta) = \exp(i\theta\tau_3/2)$ з $0 < \theta < 4\pi$, оскільки вони описують спінорні поля.

Формально можна використати оператор псевдоспіральності

$$\Lambda^{2\mathrm{D}} = \frac{\mathbf{p}\boldsymbol{\Sigma}}{|\mathbf{p}|}, \qquad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\tau} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\tau} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\tau} = (\tau_1,\tau_2), \tag{3.15}$$

який комутує з гамільтоніаном і, таким чином, відповідає квантовому числу, яке зберігається. Цей оператор, однак, відповідає внутрішній, а не просторовій симетрії, як було у $3+1$ вимірному випадку. Однак існує можливість зв'язати між собою оператори кіральності та псевдоспіральності для безмасових квазічастинок, $\gamma^5\Psi = \pm\Lambda^{2\mathrm{D}}\Psi$.

Можна бачити, що розв'язки (3.12) та (3.13), які задовільняють (3.14) відрізняються тільки знаком імпульсу. Таким чином, ми приходимо до висновку, що у $\mathbf{K}_+$ точці електронні збудження мають енергію $\hbar v_F|\mathbf{p}|$ і $\mathbf{p}\boldsymbol{\tau}/|\mathbf{p}|\psi^e_{\mathbf{K}_+} = \psi^e_{\mathbf{K}_+}$, тоді як для дірок енергія дорівнює $-\hbar v_F|\mathbf{p}|$, тобто $\mathbf{p}\boldsymbol{\tau}/|\mathbf{p}|\psi^h_{\mathbf{K}_+} = -\psi^h_{\mathbf{K}_+}$. У $\mathbf{K}_-$ точці ці співвідношення є оберненими: для електронів $\mathbf{p}\boldsymbol{\tau}/|\mathbf{p}|\psi^e_{\mathbf{K}_-} = -\psi^e_{\mathbf{K}_-}$ і для дірок $\mathbf{p}\boldsymbol{\tau}/|\mathbf{p}|\psi^h_{\mathbf{K}_-} = \psi^h_{\mathbf{K}_-}$. Для 4-компонентних спінорів $\Psi^{e,h}_{\mathbf{K}_\pm}$ ці умови можуть бути переписані з використанням оператора псевдоспіральності: $\Lambda^{2\mathrm{D}}\Psi^e_{\mathbf{K}_\pm} = \pm\Psi^e_{\mathbf{K}_\pm}$ and $\Lambda^{2\mathrm{D}}\Psi^h_{\mathbf{K}_\pm} = \mp\Psi^h_{\mathbf{K}_\pm}$. Вони означають, що у будь-якій заданій $\mathbf{K}_\pm$ точці напрямок імпульсу для електронів та дірок з тією ж самою абсолютною величиною енергії є протилежним. Ця властивість безмасових електронів та дірок є наслідком рівняння руху. Однак, щоб заборонити розсіяння квазічастинок назад, треба також подавити їх перехід від однієї долини до іншої. Це обмеження також пов'язане зі збереженням кіральності. Наприклад, кіральність є хорошим квантовим числом у графені з електростатичним потенціальним розсіянням.

Ми змогли визначити кіральну матрицю γ^5 та квантове число кіральності, оскільки використовуємо редуковане 4×4 представлення дираківських матриць. У $2+1$ вимірі є два нееквівалентних нередукованих 2×2 представлення дираківської алгебри. Відповідні 2×2 Γ матриці характеризуються сігнатурою

$$\eta = \frac{i}{2}\mathrm{Tr}[\Gamma^0\Gamma^1\Gamma^2]. \tag{3.16}$$

Можна перевірити, що $\hat{\gamma}^\nu$ і $\bar{\gamma}^\nu$ матриці, з яких сформовано 4×4 представлення (2.48), мають протилежні сігнатури $\eta = +1$ і $\eta = -1$ відповідно щоб прийняти до уваги наявність двох нееквівалентних $\mathbf{K}_\pm$ точок. Внаслідок цього виникає потреба використання двох унітарно нееквівалентних представлень 2×2 гамма матриць. Як ми бачили, у кіральному представленні 4×4 γ матриць $\mathbf{K}_\pm$ точки розрізняються квантовим числом кіральності (долинний індекс). Сігнатуру η відповідних 2×2 γ матриць іноді також називають "кіральністю". Ми відзначимо, що сам по собі цей знак не спостерігається, і необхідно ввести дираківську масу або/та магнітне поле та розглядати їх відносні знаки (див. Розділ 3.5 нижче).

Наприкінці ми відзначимо, що відповідно до (2.32) матриця α^3 антикомутує з гамільтоніаном (2.40): $\{\alpha^3, H_0\} = 0$. Наслідком цього є те, що спектр гамільтоніану є симетричним відносно власної величини $E = 0$. Тотожність $\alpha^2 H_0^*(\mathbf{k})\alpha^2 = -H_0(\mathbf{k})$ відповідає рівнянню (2.33) та гарантує симетрію спектру відносно $E = 0$ навіть при наявності скінченої дираківської маси $\Psi\gamma^3\Psi$. Також матриця γ^0 антикомутує з гамільтоніанами (2.40) та (2.45): $\{\gamma^0, H_0\} = \{\gamma^0, H_0^D\} = 0$.

3.3 Дискретні симетрії

У континуальному наближенні означення операцій дискретної симетрії не є однозначними. У теоретикопольових дослідженнях $(2+1)$-вимірних моделей існує домовленність, як визначити ці операції. Вона базується на тому, що перетворення парності відповідає інверсії тільки однієї осі, наприклад x осі: $\mathcal{P}(x, y) \to (-x, y)$, оскільки інверсія обох осей відповідає обертанню. Маючи на увазі те, що ефективна континуальна модель квазічастинкових збуджень в графені має твердотільне походження, введені тут операції дискретної симетрії узгоджені з операціями, визначеними у Розділі 2.3 для моделі на гратці. Знання цих симетрій необхідне для правильної класифікації членів, які порушують симетрію. Подібний аналіз є важливим, наприклад, при аналізі слабкої локалізації у графені де різні типи безладу можуть порушувати різні симетрії.

3.3.1 Просторова інверсія $\mathcal{P}$

Як обговорюється у Розділі 2.3.1, просторова інверсія повинна обернути обидві осі та переставити A і B атоми та $\mathbf{K}_\pm$ точки. Таким чином, використавши означення (2.19) та (2.20), для 4-компонентного спінору $\Psi_\sigma(\mathbf{p})$, який заданий рівнянням (2.39), ми визначаємо[1]

$$\Psi_\sigma(\mathbf{p}) \longrightarrow \mathcal{P}\Psi_\sigma(\mathbf{p})\mathcal{P}^{-1} = P\Psi_\sigma(-\mathbf{p}), \qquad P = \tilde{\tau}_1 \otimes \tau_0 = \gamma^0, \qquad P^2 = 1. \tag{3.17}$$

Відзначимо, що операція інверсії обох просторових координат не є еквівалентною обертанню на кут π у площині, яке задається наступним чином: $\Psi(k_x, k_y) \to \exp[i\pi(i\gamma^1\gamma^2/2)]\Psi(-k_x, -k_y)$, де $i\gamma^1\gamma^2/2$ – це генератор відповідного обертання.

[1] Компоненти $\psi_{\mathbf{K}_\pm}$ спінору (2.39) обмінюються при інверсії, але оскільки за означенням $\psi_{\mathbf{K}_-}$ підгратки вже переставлені, ми маємо матрицю τ_0, яка діє у просторі підграток замість τ_1, яка була присутня у (2.20).

Інваріантність (2.21) гамільтоніану H_0 при $\mathcal{P}$ перетворенні зараз слідує з умови

$$P\mathcal{H}_0^D(\mathbf{p})P = \mathcal{H}_0^D(-\mathbf{p}) \tag{3.18}$$

для діраківської гамільтонівської густини (2.45). Рівняння (3.18) узагальнює умову (2.22) для 2×2 гамільтонівської густини. Легко побачити, що при $\mathcal{P}$ перетворенні струм $\bar{\Psi}\sigma_0\gamma^\mu\Psi$ з (2.49) перетворюється так

$$\bar{\Psi}\gamma^0\Psi \xrightarrow{\mathcal{P}} \bar{\Psi}\gamma^0\Psi, \quad \bar{\Psi}\gamma^1\Psi \xrightarrow{\mathcal{P}} -\bar{\Psi}\gamma^1\Psi, \quad \bar{\Psi}\gamma^2\Psi \xrightarrow{\mathcal{P}} -\bar{\Psi}\gamma^2\Psi, \tag{3.19}$$

де ми опустили одиничну матрицю σ_0 яка діє на спінові індекси σ діраківських спінорів. Взаємодія з фіксованим зовнішнім магнітним полем $eA_\alpha\bar{\Psi}\sigma_0\gamma^\alpha\Psi$ є інваріантною при просторовій інверсії.

3.3.2 Обернення часу $\mathcal{T}$

Оператор обернення часу (2.28) переставляє $\mathbf{K}_\pm$ точки, але не підгратки. Відповідно, коли ми визначаємо дію $\mathcal{T}$ на 4-компонентні спінори $\Psi_\sigma(\mathbf{p})$, частина, яка діє на підграткову ступінь свободи, дорівнює τ_1[2]

$$\Psi(\mathbf{p}) \longrightarrow \mathcal{T}\Psi(\mathbf{p})\mathcal{T}^{-1} = i\sigma_2 T\Psi(-\mathbf{p}), \qquad T = \tilde{\tau}_1\otimes\tau_1 = \gamma^1\gamma^5, \qquad T^2 = 1, \tag{3.20}$$

де σ_2 діє на спінові індекси спінору $\Psi_\sigma(\mathbf{p})$. Подвійне $\mathcal{T}$-перетворення дає $\mathcal{T}^2\Psi(\mathbf{p})\mathcal{T}^{-2} = -\Psi(\mathbf{p})$. Таким чином для системи з непарною кількістю ферміонів, симетричної відносно обернення часу, виродження рівнів не може бути меншим за 2 (теорема Крамерса). Легко побачити, що $\mathbf{K}_\pm$ точки дійсно зв'язані симетрією обернення часу

$$\Psi(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} a(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) \\ b(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) \\ b(\mathbf{K}_- + \mathbf{p}) \\ a(\mathbf{K}_- + \mathbf{p}) \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathcal{T}} T\Psi(-\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} a(\mathbf{K}_- - \mathbf{p}) \\ b(\mathbf{K}_- - \mathbf{p}) \\ b(\mathbf{K}_+ - \mathbf{p}) \\ a(\mathbf{K}_+ - \mathbf{p}) \end{pmatrix}, \tag{3.21}$$

де для спрощення ми не врахували спін.[3]

У часово-просторовому представленні перетворення (3.20) має вигляд

$$\Psi(t,\mathbf{r}) \to \mathcal{T}\Psi(t,\mathbf{r})\mathcal{T}^{-1} = i\sigma_2 T\Psi(-t,\mathbf{r}). \tag{3.22}$$

[2]Порівняйте з означенням для $\mathcal{P}$ вище, що містить τ_0.

[3]Зауважимо, що у деяких випадках може бути корисним розглядати операцію обернення часу у окремих $\mathbf{K}_\pm$ точках, без їх перестановки [16].

Тоді відповідне перетворення для дираківського спряженого спінору є таким

$$\bar{\Psi}(t,\mathbf{r}) \to (\mathcal{T}\Psi(t,\mathbf{r})\mathcal{T}^{-1})^{\dagger}(\gamma^0)^* = -\bar{\Psi}(-t,\mathbf{r})i\sigma_2 T.$$

Інваріантність (2.29) гамільтоніану H_0 при $\mathcal{T}$ зараз слідує з умови

$$T\mathcal{H}_0^{D*}(\mathbf{p})T = \mathcal{H}_0^D(-\mathbf{p}) \tag{3.23}$$

на густину гамільтоніану (2.45). Рівняння (3.23) узагальнює умову (2.30) для 2×2 гамільтонової густини.

Легко бачити, що при $\mathcal{T}$ перетворенні струм $\bar{\Psi}\sigma_0\gamma^\mu\Psi$ з (2.49) перетворюється так

$$\bar{\Psi}\gamma^0\Psi \xrightarrow{\mathcal{T}} \bar{\Psi}\gamma^0\Psi, \quad \bar{\Psi}\gamma^1\Psi \xrightarrow{\mathcal{T}} -\bar{\Psi}\gamma^1\Psi, \quad \bar{\Psi}\gamma^2\Psi \xrightarrow{\mathcal{T}} -\bar{\Psi}\gamma^2\Psi. \tag{3.24}$$

Коли зовнішнє магнітне поле зафіксовано, відповідний член взаємодії $\bar{\Psi}\sigma_0\gamma^\alpha\Psi$ порушує симетрію відносно обернення часу.

3.3.3 Зарядове спряження $\mathcal{C}$

Зарядове спряження $\mathcal{C}$ набуває нетривіального значення, коли ми розглядаємо вторинно квантовану теорію Дірака і вводимо перетворення, яке обмінює частинки і античастинки (електрони і дірки), залишаючи їхні спін та імпульс незмінними.

Відповідно, ми визначаємо дію $\mathcal{C}$ на 4-компонентні спінори $\Psi_\sigma(\mathbf{p})$:

$$\Psi_\sigma(\mathbf{p}) \longrightarrow \mathcal{C}\Psi_\sigma(\mathbf{p})\mathcal{C}^{-1} = C\bar{\Psi}^T_\sigma(\mathbf{p}), \qquad C = \gamma^1, \tag{3.25}$$

де T означає транспонування. Матриця C задовольняє співвідношенням

$$C = -C^{-1} = -C^\dagger = -C^T, \qquad C(\gamma^\mu)^T C^{-1} = -\gamma^\mu, \qquad \mu = 0,1,2. \tag{3.26}$$

Легко бачити, що $\mathcal{C}$ обмінює A та B підгратки

$$\Psi_\sigma(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} a_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) \\ b_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) \\ b_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p}) \\ a_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p}) \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathcal{C}} \gamma^1\gamma^0\Psi^{\dagger T}_\sigma(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} -b^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) \\ -a^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) \\ a^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p}) \\ b^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p}) \end{pmatrix}. \tag{3.27}$$

Для дираківського спряженого спінору ми знаходимо

$$\bar{\Psi}_\sigma(\mathbf{p}) \to \mathcal{C}\Psi^\dagger_\sigma(\mathbf{p})\mathcal{C}^{-1}\gamma^0 = (\gamma^1\gamma^0\Psi_\sigma(\mathbf{p}))^T\gamma^0 = (-\gamma^1\Psi_\sigma(\mathbf{p}))^T. \tag{3.28}$$

Легко бачити, що при $\mathcal{C}$ перетворенні струм $\bar{\Psi}\sigma_0\gamma^\mu\Psi$ з (2.49) перетворюється так

$$\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi \xrightarrow{\mathcal{C}} -\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi, \qquad \mu = 0, 1, 2. \tag{3.29}$$

Можна також перевірити, що лагранжіан (2.50) є інваріантним відносно $\mathcal{C}$, якщо одночасно замінити $e \to -e$.

3.4 Різниця між квазічастинками в графені та безмасовими нейтрино

Існує широкорозповсюджена аналогія між квазічастинками в графені та безмасовими нейтрино, яка базується на подібності рівнянь Дірака-Вейля (3.10) і рівнянь (3.9) для квазічастинок у графені. Відразу слід відзначити, що на відміну від квазічастинок у графені, нейтрино не має електричного заряду. Окрім цього, наш розгляд дискретних $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$ і $\mathcal{C}$ симетрії у Розділах 3.3.1, 3.3.2 та 3.3.3 показує, що ця аналогія є неповною. Рівняння Дірака (3.10) відповідає парі рівнянь Вейля для 2-компонентних лівих спінорів, $\Psi_L = (1/2)(1-\gamma^5)\Psi$ та правих спінорів $\Psi_R = (1/2)(1+\gamma^5)\Psi$. Ці два рівняння пов'язані одне з іншим перетворенням парності. У фізиці частинок припускається, що в природі існують тільки ліві нейтрино, так що досить використовувати тільки одне рівняння Вейля. Однак, одне це рівняння порушує $\mathcal{C}$ та $\mathcal{P}$ симетрії, але зберігає $\mathcal{CP}$ та $\mathcal{T}$ симетрії. Діраківські квазічастинки у графені з певною кіральністю також описуються одним з рівнянь Вейля (3.9) для 2-компонентного спінору. Однак останнє рівняння порушує $\mathcal{P}$ та $\mathcal{T}$ симетрії, але зберігає $\mathcal{PT}$ та $\mathcal{C}$ симетрії. Цей висновок про різницю між дискретними симетріями у КЕД$_{3+1}$ і в графені не може бути зроблений формальним порівнянням рівнянь (3.10) і (3.9), оскільки при континуальному описі графену було необхідно врахувати дискретні симетрії моделі на гратці з Розділу 2.3. Ми також відзначимо той факт, що $\mathbf{K}_\pm$ точки пов'язані симетрією обернення часу (див. рівняння (3.21)), і це має важливі наслідки для ефекту Джозефсона у мезоскопічних переходах, які зроблені з шару графену, що оточений двома близько розташованими надпровідними електродами. Оскільки куперівські пари зроблені з обернених у часі станів, два електрони з куперівської пари, які інжектуються з надпровідних електродів у графен, ідуть до протилежних $\mathbf{K}_\pm$ точок. Наприкінці відзначимо, що розгляд дискретних симетрій дозволяє зробити аналогію між $\mathbf{K}_\pm$ індексом та квантовим числом, яке описує кругову поляризацію фотонів.

Дійсно, фотони з певною круговою поляризацією також порушують симетрії парності та обернення часу, але не зарядове спряження.

3.5 Порушення симетрії в графені: дираківські маси, їхні трансформаційні властивості при $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$, $\mathcal{C}$ перетвореннях

Однією з причин того, чому графен притягує до себе увагу багатьох теоретиків є те, що електрон-електронні взаємодії та/або магнітне поле призводять до порушення $U(4)$ симетрії та нової фізики, розуміння якої потребує виходу за незвичайну, але ще досить просту фізику невзаємодіючих дираківських квазічастинок.

У Розділі 3.1.2 ми вже розглянули найпростіший приклад порушення $U(4)$ симетрії членом Зеємана.

Інший канал спонтанного порушення $U(4)$ симетрії до $U(2)_c \times U(2)_d$ пов'язаний із можливістю генерації за рахунок взаємодій дираківської маси M_D, яка входить до лагранжіану (2.50) наступним чином:

$$\begin{aligned}\mathcal{L} = \bar{\Psi}(t,\mathbf{r}) \Big[i\gamma^0 \left(\hbar\partial_t - i\mu + i\sigma_3 \frac{g}{2}\mu_B B \right) \\ + i\hbar v_F \gamma^1 D_x + i\hbar v_F \gamma^2 D_y - M_D \Big] \Psi(t,\mathbf{r}).\end{aligned} \tag{3.30}$$

Дираківська маса M_D[4] має загальну форму $\Delta\sigma_\kappa \otimes \Gamma \equiv \Delta\sigma_\kappa\Gamma$, де Δ – це її абсолютна величина, σ_κ – одна з матриць Паулі (далі ми розглядаємо тільки σ_0 і σ_3, більш загальні маси з $\boldsymbol{\sigma}$ були також розглянуті в літературі) та Γ – це одна з чотирьох матриць

$$I_4, \qquad \gamma^3, \qquad i\gamma^5, \qquad \gamma^3\gamma^5. \tag{3.31}$$

При перетвореннях групи $SU(2)$ (як у Розділі 3.1.1 ми поки що ігноруємо спіновий ступінь свободи) щілини $\bar{\Psi}\Psi, \bar{\Psi}\gamma^3\Psi, \bar{\Psi}i\gamma^5\Psi$ трансформуються як вектор, тоді як щілина $\bar{\Psi}\gamma^3\gamma^5\Psi$ – як скаляр. Три щілини, $\bar{\Psi}\Psi$,$\bar{\Psi}\gamma^3\Psi$, і $\bar{\Psi}i\gamma^5\Psi$ порушують групу $SU(2)$ до підгрупи $U(1)$ (з непорушеними генераторами T_3, T_2 та T_1, відповідно).

[4]Енергетична щілина M_D пов'язана з відповідною дираківською масою m як $M_D = mv_F^2$. Далі ми будемо ігнорувати різницю між "дираківською щілиною" і "дираківською масою" та використовувати термін "дираківська маса" для обох випадків.

3.5.1 Фізичний зміст дираківських мас

Щоб зрозуміти фізичний зміст однієї з мас, перепишемо гамільтоніан H_1 визначений у (2.23) через 4-компонентний спінор (2.39)

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_\sigma \int_{DC} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \Psi^\dagger_\sigma(\mathbf{p})[m_+\tilde{\tau}_0 \otimes \tau_0 + m_-\tilde{\tau}_3 \otimes \tau_3]\Psi_\sigma(\mathbf{p}) \\ &= \int_{DC} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \bar{\Psi}(\mathbf{p})[m_+\gamma^0 + m_-\gamma^3]\Psi(\mathbf{p}). \end{aligned} \tag{3.32}$$

Як було пояснено після (2.23), член $m_+\gamma^0$ змінює повну густину носіїв на обох A та B підгратках і, таким чином, може бути поглинений до члену з хімічним потенціалом $\mu\gamma^0$. Однак член $m_-\gamma^3$ порушує $\mathcal{P}$, яка визначена у (3.17). Цей член є прикладом однієї з дираківських мас, введених вище. Оператор

$$\begin{aligned} &\int d^2x \bar{\Psi}\sigma_0\gamma^3\Psi = \\ &\sum_\sigma \int_{DC} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \left[a^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p})a_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) + a^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p})a_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p})\right. \\ &\left. -b^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p})b_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) - b^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p})b_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p})\right] \end{aligned} \tag{3.33}$$

визначає величину параметру порядку $\langle\bar{\Psi}\sigma_0\gamma^3\Psi\rangle$ (і, таким чином, ферміонну щілину), яка пропорційна густині електронного дисбалансу між A та B підгратками і відповідає формуванню хвилі зарядової густини у ексітонному основному стані, який знімає виродження між підгратками. У Розділі 2.3.1 вже відзначалось, що цей тип дираківської маси може бути створений у графені, якщо покласти його на відповідний субстрат, який порушив би симетрію між A та B підгратками.

Інші приклади дираківських мас розглянуті таким же самим чином в огляді [12], а тут ми ще розглянемо тільки найцікавіший випадок з матрицею $\Gamma = \gamma^3\gamma^5$. У цьому випадку ми маємо

$$\begin{aligned} &\int d^2x \bar{\Psi}\sigma_0\gamma^3\gamma^5\Psi = \\ &\sum_\sigma \int \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \left[a^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p})a_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) - a^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p})a_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p})\right. \\ &\left. - b^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p})b_\sigma(\mathbf{K}_+ + \mathbf{p}) + b^\dagger_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p})b_\sigma(\mathbf{K}_- + \mathbf{p})\right]. \end{aligned} \tag{3.34}$$

На відміну від щілини (маси) у (3.33), щілина у (3.34) відповідає щілині з протилежним знаком у $\mathbf{K}_-$ точці [порівняй рівняння (3.34) та (3.33)]. Ця щілина пов'язана з моделлю, що була запропонована Халдейном (Haldane) [26] у якості реалізації аномалії парності у $2+1$ вимірній теорії поля. Порівнюючи маси у рівняннях (3.33) та (3.34), знаходимо, що друга маса зберігає $\mathcal{P}$. З іншого боку, маючи на увазі, що $\mathbf{K}_\pm$ точки пов'язані обереннням часу $\mathcal{T}$ (див. рівняння (3.21)), можна побачити, що, тоді як масовий член $\Delta\sigma_0\gamma^3$ зберігає $\mathcal{T}$, маса $\Delta_{\mathcal{T}}\sigma_0\gamma^3\gamma^5$ порушує цю симетрію. На відміну від цього маса $\sim\sigma_3\gamma^3\gamma^5$, яка пов'язана зі спін-орбітальною взаємодією не порушує $\mathcal{T}$. Фактично тільки щілини $\sigma_3\gamma^3\gamma^5$ та $\sigma_0\otimes I_4$ симетричні відносно всіх дискретних симетрій.

3.5.2 Трансформаційні властивості дираківських мас

Всі можливі дираківські маси $\bar{\Psi}M_D\Psi$ та їх трансформаційні властивості при $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$, $\mathcal{C}$ симетріях наведені у Таблиці 3.1. Для повноти ми також включили матриці M_μ, M_Z і $\mathcal{M}_{\mu 1}, \mathcal{M}_{\mu 2}$, які відповідають хімічному потенціалу, зеєманівському члену та узагальненим хімічним потенціалам.

Що стосується неперервної групи симетрії $U(4)$, всі дираківські щілини, окрім $\sigma_0\otimes\gamma^3\gamma^5$ порушують її до $U(2)\otimes U(2)$ підгрупи, хоча фізичний зміст груп $U(2)$ залежить від конкретної щілини. Наприклад, у випадку щілини $\Delta\bar{\Psi}\gamma^3\Psi$ ми маємо порушення $U(4)$ до $U_a(2)\otimes U_b(2)$ з генераторами

$$\frac{\sigma^a}{2}\otimes I_4, \quad \frac{\sigma^a}{2}\otimes T_2. \tag{3.35}$$

Підгрупи $U_{a,b}(2)$ діють у просторах станів $(\mathbf{K}_+,\uparrow)$, $(\mathbf{K}_+,\downarrow)$ та $(\mathbf{K}_-,\uparrow)$, $(\mathbf{K}_-,\downarrow)$, не змішуючи їх.

Табл. 3.1: Трансформаційні властивості різних діраківських мас $\bar{\Psi}M_D\Psi = \Psi^\dagger M\Psi$ з $M_D = \sigma_{0,3}\otimes\Gamma$ при $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$ та $\mathcal{C}$ перетвореннях. Матриці M_μ, M_Z та $\mathcal{M}_{\mu 1}, \mathcal{M}_{\mu 2}$ відповідають хімічному потенціалу, зеєманівському члену та узагальненим хімічним потенціалам.

M_D	M	$\mathcal{P}$	$\mathcal{T}$	$\mathcal{C}$
$\sigma_0\otimes I_4$	$\sigma_0\otimes\tilde{\tau}_1\otimes\tau_0$	1	1	1
$\sigma_0\otimes\gamma^3$	$\sigma_0\otimes\tilde{\tau}_3\otimes\tau_3$	-1	1	1
$\sigma_0\otimes i\gamma^5$	$\sigma_0\otimes\tilde{\tau}_2\otimes\tau_0$	-1	1	-1
$\sigma_0\otimes\gamma^3\gamma^5$	$\sigma_0\otimes\tilde{\tau}_0\otimes\tau_3$	1	-1	1
$\sigma_3\otimes I_4$	$\sigma_3\otimes\tilde{\tau}_1\otimes\tau_0$	1	-1	1
$\sigma_3\otimes\gamma^3$	$\sigma_3\otimes\tilde{\tau}_3\otimes\tau_3$	-1	-1	1
$\sigma_3\otimes i\gamma^5$	$\sigma_3\otimes\tilde{\tau}_2\otimes\tau_0$	-1	-1	-1
$\sigma_3\otimes\gamma^3\gamma^5$	$\sigma_3\otimes\tilde{\tau}_0\otimes\tau_3$	1	1	1
$M_\mu = \sigma_0\otimes\gamma^0$	$\sigma_0\otimes\tilde{\tau}_0\otimes\tau_0$	1	1	-1
$M_Z = \sigma_3\otimes\gamma^0$	$\sigma_3\otimes\tilde{\tau}_0\otimes\tau_0$	1	-1	-1
$\mathcal{M}_{\mu 1} = \sigma_0\otimes\gamma^0\gamma^5$	$\sigma_0\otimes -i\tilde{\tau}_2\otimes\tau_0$	-1	-1	-1
$\mathcal{M}_{\mu 2} = \sigma_3\otimes\gamma^0\gamma^5$	$\sigma_3\otimes -i\tilde{\tau}_2\otimes\tau_0$	-1	1	-1

3.6 Дираківські рівні Ландау

Незважаючи на те, що у більшості експериментів квазічастинки у графені проявляють себе як безмасові, з теоретичної точки зору є дуже повчальним розгляд саме масивних дираківських ферміонів. У зовнішньому магнітному полі формуються релятивістські рівні Ландау. У присутності скінченої щілини $\Delta \neq 0$, але ігноруючи зеєманівське розщеплення, для матриць $\Gamma = I_4, \gamma^3, \gamma^5$ енергії рівнів Ландау дорівнюють

$$E_n = \begin{cases} \pm\Delta \operatorname{sgn}(eB), & n = 0, \\ \operatorname{sgn}(n)\sqrt{\Delta^2 + 2|n|\hbar v_F^2 |eB|/c}, & n = \pm 1, \pm 2, \ldots. \end{cases} \tag{3.36}$$

Щоб зрозуміти, як з'являється спектр (3.36), повчально записати рівняння Дірака для однієї з мас, розглянувши обидві $\mathbf{K}$ точки окремо. Наприклад, для маси $\Delta\sigma_0\gamma^3$, ми одержуємо

$$\left[i\tau_0\hbar\partial_t + i\hbar v_F\tau_1 D_x + i\hbar v_F\tau_2 D_y - \tau_3\Delta\right]\psi_{\mathbf{K}_+}(t,\mathbf{r}) = 0, \tag{3.37a}$$

$$\left[i\tau_0\hbar\partial_t - i\hbar v_F\tau_1 D_x - i\hbar v_F\tau_2 D_y + \tau_3\Delta\right]\psi_{\mathbf{K}_-}(t,\mathbf{r}) = 0. \tag{3.37b}$$

Домноживши ліву частину (3.37a) на τ_3, а ліву частину (3.37b) на $-\tau_3$, ми маємо

$$\left[i\hat{\gamma}^0\hbar\partial_t + i\hbar v_F\hat{\gamma}^1 D_x + i\hbar v_F\hat{\gamma}^2 D_y - \Delta\right]\psi_{\mathbf{K}_+}(t,\mathbf{r}) = 0, \tag{3.38a}$$

$$\left[i\tilde{\gamma}^0\hbar\partial_t + i\hbar v_F\tilde{\gamma}^1 D_x + i\hbar v_F\tilde{\gamma}^2 D_y - \Delta\right]\psi_{\mathbf{K}_-}(t,\mathbf{r}) = 0, \tag{3.38b}$$

де у (3.38a), 2×2 гамма матриці $\hat{\gamma}^\nu$ наведені у (2.48), а у (3.38b) $\tilde{\gamma}^0 = -\hat{\gamma}^0$, $\tilde{\gamma}^{1,2} = \hat{\gamma}^{1,2}$ і мають протилежну сигнатуру η [див. означення (3.16)]. Розв'язок рівнянь (3.37a) та (3.37b) у зовнішньому магнітному полі у калібруванні Ландау детально описано у Додатку A, а Додаток B присвячений розв'язку цього рівняння у симетричній калібровці. Енергії рівнів Ландау з n та $-n$ для $|n| \geq 1$ є симетричними (див. рівняння (3.36) та (3.39)). Найнижчий рівень Ландау, однак, є асиметричним і аномальним тому, що у рівнянні (3.38a) його енергія дорівнює $-\Delta\operatorname{sgn}(eB)$, тоді як у (3.38b) його енергія дорівнює $\Delta\operatorname{sgn}(eB)$ (див. Рис. 3.1 (c), де показано випадок $eB > 0$). Виявляється, що знак енергії найнижчого рівня Ландау визначається відносним знаком сигнатури η для 2×2 дираківських матриць (3.16) і дираківської маси Δ. Це означає, що, оскільки знак перед масою Δ у (3.38a) і (3.38b) є однаковим, то знак енергії найнижчого рівня Ландау залежить від знаку сігнатури $\hat{\gamma}^\nu$ і $\tilde{\gamma}^\nu$ матриць. Таким чином скомбінований з (3.37a) і (3.37b) енергетичний спектр є симетричним і задається (3.36). Це

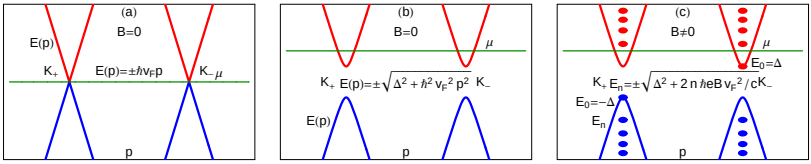


Рис. 3.1: Зонна структура графену. Електрони показані червоним, а дірки синім (у електронній версії). (a) Низькоенергетична лінійна дисперсія $E(\mathbf{k})$ поблизу дираківських точок $\mathbf{K}_+$ і $\mathbf{K}_-$ при $B = 0$. (b) Можлива модифікація спектру скінченою щілиною (дираківською масою) Δ. Хімічний потенціал (показаний горизонтальною лінією) μ зсунутий від нуля напругою на затворі. (c) Рівні Ландау в дираківський теорії графену. Спінова ступінь свободи не враховується. Для заданого напрямку магнітного поля $\mathbf{B}$, яке прикладене перпендикулярно до площини графену, найнижчий ($n = 0$) рівень Ландау має енергію $E_0 = -\Delta$ у $\mathbf{K}_+$ та $E_0 = \Delta$ у $\mathbf{K}_-$.

відповідає тому, що дираківська маса $\Delta\sigma_0\gamma^3$ не порушує симетрію відносно обернення часу.

У границі $\Delta \to 0$ енергетичні рівні Ландау $\pm\Delta\mathrm{sgn}(eB)$, які відповідають $n = 0$, об'єднуються разом, щоб сформувати єдиний рівень (див. Рис. 1.3). Однак, коли $\mu = 0$ і знехтувано розщепленням Зеємана, він залишається напівзаповненим. Ця властивість найнижчого рівня Ландау, який порівну розподілений між частинками та античастинками, є основою незвичайного цілочисельного квантового ефекту Холла у графені [10].

Для випадку моделі Халдейна з $\Gamma = \gamma^3\gamma^5$, спектр є асиметричним

$$E_n = \begin{cases} -\Delta\mathrm{sgn}(eB), & n = 0, \\ \mathrm{sgn}(n)\sqrt{\Delta^2 + 2|n|\hbar v_F^2|eB|/c}, & n = \pm1, \pm2, \dots \end{cases} \tag{3.39}$$

Дійсно, маса $\Delta_\mathcal{T}\sigma_0\gamma^3\gamma^5$, яка порушує симетрію відносно обернення часу $\mathcal{T}$, відповідає двом рівнянням

$$[i\tau_0\hbar\partial_t + i\hbar v_F\tau_1 D_x + i\hbar v_F\tau_2 D_y - \tau_3\Delta_\mathcal{T}]\,\psi_{\mathbf{K}_+}(t,\mathbf{r}) = 0,$$
$$[i\tau_0\hbar\partial_t - i\hbar v_F\tau_1 D_x - i\hbar v_F\tau_2 D_y - \tau_3\Delta_\mathcal{T}]\,\psi_{\mathbf{K}_-}(t,\mathbf{r}) = 0,$$

які мають один і той же знак перед $\Delta_\mathcal{T}$. Відповідно, оскільки 2×2 гамма матриці співпадають з матрицями в (3.38a) і (3.38b), можна легко побачити, що обидва рівняння у (3.40) ведуть до однакового знаку

енергії найнижчого рівня Ландау, який дорівнює $-\Delta_{\mathcal{T}}\,\mathrm{sgn}(eB)$. Відповідно, найнижчий рівень Ландау залишається подвійно виродженим. Таким чином, скомбінований енергетичний спектр (3.39) стає асиметричним, а порушуючий симетрію обернення часу характер дираківської маси $\Delta_{\mathcal{T}}\sigma_0\gamma^3\gamma^5$ виявляється зовнішнім магнітним полем. При температурах набагато нижче $\Delta_{\mathcal{T}}$ це веде до квантового ефекту Холла навіть у нульовому магнітному полі. Дійсно, оскільки холлівська провідність непарна відносно обернення часу, ненульова σ_{xy} можлива, якщо інваріантність відносно обернення часу порушена.

У границі $\Delta_{\mathcal{T}} \to 0$, $n = 0$ рівень Ландау з енергією $-\Delta\mathrm{sgn}(eB)$ у рівнянні (3.39) є або електронним, або дірочним, залежно від відносного знаку Δ і eB.

Виродження рівнів Ландау з $n = \pm1, \pm2, \ldots$, що задані рівняннями (3.36) і (3.39), дорівнює $|eB|/(\pi\hbar)$ (на одиничну площу і на один спін), тоді як виродження найнижчого рівня Ландау з $n = 0$ для (3.36) дорівнює $|eB|/(2\pi\hbar)$, а для (3.39) дорівнює $|eB|/(\pi\hbar)$.

Як вже згадувалось у Вступі, "релятивістський" масштаб енергій $L(B) = \sqrt{2|eB|\hbar v_F^2/c}$, який визначає відстань між рівнями Ландау у графені у тисячі разів більший ніж відповідна відстань $\hbar\omega_c = e\hbar B/mc$ у звичайних матеріалах. Якщо обрати $m = m_e$, то енергія $\hbar\omega_c$ дорівнює зеєманівському розщепленню, $\hbar\omega_c[\mathrm{K}] = \mu_B B = 1.34B[\mathrm{T}]$, оскільки відношення магнетона Бора до постійної Больцмана дорівнює $\mu_B/k_B = 0.67\mathrm{K}\cdot\mathrm{T}^{-1}$. У випадку графена ми маємо

$$\begin{aligned}\Delta E = E_1(\Delta=0) - E_0(\Delta=0) = L(B) &\approx 421\sqrt{B[\mathrm{T}]}\mathrm{K} \\ &\approx 36.3\sqrt{B[\mathrm{T}]}\mathrm{meV},\end{aligned} \tag{3.40}$$

якщо для Фермі швидкості v_F обрати значення $v_F \approx 10^6\,\mathrm{m/s}$. Це, наприклад, відповідає $\Delta E \approx 2800\,\mathrm{K}$ при $B = 45\,\mathrm{T}$, що і робить можливим спостереження КЕХ у графені навіть при кімнатній температурі.

3.7 Задачі

1. Прокласифікувати різні типи дираківських $M_D = \sigma_{0,3} \otimes \Gamma$ за їх трансформаційними властивостями при $\mathcal{P}$, $\mathcal{T}$ та $\mathcal{C}$ перетвореннях. (Перевірити Таблицю 3.1.)

2. Перевірити оцінку (3.40).
   Зауваження. Зручно використати, що постійна Планка дорівнює $\hbar = 6.5822 \times 10^{-16}\,\mathrm{eVs}$, $(1\,\mathrm{eV} = 1.1604 \times 10^4\,\mathrm{K})$, а квант магнітного потоку $\Phi_0 = \frac{hc}{2e} = 2.07 \times 10^5\,\mathrm{T\AA}^2$.

3. **Осциляції густини станів у електронному газі та графені.** Розібрати вивід виразів для осциляцій густини станів у електронному газі та графені. Порівняти відповіді.

(a) У нерелятивістському випадку запізнююча функція Гріна дорівнює

$$G^R(\epsilon + i\Gamma) = N_0\omega_c \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\epsilon - \omega_c(n+\frac{1}{2}) + i\Gamma},$$

де $N_0 = m/2\pi$ – густина станів у електронному газі (на один спін, див. Задачу 1 (а) з попереднього Розділу), $\omega_c = eB/mc$ – циклотронна частота (ми поклали $\hbar = k_B = 1$), а Γ – ширина рівнів Ландау. У цьому виразі ми також поклали $\mu = 0$ і знехтували зеєманівським розщепленням.

Таким чином, у границі $\Gamma \to 0$ густина станів дорівнює

$$\begin{aligned} D_0(\epsilon) &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R(\epsilon + i\Gamma) = N_0\omega_c \sum_{n=0}^{\infty} \delta\left(\epsilon - \omega_c(n+\frac{1}{2})\right) \\ &= N_0\omega_c \frac{d}{d\epsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \theta\left(\epsilon - \omega_c(n+\frac{1}{2})\right), \end{aligned} \tag{3.41}$$

де $\theta(x)$ – це сходинкова функція. Використавши формулу Пуассона

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n+\frac{1}{2}) = \int_0^{\infty} f(x)dx + 2\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k \int_0^{\infty} f(x)\cos(2\pi x k)dx \tag{3.42}$$

ми одержуємо відповідь

$$D_0(\epsilon) = N_0 \frac{d}{d\epsilon}\left[\epsilon + \omega_c \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\pi k} \sin\left(\frac{2\pi k\epsilon}{\omega_c}\right)\right], \quad \epsilon > 0. \tag{3.43}$$

Підкреслимо, що ми не враховували зеєманівське розщеплення і рівняння (3.43) відповідає густині станів на один спін.

(b) У релятивістському випадку, якщо відразу перейти до границі $\Gamma \to 0$, то густина станів дорівнює

$$D_0(\epsilon) = \frac{eB}{\pi}\Big[\delta(\epsilon-\Delta)+\delta(\epsilon+\Delta) + 2\sum_{n=1}^{\infty}\left(\delta(\epsilon-M_n)+\delta(\epsilon+M_n)\right)\Big]. \tag{3.44}$$

У (3.44) ми вже врахували суму по двом $\mathbf{K}$ точкам та спінам, оскільки у відносно малих полях зеєманівське розщеплення набагато менше за відстань між рівнями Ландау. Абсолютні значення енергій рівнів Ландау дорівнюють $M_n = \sqrt{\Delta^2 + 2eBn}$, де для скорочення ми поклали $\hbar = c = v_F = 1$. Далі, подібно до нерелятивістського випадку (3.41), суму (3.44) зручно записати у вигляді суми по θ- функціям:

$$\begin{aligned} D_0(\epsilon) &= \frac{2eB|\epsilon|}{\pi}\left[\delta(\epsilon^2-\Delta^2)+2\sum_{n=1}^{\infty}\delta(\epsilon^2-\Delta^2-2eBn)\right] \\ &= \frac{eB}{\pi}\mathrm{sgn}(\epsilon)\frac{d}{d\epsilon}\left[\theta(\epsilon^2-\Delta^2)+2\sum_{n=1}^{\infty}\theta(\epsilon^2-\Delta^2-2eBn)\right]. \end{aligned} \tag{3.45}$$

Нагадаємо, що множник $eB/(\pi) \to 4eB/(2\pi\hbar c)$ відповідає густині рівнів Ландау. У даному випадку зручно використати формулу Пуассона записану у наступному вигляді

$$\frac{1}{2}F(0)+\sum_{n=1}^{\infty}F(n) = \int_0^{\infty}F(x)dx + 2\mathrm{Re}\sum_{k=1}^{\infty}\int_0^{\infty}F(x)e^{2\pi ikx}dx, \tag{3.46}$$

що дає відповідь [S.G. Sharapov, V.P. Gusynin, and H. Beck, Phys. Rev. B **69**, 075104 (2004)]

$$\begin{aligned} D_0(\epsilon) &= \frac{1}{\pi}\mathrm{sgn}(\epsilon)\frac{d}{d\epsilon}\Big\{\theta(\epsilon^2-\Delta^2) \\ &\times\left[\epsilon^2-\Delta^2+2eB\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{\pi k}\sin\left(\frac{\pi k(\epsilon^2-\Delta^2)}{eB}\right)\right]\Big\}. \end{aligned} \tag{3.47}$$

4. Взагалі, осцилюючий фактор, який входить у густину станів, або в інші величини, що описують квантові магнітні осциляції, можна записати у наступній формі

$$D_{\rm osc} \sim \sum_{k=1}^{\infty} \cos\left[2\pi k\left(\frac{B_F}{B}+\frac{1}{2}+\beta\right)\right], \tag{3.48}$$

де B_F – це частота осциляцій по $1/B$, а β – це їх фаза ($0<\beta<1$). Видно, що значення фази $\beta=0$ (або $\beta=1$) відповідає нерелятивістському 2D електронному газу (3.43), тоді як дираківські ферміони у (3.47) відповідають значенню $\beta=1/2$.

Виміри фази осциляцій Шубнікова - де Гааза у графені [7, 8] *показали, що* $\beta=1/2$ *що стало одним із трьох доказів дираківської природи носіїв у графені.*

5. **Магнітні осциляції у електронному газі та графені.**

   (a) Одержати формулу Ліфшиця-Косевича для квантових осциляції намагніченності у двовимірному випадку у загальному вигляді. З точністю до коефіцієнтів, які треба одержати, її вигляд повинен бути наступним:

$$\tilde{M} \propto \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l}\psi(\lambda l)e^{-\frac{\Gamma}{\hbar\omega_c}2\pi l}\sin\left(2\pi l\left[\frac{c}{e\hbar}\frac{S(\varepsilon)}{2\pi H}-\gamma\right]\right) \times\cos\left(2\pi l\frac{\mu_B H}{\hbar\omega_c}\right), \tag{3.49}$$

   де $S(\varepsilon)$ – площа орбіти квазічастинки у імпульсному просторі, $\psi(z)=z/\sinh z$ – температурний фактор з $\lambda=2\pi^2 Tcm^*/(\hbar eH)$ та циклотронною масою $m^*=1/(2\pi)\partial S/\partial\varepsilon$, $\omega_c=eH/(m^*c)$ – циклотронна частота та Γ – ширина рівнів Ландау.

   (b) Показати, що у випадку електронного газу з параболічною дисперсією та графена з умови квантування Онзагера

$$S(\varepsilon)=(n+\gamma)2\pi\hbar\frac{eH}{c}$$

   випливають вирази для рівнів Ландау, наведені у другому рядку Таблиці 3.2. (Значення фази γ, яке квазікласичним наближенням не фіксується, наведено у третьому

рядку. Його значення можна знайти з точного розгляду, який зроблено у попередній задачі.) Далі одержати інші параметри за допомогою яких можна записати формулу Ліфшиця-Косевича для електронного газу та графена [I.A. Luk'yanchuk and Y. Kopelevich, Phys. Rev. Lett. **93**, 166402 (2004)].

Табл. 3.2: Залежність енергії ε від імпульсу $\mathbf{p}$, квантування Ландау, фази, площі квазікласичних орбіт та параметри осциляцій де Гааза - ван Альфена для масивних (Normal) та безмасових (Dirac) ферміонів.

	Normal	Dirac
$\varepsilon(\mathbf{p})$	$p^2/2m$	$\pm v_F\lvert p\rvert$
$\varepsilon(n)$	$(e\hbar/mc)\,H(n+\frac{1}{2})$	$\pm(2v_F^2 e\hbar/c)^{1/2}(Hn)^{1/2}$
γ	$1/2$	0
$S(\varepsilon)$	$2\pi m\varepsilon$	$\pi\varepsilon^2/v_F^2$
m^*	m	ε/v_F^2
ω_c	eH/cm	$ev_F^2 H/c\varepsilon$
λ	$2\pi^2 cmT/e\hbar H$	$2\pi^2 cT\varepsilon/\hbar e v_F^2 H$

(c) Зазвичай циклотронну масу m^* знаходять із вимірів залежності температурного фактора від T. Показати, що з одержаного виразу для m^* та з рівняння (2.53) випливає, що у графені циклотронна маса *залежить від концентрації носіїв* кореневим чином. Експериментальне спостереження саме такої залежності [7, 8] стало одним із трьох доказів діраківської природи носіїв у графені.

Розділ 4

Клейнівське тунелювання

Як ми бачили в попередніх розділах квазічастинкові електронні збудження поблизу $\mathbf{K}_{\pm}$ точок описуються ефективним рівнянням Дірака в $2+1$ вимірі. Релятивістськіподібна форма квазічастинкового електронного спектру істотно відрізняє графен від інших більш традиційних ефективно двовимірних реалізацій електронного газу і призводить до дуже цікавих фізичних наслідків. В цьому розділі ми розглянемо один із таких характерних наслідків, а саме клейнівське тунелювання.

Клейнівське тунелювання в графені відіграє дуже важливу роль. Ми побачимо, що саме клейнівське тунелювання відповідальне за підтримання високої мобільності носіїв заряду в графені незважаючи на неминуче присутні неоднорідності. З іншої сторони, клейнівське тунелювання не дозволяє створення в графені аналогу стандартного напівпровідникового транзистора, який базується на n-p-n з'єднанні, тому що на відміну від кремнія таке з'єднання в графені не можливо закрити.

4.1 Парадокс Клейна в квантовій релятивістській фізиці

Як добре відомо, в квантовій механіці на відміну від класичної механіки частинка може тунелювати крізь потенціальний бар'єр чия висота перевищує енергію частинки. Однак ймовірність тунелювання дуже швидко, експоненційно, придушена із збільшенням висоти

потенціального бар'єру. В квазікласичному наближенні ймовірність тунелювання крізь бар'єр чия форма визначається функцією $U(x)$ і точками повороту x_i $(i = 1, 2)$, які знаходяться з рівняння $E = U(x_i)$, де E - енергія частинки, дорівнює

$$T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx\sqrt{2m[U(x) - E]}\right), \tag{4.1}$$

де m – маса частинки.

Оскар Клейн (Oscar Klein) у 1929 році розглянув тунелювання електрона крізь потенціальний бар'єр використовуючи релятивістське рівняння Дірака і показав, що якщо eU є порядка маси електрона mc^2, то бар'єр є майже прозорим. Більш того, якщо висота бар'єру прямує до нескінченності, то ймовірність тунелювання

$$T_\infty = \frac{E^2 - m^2c^4}{E^2 - \frac{1}{2}m^2c^4}\,. \tag{4.2}$$

Очевидно, що ймовірність тунелювання є порядка одиниці для $E - mc^2$ порядка mc^2 і прямує до одиниці в ультрарелятивістській границі

$$E \gg mc^2\,. \tag{4.3}$$

Таким чином, релятивістські квантові частинки можуть тунелювати з великою ймовірністю крізь потенціальний бар'єр достатньої висоти. Безумовно такий результат є парадоксальним з точки зору звичайної нерелятивістської квантової механіки і тому він отримав назву парадокс Клейна.

Згодом було з'ясовано, що фізика пов'язана з парадоксом Клейна є досить багатою. Зокрема виявилося, що якщо потенціальний бар'єр є достатньо сильним, він може випромінювати позітрони і електрони. Однак випромінення є нестаціонарним процесом і з часом припиняється коли випроміненні частинки достатньо екранують потенціальний бар'єр. Між тим, тунелювання без експоненційного придушення може мати місце навіть якщо потенціальний бар'єр є недостатньо сильним, щоб спонтанне народження частинок відбувалося. Таким чином, клейнівське тунелювання є властивостю релятивістських хвильових рівнянь і не є явищем обов'язково пов'язаним із процесом спонтанного народження частинок зовнішнім потенціалом. Слід відзначити, що фізика парадоксу Клейна має багато спільного з міжзонним тунелюванням в теорії напівпровідників.

Внаслідок того, що маса електрона $0.51\,\mathrm{MeV/c^2}$ є дуже значною з точки зору електричних потенціалів створених в лабораторії, пара-

докс Клейна в квантовій електродинаміці безпосередньо не спостерігався. Як ми бачили в попередніх розділах, електронні квазічастинкові збудження в графені описуються ефективним безмасовим двовимірним рівнянням Дірака. Внаслідок відсутності маси для квазічастинкових електронних збуджень в графені як завгодно слабкий потенціальний бар'єр може бути використаний для дослідження парадоксу Клейна в графені. Відповідні експериментальні дослідження були проведені і вони підтвердили всі основні положення парадоксу Клейна в графені.

Слід зауважити, що клейнівське тунелювання робить дуже непростою задачу локалізації електронів в графені, що є суттєвою перешкодою на шляху створення графеного польового транзистора. З іншого боку, присутність клейнівського тунелювання означає, що неоднорідності електронної густини, які завжди присутні в реальних графенових зразках не призводять до локалізації електронів і їх вплив на мобільність електронів не є суттєвим.

4.2 Тунелювання крізь потенціальний бар'єр в графені

В цьому розділі ми розглянемо тунелювання електронів на потенціальному бар'єрі прямокутної форми [27, 28]. Гамільтоніан задачі визначається наступним рівнянням

$$H = v_F \boldsymbol{\tau} \hat{\mathbf{p}} + U(\mathbf{r}) \,, \tag{4.4}$$

де форма бар'єру задається рівнянням (див. Рис. 4.1 зверху)

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} V_0 \,, & 0 < x < D, \\ 0 \,, & x < 0 \quad \text{або} \quad x > D. \end{cases} \tag{4.5}$$

Ми припускаємо, що хвиля падає на бар'єр під кутом ϕ до вісі x (див. Рис. 4.1 знизу). Розв'язки рівнянь шукаємо у вигляді плоских хвиль

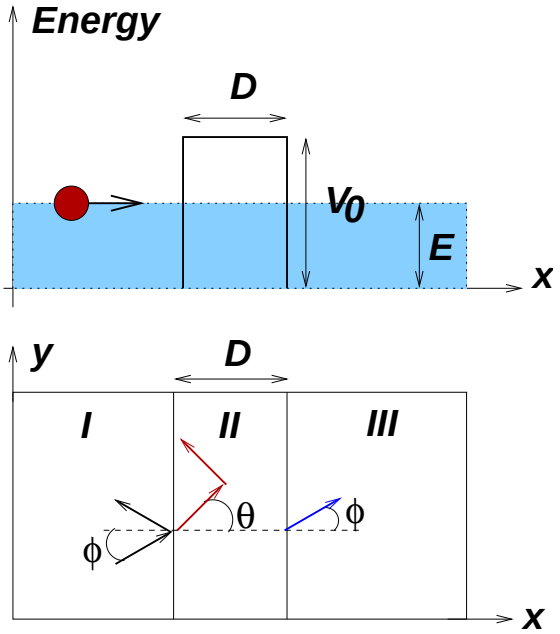


Рис. 4.1: Клейнівське тунелювання у графені (рисунок з [14]). Зверху: схема розсіяння дираківських електронів прямокутним потенціалом. Знизу: означення кутів ϕ та θ.

в трьох областях

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{ik_x x + ik_y y} + r \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-ik_x x + ik_y y}, & x < 0, \\ a \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{iq_x x + ik_y y} + r \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-iq_x x + ik_y y}, & 0 < x < D, \\ t \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{ik_x x + ik_y y}, & D < x\,. \end{cases} \tag{4.6}$$

Очевидно в області зліва від бар'єра $x < 0$ маємо електронну хвилю з хвильовим вектором $\mathbf{k}$, яка падає на бар'єр і хвилю, що відбилася

від бар'ру. В області $x > D$ маємо хвилю, що пройшла крізь бар'єр. Далі $q_x = \sqrt{(E-V_0)^2/\hbar^2 v_F^2 - k_y^2}$, $\theta = \arctan\frac{k_y}{q_x}$ – кут заломлення, $s = \mathrm{sgn}(E)$, $s' = \mathrm{sgn}(E-V_0)$, $|r|^2$ визначає ймовірність відбиття від бар'єру, а $|t|^2$ проходження крізь нього.

Стандартним чином, зшиваючи хвильові функції знайдені в різних областях в точках $x = 0$ і $x = D$ (в силу симетрії задачі хвильові функції мають однакову залежність від y координати і тому задача є ефективно одновимірною) ми отримуємо наступну систему алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned} 1 + r &= a + b\,, \\ se^{i\phi} - sre^{-i\phi} &= s'(ae^{i\theta} - be^{-i\theta})\,, \\ ae^{iq_xD} + be^{-iq_xD} &= te^{ik_xD}\,, \\ s'ae^{iq_xD+i\theta} - s'be^{-iq_xD-i\theta} &= ste^{ik_xD+i\phi}\,. \end{aligned} \tag{4.7}$$

Далі знаходимо її розв'язок

$$a = \frac{e^{i(k_x-q_x)D}(s'e^{-i\theta} + se^{i\phi})}{2s'\cos\theta}\,t\,, \tag{4.8}$$

$$b = \frac{e^{i(k_x+q_x)D}(s'e^{i\theta} - se^{i\phi})}{2s'\cos\theta}\,t\,, \tag{4.9}$$

де

$$t = \frac{2ss'\cos\phi\cos\theta e^{-ik_xD}}{ss'\left[\,e^{-iq_xD}\cos(\theta+\phi) + e^{iq_xD}\cos(\theta-\phi)\,\right] - 2i\sin(q_xD)} \tag{4.10}$$

є амплітуда хвилі, що пройшла крізь бар'єр і

$$r = \frac{2e^{i\phi}(\sin\phi - ss'\sin\theta)\sin(q_xD)}{ss'\left[\,e^{-iq_xD}\cos(\theta+\phi) + e^{iq_xD}\cos(\theta-\phi)\,\right] - 2i\sin(q_xD)} \tag{4.11}$$

є амплітуда хвилі, що відбилася від бар'єру. Для коефіцієнту проходження крізь бар'єр маємо

$$\begin{aligned} T = |t|^2 = 4\cos^2\phi\cos^2\theta \times \big[\,(\,\cos(\theta+\phi) + \cos(\theta-\phi)\,)^2\cos^2(q_xD) \\ +(\,\cos(\theta-\phi) - \cos(\theta+\phi) - 2ss'\,)^2\sin^2(q_xD)\,\big]^{-1}\,. \end{aligned} \tag{4.12}$$

Приклад залежності $T(\phi)$ показано на Рис. 4.2.

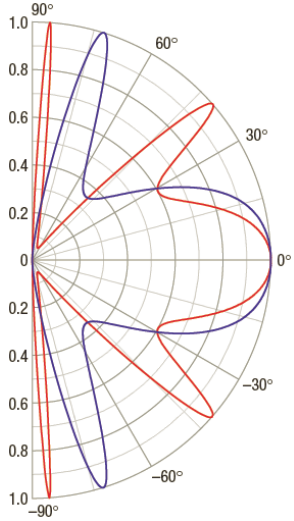


Рис. 4.2: Імовірність тунелювання T через бар'єр затовшки 100 nm як функція кута падіння ϕ. Концентрація електронів n за межами бар'єру дорівнює $0.5 \times 10^{12}\,\mathrm{cm}^{-1}$. Усередині бар'єру концентрація дірок p дорівнює $1 \times 10^{12}\,\mathrm{cm}^{-2}$ та $3 \times 10^{12}\,\mathrm{cm}^{-2}$ для красної та синьої кривих, відповідно. Це відповідає енергії Фермі E падаючих електронів ≈ 80 meV та довжині їх хвилі $\lambda \approx 50$ nm. Висота бар'єру V_0 дорівнює 200 meV та 100 meV для красної та синьої кривих, відповідно (рисунок з [27]).

У випадку коли бар'єр набагато перевищує енергію електрона $|V_0| \gg E$ ми маємо

$$T = \frac{\cos^2\phi}{1 - \sin^2\phi\cos^2(q_x D)}\,. \tag{4.13}$$

Очевидно, що бар'єр є прозорим (!) у випадку $\phi = 0$, тобто коли електрон рухається по нормалі до бар'єру. Бар'єр залишається також прозорим за умови резонансу $q_x D = \pi n$, $n = 0, \pm 1, ...$

4.3 Електронні властивості і транспорт крізь n-p перехід в графені

У попередньому параграфі ми розглядали тунелювання електронів на потенціальному бар'єрі найпростішої прямокутної форми коли потенціал $U(\mathbf{r})$ є константою у трьох відповідних областях. Корисно і важливо розглянути більш загальний випадок коли потенціал суттєво залежить від $\mathbf{r}$. Внаслідок того, що графен є двовимірним безщілинним напівпровідником, густина носіїв заряду в ньому може бути відносно легко контрольована напругою на зовнішних затворах і в залежності від напруги на затворах змінюватись від електронної до діркової (див. Задачу 2 із Розділу 2). Зрозуміло, що такий випадок відповідає n-p переходу.

Ми будемо моделювати n-p перехід в графені за допомогою електростатичного потенціалу

$$U(\mathbf{r}) = u(x) = v_F p_F \eta(x/d), \tag{4.14}$$

де d визначає характерний просторовий масштаб n-p переходу, p_F є імпульсом Фермі електронного і діркового газів в областях далеких від переходу. Далі $\eta(\pm\infty) = \pm 1$, $\eta'(0) = 1$ і лінія $x = 0$ відокремлює p-область при $x > 0$ від n-області при $x < 0$. Ми будемо аналізувати гладкий n-p перехід для $p_F d > 1$, тобто коли характерний масштаб d є більшим від довжини електронної хвилі. Детально ця задача була розглянута в роботі [28]. Але перед тим, як ми розпочнемо аналіз задачі ми розглянемо випадок нормального падіння на бар'єр, тобто під прямим кутом, який має точний розв'язок для будь-якого потенціалу $u(x)$.

Для $p_y = 0$ із рівнянь (2.40) і (2.41) маємо наступне рівняння

$$[\, v_F \hat{p}_x \tau_x + u(x) - E \,]\ \Psi(x) = 0\,. \tag{4.15}$$

Це рівняння може бути легко діагоналізовано. Дійсно підставляючи

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \eta_1(x) + \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \eta_2(x)$$

в рівняння (4.15) для функцій $\eta_{1,2}$ ми маємо наступні рівняння

$$[\pm v_F \hat{p}_x + u(x) - E \,]\ \eta_{1,2}(x) = 0\,. \tag{4.16}$$

Ці рівняння можна дуже легко проінтегрувати. Ми знаходимо

$$\eta_{1,2}(x) = C_{1,2} \exp\left(\pm \frac{i}{v_F \hbar} \int_{x_0}^{x} [\, E - u(x') \,]\, dx' \right). \tag{4.17}$$

Прийнявши до уваги вираз (4.14) бачимо, що функція η_1 при $E > v_F p_F$ описує електронну хвилю, яка падає зліва на n-p перехід і без відбиття проходить крізь перехід. Для $-v_F p_F < E < v_F p_F$ ця функція описує діркову при $x > 0$ і електронну при $x < 0$ хвилі, які падають на перехід відповідно зліва і справа. Для $E < -v_F p_F$ функція η_1 описує дірку, яка проходить крізь перехід. Функція η_2 може бути отримана із функції η_1 за допомогою перетворення обернення у часі і таким чином описує обернений у часі процес. Відсутність суперпозиції падаючої і відбитої хвиль в цих розв'язках (порівняйте з (4.6)) означає, що для потенціалу будь-якої форми у випадку нормального падіння на бар'єр для квазіелектронів в графені має місце *повне проходження* крізь бар'єр!

4.3.1 Квазікласичне наближення

Знову розглянемо гамільтоніан, що описує квазічастинкові збудження поблизу **K** точки

$$\hat{H} = v_F \hat{\mathbf{p}} \boldsymbol{\tau} + U(\mathbf{r}) \,, \tag{4.18}$$

де $U(\mathbf{r})$ – електростатичний потенціал. Як було зазначено вище, для p-n переходу в графені нам достатньо розглянути випадок коли потенціал залежить лише від координати x, тобто $U(\mathbf{r}) = u(x)$. Тоді для хвильової функції $\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\frac{p_y y}{\hbar}} \tilde{\Psi}(x)$ гамільтоніан (4.18) набуває наступного вигляду

$$\hat{H} = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i p_y \\ \hat{p}_x + i p_y & 0 \end{pmatrix} + u(x) \,. \tag{4.19}$$

Гамільтоніан (4.19) описує одночасно електронні і діркові збудження.

У цьому параграфі ми розглянемо квазікласичне наближення для квазічастинкових збуджень в графені, які описуються гамільтоніаном (4.19). Квазікласичний розклад може бути проведен у будь-якому порядку по константі Планка $\hbar$. В нашому аналізі ми обмежемось нульовим і першим порядками розкладу і отримаємо скалярні гамільтоніани, які окремо описують електрони і дірки. Знайдені результати будуть використані у наступному параграфі для знаходження амплітуд відбиття і проходження крізь n-p перехід у випадку точно розв'язуваної задачі з лінійним потенціалом $u(x) = \alpha x$.

Покажемо яким чином гамільтоніан типу (4.19) може бути діагоналізован у квазікласичному наближенні. Для цього розглянемо наступну задача на власні значення

$$\hat{H}(x, -i\hbar \frac{d}{dx}) \tilde{\Psi}(x) = E \tilde{\Psi}(x) \,, \tag{4.20}$$

де ми вважаємо, що гамільтоніан є впорядкованим оператором, так що спочатку діє оператор d/dx, а вже потім x. Слід відзначити, що ми розглядаємо випадок коли гамільтоніан є матричним оператором. Визначимо вектор-стовбчик χ і скалярну хвильову функцію $\psi(x)$ наступним чином

$$\tilde{\Psi}(x) = \chi(x, -i\hbar\frac{d}{dx})\,\psi(x)\,. \tag{4.21}$$

Далі ми хочемо, щоб ψ задовольняла наступній задачі на власні значення

$$L(x, -i\hbar\frac{d}{dx})\,\psi(x) = E\Psi(x)\,, \tag{4.22}$$

де $L(x, -i\hbar\frac{d}{dx})$ є ефективним ермітовим скалярним гамільтоніаном. З рівнянь (4.20) і (4.22) випливає

$$(\hat{H}\chi - \chi L)\,\psi(x) = 0\,. \tag{4.23}$$

Очевидно, останнє рівняння буде виконуватись для будь-якої $\psi(x)$, якщо справедлива наступна операторна рівність

$$\hat{H}(x, -i\hbar\frac{d}{dx})\,\chi(x, -i\hbar\frac{d}{dx}) = \chi(x, -i\hbar\frac{d}{dx})\,L(x, -i\hbar\frac{d}{dx})\,. \tag{4.24}$$

Для того, щоб розв'язати це рівняння ми використаємо метод символів операторів [29], згідно з яким

$$symb[\,A(x, -i\hbar\frac{d}{dx})\,B(x, -i\hbar\frac{d}{dx})\,] = A(x, p_x - i\hbar\frac{d}{dx})\,B(x, p_x)\,.$$

В нашому випадку для (4.24) ми маємо

$$\hat{H}(x, p_x - i\hbar\frac{d}{dx})\,\chi(x, p_x) = \chi(x, p_x - i\hbar\frac{d}{dx})\,L(x, p_x)\,. \tag{4.25}$$

Розвиваючи це рівняння в нульовому порядку по $\hbar$ ми знаходимо рівняння

$$\hat{H}(x, p_x)\,\chi_0(x, p_x) = L_0(x, p_x)\,\chi_0(x, p_x)\,, \tag{4.26}$$

Важливо, що L_0 є скалярним оператором. Оператор $\hat{H}(x, p_x)$ є матрицею чиї елементи не є операторами. Тому рівняння (4.26) визначає просту задачу з лінійної алгебри на власні вектори і власні значення. Для оператора (4.19) ми легко знаходимо два власних вектори $\chi_0^{\pm}$ і відповідні $L_0^{\pm}$

$$L_0^{\pm}(x, p_x) = \pm v_F|\mathbf{p}| + u(x)\,, \qquad \chi_0^{\pm}(x, p_x) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{-i\phi_p} \\ \pm 1 \end{pmatrix}\,, \tag{4.27}$$

де $\phi_p = \arctan(p_y/p_x)$. Очевидно, що $\chi_0^{\pm}$ описують електронні і діркові квазічастинкові збудження відповідно.

Нам необхідно знайти також перші поправки χ_1 і L_1 по $\hbar$. Із рівнянь (4.25) і (4.26) випливає, що

$$(\hat{H}(x,p_x) - L_0)\,\chi_1 = i\frac{\partial \hat{H}(x,p_x)}{\partial p_x}\frac{\partial \chi_0}{\partial x} - i\frac{\partial \chi_0}{\partial p_x}\frac{\partial L_0}{\partial x} + \chi_0 L_1\,. \tag{4.28}$$

Внаслідок того, що $\hat{H}(x,p_x)$ є ермітовою матрицею, домножаючи рівняння (4.28) на $\chi_0^{\dagger}$ ми переконуємось, що ліва частина дорівнює нулю і тоді

$$L_1 = -i\chi_0^{\dagger}\frac{\partial \hat{H}(x,p_x)}{\partial p_x}\frac{\partial \chi_0}{\partial x} + i\chi_0^{\dagger}\frac{\partial \chi_0}{\partial p_x}\frac{\partial L_0}{\partial x}\,, \tag{4.29}$$

де ми використали $\chi_0^{\dagger}\chi_0 = 1$. Оскільки χ_0 в нашому випадку не залежить від x ми маємо

$$L_1 = i\chi_0^{\dagger}\frac{\partial \chi_0}{\partial p_x}\frac{\partial L_0}{\partial x} = -\frac{p_y u'(x)}{2\mathbf{p}^2}\,. \tag{4.30}$$

Рівняння

$$(L_0^{\pm} + L_1^{\pm})\psi^{\pm} = E\psi^{\pm} \tag{4.31}$$

для скалярних функцій $\psi^{\pm}$, які описують електронні і діркові збудження в квазікласичному наближенні розв'язуються стандартним чином. Хвильові функції шукаються у вигляді $\psi^{\pm} = e^{iS^{\pm}(x)/\hbar}A^{\pm}(x)$. Тоді рівняння (4.31) набуває наступного вигляду $L = L_0 + L_1$

$$L(x, dS/dx - i\hbar d/dx)A(x) = EA(x)\,. \tag{4.32}$$

Це рівняння може бути розвинуте в ряд по $\hbar$. Використовучи $A^{\pm}(x) = A_0^{\pm}(x) + \hbar A_1^{\pm}(x)$ в нульовому порядку по $\hbar$ ми маємо добре відоме в класичній механіці рівняння Гамільтона-Якобі

$$L_0^{\pm}(x, dS^{\pm}/dx) = E \tag{4.33}$$

Розв'язки рівнянь (4.33) визначають дії $S^{\pm}(x)$ для квазіелектронів і дірок відповідно.

В першому порядку по $\hbar$ із (4.32) маємо наступне рівняння

$$-i\frac{\partial L_0^{\pm}}{\partial p_x}\frac{\partial A_0^{\pm}}{\partial x} + L_1^{\pm}A_0^{\pm} - \frac{i}{2}\frac{\partial^2 L_0^{\pm}}{\partial p_x^2}\frac{\partial^2 S^{\pm}}{\partial x^2} = 0\,, \tag{4.34}$$

де всі величини повинні бути обчислені для $p_x = dS^{\pm}/dx$. Домножуючи (4.34) на $A_0^{\pm}$ це рівняння може переписане наступним чином

$$-\frac{i}{2}\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial L_0^{\pm}}{\partial p_x}A_0^{\pm}\right)+\left(L_1^{\pm}+\frac{i}{2}\frac{\partial^2 L_0^{\pm}}{\partial p_x \partial x}\right)(A_0^{\pm})^2=0\,. \tag{4.35}$$

Відзначимо, що повна похідна в першому доданку діє як на x так і на $p_x = dS^{\pm}/dx$. Останнє рівняння може бути точно розв'язано, що дає

$$A_0^{\pm}=|\frac{\partial L_0^{\pm}}{\partial p_x}|^{-1/2}\exp\left[-i\int dx\left(\frac{\partial L_0^{\pm}}{\partial p_x}\right)^{-1}\left(L_1^{\pm}+\frac{i}{2}\frac{\partial^2 L_0^{\pm}}{\partial p_x\partial x}\right)\right]. \tag{4.36}$$

В нашому випадку ми знаходимо

$$|\frac{\partial L_0^{\pm}}{\partial p_x}|=\frac{v_F|p_x|}{|\mathbf{p}|}=\frac{\left(\,[E-u(x)\,]^2/v_F^2-p_y^2\,\right)^{1/2}}{|E-u(x)|}\,. \tag{4.37}$$

Диференціюючи рівняння Гамільтона-Якобі по x ми маємо

$$\frac{\partial L_0^{\pm}}{\partial p_x}\frac{dp_x}{dx}+\frac{\partial L_0^{\pm}}{\partial x}=0\,. \tag{4.38}$$

Остаточно ми знаходимо

$$\psi^{\pm}=\frac{C\,|E-u(x)|^{1/2}}{\left[\,(E-u(x))^2/v_F^2-p_y^2\,\right]^{1/4}}\,e^{iS^{\pm}(x)/\hbar+i\phi_p^{\pm}/2}\,, \tag{4.39}$$

де

$$S^{\pm}(x)=\pm\int_{x_0}^{x}\sqrt{(u(x')-E)^2/v_F^2-p_y^2}\,dx'$$

і

$$\phi^{\pm}(x)=\arg\left(\pm\sqrt{(u(x)-E)^2/v_F^2-p_y^2}+ip_y\right).$$

В задачі розсіяння для електрона падаючого зліва на перехід маємо

$$\begin{aligned}\psi=&\frac{C\,|E-u(x)|^{1/2}}{\left[\,(E-u(x))^2/v_F^2-p_y^2\,\right]^{1/4}}\\&\times\left(e^{iS^{+}(x)/\hbar+i\phi_p^{+}/2}+r(p_y)e^{-iS^{+}(x)/\hbar+i\phi_p^{-}/2-i\pi/2}\right),\end{aligned} \tag{4.40}$$

де $r(p_y)$ - коефіцієнт відбиття. Використовуючи χ_0^+ отримуємо наступну хвильову функцію в першому порядку квазікласичного розкладу (порівняйте цю функцію з точним розв'язком (4.6) для $U(\mathbf{r})$ заданого рівнянням (4.5)):

$$\Psi = \frac{C\,|E-u(x)|^{1/2}}{\left[(E-u(x))^2/v_F^2 - p_y^2\right]^{1/4}} \times \left[\begin{pmatrix} e^{iS^+(x)/\hbar - i\phi_p^+/2} \\ e^{iS^+(x)/\hbar + i\phi_p^+/2} \end{pmatrix} + r(p_y) \begin{pmatrix} e^{-iS^+(x)/\hbar - i\phi_p^-/2 - i\pi/2} \\ e^{-iS^+(x)/\hbar + i\phi_p^-/2 - i\pi/2} \end{pmatrix} \right]. \tag{4.41}$$

4.3.2 Точно розв'язувана задача

Розглянемо тепер електронні властивості p-n переходу, який визначається потенціалом $U(\mathbf{r}) \approx \alpha x$, де $\alpha = v_F p_F/d$. Такий вибір потенціалу обумовлений між усім іншим тим, що для нього задача має точний розв'язок. Знову розглянемо гамільтоніан, що описує квазічастинкові збудження поблизу **K** точки

$$(v_F \mathbf{p}\boldsymbol{\tau} + u(x) - E)\,\Psi = 0\,. \tag{4.42}$$

Діючи зліва на рівняння (4.42) оператором $v_F\mathbf{p}\tau - u(x) + E$, ми отримуємо

$$\begin{aligned} &(v_F\mathbf{p}\tau - u(x) + E)(v_F\mathbf{p}\tau + u(x) - E)\Psi \\ &= (v_F^2\mathbf{p}^2 - (u(x)-E)^2 - i\hbar v_F \tau_x u'(x))\Psi = 0\,. \end{aligned} \tag{4.43}$$

Хоча це рівняння має форму рівняння Шредінгера, однак воно має також істотні відмінності. По-перше, його ефективний потенціал є комплексним, а по-друге, він залежить від енергії частинки.

Завдяки тому, що рівняння (4.43) містить лише одну τ_x матрицю, це рівняння може бути легко діагоналізовано. Представляючи Ψ у вигляді суми

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ip_y y/\hbar}\eta_1(x) + \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{ip_y y/\hbar}\eta_2(x)$$

для $\eta_{1,2}$ ми одержуємо наступні рівняння

$$\left(\hbar^2 v_F^2 \frac{d^2}{dx^2} + (u(x)-E)^2 - v_F^2 p_y^2 \pm \hbar v_F i u'(x)\right)\eta_{1,2}(x) = 0\,. \tag{4.44}$$

Функції η_1 і η_2 не є незалежними. Зв'язок між ними визначається рівнянням (4.42). Наприклад, функція η_2 пов'язана з функцією η_1 наступним чином

$$\eta_2 = \frac{1}{p_y}\left(\hbar\frac{d}{dx} + i(u(x) - E)/v_F\right)\eta_1\,. \tag{4.45}$$

Зрозуміло, що для потенціалу $u(x) = \alpha x$ зручно позбутися залежності від E у функціях $\eta_{1,2}$ за допомогою переозначення $x \to x + E/\alpha$. Далі визначимо нові безрозмірні змінні $x' = \sqrt{\alpha}\,x/(\sqrt{\hbar v_F})$ і $p'_y = \sqrt{v_F}p_y/\sqrt{\hbar\alpha}$. Тоді рівняння (4.44) для η_1 набуває вигляд (для зручності ми не використовуємо значки $'$ над відповідними величинами)

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + x^2 - p_y^2 + i\right)\eta_1(x) = 0\,. \tag{4.46}$$

Використовуючи нову змінну z, так що $x = \xi z$, ми отримуємо

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \xi^2(i - p_y^2) + \xi^4 z^2\right)\eta_1(z) = 0\,. \tag{4.47}$$

У випадку коли $\xi = e^{-i\pi/4}/\sqrt{2}$ рівняння (4.47) набуває вигляд рівняння Вебера [30]

$$w''(z) + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4}\right)w(z) = 0\,, \tag{4.48}$$

де $\nu = ip_y^2/2$. Розв'язуючи рівняння Вебера, ми знаходимо

$$\eta_1 = c_1 D_\nu(\sqrt{2}e^{i\pi/4}x) + c_2 D_{-\nu-1}(\sqrt{2}e^{3i\pi/4}x)\,, \tag{4.49}$$

де c_1 і c_2 є невідомими константами, а $D_\nu(z)$ – функцією параболічного циліндру.

Для функція $D_\nu(z)$ виконуються наступні рекуррентні співвідношення

$$\begin{aligned}\frac{\partial D_\nu(z)}{\partial z} &= \nu D_{\nu-1}(z) - \frac{z}{2}D_\nu(z)\,,\\ \frac{\partial D_\nu(z)}{\partial z} &= \frac{z}{2}D_\nu(z) - D_{\nu+1}(z)\,.\end{aligned} \tag{4.50}$$

Використовуючи перше рівняння з (4.50), ми знаходимо

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}+ix\right)D_\nu(\sqrt{2}e^{i\pi/4}x)=\sqrt{2}\,\nu e^{i\pi/4}D_{\nu-1}(\sqrt{2}e^{i\pi/4}x)\,, \tag{4.51}$$

а використовуючи друге рівняння з (4.50) отримуємо

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}+ix\right)D_{-\nu-1}(\sqrt{2}e^{3i\pi/4}x)=\sqrt{2}e^{-i\pi/4}D_{-\nu}(\sqrt{2}e^{3i\pi/4}x)\,. \tag{4.52}$$

Підставляючи (4.51) і (4.52) в рівняння (4.45), ми маємо

$$\eta_2=\frac{c_1}{p_y}\sqrt{2}\,\nu e^{i\pi/4}D_{\nu-1}(\sqrt{2}e^{i\pi/4}x)+\frac{c_2}{p_y}\sqrt{2}e^{-i\pi/4}D_{-\nu}(\sqrt{2}e^{3i\pi/4}x)\,. \tag{4.53}$$

В результаті з рівнянь (4.49) і (4.53) для $\Psi^T=(\psi_1,\psi_2)$ ми знаходимо

$$\psi_{1,2}=\eta_1\pm\eta_2=c_1\left(D_\nu(\sqrt{2}e^{i\pi/4}x)\pm\frac{\sqrt{2}\,\nu e^{i\pi/4}}{p_y}D_{\nu-1}(\sqrt{2}e^{i\pi/4}x)\right)$$

$$+\,c_2\left(D_{-\nu-1}(\sqrt{2}e^{3\pi/4}x)\pm\frac{\sqrt{2}e^{-i\pi/4}}{p_y}D_{-\nu}(\sqrt{2}e^{3i\pi/4}x)\right)\,. \tag{4.54}$$

Використовуючи наступні асимптотики функцій Вебера [30]

$$D_\nu(z)\sim e^{-z^2/4}z^\nu-\frac{e^{z^2/4-i\pi\nu}\sqrt{2\pi}\,z^{-\nu-1}}{\Gamma(-\nu)}+\mathcal{O}(z^2)\,,\quad -\pi<\arg(z)\le-\frac{\pi}{2}\,,$$

$$D_\nu(z)\sim e^{-z^2/4}z^\nu+\mathcal{O}(z^2)\,,\qquad -\frac{\pi}{2}<\arg(z)\le\frac{\pi}{2}\,,$$

$$D_\nu(z)\sim e^{-z^2/4}z^\nu-\frac{e^{z^2/4+i\pi\nu}\sqrt{2\pi}\,z^{-\nu-1}}{\Gamma(-\nu)}+\mathcal{O}(z^2)\,,\quad -\frac{\pi}{2}<\arg(z)\le\pi\,,$$

в області діркового газу ($x\to+\infty$) ми маємо

$$\psi_{1,2}=c_1z_1^\nu e^{-ix^2/2}$$

$$+\,c_2\left[-\frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(\nu+1)}z_2^\nu e^{-ix^2/2+i\pi(\nu+1)}\pm\frac{\sqrt{2}e^{-i\pi/4}}{p_y}z_2^{-\nu}e^{ix^2/2}\right]\,. \tag{4.55}$$

З протилежної сторони, в області електронного газу ($x \to -\infty$)

$$\begin{aligned}\psi_{1,2} =& c_1 \left[z_2^{\nu} e^{-ix^2/2 - 3i\nu\pi/2} \right. \\ & \left. \pm \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1-\nu)} \frac{\sqrt{2}\,\nu z_2^{-\nu} e^{i\pi/4 + i\nu\pi/2}}{p_y} e^{ix^2/2} \right] \\ & \pm c_2 \frac{\sqrt{2} e^{-i\pi/4}}{p_y} z_1^{-\nu} e^{ix^2/2 + i\nu\pi/2}\,,\end{aligned} \tag{4.56}$$

де $z_1 = \sqrt{2} e^{i\pi/4} |x|$ і $z_2 = \sqrt{2} e^{3i\pi/4} |x|$.

Тепер розглянемо задачу розсіяння. Згідно з квазікласичним розглядом у попередньому параграфі 4.3.1 електрон, який налітає на перехід зліва має дію $S^+(x) \simeq -x^2/2$. Ця дія записана у безрозмінних змінних визначенних після рівняння (4.45) з використанням того, що $p_x = dS^+/dx \simeq -x > 0$ і $v_x = p_x/|\mathbf{p}| > 0$. Електрону, який відбився від переходу, відповідає дія $S^-(x) \simeq x^2/2$. Дірка, яка розповсюджується з позитивною швидкістю має дію $S^-(x) \simeq -x^2/2$ і від'ємний імпульс p_x. Із відсутності дірки, яка прямує на перехід справа, випливає що у рівнянні (4.55) $c_2 = 0$. Для того, щоб зафіксувати коефіцієнт c_1, а потім знайти амплітуду відбиття $r(p_y)$ ми обчислимо $S^+(x)$ для $|x| \to +\infty$. Ми одержуємо

$$S^+(x) = \int_{sgn(x)|p_y|}^{x} \sqrt{z^2 - p_y^2}\, dz \simeq \frac{1}{2} sgn(x) \left\{ x^2 - \frac{p_y^2}{2} - p_y^2 \ln\left(\frac{2|x|}{|p_y|} \right) \right\}. \tag{4.57}$$

Тоді використовуючи рівняння (4.56) ми отримуємо шукану амплітуду відбиття

$$r(p_y) = \frac{\sqrt{\pi}|p_y|}{\Gamma(1 - ip_y^2/2)} e^{-\pi p_y^2/4} e^{ip_y^2/2 - ip_y^2/2 \ln(p_y^2/2) - i3\pi/4}. \tag{4.58}$$

Ми бачимо, що амплітуду відбиття при малих p_y пропорційна p_y. Порівнюючи коефіцієнти при відповідних доданках в рівняннях (4.55) і (4.56) ми знаходимо амплітуду проходження крізь n-p перехід

$$t(p_y) = e^{isgn(p_y)/2} e^{-\pi p_y^2/2}. \tag{4.59}$$

Легко перевірити, що $|r|^2 + |t|^2 = 1$. Зауважимо також, що отриманий нами результат для амплітуди відбиття (4.58), який дорівнює нулю при нормальному падінні, тобто $p_y = 0$, повністю узгоджується з результатом отриманим на початку параграфу 4.3.

4.4 Задачі

1. Розглянути клейнівське тунелювання для електронів з ненульовою масою в графені на потенціальному бар'єрі прямокутної форми визначеного рівнянням (4.5). Гамільтоніан проблеми дорівнює (порівняйте з гамільтоніаном (4.4))

$$H = v_F \tau \hat{\mathbf{p}} + M\tau_3 + U(\mathbf{r}) \,, \tag{4.60}$$

де M - халдейнівська маса, а τ_3 - третя матриця Паулі. Обчислити коефіцієнт проходження T і порівняти його з коефіцієнтом проходження (4.12) через бар'єр для безмасових електронів.

2. Двошаровий графен утворюється двома шарами графену розташованими один над одним на відстані $d = 3.5$ Å таким чином, що другий шар є повернутим на кут $2\pi/3$ відносно першого. Низькоенергетичний ефективний вільний гамільтоніан для електронів у двошаровому графені має вигляд

$$H_0 = -\frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (\hat{p}_x - i\hat{p}_y)^2 \\ (\hat{p}_x + i\hat{p}_y)^2 & 0 \end{pmatrix} , \tag{4.61}$$

де $m = 0.054\ m_e$ і m_e – маса електрона. Дослідити клейнівське тунелювання для електронів у двошаровому графені на потенціальному бар'єрі прямокутної форми (4.5) у випадку нормального падіння. Показати, що амплітуда проходження крізь бар'єр для електронів з хвильовим вектором $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ і енергією E дорівнює

$$t = \frac{4ikq \exp(2ikD)}{(q+ik)^2 \exp(-2qD) - (q-ik)^2 \exp(2qD)} \,, \tag{4.62}$$

де $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.

Розділ 5

Нестабільність діраківського вакууму для електронів в графені у зовнішніх полях

Однією із важливих відмінностей релятивістської квантової механіки від нерелятивістської полягає у тому, що рівняння Дірака чи Клейна–Гордона–Фока мають розв'язки з якою завгодно від'ємною енергією. Ця властивість є наслідком релятивістського співвідношення яке зв'язує енергією та імпульс $E^2 = \mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4$, звідки випливає, що $E = \pm\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}$.

В квантовопольовій теорії проблема присутності розв'язків з нескінченою від'ємною енергією вирішується квантуванням поля. При цьому розв'язок із додатньою енергією пов'язується з оператором знищення частинки, а розв'язок із від'ємною енергією пов'язується із оператором народження античастинки. Вищезгадана класифікація ров'язків рівнянь Дірака або Клейна–Гордона–Фока на розв'язки з додатньою і від'ємною енергією є добре визначеною у відсутності зовнішніх класичних полів. Однак, якщо такі поля присутні, то ситуація може змінитися.

У квантовій електродинаміці добре відомо, що для кулонівського потенціалу $V_C(r) = -Ze^2/r$ енергетичний спектр для електронів з

масою m складається з неперервного спектру при $|E| > mc^2$ та дискретного - при $0 < E < mc^2$ [див. Рис. 5.1 a)]. Енергія найнижчого зв'язаного стану E_0 становить

$$E_0 = mc^2\sqrt{1-(Z\alpha)^2},$$

де $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ – постійна тонкої структури, і стає уявною при $Z\alpha > 1$, що відповідає явищу "падіння на центр". Нефізичне комплексне значення енергії вказує на те, що гамільтоніан системи не є самоспряженим для надкритичних значень $Z\alpha > 1$ і необхідно використовувати його самоспряжене розширення. В квантовій електроди-

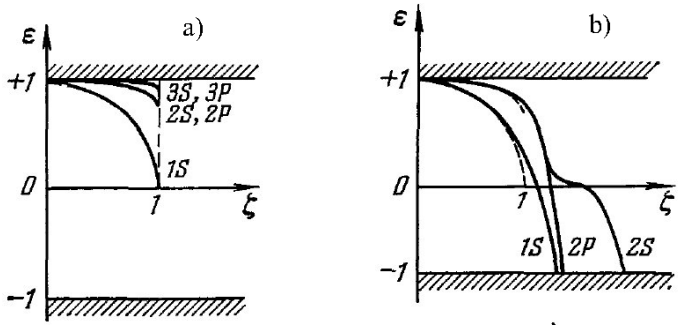


Рис. 5.1: (a) Електронні енергетичні рівні надважких атомів в одиницях mc^2 отримані із рівняння Дірака для кулонівського потенціалу $-Ze^2/r$ як функції $\zeta = Z\alpha$, де Z – заряд ядра. (b) Енергетичні рівні для регулярізованого кулонівського потенціалу. Із ростом Z дискретні рівні наближаються до континууму станів з від'ємною енергією, а потім пірнають у нього один за одним для $Z > 170$ (рисунок з [31]).

наміці цю проблему вирішують заміною сингулярного потенціалу $1/r$ регуляризованим потенціалом, який відрізняється від початкового на деякій маленькій відстані R, що фізично відповідає скінченим розмірам ядра. Як вперше показали Померанчук і Смородінський в роботі у 1945 році, в регуляризованому потенціалі явище падіння на центр відсутнє і всі енергії стають дійсними. Однак при зростанні заряду центру Z енергія дискретних рівнів наближається до енергії нижнього континууму $E = -mc^2$, а потім "пірнає" в нього [див. Рис. 5.1 b)]. При цьому, як показано Герштейном, Зельдовічем і Поповим,[1] дискретні

[1]Зацікавленому читачу ми рекомендуємо подивитися огляд [31], який не тільки

стани перетворюються на резонанси зі скінченою шириною, які описують квазістаціонарні стани з комплексною енергією $\mathrm{Im}E \neq 0$. Такі стани відповідають процесам народження електрон-позітронних пар з вакууму з подальшим розповсюдженням позітрона на нескінченність і екрануванням електроном заряду центра. Критичний заряд Z_c визначається з умови появи першого квазістаціонарного стану з ненульовою уявною частиною енергії. Він зростає при збільшенні mc^2.

Для безмасових електронів в регуляризованому кулонівському потенціалі дискретні рівні відсутні для значень $Z\alpha < 1$, натомість при $Z\alpha > 1$ в спектрі починають з'являтися квазістаціонарні стани. Енергія квазістаціонарного стану для регуляризованого потенціалу має характерну експоненціальну залежність від заряду $E \sim e^2 R^{-1} \exp(-\pi/\sqrt{(Z\alpha)^2 - 1})$, а критична константа $Z_c\alpha \to 1$ при $Rmc^2/e^2 \to 0$. Наявність маси у електронів $mc^2 \ll |E|$ зменшує $|\mathrm{Im}E|$, збільшуючи, таким чином, стабільність системи.

Критичне значення заряду ядра в квантовій електродинаміці приблизно дорівнює $Z_c \approx 170$. Оскільки ядра із зарядами $Z \simeq 170$ невідомі в природі, для спостереження явища падіння на центр робилися спроби створити такі ядра шляхом зіткнення двох ядер із меншим зарядом. Проте, незважаючи на всі зусилля, в атомній фізиці явище падіння на центр ніколи не було спостережено експериментально. Тільки відкриття графену дозволило експериментально реалізувати і спостерігати відгук дираківських ферміонів на надкритичний кулонівський потенціал заряджених домішок [32].

В попередніх розділах було показано, що електрони в графені описуються при низьких енергіях двовимірним рівнянням Дірака, в якому замість швидкості світла c присутня швидкість електронів на поверхні Фермі $v_F \approx c/300$. Як наслідок ефективна безрозмірна константа зв'язку для електронів в графені дорівнює [див. рівняння (2.52)]

$$g = \frac{e^2}{\kappa\hbar v_F} = \alpha\frac{c}{\kappa v_F}. \tag{5.1}$$

У вакуумі, тобто для випадку згаданого у підрозділі 2.4.2 підвішеного графена, константа діелектричної проникності $\kappa = 1$, що дає чисельне значення $g \approx 2.19$. З повітрям з одного боку та SiO_2 з другого, що відповідає графену на підкладці з SiO_2, значення $g \approx 1.37$. Такі значення g на кілька порядків перевищують значення постійної тонкої структури α в квантовій електродинаміці, що свідчить про сильну електрон-електронну взаємодію у графені. Як ми побачимо далі, в

пояснює фізичну суть проблеми, але і є пам'ятником фізичного фольклору тих часів.

графені теоретичне значення критичного заряду кулонівської домішки дорівнює $Z_c^{imp} \sim 1$, що і робить можливим експериментальне спостереження явища падіння на центр в графені.

Вище ми обговорювали одноелектронну задачу в графені у зовнішньому полі. Проте, слід враховувати той факт, що велике значення ефективної константи зв'язку призводить також до сильного притягання у багаточастинковій задачі між електронами і дірками у в графені. В цій ситуації можна очікувати нестабільність дираківського вакуумного стану для електронів відносно конденсації електрон-діркових пар з відповідним квантовим фазовим переходом до стану з ненульовою щілиною в спектрі електронних збуджень.

Генерація щілини в графені є багаточастинковою задачею, яка є доволі складною і потребує для свого дослідження використання методів квантової теорії поля систем багатьох частинок (див., наприклад, роботу [33]). Між тим, в теорії надпровідності добре відомо, що куперівська нестабільність в одночастинковій задачі є передвісником нестабільності в багаточастинковій проблемі. Тому в цьому розділі ми зосередимо нашу увагу тільки на проблемі стабільності дираківського вакууму в одночастинковій задачі електрона в графені у зовнішньому потенціальному полі. Ми розглянемо випадки потенціальної ями і кулонівського центру, а також дослідимо вплив зовнішнього магнітного поля на проблему стабільності дираківського вакууму.

Цей розділ ми почнемо з розгляду двовимірного рівняння Дірака для електрона в потенціальній ямі у параграфі 5.1. Далі у параграфі 5.2 ми розглянемо випадок надкритичного кулонівського центру в графені. Ці два параграфи ґрунтуються на результатах отриманих в роботі [34]. Ми покажемо, що як для потенціальної ями, так і кулонівського потенціалу для деякого критичного значення зовнішнього потенціалу вакуум безмасових дираківських частинок є нестабільним відносно народження електрон-діркових пар з випромінюванням дірок на нескінченність і екрануванням електронами зовнішнього потенціалу. Слід відзначити, що ці результати аналогічні результатам отриманих для трьохвимірного рівняння Дірака в квантовій електродинаміці [35]. Однак підкреслимо ще раз, що в графені поведінку електронів у дуже сильних полях можливо досліджувати експериментально внаслідок великого значення ефективної константи зв'язку на відміну від квантової електродинаміки, де маленьке значення постійної тонкої структури призводить до дуже значних труднощів у постановці відповідних експериментів. Вплив зовнішнього магнітного поля на проблему стабільності дираківського вакууму вивчається у параграфах 5.3 і 5.4, які ґрунтуються на результатах отриманих в роботі [36].

5.1 Потенціальна яма

Електронні квазічастинкові стані в околі $\mathbf{K}_\pm$ точок в графені у зовнішньому потенціальному полі $V(\mathbf{r})$ описуються дираківським гамільтоніаном у 2+1 вимірах

$$H = \hbar v_F \boldsymbol{\tau}\boldsymbol{p} + \xi\Delta\tau_3 + V(\mathbf{r}), \tag{5.2}$$

де $\boldsymbol{p}$ – оператор імпульсу, τ_i – матриці Паулі, і Δ – щілина в спектрі квазічастинкових збуджень (див., наприклад, рівняння (3.33)). Двокомпонентний спінор $\Psi_{\xi s}$ несе "К-точковий" ($\xi = \pm$) та спіновий ($s = \pm$) індекси. Ми використовуємо стандартні позначення: $\Psi^T_{+s} = (\psi_A, \psi_B)_{K_+ s}$, де $\Psi^T_{-s} = (\psi_B, \psi_A)_{K_- s}$, і A, B відповідають двом графеновим підґраткам. Оскільки взаємодія $V(\mathbf{r})$ не залежить від спіну, в подальшому ми опускаємо спіновий індекс s.

Розглянемо спочатку рівняння Дірака для електрона в потенціальній ямі у формі круга, $V(\mathbf{r}) = -V_0\theta(r_0 - r)$ з $r = |\mathbf{r}|$ та додатньою константою $V_0 > 0$. Ми маємо у $\mathbf{K}_+$ точці

$$\begin{pmatrix} \xi\Delta & \hbar v_F(-i\partial_x - \partial_y) \\ \hbar v_F(-i\partial_x + \partial_y) & -\xi\Delta \end{pmatrix} \Psi(\mathbf{r}) = [E - V(r)]\,\Psi(\mathbf{r})\,. \tag{5.3}$$

Очевидно, що розв'язок біля $\mathbf{K}_-$ точки може бути отриманий через розв'язок біля $\mathbf{K}_+$ точки заміною $\Delta \to -\Delta$ і перестановкою компонент спінора $\psi_A \leftrightarrow \psi_B$.

Симетрія потенціалу дозволяє її розв'язок у полярних координатах, де

$$\begin{aligned} i\partial_x + \partial_y &= e^{-i\phi}\left(i\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \\ i\partial_x - \partial_y &= e^{i\phi}\left(i\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\phi}\right). \end{aligned} \tag{5.4}$$

Оскільки гамільтоніан (5.2) комутує з оператором повного кутового моменту $J_z = L_z + S_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{\hbar}{2}\sigma_3$, розв'язок $\Psi(\mathbf{r})$ рівняння (5.3) можна записати у термінах власних функцій оператора кутового моменту J_z:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} e^{i(j-\frac{1}{2})\phi} f(r) \\ i e^{i(j+\frac{1}{2})\phi} g(r) \end{pmatrix}, \quad j = \pm 1/2, \pm 3/2, \ldots, \tag{5.5}$$

де для радіальних функцій $f(r)$, $g(r)$ отримуємо наступні рівняння:

$$f' - \frac{j+1/2}{r} f + \frac{E + \xi\Delta - V(r)}{\hbar v_F} g = 0, \tag{5.6}$$

$$g' + \frac{j-1/2}{r} g - \frac{E - \xi\Delta - V(r)}{\hbar v_F} f = 0\,. \tag{5.7}$$

Ця система рівнянь може бути легко розв'язана в областях $r < r_0$ та $r > r_0$ в термінах функцій Бесселя та Ґанкеля, відповідно. Далі, для того щоб знайти енергетичний спектр необхідно неперервно зшити одержані розв'язки в точці r_0.

Таким чином, зробивши припущення що $|E| < \Delta$, отримуємо рівняння[2]

$$\frac{\sqrt{(E+V_0)^2 - \Delta^2}}{E + V_0 - \xi\Delta} \frac{J_{j-1/2}(\beta r_0)}{J_{j+1/2}(\beta r_0)} = \frac{\sqrt{E^2 - \Delta^2}}{E - \xi\Delta} \frac{H^{(1)}_{j-1/2}(\beta' r_0)}{H^{(1)}_{j+1/2}(\beta' r_0)}, \tag{5.8}$$

де $J_\nu(z)$, $H^{(1)}_\nu(z)$ – функції Бесселя та Ґанкеля, відповідно, $\beta = \sqrt{(E+V_0)^2 - \Delta^2}/\hbar v_F$, $\beta' = \sqrt{E^2 - \Delta^2}/\hbar v_F$, і квадратні корені визначені таким чином, щоб $\mathrm{Im}\beta, \mathrm{Im}\beta' > 0$. В областях з $\mathrm{Im}\beta, \mathrm{Im}\beta' \neq 0$ можна використати наступні співвідношення $H^{(1)}_\nu(iz) = (2/\pi i) e^{-i\pi\nu/2} K_\nu(z)$ $iJ_\nu(iz) = e^{i\pi\nu/2} I_\nu(z)$. Рівняння (5.8) є інваріантним відносно заміни $j \to -j, \xi \to -\xi$.

Розглянемо $\mathbf{K}_-$ точку ($\xi = -$), тоді аналізуючи рівняння (5.8), можна побачити, що енергетичний спектр є неперервним при $|E| > \Delta$ і дискретним при $|E| < \Delta$. Перший зв'язаний стан $E \lesssim \Delta$ з'являється при довільному слабкому потенціалі V_0. Справді, при $j = -1/2$, що відповідає найменшому значенню відцентрового бар'єру, ми знаходимо

$$E \simeq \Delta \left[1 - 2 \left(\frac{\hbar v_F}{\Delta r_0} \right)^2 \exp\left(-\frac{2(\hbar v_F)^2}{V_0 \Delta r_0} - 2\gamma \right) \right], \tag{5.9}$$

де $\gamma \approx 0.577$ – константа Ейлера. Зауважимо, що розв'язки з енергією $E \lesssim \Delta$ та кутовим моментом $j = 1/2$ відсутні в $\mathbf{K}_-$ точці, натомість, такий розв'язок існує в K_+ точці.

При зростанні глибини потенціальної ями V_0 і досягненні їй критичного значення

$$V_{0\,cr} = \Delta \left[1 + \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar v_F}{\Delta r_0} \right)^2 j_{0,1}^2} \right], \tag{5.10}$$

[2]Для рівняння Дірака у центральному потенціалі в $3+1$ вимірах див. [35].

де $j_{0,1} \approx 2.41$ – перший нуль функції Бесселя $J_0(x)$, найнижчій рівень енергії пірнає в нижній континуум ($E = -\Delta$). Можна помітити, що у випадку нульової щілини ($\Delta = 0$) зв'язані стани взагалі відсутні. Натомість, при перевищенні критичного значення потенціалу $V_0 > V_{0cr}$, яке при $\Delta = 0$ дорівнює $V_{0cr} = \hbar v_F j_{0,1}/r_0$, з'являються резонанси з комплексними енергіями. Подібно тому, як це відбувається у випадку надкритичного кулонівського центру в квантовій електродинаміці, це свідчить про нестабільність системи.

Біля критичного значення потенціалу енергія резонансу має вигляд

$$\begin{aligned} E &= -\frac{V_0 - V_{0cr}}{\ln(1/\delta)} \exp\left(\frac{i\pi}{2\ln(1/\delta)}\right), \\ \delta &= \frac{(V_0 - V_{0cr}) r_0 e^{\gamma-1}}{2\hbar v_F}, \quad 0 < \delta \ll 1. \end{aligned} \tag{5.11}$$

Залежність енергії від $V_0 - V_{0cr}$ (відхилення від критичного значення) для потенціальної ями є неаналітичною, але відрізняється від суттєво-сингулярної поведінки, яка, як ми побачимо у наступному підрозділі, має місце у випадку кулонівського центру. Це, звичайно, пов'язано з відсутністю масштабної інваріантності потенціалу $V(r)$.

5.2 Надкритичний кулоніський центр

А зараз розглянемо електронні збудження в графені в полі кулонівської домішки із зарядом $Z|e|$. Ця задача також описується гамільтоніаном (5.2), але вже з кулонівським потенціалом $V(\mathbf{r}) = -Ze^2/\kappa r$, де κ – константа діелектричної проникності. Для визначеності ми розглянемо $\mathbf{K}_+$ точку, якій відповідає $\xi = +$.

Як зазначалось у вступі до даного розділу, для самоспряженості гамільтоніану кулонівський потенціал треба регуляризувати. Для простоти ми використовуємо наступну регуляризацію

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{\kappa r}, & r > R, \\ -\frac{Ze^2}{\kappa R}, & r < R. \end{cases} \tag{5.12}$$

Як і у попередньому параграфі, відповідні власні функції будемо шукати у вигляді власних функцій оператора повного кутового моменту J_z:

$$\Psi = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} e^{i\phi(j-1/2)}\, a(r) \\ i\, e^{i\phi(j+1/2)}\, b(r) \end{pmatrix}. \tag{5.13}$$

Підстановка анзацу (5.13) в рівняння $H\Psi = E\Psi$ з гамільтоніаном (5.2) дає систему диференціальних рівнянь першого порядку

$$a' - (j+1/2)\frac{a}{r} + \frac{E+\Delta-V(r)}{\hbar v_F} b = 0, \tag{5.14a}$$

$$b' + (j-1/2)\frac{b}{r} - \frac{E-\Delta-V(r)}{\hbar v_F} a = 0. \tag{5.14b}$$

Зручно ввести змінні $\epsilon = E/\hbar v_F$, $m = \Delta/\hbar v_F$, $u = \sqrt{m^2-\epsilon^2}$, $\rho = 2ur$ та $\alpha = e^2/\hbar v_F \kappa$, а замість функцій a та b розглядати їхні лінійні комбінації

$$a = \frac{\sqrt{m+\epsilon}}{2}(g-f), \quad b = \frac{\sqrt{m-\epsilon}}{2}(g+f). \tag{5.15}$$

При цьому рівняння (5.14) набудуть вигляду

$$\rho g' + g\left(\frac{\rho}{2} - \frac{1}{2} - Z\alpha\frac{\epsilon}{u}\right) + f\left(j + Z\alpha\frac{m}{u}\right) = 0, \tag{5.16a}$$

$$\rho f' - f\left(\frac{\rho}{2} + \frac{1}{2} - Z\alpha\frac{\epsilon}{u}\right) + g\left(j - Z\alpha\frac{m}{u}\right) = 0. \tag{5.16b}$$

Дискретний спектр існує тільки при $|\epsilon| < m$. Для знаходження його форми підставимо f з першого рівняння (5.16) в друге. Тоді для g компоненти отримаємо рівняння

$$\frac{d^2 g}{d\rho^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\frac{1}{2} + Z\alpha\frac{\epsilon}{u}}{\rho} + \frac{\frac{1}{4} - j^2 + Z^2\alpha^2}{\rho^2}\right) g = 0, \tag{5.17}$$

що є рівнянням Уіттекера [37]. Його загальний розв'язок має вигляд

$$g = C_1 W_{\mu,\nu}(\rho) + C_2 M_{\mu,\nu}(\rho), \tag{5.18}$$

де $\mu = 1/2 + Z\alpha\epsilon/u$, $\nu = \sqrt{j^2 - Z^2\alpha^2}$. Взявши до уваги асимптотику функцій Уіттекера $W_{\mu,\nu}(\rho)$ та $M_{\mu,\nu}(\rho)$ при $\rho \to \infty$

$$W_{\mu,\nu}(\rho) \simeq e^{-\rho/2}\rho^{\mu},$$

$$M_{\mu,\nu}(\rho) \simeq \frac{\Gamma(1+\nu)}{\Gamma(\frac{1}{2}-\mu+\nu)} e^{\rho/2}\rho^{-\mu},$$

ми маємо покласти $C_2 = 0$ для регулярності розв'язку. Тоді перше рівняння в (5.16) для компоненти f в області II ($r > R$) дає

$$f_{II} = C_1 \left(j - Z\alpha \frac{m}{u} \right) W_{-\frac{1}{2}+Z\alpha\frac{\epsilon}{u},\nu}(\rho). \tag{5.19}$$

Розв'язки для області I ($r < R$) можуть бути отримані з рівнянь (5.14)

$$\begin{aligned} b_I &= A_1 \operatorname{sgn}(j) r J_{|j+1/2|} \left(r \sqrt{\left(\epsilon + \frac{Z\alpha}{R} \right)^2 - m^2} \right), \\ a_I &= A_1 \sqrt{\frac{\epsilon + Z\alpha/R + m}{\epsilon + Z\alpha/R - m}}\, r J_{|j-1/2|} \left(r \sqrt{\left(\epsilon + \frac{Z\alpha}{R} \right)^2 - m^2} \right), \end{aligned} \tag{5.20}$$

де A_1 – константа. Тут ми вже врахували граничну умову інтегровності в нулі, якій задовольняють тільки розв'язки b_I та a_I. Енергетичні рівні визначаються з умови неперервності хвильової функції при $r = R$

$$\frac{b_I}{a_I}\Big|_{r=R} = \frac{b_{II}}{a_{II}}\Big|_{r=R}, \tag{5.21}$$

яка дає рівняння

$$\frac{W_{\frac{1}{2}+\frac{Z\alpha\epsilon}{u},\nu}(\rho)}{\left(j - \frac{Z\alpha m}{u}\right) W_{-\frac{1}{2}+\frac{Z\alpha\epsilon}{u},\nu}(\rho)}\Big|_{r=R} = \frac{k+1}{k-1}, \tag{5.22}$$

де

$$\begin{aligned} k &= \operatorname{sgn}(j)\, \frac{m+\epsilon}{u} \sqrt{\frac{\epsilon + Z\alpha/R - m}{\epsilon + Z\alpha/R + m}}\, \frac{J_{|j+1/2|}(\widetilde{\rho})}{J_{|j-1/2|}(\widetilde{\rho})}, \\ \widetilde{\rho} &= \sqrt{(Z\alpha + \epsilon R)^2 - m^2 R^2}. \end{aligned} \tag{5.23}$$

Оскільки параметр R введено лише для регуляризації, то можна вважати його малим. Тоді використовуючи асимптотичну поведінку Уіттекера при $\rho \to 0$

$$W_{\mu,\nu}(\rho) \simeq \frac{\Gamma(2\nu)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \mu + \nu)} \rho^{\frac{1}{2}-\nu} + \frac{\Gamma(-2\nu)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \mu - \nu)} \rho^{\frac{1}{2}+\nu},$$

можна записати рівняння (5.22) наступним чином

$$\begin{aligned}&\frac{\Gamma(-2\nu)}{\Gamma(2\nu)}\frac{\Gamma\left(1+\nu-Z\alpha\frac{\epsilon}{u}\right)}{\Gamma\left(1-\nu-Z\alpha\frac{\epsilon}{u}\right)}(2uR)^{2\nu}\\&=-\frac{j+\nu-\frac{Z\alpha(m+\epsilon)}{u}+k_0\left(j-\nu-\frac{Z\alpha(m-\epsilon)}{u}\right)}{j-\nu-\frac{Z\alpha(m+\epsilon)}{u}+k_0\left(j+\nu-\frac{Z\alpha(m-\epsilon)}{u}\right)}+O(R),\end{aligned}\tag{5.24}$$

де

$$k_0=\mathrm{sgn}(j)\,\frac{m+\epsilon}{u}\frac{J_{|j+1/2|}(Z\alpha)}{J_{|j-1/2|}(Z\alpha)}\equiv\frac{m+\epsilon}{u}\,\sigma(Z\alpha,j).\tag{5.25}$$

Друга рівність у рівнянні (5.25) є визначенням функції $\sigma(Z\alpha,j)$. Рівняння (5.24) можна записати в більш зручній формі

$$\begin{aligned}&\frac{\Gamma(-2\nu)}{\Gamma(2\nu)}\frac{\Gamma\left(1+\nu-Z\alpha\frac{\epsilon}{u}\right)}{\Gamma\left(1-\nu-Z\alpha\frac{\epsilon}{u}\right)}(2uR)^{2\nu}\\&=-\frac{j-\nu-\frac{Z\alpha(m-\epsilon)}{u}}{j+\nu-\frac{Z\alpha(m-\epsilon)}{u}}\frac{j+\nu-Z\alpha\sigma(Z\alpha,j)}{j-\nu-Z\alpha\sigma(Z\alpha,j)}.\end{aligned}\tag{5.26}$$

У відсутності регуляризації ($R=0$), енергетичні рівні визначаються полюсами гамма-функції $\Gamma\left(1+\nu-Z\alpha\frac{\epsilon}{u}\right)$ і нулями правої сторони рівняння (5.26). Вираз для цих рівнів є аналогом формули Бальмера в квантовій механиці

$$\epsilon_{n,j}=m\left[1+\frac{Z^2\alpha^2}{(\nu+n)^2}\right]^{-1/2},\quad\begin{cases}n=0,1,2,3,...,&j>0,\\n=1,2,3,...,&j<0.\end{cases}\tag{5.27}$$

Зв'язані стани для $n\geq 1$ є подвійно виродженими $\epsilon_{n,j}=\epsilon_{n,-j}$. Найнижчий рівень енергії визначається формулою

$$\epsilon_{0,j=1/2}=m\sqrt{1-(2Z\alpha)^2}\,.\tag{5.28}$$

Якщо $Z\alpha$ перевищує $1/2$, енергія (5.28) стає уявною, тобто відбувається "падіння на центр". Ця проблема відсутня при ненульовому R. При $Z\alpha>1/2$, параметр ν є уявним для певних значеннях j. Для них ми введемо позначення $\nu=i\beta,\beta=\sqrt{Z^2\alpha^2-j^2}$. Для скінченного R дискретні рівні існують при $Z\alpha>1/2$. Їхня енергія зменшується зі збільшенням $Z\alpha$, поки вони не досягнуть зони нижнього континууму.

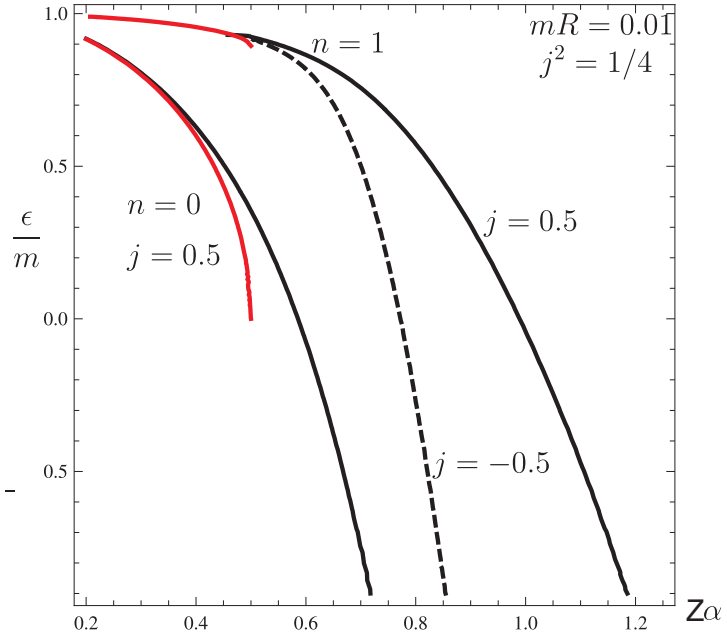


Рис. 5.2: Найнижчі енергетичні рівні як функція $Z\alpha$. Червоні лінії відповідають чистому кулонівському потенціалу (вони існують тільки до $Z\alpha < 1/2$); чорні суцільні лінії відповідають чисельним розв'язкам для $j = 1/2$, $mR = 0.01$; чорні пунктирні лінії – чисельним розв'язкам для $j = -1/2$, $mR = 0.01$.

Поведінка найнижчих рівнів з $j = 1/2$ як функція заряду $Z\alpha$ показана на Рис. 5.2.

Критичний заряд Z_c, що відповідає зануренню в континуум, можна отримати з рівняння (5.26), поклавши $\epsilon = -m$ і використовуючи вираз який випливає з формули Стірлінга: $\frac{\Gamma(x+iy)}{\Gamma(x-iy)} \to e^{2iy\log x}$, $x \to +\infty$. Ми приходимо до рівняння

$$e^{-2i\beta\log(2Z\alpha mR)} = \frac{i\beta - j + Z\alpha\sigma(Z\alpha, j)}{-i\beta - j + Z\alpha\sigma(Z\alpha, j)} \frac{\Gamma(1-2i\beta)}{\Gamma(1+2i\beta)}\,, \tag{5.29}$$

або,

$$-\beta \log(2Z\alpha mR) = \arg\left(Z\alpha\sigma(Z\alpha, j) - j + i\beta\right) + \arg\,\Gamma(1-2i\beta) + \pi n, \quad (5.30)$$

де n – ціле. Легко перевірити, що для $j = 1/2$ та $n = 1$ критична константа зв'язку $Z_c\alpha$ наближається до $1/2$ при $mR \to 0$. Залежність для критичної константи $Z_c\alpha$ від mR для $j = 1/2$ показана на Рис. 5.3. Зв'язані та квазістаціонарні стани в графені зі щілиною у випадку

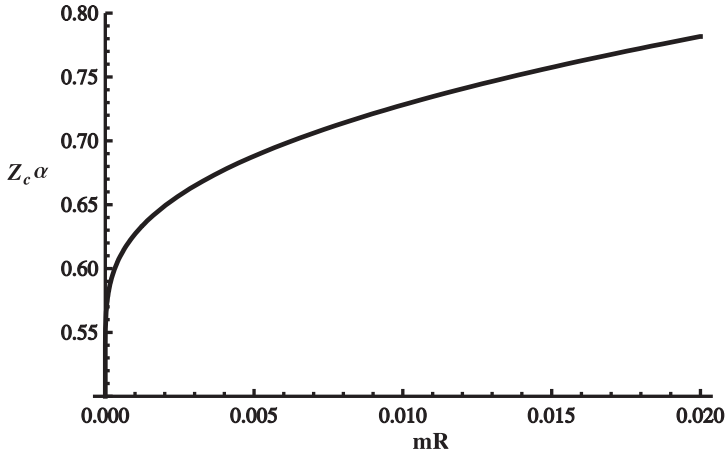


Рис. 5.3: Залежність критичної константи від mR для $1S_{1/2}$ рівня.

надкритичної кулонівської домішки також були чисельно досліджені у моделі на ґратці, яка має природнє ультрафіолетове обрізання.

Проаналізуємо рівняння (5.14) у надкритичному випадку $Z\alpha > 1/2$ і покажемо, що резонансні стани з'являються для $|\epsilon| > m$ (у цьому випадку $\Delta > 0$). Поява таких станів призводить до нестабільності надкритичного заряду з народженням електрон-діркових пар з вакууму. Народжений електрон притягується до кулонівського центру, тим самим екрануючи його. Одночасно позитивно заряджена дірка розповсюджується на нескінченність. Процес повторюється, поки заряд центру не буде зменшено до докритичних значень.

Функція Уіттекера $W_{\mu,\nu}(\rho)$ з $\mu = 1/2 + Z\alpha\epsilon/u$ та $\nu = \sqrt{j^2 - Z^2\alpha^2}$ описує зв'язані стани для $|\epsilon| < |m|$, які розташовані на першому фізичному листі змінної u, на якому $\mathrm{Re}\, u > 0$. Квазістаціонарні стани описуються тією самою функцією $W_{\mu,\nu}(\rho)$, але на другому - нефізичному листі, на якому $\mathrm{Re}\, u < 0$. Ми розглянемо розв'язки, що відповідають

квазістаціонарним станам, котрі описують розбіжну позитивно заряджену хвилю при $r \to \infty$ з

$$\mathrm{Re}\,\epsilon < 0, \quad \mathrm{Im}\,\epsilon < 0, \quad \mathrm{Re}\,u < 0, \quad \mathrm{Im}\,u < 0. \tag{5.31}$$

При $Z^2\alpha^2 > j^2$ резонансні стани визначаються з того ж рівняння (5.22), що і зв'язані стани, але при цьому ν замінюється на $\nu = i\beta$. Розглянемо стани з $j = 1/2$, які відповідають $nS_{1/2}$-станам, зокрема стану $n = 0$ з найнижчою енергією. Відповідне рівняння набуває вигляду

$$\begin{aligned} &\frac{W_{\frac{1}{2}+\frac{Z\alpha\epsilon}{u},i\beta}(\rho)}{\left(\frac{1}{2}-\frac{Z\alpha m}{u}\right)W_{-\frac{1}{2}+\frac{Z\alpha\epsilon}{u},i\beta}(\rho)}\Big|_{r=R} = \frac{k+1}{k-1}, \\ &k = \frac{m+\epsilon}{u}\sqrt{\frac{\epsilon+Z\alpha/R-m}{\epsilon+Z\alpha/R+m}}\frac{J_1(\widetilde{\rho})}{J_0(\widetilde{\rho})}, \\ &\widetilde{\rho} = \sqrt{(Z\alpha+\epsilon R)^2-m^2R^2}, \end{aligned} \tag{5.32}$$

де $W_{\mu,\nu}(x)$ і $J_a(x)$ – функції Уіттекера та Бесселя, відповідно.

Ми цікавимося випадком $|\epsilon| \gg m$ і, зокрема, випадком безмасового електрона ($m = 0$). Аналітичні розв'язки можуть бути отримані для значень заряду, що не сильно перевищують критичне значення Z, де $Z\alpha - 1/2 \ll 1$. Вважаючи параметр обрізання малим ($|2uR| \ll 1$) і використовуючи асимптотику функції Уіттекера, можна знайти

$$\begin{aligned} &(2uR)^{2i\beta}\frac{\Gamma(1-2i\beta)}{\Gamma(1+2i\beta)}\frac{\Gamma\left(1+i\beta-\frac{Z\alpha\epsilon}{u}\right)}{\Gamma\left(1-i\beta-\frac{Z\alpha\epsilon}{u}\right)} \\ &= \frac{\frac{1}{2}-i\beta-\frac{Z\alpha(m-\epsilon)}{u}}{\frac{1}{2}+i\beta-\frac{Z\alpha(m-\epsilon)}{u}}\frac{\frac{1}{2}+i\beta-Z\alpha\frac{J_1(Z\alpha)}{J_0(Z\alpha)}}{\frac{1}{2}-i\beta-Z\alpha\frac{J_1(Z\alpha)}{J_0(Z\alpha)}}. \end{aligned} \tag{5.33}$$

Розкладаючи рівняння (5.33) поблизу критичної константи по степеням $\beta = \sqrt{Z^2\alpha^2 - 1/4}$, ми отримуємо наступне рівняння:

$$\begin{aligned} &(-2i\sqrt{\epsilon^2-m^2}R)^{2i\beta} = 1 + 4i\beta\left[\frac{J_0(1/2)}{J_0(1/2)-J_1(1/2)}\right. \\ &\left.+\Psi(1) - \frac{1}{2}\Psi\left(1-\frac{i}{2}\frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2-m^2}}\right) - \frac{1}{1+i\sqrt{\frac{\epsilon-m}{\epsilon+m}}}\right], \end{aligned} \tag{5.34}$$

де $\Psi(x)$ – логарифмічна похідна гамма-функції Ейлера, $u = -i\sqrt{\epsilon^2 - m^2}$.

Розглянемо спочатку безмасовий випадок $m = 0$. Після виділення модуля та фази, $\epsilon = |\epsilon|e^{i\gamma}$, рівняння (5.34) приймає вигляд

$$\begin{aligned}\ln(2|\epsilon|R) + i\left(\gamma - \frac{\pi}{2}\right) = -\frac{\pi n}{\beta} + 2\left[\frac{J_0(1/2)}{J_0(1/2) - J_1(1/2)}\right. \\ \left. +\Psi(1) - \frac{1}{2}\Psi\left(1 - \frac{i}{2}\right) - \frac{1}{1+i}\right], \quad n = 1, 2, \ldots.\end{aligned} \tag{5.35}$$

Звідси

$$\begin{aligned}\epsilon_n^{(0)} &= aR^{-1}e^{i\gamma}\exp\left[-\frac{\pi n}{\sqrt{Z^2\alpha^2 - 1/4}}\right], \qquad n = 1, 2, \ldots, \\ &= -(1.18 + 0.17i)R^{-1}\exp\left[-\frac{\pi n}{\sqrt{Z^2\alpha^2 - 1/4}}\right],\end{aligned} \tag{5.36}$$

де

$$\gamma = \frac{\pi}{2}\left(1 + \coth\frac{\pi}{2}\right) \approx 3.28, \tag{5.37}$$

та

$$a = \frac{1}{2}\exp\left[\frac{2J_0(1/2)}{J_0(1/2) - J_1(1/2)} + 2\Psi(1) - 1 - \mathrm{Re}\Psi\left(1 - \frac{i}{2}\right)\right] \approx 1.19. \tag{5.38}$$

Енергія квазістаціонарних станів (5.36) має характерну суттєво-сингулярну залежність від критичної константи зв'язку, яка відображає скейлінгову інваріантність кулонівського потенціалу. Нескінченна кількість квазістаціонарних рівнів пов'язана з далекодіючим кулонівським полем. Аналогічна залежність має місце у випадку надкритичного кулонівського центру в квантовій електродинаміці.

Оскільки "постійна тонкої структури" в підвішеному графені має значення $g = e^2/\hbar v_F \approx 2.19$ (див. рівняння (5.1)), нестабільність з'являється вже при $Z = 1$. Треба зауважити, що наведений вище аналіз не враховує ефектів поляризації вакууму. Розглядаючи такі ефекти і застосовуючи наближення Хартрі для електрон-електронної взаємодії, можна показати, що ефективний заряд домішки Z_{eff} є таким, що домішка з голим зарядом $Z = 1$ залишається в докритичній області, тобто $Z_{eff}e^2/(\kappa\hbar v_F) < 1/2$ для довільної $e^2/(\kappa\hbar v_F)$, тоді як домішки з більшими Z можуть бути надкритичними.

Для скінченних m і у випадку $|\epsilon| \gg m$, $\mathrm{Re}\,\epsilon < 0$, розкладаючи рівняння (5.34) в ряд по m/ϵ до другого порядку, ми отримуємо

$$\epsilon - \frac{m^2}{2\epsilon} = \epsilon_n^{(0)} \left(1 - \frac{m}{\epsilon} + \frac{m^2}{\epsilon^2}(0.29 - 0.23i)\right), \qquad n = 1, 2, \dots, \quad (5.39)$$

де енергії квазістаціонарних станів $\epsilon_n^{(0)}$ для випадку $m = 0$ наведені у (5.36). Якщо у рівнянні (5.39) покласти $m = 0$, то ми повертаємось до вже розглянутого випадку з $\epsilon_n = \epsilon_n^{(0)}$, а відповідні резонансні стани описують спонтанне випромінення зарядженої дірки, коли дискретний рівень занурюється в континуум.

Для ненульового m, для того, щоб знайти поправки до енергетичних рівнів, будемо шукати розв'язок рівняння (5.39) у вигляді ряду $\epsilon = \sum_{k=0}^{\infty} \epsilon^{(k)}$, в якому $\epsilon^{(k)}$ є величиною порядку m^k. Легко знайти перші два члени такого розкладу

$$\epsilon_n = \epsilon_n^{(0)} - m + \frac{m^2}{|\epsilon_n^{(0)}|}(0.24 + 0.20i). \quad (5.40)$$

Оскільки $\mathrm{Im}\,\epsilon_n^{(0)} < 0$, поява щілини зменшує ширину резонансу і таким чином збільшує стабільність системи.

Таким чином, ми розглянули випадок $|\epsilon| \gg m$ і проаналізували як ненульова маса впливає на форму резонансу. Також повчально розглянути резонансні стани поблизу рівня $\epsilon = -m$, коли зв'язані стани занурюються в континуум і визначити дійсну та уявну частину їхньої енергії. Перш за все видно що, ненульова маса збільшує значення критичного заряду. Дійсно, використовуючи рівняння (5.30), ми отримуємо, що критичне значення заряду $Z_c\alpha$ для $j = 1/2$ залежить від m наступним чином (див. також Рис. 5.3)

$$Z_c\alpha \simeq \frac{1}{2} + \frac{\pi^2}{\log^2(cmR)}, \quad (5.41)$$

де

$$c = \exp\left[-2\Psi(1) - \frac{2J_0(1/2)}{J_0(1/2) - J_1(1/2)}\right] \approx 0.21. \quad (5.42)$$

Зауважимо, що залежність критичної константи від mR дуже схожа на аналогічну залежність у випадку квантовій електродинаміці. Для $Z > Z_c$, використовуючи рівняння (5.34), знаходимо резонансні рівні:

$$\epsilon = -m\left(1 + \xi + i\frac{3\pi}{8}e^{-\pi/\sqrt{2\xi}}\right), \quad \xi = \frac{3\pi}{8}\,\frac{\beta - \beta_c}{\beta\beta_c}, \quad (5.43)$$

де $\beta_c = \sqrt{(Z_c\alpha)^2 - 1/4}$. Так само як і в квантовій електродинаміці, уявна частина енергії резонансного стану зникає експоненційно при $Z \to Z_c$. Така поведінка пов'язана з тунелюванням крізь кулонівський бар'єр.

Для квазічастинок в графені в полі центрального потенціалу $V(r)$ можемо отримати ефективне рівняння Шредінгера для нижньої компоненти $\chi(r)$ дираківського радіального спінора $\Psi^T(r) = (a(r)\ \chi(r))$, а саме

$$\chi''(r) + k^2(r)\chi(r) = 0. \tag{5.44}$$

При цьому верхня компонента $a(r)$ виражається через нижню наступним чином

$$a(r) = \exp\left[\frac{1}{2}\int\left(\frac{1}{r} - \frac{\tilde{V}'}{\epsilon + m - \tilde{V}}\right)dr\right]\chi(r), \tag{5.45}$$

де

$$k^2(r) = 2(\mathcal{E} - U(r)), \quad \mathcal{E} = \frac{\epsilon^2 - m^2}{2}, \quad \tilde{V} = \frac{V(r)}{\hbar v_F}.$$

Ефективний потенціал $U(r)$ можна представити у вигляді суми двох членів $U(r) = U_1(r) + U_2(r)$, де ефективний потенціал поля Клейна-Гордона

$$U_1(r) = \epsilon\tilde{V} - \frac{\tilde{V}^2}{2} + \frac{j(j-1)}{2r^2}, \tag{5.46}$$

а потенціал

$$U_2(r) = \frac{1}{4}\left[\frac{\tilde{V}''}{\epsilon + m - \tilde{V}} + \frac{3}{2}\left(\frac{\tilde{V}'}{\epsilon + m - \tilde{V}}\right)^2 + \frac{2j\tilde{V}'}{r(\epsilon + m - \tilde{V})}\right] \tag{5.47}$$

включає спінові ефекти. Треба зазначити, що вираз (5.45) і потенціали (5.46) та (5.47) співпадають з відповідними рівняннями в квантовій електродинаміці. На Рис. 5.4 зображено потенціал $U(r)$ при $Z \to Z_c$, $j = 1/2$, та $\epsilon = -m$, який має бар'єр. Тунелювання через цей бар'єр і обумовлює вище згадані резонанси. Поява резонансних станів одночасно з "пірнанням" дискретних станів в нижній континуум є типовою в квантовоелектродинамічно-подібних системах. У наступному підрозділі ми покажемо, що присутність магнітного поля суттєво змінює цю властивість.

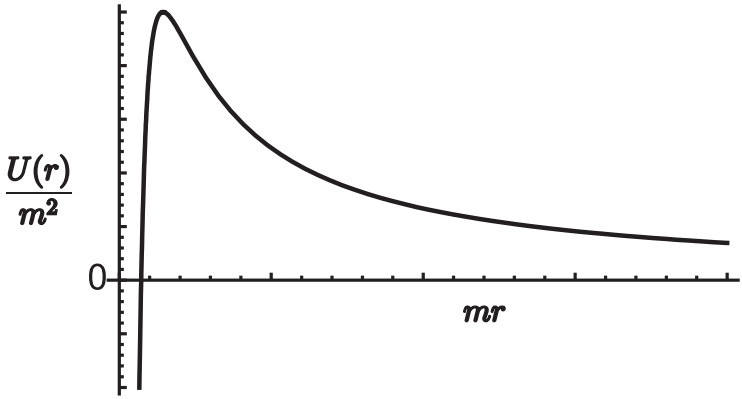


Рис. 5.4: Ефективний потенціал для кулонівського центру у випадку $\epsilon = -m$ та $Z = Z_c$.

5.3 Потенціальна яма у зовнішньому магнітному полі.

Для розгляду нестабільності електронів в потенціальній ямі у однорідному магнітному полі в графені корисно спочатку нагадати вираз для енергії рівнів Ландау у графені, який вже розглядався у Розділі 3.6. У цьому і наступному розділі ми будемо розглядати рівняння Дірака в симетричному калібруванні, яке вивчається у Додатку В. Але замість квантового числа m, яке у Додатку В визначає залежність нижньої компоненти дираківського спінора, нам буде більш зручним використовувати у цьому і наступному розділах квантове число $j + 1/2$, де j є значення повного кутового моменту. Таким чином, оскільки рівень з енергією $E_0 = \Delta$ ($E = -\Delta$) присутній тільки в $\mathbf{K}_-$ ($\mathbf{K}_+$) точці, маємо

$$E_0 = -\xi\Delta, \qquad j \le -\frac{1}{2}, \tag{5.48}$$

тоді як енергії вищих рівнів

$$E_n = \pm\sqrt{\Delta^2 + 2n\left(\frac{\hbar v_F}{l}\right)^2}, \qquad n = 1, 2, \ldots, \quad j + \frac{1}{2} \le n, \tag{5.49}$$

де $l = \sqrt{\hbar c/|eB|}$ – магнітна довжина.

Спочатку розглянемо рівняння Дірака для електрона в потенціальній ямі $V(r) = -V_0\theta(r_0 - r)$ з $V_0 > 0$ в магнітному полі, яке направлено перпендикулярно до площини графену. Ми маємо

$$\begin{bmatrix} \xi\Delta & \hbar v_F(-iD_x - D_y) \\ \hbar v_F(-iD_x + D_y) & -\xi\Delta \end{bmatrix} \Psi(\mathbf{r}) = [E - V(r)]\,\Psi(\mathbf{r}), \tag{5.50}$$

де $D_i = \partial_i + (ie/\hbar c)A_i$ з $i = x, y$, є коваріантною похідною в симетричному калібруванні $(A_x, A_y) = (B/2)(-y, x)$. Очевидно, що розв'язок біля K_- точки може бути отриманий через розв'язок біля K_+ точки заміною $\Delta \to -\Delta$ і перестановкою компонент спінора $\psi_A \leftrightarrow \psi_B$.

У полярних координатах

$$\begin{aligned} iD_x + D_y &= e^{-i\phi}\left(i\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{ieBr}{2\hbar c}\right), \\ iD_x - D_y &= e^{i\phi}\left(i\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{ieBr}{2\hbar c}\right). \end{aligned} \tag{5.51}$$

Як і раніше, ми можемо представити $\Psi(\mathbf{r})$ в термінах власних функцій кутового моменту $J_z = L_z + \sigma_z/2 = -i\partial/\partial\phi + \sigma_z/2$ наступним чином:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} e^{i(j-\frac{1}{2})\phi} f(r) \\ ie^{i(j+\frac{1}{2})\phi} g(r) \end{pmatrix}, \tag{5.52}$$

з $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \ldots$. Тоді для функцій $f(r)$, $g(r)$ отримаємо наступні рівняння:

$$f' - \frac{j+1/2}{r} f - \frac{r}{2l^2} f + \frac{E + \xi\Delta - V(r)}{\hbar v_F} g = 0, \tag{5.53}$$

$$g' + \frac{j-1/2}{r} g + \frac{r}{2l^2} g - \frac{E - \xi\Delta - V(r)}{\hbar v_F} f = 0. \tag{5.54}$$

Ці рівняння можуть бути легко розв'язані в областях $r < r_0$ та $r > r_0$ в термінах вироджених гіпергеометричних функцій Φ та Ψ. В області $r < r_0$, виключаючи функцію $g(r)$, ми отримуємо диференціальне рівняння другого порядку для $f(r)$

$$f'' - \frac{1}{\rho} f' + \left[2p_V^2 - j - \frac{1}{2} - \frac{j^2 - j - 3/4}{\rho^2} - \frac{\rho^2}{4}\right] f = 0, \tag{5.55}$$

де ми ввели безрозмірні величини $\rho = r/l$

$$p_V^2 = \frac{l^2[(E+V_0)^2 - \Delta^2]}{2(\hbar v_F)^2}, \qquad p^2 = \frac{l^2(E^2-\Delta^2)}{2(\hbar v_F)^2}. \tag{5.56}$$

В області $r > r_0$ рівняння для $f(r)$ має такий самий вигляд як і (5.55), тільки необхідно покласти $V_0 = 0$.

Розв'язки, які є регулярними в точці $r = 0$, мають вигляд

$$f_1(\rho) = \rho^{j+\frac{1}{2}} e^{-\rho^2/4} \frac{C_1}{\Gamma(j+1/2)} \Phi\left(j + \frac{1}{2} - p_V^2, j + \frac{1}{2}; \frac{\rho^2}{2}\right), \tag{5.57}$$

$$g_1(\rho) = \frac{l(E+V_0-\xi\Delta)}{\sqrt{2}\hbar v_F} \rho^{j+\frac{3}{2}} e^{-\rho^2/4} \frac{C_1}{\Gamma(j+3/2)} \Phi\left(j + \frac{1}{2} - p_V^2, j + \frac{3}{2}; \frac{\rho^2}{2}\right), \tag{5.58}$$

а ті що спадають на нескінченності, визначаються наступними рівняннями

$$f_2(\rho) = C_2 \rho^{j+\frac{1}{2}} e^{-\rho^2/4} \Psi\left(j + \frac{1}{2} - p^2, j + \frac{1}{2}; \frac{\rho^2}{2}\right), \tag{5.59}$$

$$g_2(\rho) = \frac{\sqrt{2}\hbar v_F C_2}{l(E+\xi\Delta)} \rho^{j+\frac{3}{2}} e^{-\rho^2/4} \Psi\left(j + \frac{1}{2} - p^2, j + \frac{3}{2}; \frac{\rho^2}{2}\right). \tag{5.60}$$

Зауважимо, що ці вирази є справедливими при всіх $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \ldots$.

Зшиваючи розв'язки при $r = r_0$

$$\left.\frac{f_1(\rho)}{f_2(\rho)}\right|_{\rho=\rho_0} = \left.\frac{g_1(\rho)}{g_2(\rho)}\right|_{\rho=\rho_0}, \qquad \rho_0 = \frac{r_0}{l}, \tag{5.61}$$

ми отримуємо трансцендентне рівняння для енергій рівнів з повним моментом j

$$\begin{aligned} &\frac{2(\hbar v_F)^2 (j+\frac{1}{2}) \Phi\left(j+\frac{1}{2}-p_V^2, j+\frac{1}{2}; \frac{\rho_0^2}{2}\right)}{l^2(E+V_0-\xi\Delta)\Phi\left(j+\frac{1}{2}-p_V^2, j+\frac{3}{2}; \frac{\rho_0^2}{2}\right)} \\ &= (E+\xi\Delta) \frac{\Psi\left(j+\frac{1}{2}-p^2, j+\frac{1}{2}; \frac{\rho_0^2}{2}\right)}{\Psi\left(j+\frac{1}{2}-p^2, j+\frac{3}{2}; \frac{\rho_0^2}{2}\right)}. \end{aligned} \tag{5.62}$$

Для ненульового V_0, рівні Ландау перестають бути виродженими. Використовуючи рівняння (5.62), можна отримати залежність енергії рівнів від V_0. Для рівнів Ландау $E = \Delta$ з різними j, їх енергії як функція V_0/Δ (при фіксованому магнітному полі B) зображені на Рис. 5.5 для $l\Delta/(\sqrt{2}\hbar v_F) = 0.1$ та $\rho_0 = r_0/l = 0.02$. Ми бачимо, що при

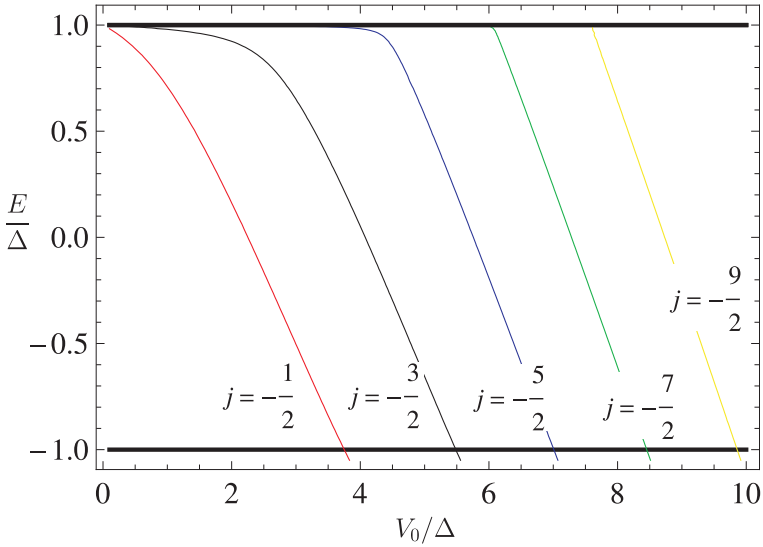


Рис. 5.5: Залежність енергій найнижчих рівнів Ландау в $\mathbf{K}_-$ точці від V_0/Δ.

зростанні V_0 все більше рівнів з різними j *перетинають енергетичний рівень* $E = -\Delta$. Це означає, що вакуум вторинно квантованої теорії стає нестабільним відносно формування електрон-діркових пар. Однак, як зазначено у Вступі, через наявність однорідного магнітного поля відсутні *резонансні розв'язки*. Причиною цього є поява додатнього доданку $r^2/4l^2$ в потенціалі ефективного рівняння Шредингера для однієї з компонент спінора (див. відповідні рівняння для кулонівського потенціалу в наступному підрозділі), який якісно змінює асимптотику ефективного потенціалу: в ненульовому полі потенціал зростає на нескінченності, а при $B = 0$ спадає. Отже, квазічастинки обмежуються потенціалом і не можуть вилетіти на нескінченність, формуючи тільки дискретні рівні.

Ми хотіли б наголосити, що дана ситуація подібна до ситуації з

глибокою вакансією в багатоелектронному атомі. Усі електронні зв'язані стани в атомі, які знаходяться як розв'язки рівняння Дірака в кулонівському полі ядра є абсолютно стабільними. Однак, беручи до уваги взаємодію з вторинно квантованим електромагнітним полем, електрони вищих рівнів стають нестабільними відносно переходу в вакантний стан із випромінюванням фотону.

Критичний потенціал V_{0cr} визначається як потенціал, для якого відбувається перше занурення. Відповідно до Рис. 5.5, таке занурення вперше реалізується для стану з $j = -1/2$ (потенціальна яму знімає виродження рівнів Ландау по квантовому числу момента імпульсу j). Проаналізуємо в деталях, як цей стан змінюється з зростанням V_0. Для стану з $j = -1/2$ рівняння (5.62) набуває вигляду

$$(E + V_0 - \Delta)\frac{\rho_0^2}{2}\frac{\Phi\left(1 - p_V^2, 2; \frac{\rho_0^2}{2}\right)}{\Phi\left(-p_V^2, 1; \frac{\rho_0^2}{2}\right)} = -(E - \Delta)\frac{\Psi\left(-p^2, 0; \frac{\rho_0^2}{2}\right)}{\Psi\left(-p^2, 1; \frac{\rho_0^2}{2}\right)}, \quad (5.63)$$

де ми використали співвідношення

$$\lim_{c\to -m}\frac{\Phi(a, c; x)}{\Gamma(c)} = \frac{\Gamma(a + m + 1)}{\Gamma(a)(m + 1)!}x^{m+1}\Phi(a+m+1, m+2; x),\ m = 0, 1, \ldots. \quad (5.64)$$

При $V_0 \to 0$ рівняння (5.63) дає наступну енергію зв'язаного стану в $\mathbf{K}_-$ точці:

$$E = \Delta - V_0\left(1 - e^{-r_0^2/2l^2}\right), \quad (5.65)$$

на противагу неаналітичній поведінці по константі зв'язку V_0 у відсутності магнітного поля, що описується виразом (5.9). (У $\mathbf{K}_+$ точці подібний стан існує для кутового моменту $j = +1/2$.)

Із ростом V_0, енергія цього зв'язаного стану зменшується і згодом перетинає рівень $E = -\Delta$ для деякого критичного значення V_{0cr}. При $E = -\Delta$ ми маємо $p^2 = 0$ і $p_V^2 = l^2(V_0^2 - 2\Delta V_0)/2(\hbar v_F)^2$. Тоді, використовуючи те, що $\Psi(0, 0; z) = \Psi(0, 1; z) = 1$, ми знаходимо, що рівняння (5.63) визначає наступне значення V_{0cr}

$$V_{0cr} = 2\Delta\left[1 + \frac{2\Phi\left(a, 1, \frac{\rho_0^2}{2}\right)}{\rho_0^2\Phi\left(1 + a, 2, \frac{\rho_0^2}{2}\right)}\right], \quad (5.66)$$

де $a = -l^2V_{0cr}(V_{0cr} - 2\Delta)/2(\hbar v_F)^2$. Слід зауважити, що для нульового магнітного поля ($l = \infty$) рівняння (5.66) зводиться до рівняння

(5.10) для V_{0cr}. При цьому, величина V_{0cr} прямує до скінченного значення в безмасовій границі, $\Delta \to 0$. Критична сила потенціалу V_{0cr} як функція Δ зображена на Рис. 5.6 при різних значеннях параметра ρ_0, який визначає відношення глибини потенціалу до магнітної довжини. Аналітично не важко побачити, що при $\rho_0 \ll 1$ рівняння (5.66)

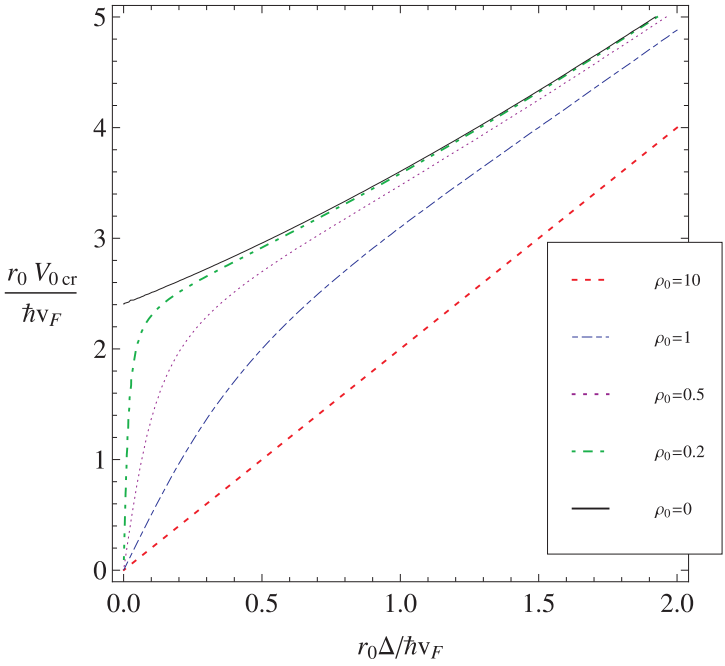


Рис. 5.6: Критичний потенціал V_{0cr} як функція щілини для різних значень ρ_0. Випадок нульового магнітного поля відповідає $\rho_0 = 0$.

передбачає

$$V_{0cr} = 2\Delta(1 + 2l^2/r_0^2)\,. \tag{5.67}$$

Як видно з Рис. 5.6 та рівняння (5.67), критична сила потенціалу V_{0cr} зменшується з ростом магнітного поля (зменшенням l) при фіксованих r_0 та Δ. Фізична причина цього полягає в тому, що магнітне поле робить орбіти електронів ближчими до зарядженого центру, роблячи притягання сильнішим, і тому ефективно знижує критичну константу.

Цікавим є те, що V_{0cr} прямує до нуля при $\Delta \to 0$. Таким чином,

присутність однорідного магнітного поля призводить до нестабільності безмасових квазічастинок у вторинно квантованій теорії для *будь-якого* значення потенціалу V_0. Цей результат показує, що відповідна нестабільність повинна бути також присутня і для електронних станів у полі кулонівського центру у зовнішньому магнітному полі при будь-якому значенні Z. Ця задача буде розглянута у наступному підрозділі.

Нарешті, ми проаналізуємо стани з енергіями біля $\pm\Delta$ і великих по модулю негативних j. Існує нескінченна серія рівнів енергії, що асимптотично наближаються до $\pm\Delta$ для великих $|j+1/2|$. Таким чином, для достатньо великих j ефектом потенціалу V_0 можна знехтувати і спектр відтворює рівні Ландау. При $V_0 \to 0$, вони поводять себе як

$$E \simeq -\xi\Delta - \frac{V_0 e^{-\rho_0^2/2}}{\Gamma(k+1)} \left(\frac{\rho_0^2}{2}\right)^{k+1}, \qquad k = -\left(j+\frac{1}{2}\right) >> 1. \tag{5.68}$$

Ці рівні також можна знайти прямим чином розв'язавши рівняння (5.62): спершу треба взяти границю $j+1/2 \to -k$ у сенсі (5.64), а потім проаналізувати випадок слабкого зв'язку та великих k. Альтернативно, рівняння (5.68) можна отримати як перший порядок теорії збурень до рівнів енергії $\pm\Delta$ в $\mathbf{K}_\pm$ точках у магнітному полі. Зауважимо, що рівні (5.68) лежать нижче Δ для $\mathbf{K}_-$ точки та нижче $-\Delta$ для $\mathbf{K}_+$ точки.

5.4 Безпорогова нестабільность для кулонівського центру індукована зовнішнім магнітним полем

Рівняння для функцій $f(r)$ та $g(r)$ для кулонівського центру випливають прямо з рівнянь (5.53) і (5.54), якщо покласти

$$V(r) = -Ze^2/r\ \theta(r-R) - Ze^2/R\ \theta(R-r)$$

(ми використовуємо діелектричну константу $\kappa = 1$). Виключаючи функцію $f(r)$, ми отримуємо диференціальне рівняння другого порядку для функції $g(r)$. Далі, вводячи функцію $\chi(r)$ через співвідношення

$$[E - \xi\Delta - V(r)]^{1/2}\chi(r) = \frac{g(r)}{\sqrt{r}}, \tag{5.69}$$

ми отримуємо рівняння Шредінгера,

$$-\chi''(r) + U(r)\chi(r) = \mathcal{E}\chi(r), \tag{5.70}$$

де

$$\mathcal{E} = E^2 - \Delta^2, \tag{5.71}$$

і ефективний потенціал $U(r) = U_1(r) + U_2(r)$ з

$$U_1 = \frac{V(2E-V)}{(\hbar v_F)^2} + \frac{j(j+1)}{r^2} + \frac{r^2}{4l^4} + \frac{j-1/2}{l^2} \tag{5.72}$$

та

$$U_2 = \frac{1}{2}\left[\frac{V''}{E-\xi\Delta-V} + \frac{3}{2}\left(\frac{V'}{E-\xi\Delta-V}\right)^2 - \left(\frac{j}{r} + \frac{r}{2l^2}\right)\frac{2V'}{E-\xi\Delta-V}\right]. \tag{5.73}$$

Ми зобразили ефективний потенціал $U(r)$ біля точки $\mathbf{K}_-$ для $E = -\Delta$ та $j = -1/2$ на Рис. 5.7. Легко побачити енергетичний бар'єр

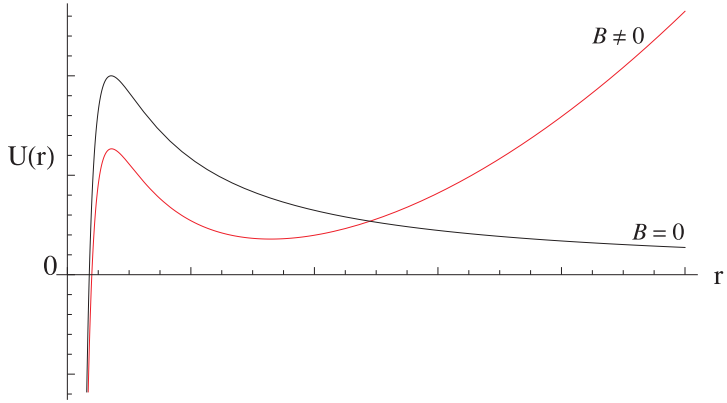


Рис. 5.7: Залежність потенціалу $U(r)$ від відстані r до кулонівського центру при нульовому та ненульовому магнітному полі для стану з $E = -\Delta$ та $j = -1/2$.

у відсутності магнітного поля, що призводить до появи резонансів для достатньо великих зарядів. Присутність ненульового магнітного поля *змінює* асимптотику ефективного потенціалу на нескінченності і,

таким чином, перешкоджає появі резонансних станів. Ця особливість *якісно* відрізняє задачу кулонівського центру (або потенціальної ями) в магнітному полі від аналогічної при $B = 0$.

На жаль, рівняння (5.70) належить до класу рівнянь з двома регулярними та однією нерегулярною (при $r = \infty$) сингулярностями, і, тому, його розв'язки не можуть бути отримані у формі відомих спеціальних функцій.

Оскільки нас цікавлять розв'язки рівнянь (5.53) та (5.54) з кулонівським потенціалом в режимі $Z\alpha \to 0$ ($\alpha = e^2/\hbar v_F$), ми можемо їх знайти, використовуючи теорію збурень. Для $Z\alpha = 0$, розв'язки рівнянь (5.53) та (5.54) описують рівні Ландау, які є виродженими з повним кутовим моментом j. Для рівнів з $E^{(0)} = \Delta$ відповідні нормовані хвильові функції (5.52) мають форму (в $\mathbf{K}_-$ точці)

$$\Psi_k(r,\phi) = \frac{(-1)^k}{l\sqrt{2\pi k!}} e^{-r^2/4l^2} \begin{pmatrix} 0 \\ \left(\frac{r^2}{2l^2}\right)^{k/2} e^{-ik\phi} \end{pmatrix}, \tag{5.74}$$

де $k = -(j+1/2) = 0, 1, 2, \ldots$. Кулонівський потенціал знімає виродження по j. Поправки до енергії збурених станів рівня Ландау $E^{(0)} = \Delta$ можуть бути знайдені із секулярного рівняння

$$|E^{(1)} - V_{k_1 k_2}| = 0\,.$$

Оскільки $V_{k_1 k_2}$ є діагональною матрицею, ми легко отримуємо

$$E_k^{(1)} = V_{kk} = -\frac{Ze^2}{k!2^k l} \int\limits_0^\infty d\rho\, \rho^{2k}\, e^{-\rho^2/2} = -\frac{Ze^2\Gamma(k+\frac{1}{2})}{l\sqrt{2}\Gamma(k+1)}\,. \tag{5.75}$$

Таким чином, при великих k енергетичні рівні згущуються біля $E = \Delta$:

$$E_k \simeq \Delta - \frac{Ze^2}{l\sqrt{2k}}. \tag{5.76}$$

Так само як і у випадку потенціальної ями, найбільша за модулем поправка $E_0^{(1)} = -Z\alpha\hbar v_F\sqrt{\pi}/l\sqrt{2}$ відповідає стану з $j = -1/2$ ($k = 0$). Критичний заряд визначається з умови $E = E^{(0)} + E_0^{(1)} = -\Delta$, тобто коли рівень E перетинає заповнені рівні. Це дає

$$Z_c\alpha = \frac{2\sqrt{2}\Delta l}{\sqrt{\pi}\hbar v_F}\,. \tag{5.77}$$

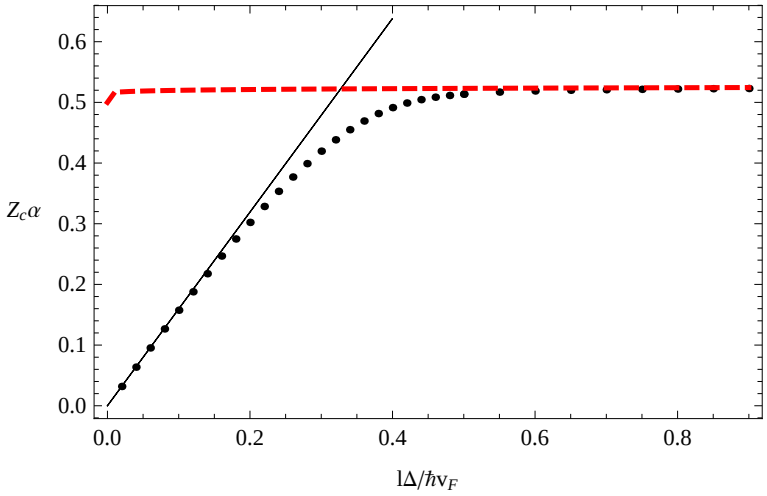


Рис. 5.8: Критична кулонівська константа зв'язку $Z_c\alpha$ як функція щілини для нульового (пунктирна червона ліня) та ненульового магнітного поля (чорна лінія з крапок) для стану з $j = -1/2$. Пряма чорна лінія відповідає критичній кулонівській константі в першому наближенні теорії збурень (5.77).

Подібно до випадку потенціальної ями в магнітному полі, критичний заряд (5.77) прямує до нуля при $\Delta \to 0$. Це означає, що магнітне поле значно впливає на задачу кулонівського центру в графені, роблячи будь-який заряд надкритичним. Рівняння (5.77) дає вираз для критичної кулонівської константи зв'язку при $Z\alpha \to 0$ у першому порядку теорії збурень. Для довільних значень $Z\alpha$ ми розрахували залежність критичної константи від щілини чисельно. Відповідні результати представлені на Рис. 5.8, де параметр регуляризації кулонівського потенціалу ми поклали рівним $R = 10^{-3}l$. Пунктирна червона лінія на Рис. 5.8 є критичною кулонівською константою зв'язку $Z_c\alpha = 1/2 + \pi^2/\log^2(c\Delta R/\hbar v_F)$ у відсутності магнітного поля (див. Рис. 5.3 з підрозділу 5.2). Таким чином, у відсутності магнітного поля ($l \to \infty$) критичний заряд прямує до $1/2$, тоді як при $l\Delta \to 0$ для безмасових збуджень у зовнішньому магнітному полі $Z_c\alpha \to 0$.

Таким чином, зовнішнє магнітне поле знижує до нуля значення критичної константи, при якій відбувається зародження нестабільно-

сті системи 2+1-вимірних діраківських електронів у полі зарядженого центру (зарядженої домішки). Важливим інгредієнтом нестабільності для безщілинних частинок в магнітному полі є наявність нескінченно виродженого рівня з нульовою енергією. В цьому випадку, довільно малий притягуючий потенціал призводить до появи незаповнених станів в морі Дірака, що і призводить до нестабільності системи.

Треба підкреслити якісну відмінність в явищі нестабільності між масивними та безмасовими частинками. Для масивних частинок існує *скінченне* критичне значення сили потенціалу, при якій найнижчий незаповнений рівень перетинається з першим заповненим, формуючи дірку в морі заповнених станів. При зростанні потенціалу все більше рівнів перетинають цей рівень. Ясно, що система буде намагатися перебудуватись, заповнюючи незайняті стани. Важливою відмінністю у випадку безмасових станів, окрім нульової критичної сили потенціалу, є те, що вакантною стає одразу нескінченна кількість станів.

Отже, присутність зовшнішнього магнітного поля значно впливає на проблему атомного колапсу в графені в сильному кулонівському полі. Ясно, що задача стає багаточастинковою і має бути розглянута за допомогою методів теорії поля. Можна очікувати, що генерація щілини в графені за наявності магнітного поля буде мати місце і при слабкому зв'язку.

Бібліоґрафія

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov et al., *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films,* Science **306**, 666 (2004).

[2] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика, ч. 1.* (Наука, Москва, 1976).

[3] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M. Peres, *Drawing Conclusions from Graphene,* Physics World **19**, 34 (2006).

[4] T. Chakraborty, *Graphene: a nanoscale quantum playing field,* Physics in Canada **63**, 351 (2006).

[5] P.R. Wallace, *The band theory of graphite,* Phys. Rev. **71**, 622 (1947).

[6] G.W. Semenoff, *Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly,* Phys. Rev. Lett. **53**, 2449 (1984).

[7] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov et al., *Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene,* Nature **438**, 197 (2005).

[8] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, P. Kim, *Experimental Observation of Quantum Hall Effect and Berry's Phase in Graphene,* Nature **438**, 201 (2005).

[9] M.O. Goerbig, *Quantum Hall Effects*, lecture notes for the Singapore session "Ultracold Gases and Quantum Information" of Les Houches Summer School, 2009; Preprint arXiv:0909.1998.

[10] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, *Unconventional Integer Quantum Hall Effect in Graphene,* Phys. Rev. Lett. **95**, 146801 (2005).

[11] M. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions,* (Cambridge University Press, 2012).

[12] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, and J. P. Carbotte, *AC conductivity of graphene: from tight-binding model to* $2+1$*-dimensional quantum electrodynamics*, Int. J. Mod. Phys. B **21**, 4611 (2007).

[13] A.K. Geim and K. S. Novoselov, *The rise of graphene*, Nature Materials **6**, 183 (2007).

[14] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A. K. Geim, *The electronic properties of graphene*, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).

[15] D.S.L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler, and T. Chakraborty, *Properties of Graphene: Theoretical Perspective*, Adv. in Phys. **59**, 261 (2010).

[16] C. W. J. Beenakker, *Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene*, Rev. Mod. Phys. **80**, 1337 (2008).

[17] M.O. Goerbig, *Electronic Properties of Graphene in a Strong Magnetic Field*, Rev. Mod. Phys. **83**, 1193 (2011).

[18] S. Das Sarma, S. Adam, E. W. Hwang, E. Rossi, *Electronic Transport in Two Dimensional Graphene*, Rev. Mod. Phys. **83**, 407 (2011).

[19] Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела, т. 1.* (Наука, Москва, 1979).

[20] J.C. Slonczewski and P. R. Weiss, *Band Structure of Graphite*, Phys. Rev. **109**, 272 (1959).

[21] W.M. Lomer, *The Valence Bands in two-dimensional Graphite*, Proc. Roy. Soc. A **227**, 330 (1955).

[22] A. Altland and B. Simons, *Condensed Matter Field Theory,* (Cambridge University Press, 2006).

[23] А.С. Давыдов, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1973).

[24] G. Volovik, *Quantum phase transitions from topology in momentum space. Chapter in the book "Quantum Analogues: From Phase Transitions to Black Holes and Cosmology"*, Ed. by W. G. Unruh, R. Schutzhold. Vol. 718. Pp. 31–73 (Springer Lecture Notes in Physics, 2007).

[25] C.P. Enz, *A Course on Many-Body Theory Applied to Solid-State Physics*, (World Scientific, Singapore, 1992).

[26] F.D.M. Haldane, *Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).

[27] M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, A.K. Geim, *Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene*, Nature Phys. **2**, 620 (2006).

[28] T. Tudorovskiy, K. J. A. Reijnders, M. I. Katsnelson, *Chiral tunneling in single-layer and bilayer graphene*, Phys. Scr. T **146**, 014010 (2012).

[29] В.П. Маслов, М.В. Федорюк, *Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики*, (Наука, Москва, 1976).

[30] M. Abramowitz, I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, (Dover, New York, 1964).

[31] Я.Б. Зельдович, В.С. Попов, *Электронная структура сверхтяжелых атомов*, УФН **105**, 403 (1971).

[32] Y. Wang, V.W. Brar, A.V. Shytov, Q. Wu, W. Regan, H.-Z. Tsai, A. Zettl, L.S. Levitov, and M.F. Crommie, *Mapping Dirac quasiparticles near a single Coulomb impurity on graphene*, Nat. Phys. **8**, 653 (2012).

[33] E.V. Gorbar, V.P. Gusynin, V. A. Miransky, I. A. Shovkovy, *Magnetic field driven metal-insulator phase transition in planar systems*, Phys. Rev. B **66**, 045108 (2002).

[34] O.V. Gamayun, E.V. Gorbar, V.P. Gusynin, *Supercritical Coulomb center and excitonic instability in graphene*, Phys. Rev. B **80**, 165429 (2009).

[35] А.И. Ахиезер, В.Б. Берестецкий *Квантовая электродинамика*, (Наука, Москва, 1981).

[36] O.V. Gamayun, E.V. Gorbar, V.P. Gusynin, *Magnetic field driven instability of a charged center in graphene*, Phys. Rev. B **83**, 235104 (2011).

[37] I.S. Gradshtein, I.M. Ryzhik, *Table of integrals, series and products*, (Academic Press, Orlando, 1980).

[38] H. Bateman, A. Erdelyi, *Higher Transcendental Functions, Vol. 2.* (Mc Graw-Hill book Co., New York, 1953).

Додаток А

Рівняння Дірака у зовнішньому магнітному полі: калібрування Ландау

Рівняння Дірака з масовим членом γ^3 має вигляд:

$$\left[i\gamma^0\hbar\partial_t + i\hbar v_F\gamma^1 D_x + i\hbar v_F\gamma^2 D_y - \Delta\gamma^3\right]\Psi(t,\mathbf{r}) = 0, \tag{A.1}$$

де коваріантна похідна

$$D_i = \partial_i + \frac{ie}{\hbar c}A_i, \quad i = x, y, \quad A_i = (A_x, A_y), \tag{A.2}$$

та матриці γ^i належать до кірального представлення (2.43). Магнітне поле $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, B_z)$ в калібруванні Ландау визначається вектор-потенціалом $(A_x, A_y) = (0, Bx)$. Легко перевірити, що комутатор

$$[D_x, D_y] = \frac{i}{l^2}, \tag{A.3}$$

де ми ввели магнітну довжину $l = \sqrt{\hbar c/|eB|}$. Для розв'язків типу $\Psi(t,\mathbf{r}) = e^{-iEt/\hbar}\Psi(\mathbf{r})$ рівняння (A.1) набуває вигляд

$$\left[\hbar v_F\left(-\alpha_1 iD_x - \alpha_2 iD_y\right) + \Delta\alpha_3\right]\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \qquad \alpha_i = \gamma^0\gamma^i \tag{A.4}$$

де матриці α_i наведені у (2.41). Дуже зручною властивістю цього представлення рівняння Дірака є те, що рівняння для різних долин ($\mathbf{K}_\pm$ точок) розділяються:

$$\begin{pmatrix} \Delta & \hbar v_F\left(-iD_x - D_y\right) \\ \hbar v_F\left(-iD_x + D_y\right) & -\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{AK_+} \\ \psi_{BK_+} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_{AK_+} \\ \psi_{BK_+} \end{pmatrix}, \tag{A.5}$$

$$\begin{pmatrix} \Delta & \hbar v_F\left(-iD_x - D_y\right) \\ \hbar v_F\left(-iD_x + D_y\right) & -\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{BK_-} \\ \psi_{AK_-} \end{pmatrix} = -E \begin{pmatrix} \psi_{BK_-} \\ \psi_{AK_-} \end{pmatrix}. \tag{A.6}$$

При умові $E \neq -\Delta$ можна виразити B-компоненти ψ_{BK_+}, ψ_{BK_-} через A-компоненти:

$$\begin{aligned} \psi_{BK_+} &= \frac{\hbar v_F}{E+\Delta}\left(-iD_x + D_y\right)\psi_{AK_+}, \\ \psi_{BK_-} &= \frac{\hbar v_F}{E+\Delta}\left(iD_x + D_y\right)\psi_{AK_-}. \end{aligned} \tag{A.7}$$

Таким чином двокомпонентні спінори для $\mathbf{K}_\pm$ долин можуть бути записані у формі:

$$\begin{aligned} \psi_{K_+} &= A_1 \begin{pmatrix} \psi_{AK_+} \\ \frac{\hbar v_F\left(-iD_x + D_y\right)}{E+\Delta}\psi_{AK_+} \end{pmatrix}, \\ \psi_{K_-} &= A_2 \begin{pmatrix} \frac{\hbar v_F\left(iD_x + D_y\right)}{E+\Delta}\psi_{AK_-} \\ \psi_{AK_-} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{A.8}$$

Константи $A_{1,2}$ в (A.8) визначаються за допомогою умов нормування

$$\int d^2 r \psi^\dagger_{K_\pm}(\mathbf{r}, k, n)\psi_{K_\pm}(\mathbf{r}, k', n') = \delta_{n,n'}\delta(k - k'), \tag{A.9}$$

де k, k' та n, n' є квантовими числами, що характеризують власні стани дираківських квазічастинок у магнітному полі (у обраному калібруванні ними є хвильовий вектор направлений повздовж y-напрямку та індекс рівня Ландау). Як слідує з (A.5) і (A.6), A-компоненти спінорів ψ_{AK_+}, ψ_{AK_-} задовольняють наступним рівнянням:

$$\left(-iD_x - D_y\right)\left(-iD_x + D_y\right)\psi_{AK_+} = \frac{E^2 - \Delta^2}{\hbar^2 v_F^2}\psi_{AK_+}, \tag{A.10}$$

$$\left(-iD_x + D_y\right)\left(-iD_x - D_y\right)\psi_{AK_-} = \frac{E^2 - \Delta^2}{\hbar^2 v_F^2}\psi_{AK_-}. \tag{A.11}$$

Ці рівняння другого порядку можна ще спростити, якщо ввести безрозмірний параметр $\lambda \equiv \left(E^2 - \Delta^2\right)/\epsilon_0^2$, де енергетичний масштаб Ландау $\epsilon_0 \equiv \sqrt{2\hbar v_F^2 |eB|/c}$. Тоді (A.10) та (A.11) набувають вигляд

$$\begin{aligned} \left(-l^2 D_x^2 - l^2 D_y^2 + 1\right) \psi_{AK_+} &= 2\lambda \psi_{AK_+}, \\ \left(-l^2 D_x^2 - l^2 D_y^2 - 1\right) \psi_{AK_-} &= 2\lambda \psi_{AK_-}. \end{aligned} \tag{A.12}$$

У обраному калібруванню Ландау $(A_x, A_y) = (0, Bx)$, диференційні рівняння (A.12) не мають явної залежності від координати y. Таким чином, відповідні розв'язки (A.12) трансляційно інваріантні в y-напрямку, що задовольняється, якщо хвильові функції є плоскими хвилями у y-напрямку,

$$\begin{aligned} \psi_{AK_+}(\mathbf{r}, k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi l}} e^{iky} u_+(x, k), \qquad & \psi_{BK_+} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi l}} e^{iky} v_+(x, k), \\ \psi_{AK_-}(\mathbf{r}, k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi l}} e^{iky} u_-(x, k), \qquad & \psi_{BK_-} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi l}} e^{iky} v_-(x, k), \end{aligned} \tag{A.13}$$

де функції $u_\pm(x, k)$ залежать тільки від однієї безрозмірної комбінації змінних, $\xi = x/l + kl$, та задовольняють наступним рівнянням:

$$\left(\partial_\xi^2 - \xi^2 \mp 1 + 2\lambda\right) u_\pm(\xi) = 0. \tag{A.14}$$

У відповідності з (A.8), усунуті компоненти $v_\pm(x, k) \equiv v_\pm(\xi)$ дорівнюють

$$v_\pm(\xi) = \mp i \frac{\epsilon_0 \left(\partial_\xi \mp \xi\right) u_\pm(\xi)}{\sqrt{2}(E + \mu^{(\pm)} \mp \Delta^{(\mp)})}. \tag{A.15}$$

(Зазначимо, що $x_0 \equiv -kl^2$ можна інтерпретувати як центр локалізації хвильової функції у x-напрямку.)

Ліва частина умови (A.9) може бути переписана, наприклад, для

константи A_1 так:

$$
\begin{aligned}
&|A_1|^2 \int d^2\mathbf{r} \left[\psi^\dagger_{AK_+}(\mathbf{r},k)\psi_{AK_+}(\mathbf{r},k') \right.\\
&\left. +\frac{\hbar^2 v_F^2}{(E+\Delta)^2}[(-iD_x+D_y)\psi_{AK_+}(\mathbf{r},k)]^\dagger(-iD_x+D_y)\psi_{AK_+}(\mathbf{r},k')\right]\\
=&|A_1|^2 \int d^2\mathbf{r} \left[\psi^\dagger_{AK_+}(\mathbf{r},k)\psi_{AK_+}(\mathbf{r},k') \right.\\
&\left. -\frac{\hbar^2 v_F^2}{(E+\Delta)^2}\psi^\dagger_{AK_+}(\mathbf{r},k)(iD_x+D_y)(-iD_x+D_y)\psi_{AK_+}(\mathbf{r},k')\right] =\\
=&|A_1|^2 \int d^2\mathbf{r} \left[\psi^\dagger_{AK_+}(\mathbf{r},k)\psi_{AK_+}(\mathbf{r},k') + \frac{E^2-\Delta^2}{(E+\Delta)^2}\psi^\dagger_{AK_+}(\mathbf{r},k)\psi_{AK_+}(\mathbf{r},k')\right]\\
=&|A_1|^2 \int d^2\mathbf{r} \frac{2|E|}{|E+\Delta|}\psi^\dagger_{AK_+}(\mathbf{r},k)\psi_{AK_+}(\mathbf{r},k'),
\end{aligned}
\tag{A.16}
$$

де у четвертій лінії ми використали рівняння (A.10). Таким чином, $A_1 = \sqrt{\frac{|E+\Delta|}{2|E|}}$. За допомогою цього виразу умови нормування (A.16) для функцій $u_\pm(x,k)$ приймають вигляд

$$
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{l}\, u^\dagger_\pm(x,k)u_\pm(x,k) = 1, \qquad A_{1,2} = \sqrt{\frac{|E+\Delta|}{2|E|}}. \tag{A.17}
$$

Можна легко побачити, що диференційне рівняння другого порядку (A.14) співпадає з відповідним рівнянням, яке виникає при розгляді таких загальновідомих задачах, як опис гармонічного осцилятора та нерелятивістських електронів у магнітному полі. Також ми можемо використати рівняння (10.13.13) з книги [38], яке стверджує, що обмежені розв'язки рівняння

$$
z'' + (2n+1-x^2)z = 0 \tag{A.18}
$$

виражаються через поліноми Ерміта:

$$
z_n(x) = [\pi^{1/2}2^n n!]^{-1/2}\exp(-x^2/2)H_n(x). \tag{A.19}
$$

Розв'язок (A.19) включає в себе нормуючи фактори. Таким чином, обмежені розв'язки (A.14) існують коли $2\lambda = (2n+1\pm1), \quad n = 0,1,\ldots$

і дорівнюють:

$$\begin{aligned}
&u_+(\xi) = w_n(\xi), \qquad \lambda = n+1;\\
&u_-(\xi) = w_n(\xi), \qquad \lambda = n, \qquad n = 0, 1, \ldots,\\
&w_n(\xi) = (\pi^{1/2} 2^n n!)^{-1/2} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\xi w_n(\xi) w_m(\xi) = \delta_{nm}.
\end{aligned} \tag{A.20}$$

Відзначимо, що власні функції $u_-(\xi)$, що відповідають $n = 0$ і $E = -\Delta$ повинні бути виключені з цього списку та розглянуті окремо.

Коли $E = -\Delta$ рівняння у $\mathbf{K}_+$ точці приймає форму

$$\hbar v_F \left(-iD_x + D_y\right) \psi_{AK_+} = 0, \tag{A.21a}$$

$$\hbar v_F \left(-iD_x - D_y\right) \psi_{BK_+} = -2\Delta \psi_{AK_+} \tag{A.21b}$$

Нетривіальним розв'язком рівняння (A.21a) є

$$\psi_{AK_+} \sim e^{iky} e^{\frac{1}{2}(x/l + kl)^2}, \tag{A.22}$$

яке є квадратично неінтегрованим. Через це $\psi_{AK_+} = 0$. Рівняння (A.21b) дає

$$\psi_{BK_+} \sim e^{iky} e^{-\frac{1}{2}(x/l + kl)^2}. \tag{A.23}$$

Таким же самим чином у $\mathbf{K}_-$ точці

$$\hbar v_F \left(-iD_x - D_y\right) \psi_{AK_-} = 0, \tag{A.24a}$$

$$\hbar v_F \left(-iD_x + D_y\right) \psi_{BK_-} = 2\Delta \psi_{AK_-}. \tag{A.24b}$$

Подібно до розгляду $\mathbf{K}_+$ точки, і для ψ_{BK_-} ми одержуємо $\psi_{AK_-} = \psi_{BK_-} = 0$.

Таким чином, при $eB, \Delta > 0$ ми маємо наступні розв'язки з пози-

тивною ($\psi^{(+)}_{K_+}$) і негативною ($\psi^{(-)}_{K_+}$) енергією у $\mathbf{K}_+$ точці:

$$
\begin{aligned}
&\psi^{(+)}_{K_+}(x,y;n,k) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi l}} e^{-i|E_n|t+iky} \frac{1}{\sqrt{2|E_n|}} \begin{pmatrix} \sqrt{|E_n|+\Delta}\, w_{n-1}(\xi) \\ i\sqrt{|E_n|-\Delta}\, w_n(\xi) \end{pmatrix}, \quad n \geq 1, \\
&\psi^{(-)}_{K_+}(x,y;n,k) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi l}} e^{i|E_n|t+iky} \frac{1}{\sqrt{2|E_n|}} \begin{pmatrix} \sqrt{|E_n|-\Delta}\, w_{n-1}(\xi) \\ -i\sqrt{|E_n|+\Delta}\, w_n(\xi) \end{pmatrix}, \quad n \geq 1, \\
&\psi^{(-)}_{K_+}(x,y;n=0,k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi l}} e^{i|E_0|t+iky} \begin{pmatrix} 0 \\ -iw_0(\xi) \end{pmatrix}, \quad n = 0,
\end{aligned}
\tag{A.25}
$$

та у $\mathbf{K}_-$ точці:

$$
\begin{aligned}
&\psi^{(+)}_{K_-}(x,y;n=0,k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi l}} e^{-i|E_0|t+iky} \begin{pmatrix} 0 \\ iw_0(\xi) \end{pmatrix}, \quad n = 0, \\
&\psi^{(+)}_{K_-}(x,y;n,k) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi l}} e^{-i|E_n|t+iky} \frac{1}{\sqrt{2|E_n|}} \begin{pmatrix} \sqrt{|E_n|-\Delta} w_{n-1}(\xi) \\ i\sqrt{|E_n|+\Delta} w_n(\xi) \end{pmatrix}, \quad n \geq 1, \\
&\psi^{(-)}_{K_-}(x,y;n,k) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi l}} e^{i|E_n|t+iky} \frac{1}{\sqrt{2|E_n|}} \begin{pmatrix} -\sqrt{|E_n|+\Delta} w_{n-1}(\xi) \\ i\sqrt{|E_n|-\Delta} w_n(\xi) \end{pmatrix}, \quad n \geq 1,
\end{aligned}
\tag{A.26}
$$

де

$$
E_n = \pm\sqrt{\Delta^2 + \hbar v_F^2 2n|eB|/c}, \tag{A.27}
$$

та ми визначили $w_{-1}(\xi) \equiv 0$. Найнижчий рівень Ландау є незвичайним: тоді як при $n \geq 1$ існують розв'язки, що відповідають як і електронним ($E_n > 0$) так і дірковим ($E_n < 0$) станам у обох $\mathbf{K}_+$ і $\mathbf{K}_-$ точках, розв'язок з $n = 0$ описує дірки у $\mathbf{K}_+$ точці та електрони у $\mathbf{K}_-$ точці. Підкреслимо також, що стани з нульового рівня Ландау з долини $\mathbf{K}_+$ знаходяться тільки на B підгратці, тоді як відповідні стани з долини $\mathbf{K}_-$ знаходяться тільки на A підгратці. (Нагадаємо, що для $\mathbf{K}_-$ долини компоненти спінору переставлені між собою, якщо порівнювати зі спінором визначеним для $\mathbf{K}_+$ долини.)

Додаток B

Рівняння Дірака у зовнішньому магнітному полі: симетрична калібрування

Рівняння Дірака зі звичайним масовим членом має вигляд:

$$\left[i\tilde{\gamma}^0\hbar\partial_t + iv_F\tilde{\gamma}^1\left(\hbar\partial_x + i\frac{e}{c}A_x\right) + iv_F\tilde{\gamma}^2\left(\hbar\partial_y + i\frac{e}{c}A_y\right) - \Delta\right]\psi(t,\mathbf{r}) = 0, \tag{B.1}$$

де у симетричному калібруванні $\mathbf{A} = (-By/2, Bx/2)$, так, що як і у Додатку A магнітне поле $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ направлене повздовж позитивного напрямку z осі.

Як ми вже відзначали у Розділі 3.2 у $2+1$ вимірі існує два нееквівалентних представлення алгебри Дірака:

$$\tilde{\gamma}^0 = \sigma_3, \tilde{\gamma}^1 = i\sigma_1, \tilde{\gamma}^2 = i\sigma_2 \tag{B.2}$$

та

$$\tilde{\gamma}^0 = -\sigma_3, \tilde{\gamma}^1 = -i\sigma_1, \tilde{\gamma}^2 = -i\sigma_2. \tag{B.3}$$

Представлення γ-матриць $\hat{\gamma}^0 = \sigma_3$, $\hat{\gamma}^1 = i\sigma_2$,$\hat{\gamma}^3 = -i\sigma_1$) наведене у (2.48) пов'язано з представленням (B.2), $(\sigma_3, i\sigma_1, i\sigma_2)$ унітарним перетворенням $U = (\hat{I} + i\sigma_3)/\sqrt{2}$.

Хоча й кінцеві результати обчислень не залежать ні від представлення γ-матриць ні від вибору калібрування, проміжні вирази залежать від цього вибору. Оскільки представлення (B.2), (B.3) також часто використовуються у літературі, у цьому Додатку ми розв'яжемо рівняння Дірака (B.1) використовуючи ці представлення. Ми почнемо з розгляду представлення (B.2). Як ми вже знаємо з Додатку A, енергетичний спектр задачі (B.1) залежить від знаків eB та Δ. Як і раніше, ми припустимо, що $eB, \Delta > 0$.

У цьому випадку ми одержуємо, що спектр знову має вигляд:

$$\begin{aligned} E_0 &= -M_0 = -\Delta, \\ E_n &= \pm M_n = \pm\sqrt{\Delta^2 + 2n|eB|\hbar v_F^2/c}, \quad n = 1, 2, \ldots. \end{aligned} \tag{B.4}$$

Загальний розв'язок має вигляд

$$\psi(x) = \sum_{n,m} \left[a_{nm} u_{nm}(x) + b^+_{nm} v_{nm}(x) \right], \tag{B.5}$$

де

$$\begin{aligned} u_{nm} =& \frac{1}{l\sqrt{2\pi}} \exp(-iM_n t) \frac{1}{\sqrt{2M_n}} \begin{pmatrix} \sqrt{M_n + \Delta}\, J^{n-m}_{m-1}(\xi) e^{i(m-1)\theta} \\ \sqrt{M_n - \Delta}\, J^{n-m}_{m}(\xi) e^{im\theta} \end{pmatrix}, \\ & n \geq 1, \qquad m \leq n, \\ v_{0m} =& \frac{1}{l\sqrt{2\pi}} \exp(iM_0 t) \begin{pmatrix} 0 \\ J^{-m}_{m}(\xi) e^{im\theta} \end{pmatrix}, \qquad n = 0, \qquad m \leq 0, \\ v_{nm} =& \frac{1}{l\sqrt{2\pi}} \exp(iM_n t) \frac{1}{\sqrt{2M_n}} \begin{pmatrix} -\sqrt{M_n - \Delta}\, J^{n-m}_{m-1}(\xi) e^{i(m-1)\theta} \\ \sqrt{M_n + \Delta}\, J^{n-m}_{m}(\xi) e^{im\theta} \end{pmatrix}, \\ & n \geq 1, \qquad m \leq n. \end{aligned} \tag{B.6}$$

Ці розв'язки ми записали з використанням функцій

$$\begin{aligned} J^n_\nu(\xi) &= \left[\frac{n!}{(n+\nu)!} \right]^{1/2} e^{-\xi/2} \xi^{\nu/2} L^\nu_n(\xi), \\ J^{-m}_m(\xi) &= \frac{(-1)^m}{\sqrt{(-m)!}} e^{-\xi/2} \xi^{-m/2} \qquad (m \leq 0), \end{aligned} \tag{B.7}$$

де $L^m_n(\xi)$ – поліноми Лагера ($L^m_n(\xi) \equiv 0$ при $n \leq -1$), $l \equiv (\hbar c/|eB|)^{1/2}$, як було вже визначено, магнітна довжина, $\xi = \mathbf{r}^2/2l^2$, а квантове

число $m \leq n$ відображає виродженість кожного рівня по кутовому моменту. Спінори u_{nm} та v_{nm} нормуються наступним чином:

$$\int d^2x\, u^\dagger_{n'm'}(x)u_{nm}(x) = \int d^2x\, v^\dagger_{n'm'}(x)v_{nm}(x) = \delta_{n',n}\delta_{m',m}. \quad \text{(B.8)}$$

Таким чином, найнижчий рівень Ландау з $n = 0$ є особливим: тоді як при $n \geq 1$ існують розв'язки, що відповідають як і ферміонним ($E_n = M_n$) так і антиферміонним ($E_n = -M_n$) станам, розв'язок з $n = 0$ описує тільки антиферміонні стани.

У випадку використання представлення (B.3) для дираківських матриць, загальний розв'язок задається рівнянням (B.5), де $u_{nm}(x)$, $v_{nm}(x)$ замінені на $v_{nm}(-x), u_{nm}(-x)$:

$$\psi(x) = \sum_{n,m} \left[c_{nm}v_{nm}(-x) + d^\dagger_{nm}u_{nm}(-x)\right]. \quad \text{(B.9)}$$

Розв'язок v_{0m} відповідає найнижчому рівню Ландау з додатньою енергією $E_0 = \Delta$, тоді як розв'язки v_{nm}, u_{nm} з $n \geq 1$ відповідають енергіям $E_n = \pm M_n$ (порівняй з (B.4)). Відповідно, коли спектри двох нееквівалентних представлень об'єднані разом, виродження найнижчого рівня Ландау з $n = 0$ дорівнює половині виродження рівнів з $n \geq 1$.

Покажчик

вуглецева нанотрубка, 8
графен, 7
графіт, 8
густина станів, 35
Дираківська точка, 10, 25
зонна структура графену, 22
квантовий ефект Холла, 12
клейнівське тунелювання, 60, 62
Клейна парадокс, 15, 61
Ландау рівень, 13, 53
надкритичний кулонівський центр, 82, 90
нестабільність вакууму у зовнішніх полях, 76
оптичне правило сум, 37
падіння на центр, 77, 89
рипли, 8
сігнатура гамма-матриць, 44
фулерен, 8

Е. В. Горбар, С. Г. Шарапов
Основи фізики графену.
Навчальний посібник. – Київ, 2013. – 118 с.

Комп'ютерна верстка *А.С. Жохін*
Київ 03680, вул. Метрологічна 14-б
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України
http://www.bitp.kiev.ua
gorbar@bitp.kiev.ua, sharapov@bitp.kiev.ua, т. +38(044) 521-3171
Макет виготовлено у видавничій системі LaTeX

Зам. 3	Формат $60 \times 84/16$.	Обл.-вид. арк. 8
Підписано до друку	28.03.2013.	Тираж 100

Поліграфічна дільниця ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України