

Elektronoptika és szórás ABC grafénben

Holló Áron

Fizika BSc III.

ELTE TTK

2023.



TDK dolgozat

Témavezetők: **Cserti József, Oroszlány László**

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
1.1. A vizsgált rendszer fizikai leírása	4
2. A Hamilton-operátor sajátérték-problémája	5
2.1. Az N -rétegű, ABC grafén Hamilton-operátora linearizált <i>tight-binding</i> közelítésben . .	5
2.2. A pszeudo-impulzusmomentum operátor	6
2.3. A sajátfüggvények általános alakja forgásszimmetrikus esetben	9
3. Az ansatz felírása	10
3.1. Inverz diszperziós reláció	10
3.2. A hullámfüggvény ansatz, a peremfeltételek figyelembevételével	12
4. A rendszer szórási problémája	13
4.1. Elektronoptikai motiváció, klasszikus határeset	13
4.2. Elektron-síkhullám szórás forgásszimmetrikus potenciálon	13
5. Eredmények	18
5.1. Az $n - n$ átmenet vizsgálata	19
5.2. A $p - n$ átmenet vizsgálata különböző paraméterek mellett	20
5.2.1. Az $N = 1$ single-layer esete	20
5.2.2. Az $N = 2$ bilayer esete	21
5.2.3. Elektronoptikai kettőstörés	23
5.2.4. Az $N = 3$ trilayer esete	24
5.2.5. Az $N = 4$ réteg esete	26
6. Konklúzió, kitekintés	27
7. Függelék	29
7.1. Az impulzus és az impulzusmomentum operátorok kapcsolata	29
7.2. A kausztikák görbeseregének egyenleteinek levezetése	30

Absztrakt

A grafén felfedezése óta kísérletileg és elméletileg is intenzíven kutatják a van der Waals-féle kötéssel kialakuló, többrétegű szerkezetek elektronállapotainak tulajdonságait. Ilyen anyag például az általunk vizsgált, ABC sorrendben egymásra helyezett N -rétegű grafén szendvics szerkezet. Kapcsolódva a hazai és nemzetközi kutatásokhoz, célunk a többrétegű ABC rétegződéssel jellemzett grafén minták elektron-sávszerkezetének és az elektronállapotainak elméleti vizsgálata inhomogén külső elektrosztatikus potenciál jelenlétében.

Jelen dolgozatban olyan elektrosztatikus potenciált vizsgálunk, amely körszimmetrikus és egy R sugarú tartományon belül és kívül is állandó, de különböző értékű. Meghatározzuk a rendszert leíró forgáshoz szimmetrikus Hamilton-operátor lehetséges elektronállapotait a Bessel-függvények segítségével. Tanulmányozzuk a kapott elektron-hullámfüggvény szerkezetében kialakuló kausztikákat rövidhullámhosszú határesetekben. Ezeknek a kausztikáknak az alakját geometriai optikai határesetben számítjuk ki, és összevetjük az egzakt számolásból kapott hullámfüggvénnyel. Megmutatjuk, hogy N rétegszámú ABC grafénben megfelelő paraméterek választása mellett a kialakuló kausztikák maximális száma N . Ez az eredményünk különleges, ugyanis az ABC grafénben a potenciál-változás határán az elektronok *többestörése* lehetséges, ellentétben a kristályos anyagokkal, ahol a fénysugárnak maximum kettőstörésére van lehetőség. Tudomásunk szerint ezt a *többestörő* elektronoptikai jelenséget még nem publikálták az irodalomban.

1. Bevezetés

A grafén – amely egyetlen atomi réteg vékony grafit – felfedezése óta, a napjainkban is zajló kutatások szerves részét képezi különleges fizikai tulajdonságai miatt [1, 2]. Ennek oka többek között az érdekes elektromos, optikai, valamint transzport tulajdonságai, melyek részletes megértése számos kísérleti és elméleti vizsgálatot ösztökélt. Attól függően, hogy hány rétegű rendszerről van szó, más jellegzetességek lépnek fel. Az egyrétegű grafén részletes tanulmányozása jelentős számú kutatás tárgyát képezte és képezi napjainkig [3]. Ami a gyakorlati alkalmazhatóságukat illeti, az egyrétegű grafén jellegzetessége, hogy nem lehet könnyen korlátozni külső elektrosztatikus potenciállal az elektronok mozgásterét, mivel nem lehet tiltott sávot nyitni [4, 5]. Kétrétegű grafén esetén azonban, mivel a rétegekre merőleges elektromos mező a térrel arányos tiltott sávot nyit, ezért azt könnyebben lehet mikroelektronikai eszközökbe integrálni, mint az egyrétegű módosulatát [6].

Kettőnél több rétegű rendszer esetén a rendszert alkotó elemi rétegek egy hatszögrácsba rendeződő alrácsot tartalmaznak. A kristály periodicitása miatt csak háromféleképpen lehet egy réteget elhelyezni az alsóhoz képest, amelyet A , B és C jelöléssel szoktunk ellátni. Három réteg esetén például ABA , vagy ABC lehet a rendszer rétegződése, ezeket számos munka tanulmányozta, és jelenleg is a szilárdtest fizikai kutatások szerves részét képezik [7, 8, 9, 10, 11].

Ezen dolgozat tárgya a fent említett ABC rétegződésű grafén elméleti tanulmányozása analitikus számításokkal, speciális tulajdonságú, külső elektrosztatikus potenciál jelenlétében. Dolgozatunk célja a rendszert leíró időfüggetlen Schrödinger-egyenletében megjelenő Hamilton-operátorának sajátfüggvény ansatzának felírása, majd ennek felhasználásával a szórási problémájának megoldása.

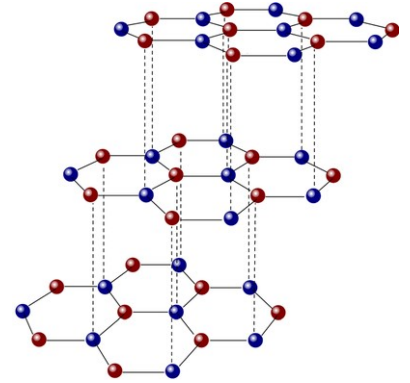
A dolgozatban először tárgyaljuk a vizsgált fizikai rendszer struktúráját. A struktúra ismeretében felírjuk a szoros kötésű közelítésből származtatott folytonos modell Hamilton-operátorát külső inhomogén potenciál jelenlétében. Ezután megoldjuk a felírt Hamilton-operátor sajátérték-problémáját, majd ennek ismeretében a vizsgált rendszer szórási problémáját, végül tárgyaljuk a kváziklasszikus határesetet. Kiderül, hogy ekkor az elektron-hullámfüggvény szerkezetében kausztikák jelennek meg, melyeket össze tudunk vetni a geometriai optikai határesetből adódó görbékkel. Megmutatjuk, hogy N réteg esetében a kausztikák maximális száma N , mely a többrétegű grafén rendszer elektronoptikai többestörését jelenti. Ez a jelenség különleges, hiszen ismeretes, hogy a geometriai optikában legfeljebb kettőstörés lehetséges, így az itt kapott tulajdonság a kettőstörés elektronoptikai általánosításának felel meg.

1.1. A vizsgált rendszer fizikai leírása

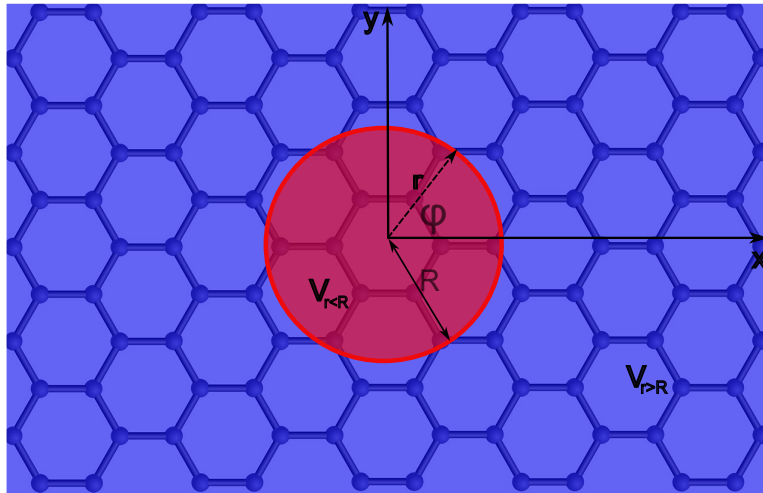
A vizsgált rendszerünk egy N rétegű, rombohedralis ABC rétegzésű grafén, ennek konfigurációját szemlélteti az 1-es ábra. Az ABC grafénben több réteg épül egymásra, és köztük gyenge van der Waals kölcsönhatás van jelen. Egyrétegű grafén kristályszerkezetének minden elemi cellájában két szénatom helyezkedik el, ennek megkülönböztetésül jelöli az 1-es ábra a cella atomjait pirossal, valamint kékkel.

A szén s -pályája és a két p -pályája között fellépő (sp^2) hibridizáció eredményezi a hatszöges szerkezetet, mely σ -kötést alakít ki. A szénatom harmadik p -pályája, mely merőleges a hatszöges síkra, az egész síkra delokalizált kötással kapcsolódik a szomszédos p_z pályáéhoz, itt pedig π -kötés alakul ki [12]. Az ilyen szerkezetre egy jellemző távolság érték, ami a szén-szén atomok közti mérésekből ismert, ennek értéke $a_{C-C} \approx 1.42 \text{ \AA}$ [12].

A dolgozatban a fenti rendszert egy külső inhomogén elektrosztatikus potenciál jelenlétében vizsgáljuk, oly módon, hogy a potenciált kör alakúnak tesszük fel, úgy hogy a kör belseje $V_{r < R}$, a külseje pedig $V_{r > R}$ potenciálon van, ahogy azt a 2-es ábra szemlélteti.



1. ábra. Az ABC rétegzésű grafén sematikus ábrája.



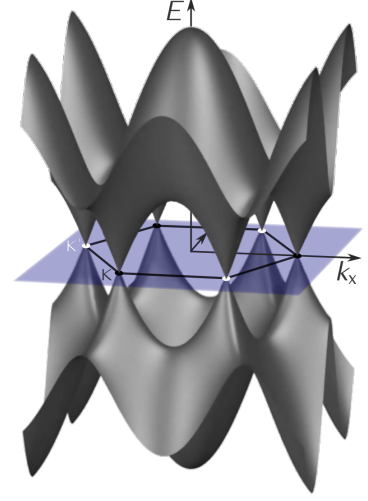
2. ábra. ABC grafén szerkezet felülnézeti ábrája, R sugarú inhomogén kör alakú potenciál jelenlétében.

Többrétegű grafén esetén a vizsgált rendszer viselkedése a szoros kötésű modell segítségével leírható, amely az egyes atomhelyeken elhelyezkedő izolált p_z pályán lévő elektronok hullámfüggvényeinek szuperpozícióján alapszik.

2. A Hamilton-operátor sajátérték-problémája

2.1. Az N -rétegű, ABC grafén Hamilton-operátora linearizált *tight-binding* közelítésben

A grafén sávszerkezetében – lásd. 3-as ábra – megjelenő "völgyeket" *Dirac-pontoknak*, vagy K pontoknak szokás nevezni¹. Belátható, hogy egy rácson belül két darab nem-ekvivalens K pont található, melyeket K illetve K' -vel szokás jelölni, ily módon megkülönböztetve őket egymástól. A dolgozat során az 1.1 alfejezetben leírt fizikai rendszernek azt az alacsony energiás közelítést fogjuk vizsgálni, melyben a Fermi-energia a *Dirac-pontok* közelébe esik. Speciálisan kizárólag olyan energiákat fogunk tekinteni, melyek a rendszerre jellemző rétegek közötti ugrás energia – hopping energia – környékén találhatóak. Ebben az esetben a szoros kötésű közelítésre felírt Hamilton-operátor linearizálható a K pontok körül, mely a következő alakot fogja öltetni [13, 4]:



3. ábra. Egyrétegű grafén sáv-szerkezete. A kép az alábbi Wikipédia cikkből származik.

$$\hat{H}_{2N \times 2N} = v_F \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{V_{\leq}}{v_F} & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & \frac{V_{\leq}}{v_F} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma_1/v_F & 0 \end{pmatrix} & 0 & \dots & 0 \\ \begin{pmatrix} 0 & \gamma_1/v_F \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{V_{\leq}}{v_F} & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & \frac{V_{\leq}}{v_F} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma_1/v_F & 0 \end{pmatrix} & \dots & 0 \\ 0 & \begin{pmatrix} 0 & \gamma_1/v_F \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{V_{\leq}}{v_F} & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & \frac{V_{\leq}}{v_F} \end{pmatrix} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma_1/v_F & 0 \end{pmatrix} \\ 0 & 0 & 0 & \begin{pmatrix} 0 & \gamma_1/v_F \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \frac{V_{\leq}}{v_F} & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & \frac{V_{\leq}}{v_F} \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

ahol $\hat{p}_{\pm} = (\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y)$ függvényekre ható operátorok, melyek a következő differenciáloperátorok lineáris kombinációi: $(\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y})$, $\gamma_1 = 377 \text{ meV}$ a rendszerre jellemző hopping energia, $v_F \approx 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ a Fermi-sebesség, $V_{\leq}$ pedig a rendszerre ható potenciál értéke, melyet az adott tartományon belül konstansnak veszünk.

Célunk elsőként a fenti Hamilton-operátor sajátfüggvényeinek meghatározása, melyhez meg kell oldanunk az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet:

$$\hat{H}_{2N \times 2N} \Psi = \varepsilon \Psi. \quad (2)$$

¹Erről részletesebben az [12]-es hivatkozásban lehet olvasni.

A dolgozat során a potenciálról feltételezzük, hogy forgásszimmetrikus, valamint, hogy atomi skálán folytonosan változik a potenciál sugár határán² [7, 8, 13]. Mivel a rendszer forgásszimmetriával rendelkezik, a továbbiakban át fogunk térni síkbeli polárkoordináta-rendszerbe, így mindenekelőtt az (1)-es egyenletben definiált mátrixban megjelenő differenciáloperátorokat kell átírunk ennek megfelelően. A fenti mátrixot fel tudjuk írni kompaktabb alakban, bevezetve az alábbi jelöléseket: $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, valamint $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_+, \hat{p}_-)$, itt $\sigma_{x,y}$ az első két Pauli-mátrix.

Ezek segítségével a fenti mátrix, potenciál jelenlétében a következőképpen írható fel [12]:

$$\hat{H}_{2N \times 2N} = v_F \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}} \mathbb{I}_{N \times N} + \gamma_1 \mathcal{A} + V_{\leq} \mathbb{I}_{2N \times 2N}, \quad (3)$$

ahol $\mathcal{A}$ a következő $2N \times 2N$ -es mátrix

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & \Gamma & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \Gamma^\dagger & 0 & \Gamma & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \Gamma^\dagger & 0 & \Gamma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \Gamma^\dagger & 0 & \Gamma \end{pmatrix}. \quad (4)$$

2.2. A pszeudo-impulzusmomentum operátor

Ahogy a 1.1 fejezetben említettük, a jelen dolgozatban vizsgált elrendeződés forgásszimmetriával rendelkezik, melynek következtében célszerű polárkoordináta-rendszert használni. Emellett pedig a 2.1 fejezetben láttuk, hogy a vizsgált rendszerünk Hamilton-operátorában fellépnek a $\hat{p}_\pm$ differenciáloperátorok, így a fentieknek megfelelően írjuk fel ezeket polárkoordináta-rendszerben [2]:

$$\hat{p}_\pm = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \pm i \frac{\hbar}{i} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \frac{\hbar}{i} e^{\pm i \varphi} \left[\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]. \quad (5)$$

Ahhoz, hogy fel tudjuk írni a fenti a Hamilton-operátornak a sajátfüggvényeit, vegyük segítségül a következő módon definiált operátort [8, 7]:

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z \cdot \mathbb{I}_{2N \times 2N} - \left[\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{2 \times 2} & & & & \\ & 3\mathbb{I}_{2 \times 2} & & & \\ & & 5\mathbb{I}_{2 \times 2} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & (2N+1)\mathbb{I}_{2 \times 2} \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_z & & & & \\ & \sigma_z & & & \\ & & \sigma_z & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \sigma_z \end{pmatrix} \right], \quad (6)$$

ahol $\hat{L}_z$ az impulzusmomentum operátor polárkoordinátás alakja: $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$, $\mathbb{I}_{2N \times 2N}$ a $2N \times 2N$ -es egységmátrix, $\hbar$ a redukált Planck-állandó, σ_z pedig a harmadik Pauli-mátrix [13].

²Fontos megjegyezni, hogy ha nem így lenne, akkor a K pontok közötti szórást is figyelembe kellene venni a modell felépítésének során.

A továbbiakban ezen operátorra pszeudo-impulzusmomentum operátorként fogunk hivatkozni [12, 8]. Belátható, hogy az így definiált operátor kommutál az (1)-es egyenletben definiált Hamilton-operátorral, amelyből következik, hogy közös sajátfüggvényrendszerük van [8, 13]. Lássuk ezt be az alábbi módon. A számolás alatt a következő összefüggéseket használjuk majd fel, melyek könnyen ellenőrizhetők³:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\sigma_x - i\sigma_y), \quad (7a)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\sigma_x + i\sigma_y), \quad (7b)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hat{p}_+}{2} (\sigma_x - i\sigma_y) + \frac{\hat{p}_-}{2} (\sigma_x + i\sigma_y), \quad (7c)$$

$$[\hat{L}_z \hat{p}_\pm] = \pm \hbar \hat{p}_\pm, \quad (7d)$$

ahol σ_x, σ_y mátrixok az első két Pauli-mátrix. Célunk tehát a $[\hat{J}_z, \hat{H}]$ kommutátor kiszámítása. Láttuk, hogy pszeudo-impulzusmomentum-operátor három tagból áll. Ezek közül az első tag az $\hat{L}_z \cdot \mathbb{I}_{2N \times 2N}$ impulzusmomentum operátor, a másik két tagot pedig jelölje rendre $\hat{J}_z^{(2)}, \hat{J}_z^{(3)}$. Nyilvánvaló, hogy ha ki szeretnénk számítani a $[\hat{J}_z, \hat{H}]$ kommutátort, azt - az egyszerűség kedvéért - szétszedhetjük ezen kommutátorok előjeles összegére: $[\hat{L}_z \cdot \mathbb{I}_{2N \times 2N}, \hat{H}], [\hat{J}_z^{(2)}, \hat{H}], [\hat{J}_z^{(3)}, \hat{H}]$. Írjuk ki ezeket a kommutátorokat:

$$[\hat{L}_z \cdot \mathbb{I}_{2N \times 2N}, \hat{H}] = v_F \begin{pmatrix} L_z & & \\ & L_z & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{\gamma_1}{v_F} & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ \begin{pmatrix} 0 & \frac{\gamma_1}{v_F} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} - v_F \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{\gamma_1}{v_F} & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ \begin{pmatrix} 0 & \frac{\gamma_1}{v_F} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{L}_z & & \\ & \hat{L}_z & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \quad (8)$$

Kihasználva a (7d) azonosságot, a következő egyszerű eredményt kapjuk:

$$[\hat{L}_z \cdot \mathbb{I}_{2N \times 2N}, \hat{H}] = v_F \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & [\hat{L}_z, \hat{p}_-] \\ [\hat{L}_z, \hat{p}_+] & 0 \end{pmatrix} & & \\ & & \ddots \end{pmatrix} = \hbar v_F \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & & \\ & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Következő lépésként vegyük a $[\hat{J}_z^{(2)}, \hat{H}]$ kommutátort:

$$[\hat{J}_z^{(2)}, \hat{H}] = \frac{\hbar v_F}{2} \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{2 \times 2} & & \\ & 3\mathbb{I}_{2 \times 2} & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{\gamma_1}{v_F} & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ \begin{pmatrix} 0 & \frac{\gamma_1}{v_F} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{\gamma_1}{v_F} & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ \begin{pmatrix} 0 & \frac{\gamma_1}{v_F} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{2 \times 2} & & \\ & 3\mathbb{I}_{2 \times 2} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (10)$$

³A (7d) összefüggés bizonyítása megtalálható a függelék 7.1 alfejezetében.

Erről könnyen lehet látni, hogy a következő kifejezéssel egyenlő:

$$\frac{\hbar v_F}{2} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{-2\gamma_1}{v_F} & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ \begin{pmatrix} 0 & \frac{2\gamma_1}{v_F} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\gamma_1 & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ \begin{pmatrix} 0 & \gamma_1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Végül számítsuk ki az $[\hat{J}_z^{(3)}, \hat{H}]$ kommutátort, ahol használjuk fel a (7a), (7b) és (7c) összefüggéseket:

$$[\hat{J}_z^{(3)}, \hat{H}] = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} (\hat{p}_+ + \hat{p}_-)[\sigma_z, \sigma_x] + i(\hat{p}_- \hat{p}_+ [\sigma_z, \sigma_y]) & \frac{\gamma_1}{v_F} [\sigma_z, \sigma_x] - i \frac{\gamma_1}{v_F} [\sigma_z, \sigma_y] & \cdots \\ \frac{\gamma_1}{v_F} [\sigma_z, \sigma_x] + i \frac{\gamma_1}{v_F} [\sigma_z, \sigma_y] & (\hat{p}_+ + \hat{p}_- [\sigma_z, \sigma_x] + i(\hat{p}_- - \hat{p}_+) [\sigma_z, \sigma_y]) & \cdots \\ \frac{\gamma_1}{v_F} [\sigma_z, \sigma_x] + i \frac{\gamma_1}{v_F} [\sigma_z, \sigma_y] & \vdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Itt használjuk ki a Pauli-mátrixokra vonatkozó, alábbi relációkat: $[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$, $[\sigma_z, \sigma_y] = -2i\sigma_x$.

Így egyszerű algebrai átalakítások után a következőt kapjuk:

$$[\hat{J}_z^{(3)}, \hat{H}] = \hbar v_F \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ -\hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{\gamma_1}{v_F} & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ \begin{pmatrix} 0 & \frac{\gamma_1}{v_F} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_- \\ -\hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (13)$$

A keresett kommutátor, a fent kiszámított kommutátorok megfelelő előjeles összege lesz, ebből pedig látszik, hogy a keresett kommutátor nulla:

$$[\hat{J}_z, \hat{H}] = [L_z \cdot \mathbb{I}_{2N \times 2N}, \hat{H}] - [\hat{J}_z^{(2)}, \hat{H}] + [\hat{J}_z^{(3)}, \hat{H}] = \mathbf{0}. \quad (14)$$

Tehát a pszeudo-impulzusmomentum operátor kommutál a rendszer Hamilton-operátorával, amelyből következik, hogy közös sajátfüggvényrendszerük van. A következő alfejezetben az itt definiált operátor sajátfüggvényeinek struktúrájának segítségével fogjuk felépíteni a (1)-es egyenletben felírt Hamilton-operátor sajátfüggvényeit.

2.3. A sajátfüggvények általános alakja forgásszimmetrikus esetben

Az előző fejezetben beláttuk, hogy a rendszer Hamilton-operátora kommutál a pszeudo-impulzusmomentum operátorral. Ez számunkra azért előnyös, mivel a pszeudo-impulzusmomentum operátor sajátfüggvényeit már könnyen ki tudjuk következtetni. Ezen függvénycsalád egy tagjának általános alakja látható a (15) definícióban. Itt k a hullám-szám, r a sugár, φ a polárszög, m pedig egy kvantumszám – melyet az irodalomban *mágneses* kvantumszámnak szokás nevezni –, amelyre a $\Psi(kR, \varphi = 0) = \Psi(kR, \varphi = 2m\pi)$ periodicitási feltételből adódik, hogy $m \in \mathbb{Z}$.

$$\Psi(kr, \varphi) = \begin{pmatrix} \Phi_1(kr) \\ \Phi_2(kr)e^{i\varphi} \\ \Phi_3(kr)e^{i\varphi} \\ \Phi_4(kr)e^{i2\varphi} \\ \Phi_5(kr)e^{i2\varphi} \\ \Phi_6(kr)e^{i3\varphi} \\ \vdots \\ \Phi_N(kr)e^{iN\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}. \quad (15)$$

Tehát a 2.1 fejezetben definiált sajátérték-problémát változói szerint szeparálva, megtaláltuk a szögtől függő rész megoldásának sajátfüggvényeit. Ez nagy segítségünkre lesz a következőkben. Kiderül ugyanis, hogy a sugártól függő rész sajátfüggvényeiben is megjelenik az m kvantumszám, mint szabad paraméter, és a megfelelő sajátvektor felépítésénél ennek megválasztása a spinor különböző komponenseiben nem lenne triviális. Így viszont, hogy megtaláltuk a rendszert leíró Hamilton-operátorának szögtől függő részének sajátfüggvényét, ennek segítségével már könnyen ki tudjuk találni az ansatz spinor indexeit.

A sugártól függő rész sajátfüggvényeinek a felírásához célszerű próbálkozni a $J_m(kr)$ Bessel-, illetve a $H_m^{(1)}(kr)$ első-, illetve a $H_m^{(2)}(kr)$ másodfajú Hankel-függvényekkel. Jelölje ezeket összefoglalóul $Z_m(kr)$, ahol m egy szabad paraméter [11]. Hattassuk az (5) egyenletben felírt $\hat{p}_\pm$ impulzus operátorokat a $Z_m(kr)e^{im\varphi}$ függvény szorzatra, s használjuk ki a Bessel/Hankel-függvényekre vonatkozó rekurziós relációkat:

$$\frac{\partial Z_m(kr)}{\partial r} = \frac{k}{2} [Z_{m-1}(kr) - Z_{m+1}(kr)]. \quad (16)$$

Ennek segítségével könnyen belátható, hogy a $\hat{p}_+$, és a $\hat{p}_-$ operátorok hatása ezen függvényeken az alábbi egyszerű alakot ölti:

$$\hat{p}_\pm Z_m(kr)e^{im\varphi} = \pm i\hbar k Z_{m\pm 1}(kr)e^{i(m\pm 1)\varphi}. \quad (17)$$

Felhasználva az itt kapott eredményeket, a Hamilton-operátor sajátfüggvényei már könnyedén felírhatóak, azok a következőképpen fognak kinézni:

$$\Psi(kr, \varphi) = \begin{pmatrix} Z_m(kr) \\ Z_{m+1}(kr)e^{i\varphi} \\ Z_{m+1}(kr)e^{i\varphi} \\ Z_{m+2}(kr)e^{i2\varphi} \\ Z_{m+2}(kr)e^{i2\varphi} \\ Z_{m+3}(kr)e^{i3\varphi} \\ Z_{m+3}(kr)e^{i3\varphi} \\ \vdots \\ Z_{m+N}(kr)e^{iN\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}. \quad (18)$$

A továbbiakban ezt az alakot felhasználva fogunk eljutni a fenti rendszer hullámfüggvény anszatzához.

3. Az ansatz felírása

3.1. Inverz diszperziós reláció

Az előző fejezetben kapott eredmények felhasználásával fel tudjuk írni az (1) egyenletben definiált Hamilton-operátor diszperziós relációját. A $\hat{H}_{2N \times 2N} \Psi = \varepsilon \Psi$ időfüggetlen Schrödinger egyenlet a 2.3 alfejezetben kapott függvénycsalád behelyettesítésével a következőképpen fog kinézni:

$$v_F \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{\leq}/v_F & -i\hbar k \\ i\hbar k & V_{\leq}/v_F \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma_1/v_F & 0 \end{pmatrix} & 0 & \dots & 0 \\ \begin{pmatrix} 0 & \gamma_1/v_F \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} V_{\leq}/v_F & -i\hbar k \\ i\hbar k & V_{\leq}/v_F \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma_1/v_F & 0 \end{pmatrix} & \dots & 0 \\ 0 & \begin{pmatrix} 0 & \gamma_1/v_F \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} V_{\leq}/v_F & -i\hbar k \\ i\hbar k & V_{\leq}/v_F \end{pmatrix} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \gamma_1/v_F & 0 \end{pmatrix} \\ 0 & 0 & 0 & \begin{pmatrix} 0 & \gamma_1/v_F \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} V_{\leq}/v_F & -i\hbar k \\ i\hbar k & V_{\leq}/v_F \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \\ C_6 \\ C_7 \\ \vdots \\ C_{2N} \end{pmatrix} = \varepsilon \cdot \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \\ C_6 \\ C_7 \\ \vdots \\ C_{2N} \end{pmatrix}, \quad (20)$$

ahol a $C_1, C_2, \dots, C_{2N}$ komplex számok, melyeket a fenti sajátérték-probléma határoz meg.

Ezen a ponton érdemes dimenziótlanítani az itt szereplő egyenleteket a numerikus számítások egyszerűsítése érdekében. Tegyük ezt meg a következő mennyiségek – dimenziótlan hullámszám, valamint dimenziótlan energia/potenciál – bevezetésével: $k = k' \frac{1}{a}$, $\varepsilon = \varepsilon' \gamma_1$, $V_{\leq} = V'_{\leq} \gamma_1$.

Itt a , valamint γ_1 az 2.1 alfejezetben bevezetett rendszerre jellemző karakterisztikus szén-szén távolság, valamint hopping energia. Ezen mennyiségek bevezetésével felírva például a második egyenletet, a dimenziótlanítás az alábbiak szerint történik:

$$iv_F \hbar k + V_{\leq} + \gamma_1 = \varepsilon, \quad (21a)$$

$$i \overbrace{\frac{v_F \hbar}{a \gamma_1}}^{\alpha} k' + V'_{\leq} + 1 = \varepsilon' \Rightarrow i \alpha k' + V'_{\leq} + 1 = \varepsilon'. \quad (21b)$$

Az itt definiált dimenziótlán α konstans numerikus értéke az ismert paraméterek behelyettesítésével adódik, ez a következő lesz:

$$\alpha = \frac{v_F \hbar}{a \gamma_1} = \frac{10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot 1.05 \cdot 10^{-34} \text{Js}}{1.42 \cdot 10^{-10} \text{m} \cdot 0.377 \cdot 1.60 \cdot 10^{-19} \text{J}} = 12.26.$$

Az 2.3 fejezetben megoldottuk a Hamilton-operátor sajátérték problémáját, viszont ott a k' hullámszám egy bemeneti paraméterként szerepelt. A továbbiakban az ansatz felépítéséhez, adott energia mellett kell meghatároznunk az ahhoz tartozó hullámszámokat a két tartományban. Ezen $k'(\varepsilon')$ összefüggés meghatározásához elsőként írjuk fel a (20) egyenlet együttható mátrixának a következőképpen faktorizált alakját, majd helyettesítsük be azt a sajátérték problémájába:

$$\mathcal{H} = \alpha k' \Sigma + \mathcal{A} + V'_{\leq} \mathbb{I}_{2N \times 2N}. \quad (22)$$

A mátrix felírásánál a diszperziós relációnak megfelelően az alábbi jelöléseket vezettük be:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (23a)$$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_y & & & & \\ & \sigma_y & & & \\ & & \sigma_y & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \sigma_y \end{pmatrix}, \quad \mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & \Gamma & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \Gamma^\dagger & 0 & \Gamma & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \Gamma^\dagger & 0 & \Gamma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \Gamma^\dagger & 0 & \Gamma \end{pmatrix}. \quad (23b)$$

Tehát megoldandó a (22)-es definíció $\mathcal{H}$ mátrixának sajátérték-problémája, melyet fel tudtunk írni faktorizált alakban, a fenti mátrixok bevezetésével.

$$\mathcal{H}\Psi = \varepsilon' \Psi. \quad (24)$$

Helyettesítsük be a sajátérték-egyenletbe a mátrix (22)-beli alakját, majd rendezzük az egyenletet úgy, hogy a jobb oldalon ne ε' , hanem k' szerepeljen:

$$(\mathcal{A} + (V'_{\leq} - \varepsilon') \mathbb{I}_{2N \times 2N}) \Psi = -\alpha k' \Sigma \Psi. \quad (25)$$

Végül szorozzunk be balról a Σ mátrix inverzének mínusz egyszerezésével, így megkapva k' -re az alábbi sajátértékproblémát, mely definiálja a keresett $k'(\varepsilon')$ összefüggést:

$$\hat{\Lambda}(\varepsilon') \Psi = k' \Psi, \quad (26)$$

ahol

$$\hat{\Lambda} = -\frac{1}{\alpha} \Sigma^{-1} (\mathcal{A} + (V'_{\leq} - \varepsilon') \mathbb{I}_{2N \times 2N}).$$

Tehát ahhoz, hogy a próbafüggvényünk argumentumába be tudjuk majd helyettesíteni az adott ε' energiákhoz tartozó k' hullámszámokat, valamint megkapjuk a hozzájuk tartozó sajátvektorok $(C_1, C_2, \dots, C_{2N})$ komponenseit, a fenti sajátérték-problémát kell megoldanunk. Fontos megjegyezni, hogy az itt kapott hullámszámok már lehetnek komplexek is.

3.2. A hullámfüggvény ansatz, a peremfeltételek figyelembevételével

Az 2. fejezetben sikeresen felírtuk a vizsgált rendszer Hamilton-operátorának sajátfüggvényeit. Ezenkívül az 3.1 alfejezetben leírt módszer alapján meg tudtuk konstruálni az általános $k'(\varepsilon')$ hullámszám-energia összefüggést. Kihasználva a többrétegű grafén diszperziós relációjának szerkezetéből adódó azon tényt, hogy N rétegű rendszer esetén egy adott energiához N különböző hullámszám tartozik, ezek segítségével már fel tudjuk építeni a hullámfüggvény ansatzot.

A potenciálgáton belül: Ebben a tartományban a Bessel, illetve Hankel-függvények közül kizárólag a Bessel függvények jöhetnek szóba, mivel a Hankel-függvények az $r = 0$ -ban mínusz végtelenhez tartanak. Jelölje az m -ed fajú Bessel függvényt a továbbiakban $J_m(k_j r)$, ahol $k_j \in \mathbb{C}$ a 3.1 fejezetben leírtakkal összhangban. Ezt felhasználva a potenciál sugáron belül a megfelelő ansatz a különböző k_j hullámszámokhoz tartozó sajátvektorok lineáris kombinációjaként fog előállni:

$$\Psi_{<}(r, \varphi) = \sum_{j=1}^N A_j \begin{pmatrix} C_1^{in}(k_j) J_m(k_j^{in} r) \\ C_2^{in}(k_j) J_{m+1}(k_j^{in} r) e^{i\varphi} \\ C_3^{in}(k_j) J_{m+1}(k_j^{in} r) e^{i\varphi} \\ C_4^{in}(k_j) J_{m+2}(k_j^{in} r) e^{i2\varphi} \\ C_5^{in}(k_j) J_{m+2}(k_j^{in} r) e^{i2\varphi} \\ C_6^{in}(k_j) J_{m+3}(k_j^{in} r) e^{i3\varphi} \\ C_7^{in}(k_j) J_{m+3}(k_j^{in} r) e^{i3\varphi} \\ \vdots \\ C_{2N}^{in}(k_j) J_{m+N}(k_j^{in} r) e^{iN\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}. \quad (27)$$

A potenciálgáton kívül: Ezen tartományban a próbafüggvényt az első-, illetve másodfajú Hankel-függvényekből kell felépíteni, jelölje ezeket összefoglalóul $H_m^{(d)}(k_j r)$. Figyelembe véve a Hankel-függvények asszimptotikus viselkedését, attól függően, hogy a k_j komplex szám képzetes része pozitív, vagy negatív, rendre az első, illetve másodfajú Hankel-függvényeket kell az ansatz-ba beépíteni. Így a potenciálgáton kívüli hullámfüggvény ansatz összefoglalva a következő lesz:

$$\Psi_{>}(r, \varphi) = \sum_{j=1}^N B_j \begin{pmatrix} C_1^{out}(k_j) H_m^{(d)}(k_j^{out} r) \\ C_2^{out}(k_j) H_{m+1}^{(d)}(k_j^{out} r) e^{i\varphi} \\ C_3^{out}(k_j) H_{m+1}^{(d)}(k_j^{out} r) e^{i\varphi} \\ C_4^{out}(k_j) H_{m+2}^{(d)}(k_j^{out} r) e^{i2\varphi} \\ C_5^{out}(k_j) H_{m+2}^{(d)}(k_j^{out} r) e^{i2\varphi} \\ C_6^{out}(k_j) H_{m+3}^{(d)}(k_j^{out} r) e^{i3\varphi} \\ C_7^{out}(k_j) H_{m+3}^{(d)}(k_j^{out} r) e^{i3\varphi} \\ \vdots \\ C_{2N}^{out}(k_j) H_{m+N}^{(d)}(k_j^{out} r) e^{iN\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}. \quad (28)$$

Itt $\Psi_{<}$, $\Psi_{>}$ jelölések arra utalnak, hogy a kör potenciál sugárán belül, vagy azon kívül tartózkodunk. Ezzel sikeresen fel tudtuk írni a (1)-es egyenletben felírt Hamilton-operátor sajátérték problémájának általános megoldását, azaz fel tudtuk építeni a megfelelő hullámfüggvény ansatzot. A következőkben az itt kapott eredményeket felhasználva egzaktul meg fogjuk oldani az N rétegű ABC grafén szórási problémáját kör szimmetrikus potenciálban.

4. A rendszer szórési problémája

4.1. Elektronoptikai motiváció, klasszikus határeset

Ebben a fejezetben célunk a többrétegű ABC grafén struktúrájú rendszer elektronoptikai tulajdonságainak tanulmányozása a szórési problémájának megoldásán keresztül. Meg fogjuk vizsgálni, hogy a fenti elrendezésben egy adott hullámszámmal jellemzett elektron-síkhullám hogyan szóródik egy kör-szimmetrikus potenciálon.

A geometriai optikából ismeretes, hogy két közeg egymásra vonatkoztatott törésmutatója a különböző tartományokban vett csoportsebességek hányadosa. Jelen elrendezés diszperziós relációjában jó közelítéssel a csoportsebesség arányos a hullámszámmal, ennek köszönhetően a törésmutató a különböző tartományokban vett hullámszámok hányadosára fog egyszerűsödni. Látni fogjuk, hogy az ily módon bevezetett törésmutató mind pozitív, mind *negatív* értékű is lehet a potenciálok egymáshoz való viszonyától függően. A geometria optikában igen érdekes jelenségnek számít az ún. kausztika kialakulása, mely nem más, mint a fénysugarak burkológörbéje, ahol a fény intenzitásának elméletileg végtelennek kell lennie. A következőkben elméleti úton, a rendszer szórési problémájának megoldásának segítségével megmutatjuk, hogy kausztikák lépnek fel a különböző potenciál átmeneteknél. Ez lehetőséget ad arra, hogy összevegyük a kapott eredményeket a geometriai optikából adódóakkal, a fent bevezetett törésmutató segítségével.

A vizsgált rendszer szórési problémájának megoldásával kezünkben meg fogjuk vizsgálni az elektron-hullámfüggvény abszolútérték négyzetét klasszikus határesetben. Ez azt jelenti, hogy vesszük a rövid-hullámhosszú $\lambda \ll \lambda_F$ határesetet, ahol λ_F a Fermi-hullámhossz. Ezt azért érdemes megtenni, mivel ekkor rajzolódnak ki a kausztikák a legszembetűnőbben. Látni fogjuk, hogy ha növeljük a rétegszámot, és a paramétereket megfelelően választjuk meg, a kausztikák maximális száma a rétegek számával fog megegyezni. Ezzel demonstrálni tudjuk azt a tényt, hogy a vizsgált többrétegű grafén szerkezet elektronoptikailag "többestörő" anyagként viselkedik, mely a geometriai optikai kettőstörés általános esetének felel meg. Megjegyezendő, hogy ez a tulajdonság általában is igaz olyan fizikai rendszerek esetében, melyek sávszerkezetében több elektron-ág is megjelenik.

4.2. Elektron-síkhullám szórás forgásszimmetrikus potenciálon

Szilárdtestfizikából ismert, hogy egy anyag sávszerkezetének vezetési sávjához tartozó kvázirészecske állapotokat elektronszerűnek, a vegyértéksávhoz tartozókat pedig lyukszerűnek szokás nevezni. Elsőként azt az esetet fogjuk vizsgálni, amikor a bejövő elektron-síkhullám energiája mind a potenciálgáton belül, mind azon kívül a vezetési sávban van, erre $n - n$ átmenetként fogunk hivatkozni, érthető okoknál fogva. Ezt követően részletesen meg fogjuk vizsgálni azt az esetet, amikor a kör potenciál tartományán

belül az elektron a vegyértéksávban, azon kívül pedig a vezetési sávban van, melyet a továbbiakban röviden $p - n$ átmenetnek fogunk nevezni.

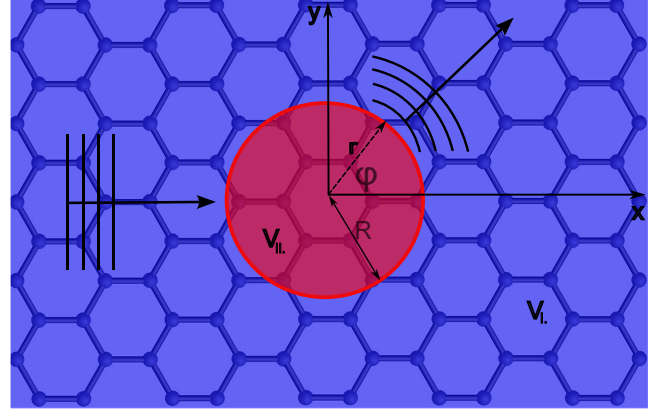
Érkezzen az elektron balról x irányban! (lásd: 4-es ábra a) része.) Ezzel a feltevessel nem sértjük meg az általánosságot, szimplán egyszerűsítjük a további számításokat. A grafén diszperziós relációját ábrázolva a K pontok körül látható, hogy két lehetőség is adódik a betölthető állapotokra, annak szimmetriájának következtében – lásd: 4-es ábra b) és c) része –. Azonban, mivel abban az esetben, ha az elektron a határfelülettől jobbra távolodik, a csoportsebességének pozitívnak kell lennie, az elektron kizárólag azt az állapotot töltheti be, ahol a diszperziós reláció meredeksége pozitív. A továbbiakban a potenciál sugarán kívüli kékkel, valamint a potenciál sugarán belüli pirossal jelölt tartományt rendre I., illetve II. tartománynak fogjuk nevezni.

A 4.1 alfejezetben leírtaknak megfelelően a vizsgált rendszer diszperziós relációja alakjának köszönhetően a törésmutató a két tartományban vett hullámszám hányadosával egyezik meg, tehát:

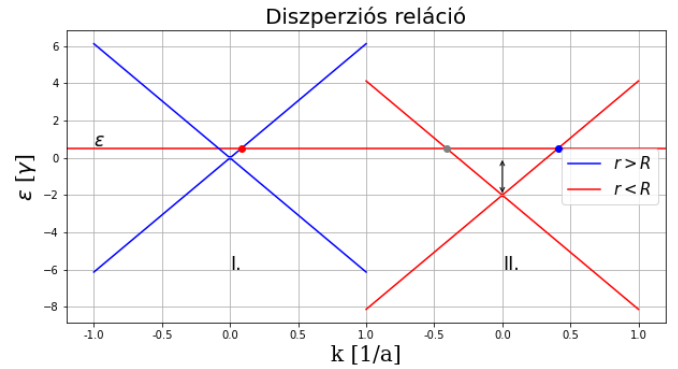
$$n = \frac{k_{II}}{k_I}. \quad (29)$$

Ebből tisztán látszik, hogy az $n - n$ átmenet esetében pozitív, a $p - n$ átmenet esetében pedig negatív lesz a törésmutató.

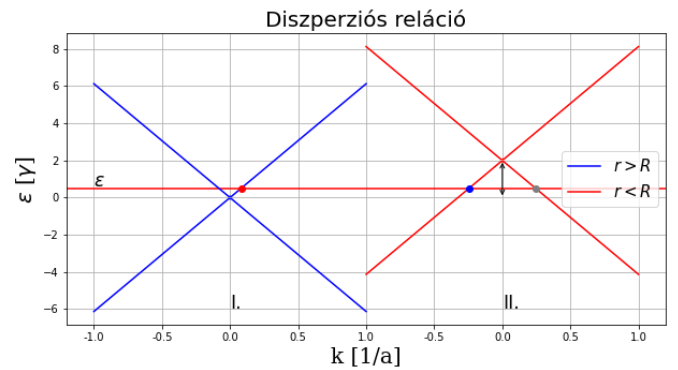
Ahhoz, hogy meg tudjuk vizsgálni a rendszer elektronoptikai tulajdonságait, elsőként oldjuk meg a fent definiált szórási problémát. Ehhez a kvantummechanikából jól ismert parciális hullámok módszerét fogjuk alkalmazni.



(a) ABC grafénben a bejövő elektron-síkhullám egy forgásszimmetrikus potenciálra való szóródása.



(b) $n - n$ átmenet: A piros karikával jelölt állapot ez esetben a kék karikával jelölt állapotba megy át, mivel ott fog teljesülni, hogy a csoportsebesség pozitív. A szürkével jelölt állapot betöltetlenül marad. Mivel ekkor a hullámszám x komponense nem vált előjelet, itt a törésmutató *pozitív*.



(c) $p - n$ átmenet: A piros karikával jelölt állapot ez esetben is a kék karikával jelölt állapotba fog átmenni, mivel ott fog teljesülni, hogy a csoportsebesség pozitív. Mivel ekkor a hullámszám x komponense előjelet vált, itt a törésmutató *negatív*.

4. ábra. A vizsgált szórási probléma vázlatos ábrája, valamint a diszperziós relációk $N = 1$ rétegű rendszer esetében, különböző átmeneteknél.

Az előző fejezetekben sikeresen fel tudtuk írni a vizsgált rendszer Hamilton-operátorának saját-függvényeit, valamint meg tudjuk határozni a szükséges $k(\varepsilon)$ összefüggést, így ezeknek a segítségével már fel tudjuk építeni a szórási problémát megoldó hullámfüggvény ansatzot.

Az egyetlen $\varepsilon > 0$ energiával, k_ν hullámszámmal bejövő $\mathbf{h}_{m,\nu}^{(2)}$ parciális hullámnak (a definíciót lásd lent) a szóródását leíró hullámfüggvény polárkoordinátákban, a szórási tartományon kívül ($r > R$) felírható a fenti Hamilton-operátor sajátfüggvényeivel:

$$\Psi_{m,\nu}^{(out)} = \mathbf{h}_{m,\nu}^{(2)} + \sum_{\beta=1}^N S_{\nu\beta} \mathbf{h}_{m,\beta}^{(1)}, \quad (30)$$

$$\mathbf{h}_{m,\nu}^{(d)}(r, \varphi) = \begin{pmatrix} C_1^{(out)}(k_\nu) H_m^{(d)}(k_\nu^{(out)} r) \\ C_2^{(out)}(k_\nu) H_{m+1}^{(d)}(k_\nu^{(out)} r) e^{i\varphi} \\ C_3^{(out)}(k_\nu) H_{m+1}^{(d)}(k_\nu^{(out)} r) e^{i\varphi} \\ C_4^{(out)}(k_\nu) H_{m+2}^{(d)}(k_\nu^{(out)} r) e^{i2\varphi} \\ C_5^{(out)}(k_\nu) H_{m+2}^{(d)}(k_\nu^{(out)} r) e^{i2\varphi} \\ C_6^{(out)}(k_\nu) H_{m+3}^{(d)}(k_\nu^{(out)} r) e^{i3\varphi} \\ C_7^{(out)}(k_\nu) H_{m+3}^{(d)}(k_\nu^{(out)} r) e^{i3\varphi} \\ \vdots \\ C_{2N}^{(out)}(k_\nu) H_{m+N}^{(d)}(k_\nu^{(out)} r) e^{iN\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}, \quad (31)$$

ahol $H_m^{(d)}$ az első-, illetve másodfajú Hankel-függvényeket jelöli. A szórási tartományon belül pedig ($r < R$) a hullámfüggvény:

$$\Psi_m^{(in)} = \sum_{\mu=1}^N A_\mu \mathbf{J}_\mu, \quad (32)$$

$$\mathbf{J}_{m,\mu}(r, \varphi) = \begin{pmatrix} C_1^{(in)}(k_\mu) J_m(k_\mu^{(in)} r) \\ C_2^{(in)}(k_\mu) J_{m+1}(k_\mu^{(in)} r) e^{i\varphi} \\ C_3^{(in)}(k_\mu) J_{m+1}(k_\mu^{(in)} r) e^{i\varphi} \\ C_4^{(in)}(k_\mu) J_{m+2}(k_\mu^{(in)} r) e^{i2\varphi} \\ C_5^{(in)}(k_\mu) J_{m+2}(k_\mu^{(in)} r) e^{i2\varphi} \\ C_6^{(in)}(k_\mu) J_{m+3}(k_\mu^{(in)} r) e^{i3\varphi} \\ C_7^{(in)}(k_\mu) J_{m+3}(k_\mu^{(in)} r) e^{i3\varphi} \\ \vdots \\ C_{2N}^{(in)}(k_\mu) J_{m+N}(k_\mu^{(in)} r) e^{iN\varphi} \end{pmatrix} e^{im\varphi}, \quad (33)$$

Itt $m \in \mathbb{M} \equiv \{\dots, -1, 0, 1, \dots\}$. Az $S_{\nu\beta}$ szórási-mátrixot és az A_μ amplitúdót a határfeltételekből határozhatjuk meg, azaz a teljes hullámfüggvény folytonosságából: $\Psi_{m,\nu}^{(out)}(r = R, \varphi) = \Psi_m^{(in)}(r = R, \varphi)$, mely az alábbi inhomogén lineáris egyenletrendszerre vezet:

$$\sum_{\mu=1}^N A_\mu \mathbf{J}_\mu - \sum_{\beta=1}^N S_{\nu\beta} \mathbf{h}_{m,\beta}^{(1)} = \mathbf{h}_{m,\nu}^{(2)}. \quad (34)$$

Most tekintsünk egy x tengely irányából bejövő síkhullám szóródását az $r > R$ részben!

Ennek az ε energiájú sajátállapota az alábbi alakban írható:

$$\Phi_x(r, \varphi) = e^{ikx} \begin{pmatrix} \tilde{C}_1^{(out)}(k_\nu) \\ \tilde{C}_2^{(out)}(k_\nu) \\ \vdots \\ \tilde{C}_{2N}^{(out)}(k_\nu) \end{pmatrix}. \quad (35)$$

Könnyen belátható, hogy az inverz sajátérték-problémából polárkoordinátákban kapott C , valamint a Descartes-féle koordináta-rendszerben felírt síkhullámot reprezentáló spinor $\tilde{C}$ komponensei között az alábbi összefüggés áll fenn:

$$\begin{pmatrix} C_1^{(out)}(k_\nu) \\ C_2^{(out)}(k_\nu) \\ C_3^{(out)}(k_\nu) \\ C_4^{(out)}(k_\nu) \\ C_5^{(out)}(k_\nu) \\ C_6^{(out)}(k_\nu) \\ C_7^{(out)}(k_\nu) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{C}_1^{(out)}(k_\nu) \\ i\tilde{C}_2^{(out)}(k_\nu) \\ i\tilde{C}_3^{(out)}(k_\nu) \\ i^2\tilde{C}_4^{(out)}(k_\nu) \\ i^2\tilde{C}_5^{(out)}(k_\nu) \\ i^3\tilde{C}_6^{(out)}(k_\nu) \\ i^3\tilde{C}_7^{(out)}(k_\nu) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Felhasználva ezt a tényt, valamint a Bessel-függvényekre vonatkozó Jacobi-Anger-féle kifejtési-tételt, miszerint:

$$e^{ix} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(kr) e^{im\varphi}, \quad (37)$$

megmutatható, hogy a fenti Φ_x függvény parciális hullámokra való felbontása a következő:

$$\Phi_x = \sum_{m \in \mathbb{M}} \frac{i^m}{2} (\mathbf{h}_{\nu,m}^{(1)} + \mathbf{h}_{\nu,m}^{(2)}) = e^{ikx} \begin{pmatrix} \tilde{C}_1^{(out)}(k_\nu) \\ \tilde{C}_2^{(out)}(k_\nu) \\ \vdots \\ \tilde{C}_{2N}^{(out)}(k_\nu) \end{pmatrix}. \quad (38)$$

Ekkor a hullámfüggvény rendre az $r > R$, valamint az $r < R$ tartományokban a következő alakban írható:

$$\Psi^{(out)} = \Phi_{plane, \varphi_i=0}^\nu + \sum_{\beta, m} \frac{i^m}{2} (S_{\nu\beta} - \delta_{\nu\beta}) \mathbf{h}^{(1)}_{\beta, m}, \quad (39)$$

$$\Psi^{(in)} = \sum_{\mu, m} \frac{i^m}{2} A_{\mu m} \mathbf{J}_{\mu m}. \quad (40)$$

Fontos, hogy a hullámfüggvény csak a $k_I R$, illetve $k_{II} R$ dimenziótlan paraméterektől függ.

A szórési hatáskeresztmetszetet a szórt hullám asszimptotikus $r \gg R$ alakjából kaphatjuk meg [12].

Ezzel a rendszer szórási problémáját egzaktul megoldottuk. Tudomásunk szerint a dolgozat során vizsgált spinor-rendszer szórási problémáját az irodalomban mi oldottuk meg elsőként, így ez önmagában is jelentős eredménynek számít.

A továbbiakban az itt kapott eredményeket fogjuk venni klasszikus határesetben, és az ebből kapott elektron megtalálási valószínűség sűrűségfüggvényeket fogjuk ábrázolni különböző paraméterek esetén, melyeket összehasonlítunk a klasszikus geometriai optikából adódó görbékkel, melyeknek alakja negatív törésmutató esetén a következő⁴:

$$\mathbf{r}_K^p(\alpha) = (-1)^p \left[\begin{pmatrix} \cos(\alpha + 2\beta(p-1)) \\ -\sin(\alpha + 2\beta(p-1)) \end{pmatrix} + t^*(\alpha) \left(\begin{pmatrix} \cos(\alpha + 2\beta(p-1)) \\ -\sin(\alpha + 2\beta(p-1)) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \cos(\alpha + 2\beta p) \\ -\sin(\alpha + 2\beta p) \end{pmatrix} \right) \right], \quad (41)$$

ahol α, β a bejövő síkhullám beesési, illetve törési szögét, p pedig a kör alakú tartományban elszorított reflexióból adódó hurok számát jelöli. Ezenkívül az áttekinthetőség érdekében bevezettük az alábbi rövidítéseket:

$$t^*(\alpha) = \frac{1 + 2(p-1)\beta'(\alpha)}{2[1 + (2p-1)\beta'(\alpha)]}, \quad (42a)$$

$$\beta'(\alpha) = \frac{\cos \alpha}{\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}. \quad (42b)$$

A kausztikák csúcsait a fenti esetben a következőképpen kaphatjuk meg a geometriai optika szerint:

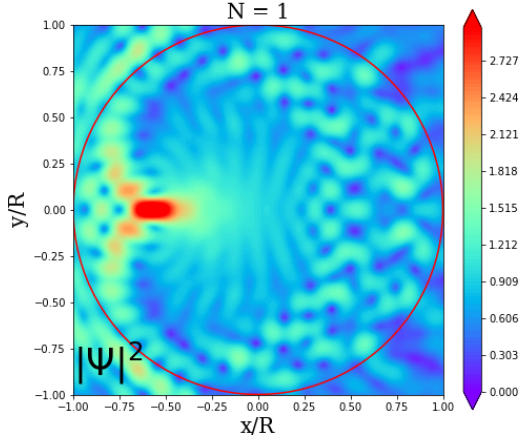
$$x_{cusp}^{(p)} = \frac{(-1)^p}{|n| - 1 + 2p}. \quad (43)$$

Így ezek ismeretében a továbbiakban célunk a kvantummechanikai eredmények összevetése a klasszikus eredményekkel, a megfelelő határesetben.

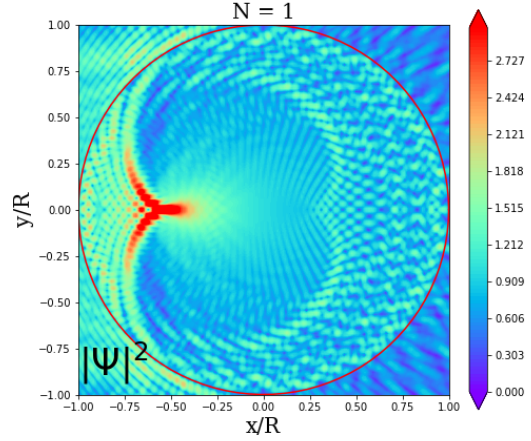
⁴Ezen görbék egyenleteinek levezetése megtalálható a függelék 7.2 alfejezetében.

5. Eredmények

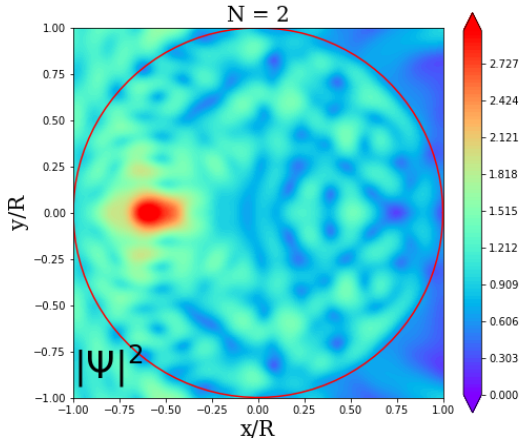
Ábrázoljuk a szórási problémából kapott hullámfüggvény abszolút értékének négyzetét különböző rétegszámok mellett, és vegyük a $\lambda \ll \lambda_F$ rövidhullámhosszú esetet! Ez a feltétel ekvivalens a $kR \gg 1$ feltétellel. Az $N = 1$ single-, illetve az $N = 2$ bilayer eseteit tartalmazza az 5-ös ábra. Jól látszanak a besűrűsödések a hullámfüggvény szerkezetében, amennyiben növeljük annak kR argumentumát.



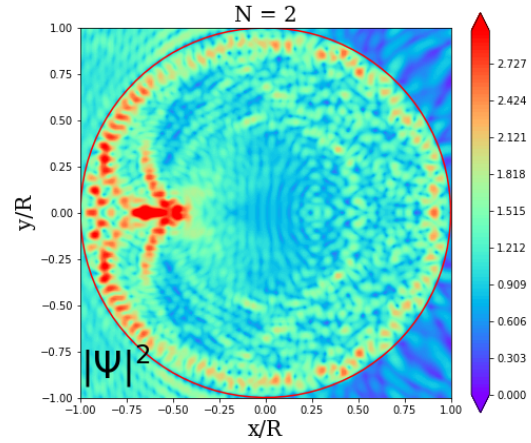
(a) $k_I R = 30, k_{II} R = 30$.



(b) $k_I R = 100, k_{II} R = 100$.



(c) $k_I R = 20, k_{II}^{(1)} R = 30, k_{II}^{(2)} R = 15$.



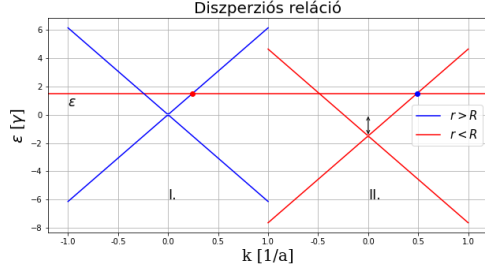
(d) $k_I R = 80, k_{II}^{(1)} R = 100, k_{II}^{(2)} R = 50$.

5. ábra. A szórt hullámfüggvény $|\Psi(r)|^2$ térfüggése $N = 1, 2$ rétegszámok esetén, különböző nagyságrendű kR argumentumok mellett.

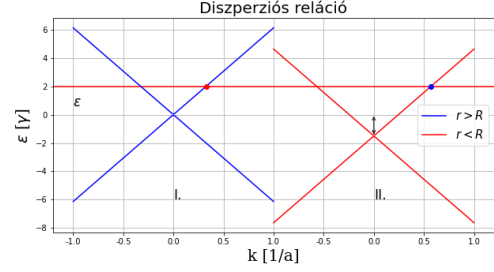
Látható tehát, hogy érdekes karakterisztikát tapasztalunk a $kR \gg 1$ határesetben, így a továbbiakban kizárólag erre korlátozódunk, különböző potenciál átmenetek esetében.

5.1. Az $n - n$ átmenet vizsgálata

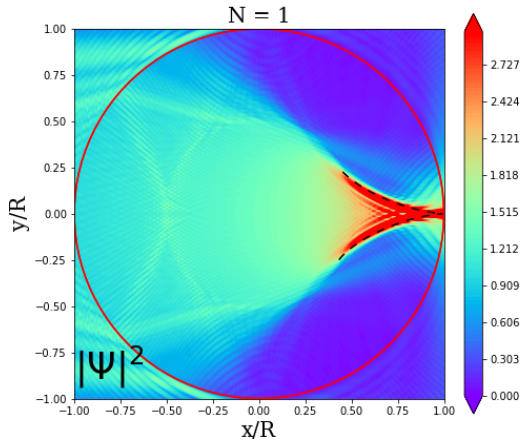
Elsőként tekintsük az $n - n$ átmenetet! A dolgozatban kizárólag az $N = 1$ single-layer esetén kapott eredményeket közöljük, nagyobb rétegszám esetén az eredmény ehhez hasonló.



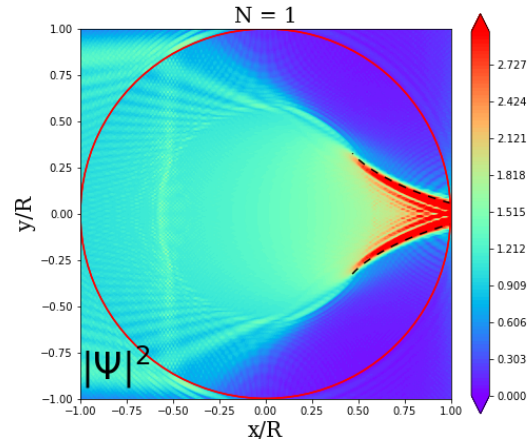
(a) $V_I = 0$, $V_{II} = -1.5\gamma_1$, $\varepsilon = 1.5\gamma_1$.



(b) $V_I = 0$, $V_{II} = -1.5\gamma_1$, $\varepsilon = 2\gamma_1$.



(c) A szórási problémából kapott $|\Psi(r)|^2$ mindkét tartományban. A piros körvonal jelzi a potenciál határát. A paraméterek $k_I R = 150$, $k_{II} R = 300$, $n = 2$, $x_{cusp} = 1$.



(d) A szórási problémából kapott $|\Psi(r)|^2$ mindkét tartományban. A piros körvonal jelzi a potenciál határát. A paraméterek $k_I R = 200$, $k_{II} R = 350$, $n = 1.75$, $x_{cusp} = 1.3$.

6. ábra. Az $n - n$ átmenetben vett diszperziós relációk, valamint a hozzájuk tartozó $|\Psi(r)|^2$ térfüggések egymás alatt két esetben. A piros karikával jelölt k hullámszámú elektron-síkhullám szóródik a kék karikával jelölt elektronszerű állapotba, adott ε energia esetén. Az ábrákon szaggatott vonal jelzi a geometriai optikából adódó kausztikák görbéit.

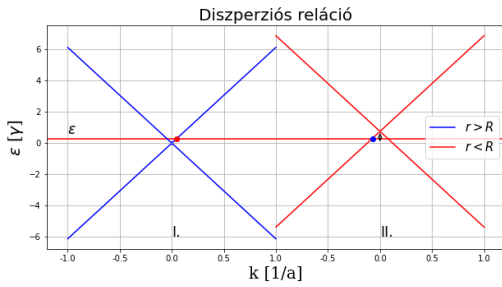
Látható, hogy a hullámfüggvény abszolútérték négyzetében megjelenő besűrűsödésekkel a rendszer a bejövő elektronokat egy pontba fókuszálja, az energia növelésével egyre inkább kifelé. Megfigyelhető az egzakt kvantummechanikai számításból kapott besűrűsödések klasszikus számításokkal való tökéletes átfedése.

5.2. A $p - n$ átmenet vizsgálata különböző paraméterek mellett

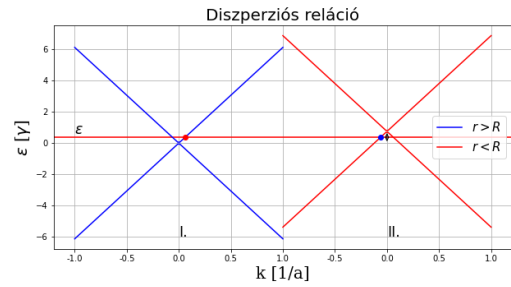
A továbbiakban kizárólag a $p - n$ átmenet vizsgálatára korlátozódunk, különböző rétegszámú rendszerek esetében. A legegyszerűbb egyrétegű single-layer, illetve kétrétegű bilayer módosulatot már részletesen vizsgálták az irodalomban, így elsőként a dolgozat során leírt modellből kapott eredményeket fogjuk összehasonlítani a szakirodalomban fellelhetőekkel.

5.2.1. Az $N = 1$ single-layer esete

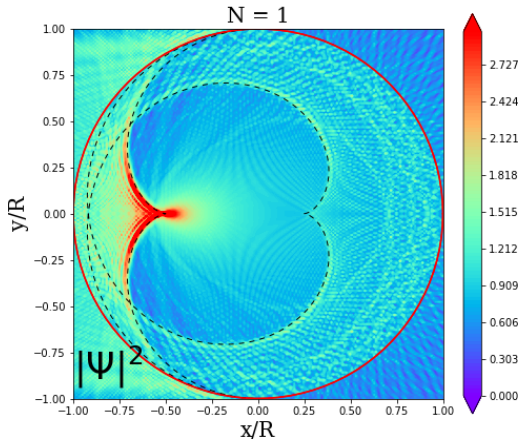
Elsőként vegyük az $N = 1$ egyrétegű rendszert. A $p - n$ átmenet az előző fejezetben leírtaknak megfelelően azt jelenti, hogy a kör potenciálon kívül az elektron-síkhullám a vezetési, azon belül pedig a vegyértéksávban tartózkodik, ennek következtében pedig a törésmutató negatív. A Dirac-pontok környékén ábrázolt diszperziós relációk, valamint a hozzájuk tartozó szórt elektron megtalálási valószínűség sűrűségfüggvények láthatóak a 7-es ábrán.



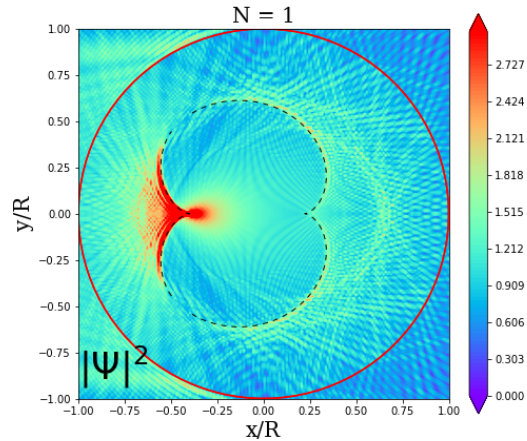
(a) $V_I = 0$, $V_{II} = 0.75\gamma_1$, $\varepsilon = 0.375\gamma_1$.



(b) $V_I = 0$, $V_{II} = 0.75\gamma_1$, $\varepsilon = 0.30\gamma_1$.



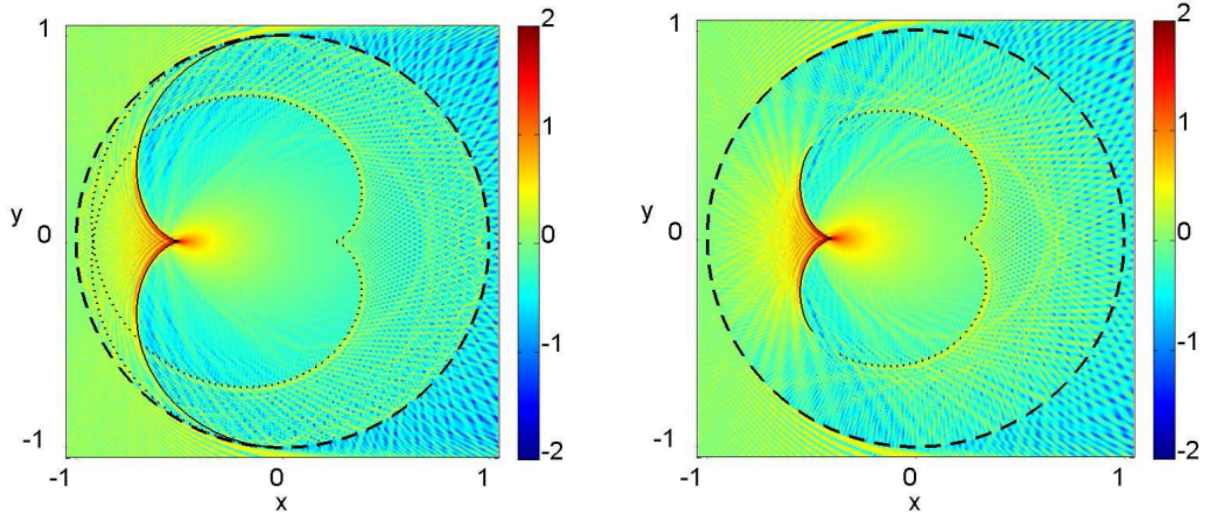
(c) $k_I R = 300$, $k_{II} R = 300$, $n = -1$, $x_{cusp} = -0.5$.



(d) $k_I R = 200$, $k_{II} R = 300$, $n = -1.5$, $x_{cusp} = -0.4$.

7. ábra. Diszperziós relációk és a hozzájuk tartozó $|\Psi(r)|^2$ térfüggések ábrázolása egymás alatt. Az ábrákon szaggatott vonal jelzi a geometriai optikából adódó kausztikák görbéit.

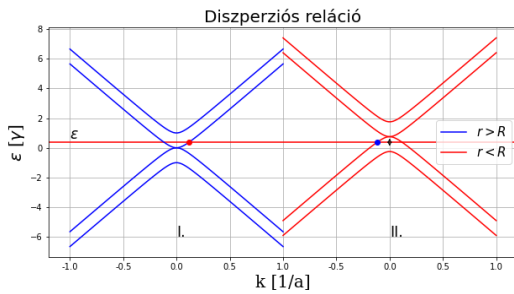
Látható, hogy az egzakt kvantummechanikai számolással kapott besűrűsödések kitűnően egyeznek a klasszikus számításokból adódóakkal. Összevetve az itt kapottakat az irodalomban fellelhetővel – lásd: 8-as ábra –, az eredmények kifogástalanul átfednek.



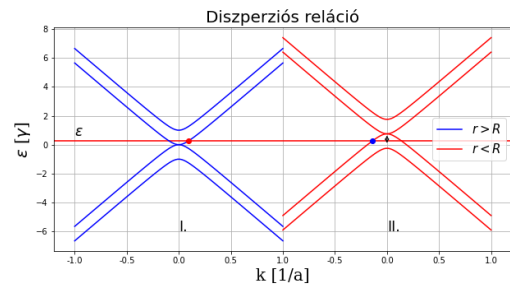
8. ábra. Cserti József MTA nagydoktori dolgozatában található ábrák ugyanazon paraméterek esetében, logaritmikus skálán ábrázolva [12].

5.2.2. Az $N = 2$ bilayer esete

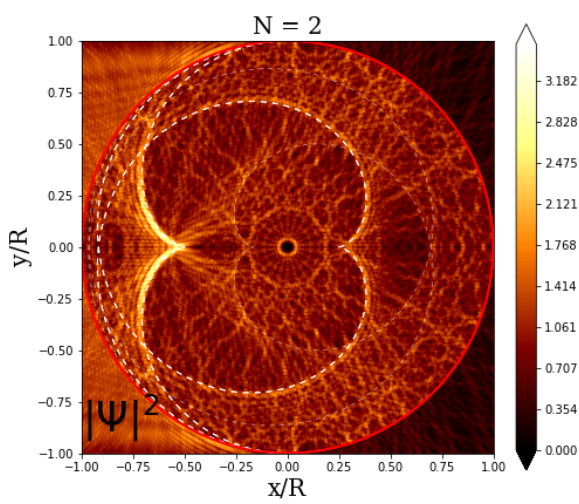
Összevetés az irodalomban fellelhető eredményekkel: A kétrétegű, ún. bilayer szerkezetet szintén vizsgálták már az irodalomban [14, 15]. Elsőként vessük össze a számításunkból kapott eredményeket az ott fellelhetőekkel. Többrétegű rendszer esetén a diszperziós relációban már több ág is megjelenik a különböző tartományokban. Mi most elsőként olyan energiájú esetet veszünk, amikor mindkét tartományban kizárólag egy "valós" k metszés van. Ekkor a másik hullámszám egy evanescens megoldást fog adni, így arra számítunk, hogy továbbra is csak egy besűrűsödés fog adódni a klasszikus határesetben, mivel a bejövő síkhullám csak egy határozott lyukszerű állapotba tud szóródni (9-es ábra).



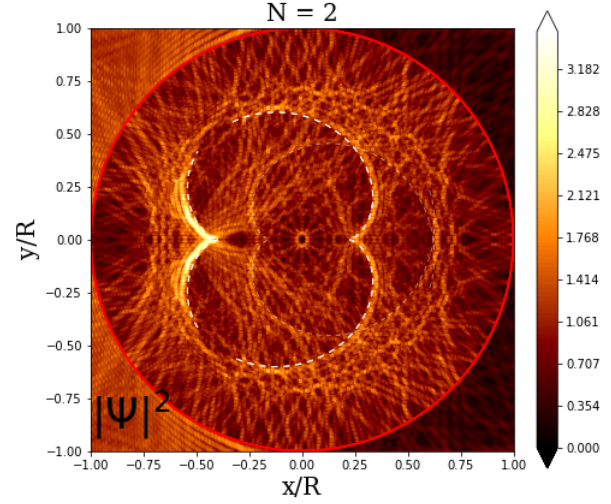
(a) $V_I = 0$, $V_{II} = 0.75\gamma_1$, $\varepsilon = 0.375\gamma_1$.



(b) $V_I = 0$, $V_{II} = 0.75\gamma_1$, $\varepsilon = 0.25\gamma_1$.



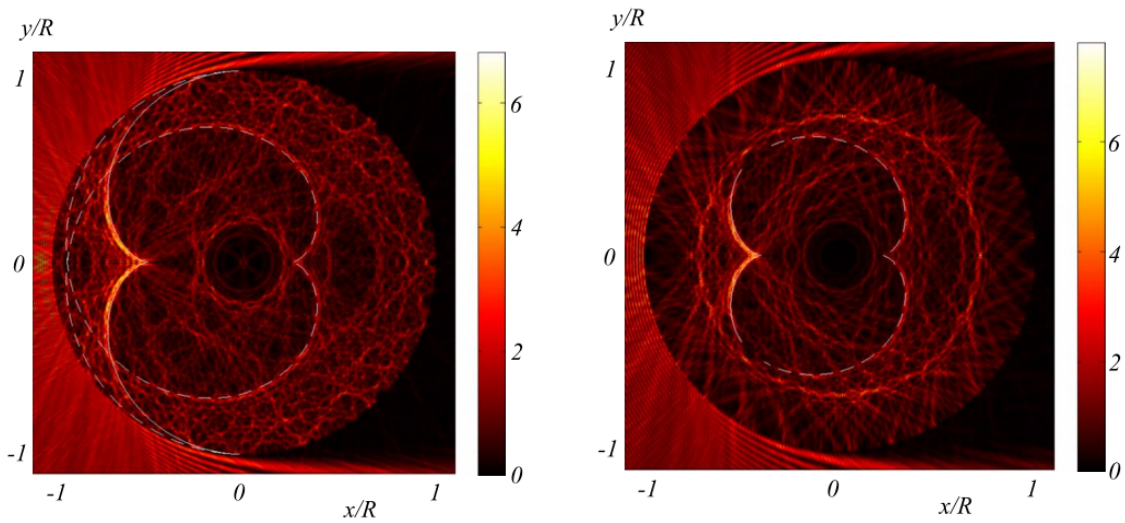
(c) $k_I R = 300$, $k_{II} R = 300$, $n = -1$, $x_{cusp} = -0.5$.



(d) $k_I R = 200$, $k_{II} R = 300$, $n = -1.5$, $x_{cusp} = -0.4$.

9. ábra. Diszperziós relációk és a hozzájuk tartozó $|\Psi(r)|^2$ térfüggések ábrázolása egymás alatt, egy valós k hullámszám metszés esetében. A piros karikával jelölt elektron-síkhullám szóródik a kék karikával jelölt lyukszerű állapotba, adott ε energia esetén. Az ábrákon szaggatott vonal jelzi a geometriai optikából adódó kausztikák görbéit.

Látszik, hogy a vártaknak megfelelően csupán egy kausztika jelenik meg mindkét esetben, méghozzá oda, ahová a klasszikus számítás alapján azt várnánk. Hasonlítsuk össze a kapott eredményeket az szakirodalomban találhatóakkal (10-es ábra).

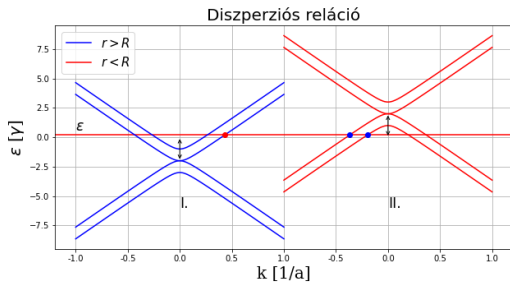


10. ábra. Bilayer rendszer $|\Psi(r)|^2$ térfüggése folding-módszerből felépített Hamilton-operátor esetén, ugyanazon paraméterek mellett. Az ábrák Cserti József és Pályi András cikkéből származnak [15].

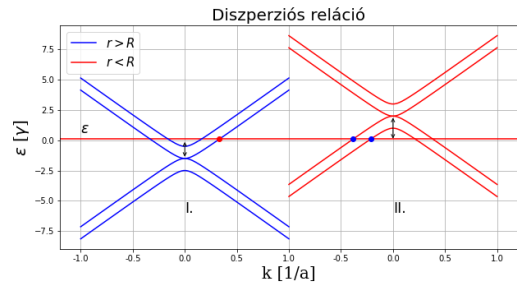
Megjegyezendő, hogy a fenti ábrák egy jelentősen különböző, nevezetesen a kisenergiás folding-módszeréből felépített Hamilton-operátor megoldásaiból származnak [15]. Ennek ellenére a két módszerből kapott eredmény igen szépen átfed egymással.

5.2.3. Elektronoptikai kettőtörés

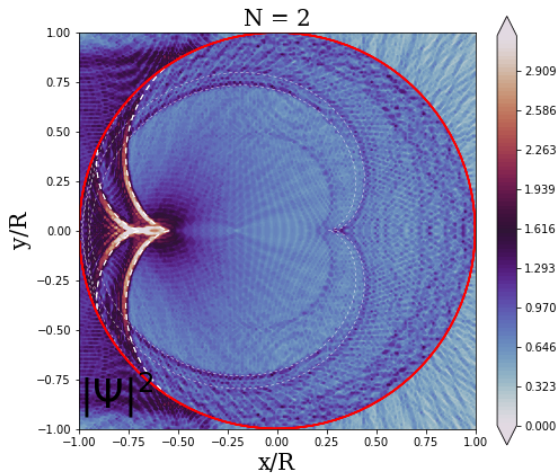
A további alfejezetekben kizárólag olyan eseteket fogunk vizsgálni, melyekben az adott valós k metszéspontok száma maximális. Ekkor az adott hullámszámú kvázirészecskét reprezentáló síkhullám elviekben kettő lyukszerű állapotot is betölthet. Ez azt jelenti, hogy amennyiben vesszük a rövidhullámhosszú, klasszikus határesetet, a rétegszámmal megegyező kausztika fog megjelenni. A kapott eredmények láthatóak a 11-es ábrán.



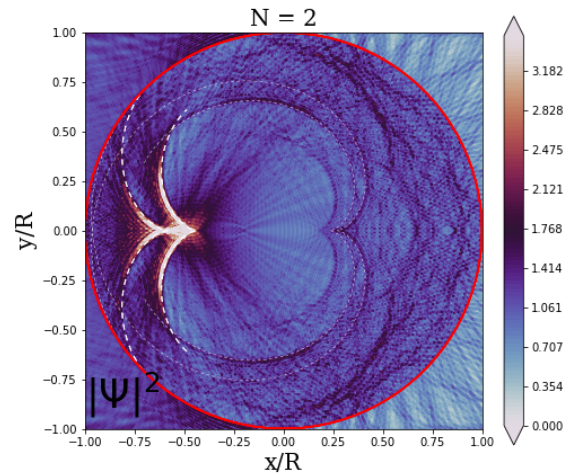
(a) $V_I = -2\gamma_1$, $V_{II} = 2\gamma_1$, $\varepsilon = 0.2\gamma_1$.



(b) $V_I = -1.5\gamma_1$, $V_{II} = 2\gamma_1$, $\varepsilon = 0.1\gamma_1$.



(c) $k_I R = 530$, $k_{II}^{(1)} R = 449$, $k_{II}^{(2)} R = 240$, $n^{(1)} = -0.85$, $n^{(2)} = -0.45$, $x_{cusp}^{(1)} = -0.54$, $x_{cusp}^{(2)} = -0.69$.



(d) $k_I R = 365$, $k_{II}^{(1)} R = 470$, $k_{II}^{(2)} R = 260$, $n^{(1)} = -1.28$, $n^{(2)} = -0.71$, $x_{cusp}^{(1)} = -0.44$, $x_{cusp}^{(2)} = -0.58$.

11. ábra. Diszperziós relációk és a hozzájuk tartozó $|\Psi(r)|^2$ térfüggések ábrázolása egymás alatt, két valós k hullámszám metszés esetében. A piros karikával jelölt elektron-síkhullám szóródik a kék karikával jelölt lyukszerű állapot valamelyikébe, adott ε energia esetén. Az ábrákon szaggatott vonal jelzi a geometriai optikából adódó kausztikák görbéit.

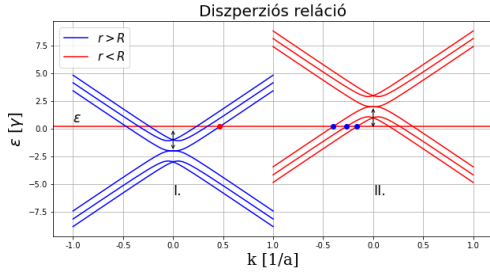
Ahhoz, hogy a $kR \gg 1$ fenti feltételt maradéktalanul teljesíteni tudjuk, a legnagyobb hullámszámú elektron-síkhullám szóródását kell vizsgálnunk, így a továbbiakban kizárólag ezekre az esetekre korlátozódunk. Ebben az esetben mind a bejövő, mind a szórt síkhullámok hullámszámainak abszolútértékei kellően nagyok ahhoz, hogy valóban a klasszikus határátmenetről beszélhessünk. Ennek megfelelően a potenciál sugarán belül két kausztika jelenik meg, mely az optikai kettőstörésnek az elektronoptikai megfelelője.

Mind a bal, mind a jobb, oldalon található kausztikákra tökéletesen illeszkednek a geometriai optikából adódó görbék, azonban látható az is, hogy a jobb oldalon megjelenik egy harmadik besűrűsödés is, melynek a klasszikus számításból adódó eredményekből nincsen megfelelője. Ennek oka feltehetőleg az, hogy a reflexiót szenvedő hullámcsomagok egymással is interferenciába lépnek, tehát kvantummechanikailag nem tekinthetők egymástól tökéletesen függetlennek, ahogyan azt a klasszikus számítások hallgatólágosan feltételezik. Ennek következtében azonban meg fog jelenni a szórt elektron megtalálási valószínűségében egy interferencia mintázat is. Fontos látni azt is, hogy 11-es ábrák jobb oldalán található "klasszikus" kausztikák az előző alfejezetben kapott 7-es ábrákban találhatóakhoz képest jelentősen elhalványulnak, melynek feltehetőleg szintén a fellépő interferenciában keresendő az oka. Ennek pontos megválaszolása azonban még részletesebb vizsgálatokat igényel, melyek meghaladják jelen dolgozat kereteit.

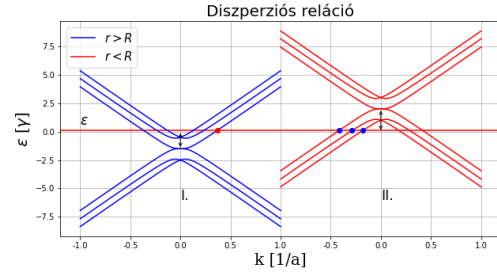
5.2.4. Az $N = 3$ trilayer esete

Növelve a rétegszámot, azaz véve a háromrétegű grafén szerkezetet, immáron három különböző águnk lesz a rendszer sáv szerkezetében. Ennek következtében, amennyiben az energiát megfelelően választjuk, három különböző metszéspontot fogunk kapni a diszperziós relációban. Mivel az előző alfejezetben láttuk, hogy klasszikus határesetről kizárólag akkor beszélhetünk, ha a legnagyobb hullámszámmal rendelkező elektron-síkhullámot engedjük be a rendszerbe, a továbbiakban kizárólag ezt az esetet fogjuk vizsgálni.

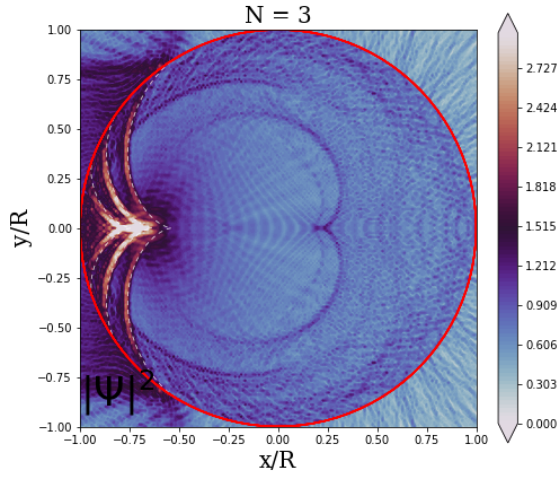
Ábrázolva a szórt elektron megtalálási valószínűség sűrűségét a klasszikus határátmenetben – lásd: 12-es ábra – tökéletesen kirajzolódik a térbeli mintázatban három különböző kausztika a bal oldalon, melyek tökéletesen átfednek az ott található, klasszikus számításokból adódó görbékkel abban az esetben, amikor a síkhullám kizárólag transzmittál. Azonban láthatóan a visszaverődésből adódó kausztikák az ábrán csak nagyon nehezen kivehetőek, helyettük ismételt a klasszikus számításokból nem adódó eredmény látszik élesen kirajzolódni. Ennek oka ismételt a különböző hullámszámú komponensek interferenciájában keresendő.



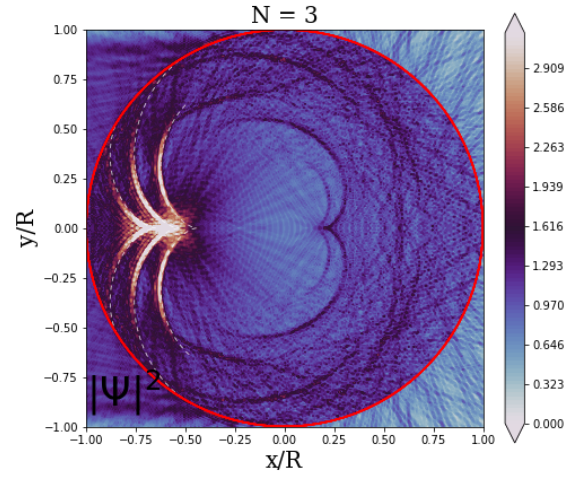
(a) $V_I = -2\gamma_1$, $V_{II} = 2\gamma_1$, $\varepsilon = 0.2\gamma_1$.



(b) $V_I = -1.5\gamma_1$, $V_{II} = 2\gamma_1$, $\varepsilon = 0.1\gamma_1$.



(c) $k_I R = 572$, $k_{II}^{(1)} R = 490$, $k_{II}^{(2)} R = 330$, $k_{II}^{(3)} R = 200$,
 $n^{(1)} = -0.86$, $n^{(2)} = -0.58$, $n^{(3)} = -0.35$, $x_{cusp}^{(1)} =$
 -0.54 , $x_{cusp}^{(2)} = -0.64$, $x_{cusp}^{(3)} = -0.74$.



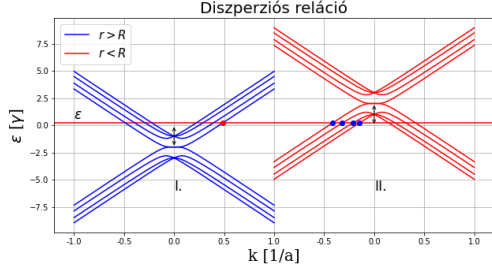
(d) $k_I R = 408$, $k_{II}^{(1)} R = 510$, $k_{II}^{(2)} R = 350$, $k_{II}^{(3)} R =$
 220 , $n^{(1)} = -1.25$, $n^{(2)} = -0.86$, $n^{(3)} = -0.54$,
 $x_{cusp}^{(1)} = -0.44$, $x_{cusp}^{(2)} = -0.54$, $x_{cusp}^{(3)} = -0.64$.

12. ábra. Diszperziós relációk és a hozzájuk tartozó $|\Psi(r)|^2$ térfüggések ábrázolása egymás alatt, három valós k hullámszám metszet esetén. A piros karikával jelölt, legnagyobb hullámszámú elektron-síkhullám szóródik a kék karikával jelölt lyukszerű állapot valamelyikébe, adott energia esetén. Az ábrákon szaggatott vonal jelzi a geometriai optikából adódó kausztikák görbéit.

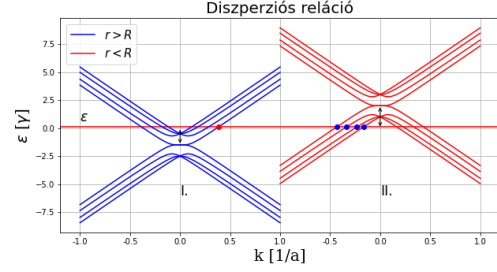
Kiderült tehát, hogy a háromrétegű ABC grafén szerkezetű rendszer megvalósítja az elektron-optikai "hármastörést"! Tudomásunk szerint ilyen kettőnél több, "többestörési" jelenségről még nem publikáltak az irodalomban.

5.2.5. Az $N = 4$ réteg esete

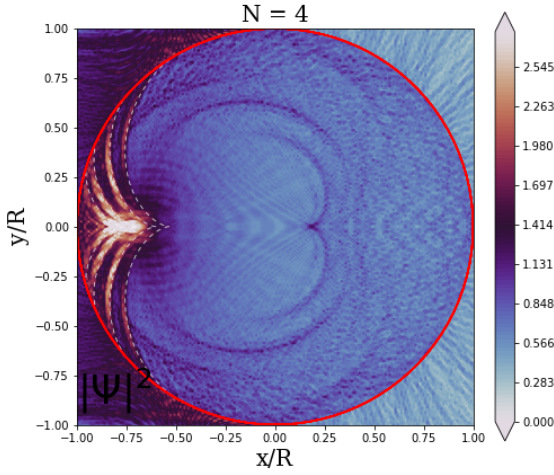
Végül vegyük az $N = 4$, négyrétegű rendszert, az előző alfejezetekben vett esetekkel megegyező paraméterek mellett (13-as ábra).



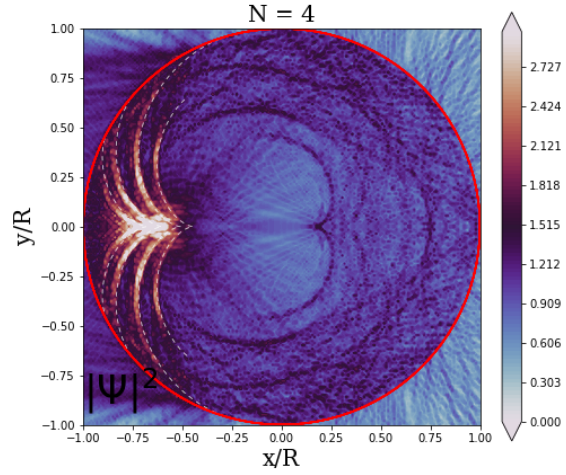
(a) $V_I = -2\gamma_1$, $V_{II} = 2\gamma_1$, $\varepsilon = 0.2\gamma_1$.



(b) $V_I = -1.5\gamma_1$, $V_{II} = 2\gamma_1$, $\varepsilon = 0.1\gamma_1$.



(c) $k_I R = 890$, $k_{II}^{(1)} R = 768$, $k_{II}^{(2)} R = 587$, $k_{II}^{(3)} R = 394$, $k_{II}^{(4)} R = 275$ $n^{(1)} = -0.86$, $n^{(2)} = -0.66$, $n^{(3)} = -0.44$, $n^{(4)} = -0.31$, $x_{cusp}^{(1)} = -0.76$, $x_{cusp}^{(2)} = -0.69$, $x_{cusp}^{(3)} = -0.60$, $x_{cusp}^{(4)} = -0.54$.



(d) $k_I R = 645$, $k_{II}^{(1)} R = 798$, $k_{II}^{(2)} R = 620$, $k_{II}^{(3)} R = 427$, $k_{II}^{(4)} R = 306$, $n^{(1)} = -1.24$, $n^{(2)} = -0.96$, $n^{(3)} = -0.66$, $n^{(4)} = -0.48$, $x_{cusp}^{(1)} = -0.67$, $x_{cusp}^{(2)} = -0.60$, $x_{cusp}^{(3)} = -0.50$, $x_{cusp}^{(4)} = -0.45$.

13. ábra. Diszperziós relációk és a hozzájuk tartozó $|\Psi(r)|^2$ térfüggések ábrázolása egymás alatt, négy valós k hullámszám metszet esetén. Az ábrákon szaggatott vonal jelzi a geometriai optikából adódó kausztikák görbéit. A piros karikával jelölt, legnagyobb hullámszámú elektron-síkhullám szóródik a kék karikával jelölt lyukszerű állapot valamelyikébe, adott energia esetén, megvalósítva ezzel a "négyestörést".

6. Konklúzió, kitekintés

A fenti dolgozatban felírtuk az általános, N rétegű ABC grafénból álló rendszer Hamilton-operátorának sajátfüggvényeit, szoros kötésű közelítésben. Ezek segítségével fel tudtuk építeni a megfelelő hullámfüggvény ansatz-ot, melynek ismeretében egzaktul megoldottuk az említett struktúra szórási problémáját. Tudomásunk szerint tetszőleges N rétegű, a fentihez hasonló spinor rendszer szórási problémáját még nem tanulmányozták, így ezen eredmények önmagukban is nagy jelentőséggel bírnak.

Ábrázoltuk a szórási problémából kapott szórt elektron megtalálási valószínűség sűrűség térfüggését, és láttuk, hogy érdemes annak rövidhullámhosszú, más szóval klasszikus határesetét vizsgálni. Azt találtuk ugyanis, hogy a hullámfüggvény szerkezetében kausztikák rajzolódnak ki, így ez lehetőséget adott a geometriai optikával való összehasonlításra. Megmutattuk, hogy a klasszikus számításokból adódó kausztikák tökéletesen egyeznek az egzakt kvantummechanikából kapottakkal. Demonstráltuk ezenkívül, hogy a paraméterek megfelelő választása mellett, ezeknek a maximális száma megegyezik a rétegszámmal. Ezen "többestörő" (ellentétben az optikából ismert kettőstöréssel) tulajdonsággal kapcsolatban tudomásunk szerint egy új elektronoptikai tulajdonságot találtunk. Ez a többestörés elviekben minden olyan fizikai rendszerben felléphet, melynek sávszerkezetében több elektron-ág is megjelenik. Együttműködve kísérleti kutatókkal, célunk a következőkben annak kidolgozása, hogy a fenti struktúra ezen tulajdonságát milyen módon lehetne kísérletileg kimutatni. Célunk továbbá ezen kausztikák mélyebb elméleti vizsgálata, illetve a dolgozat során említett, az elektron-síkhullámok interferenciájából adódó mintázatok pontos megértése.

Végül vizsgálni szeretnénk a későbbiekben az ABC grafén többrétegű rendszer állapotsűrűségét, különösen annak diszperziós relációjában megjelenő lapos sávok környékén. Ennek kiszámításához az itt kapott eredmények alapvető fontosságúak.

Köszönetnyilvánítás

Elsőként szeretnék köszönetet mondani Cserti Józsefnek a téma felvetéséért, valamint az ahhoz szükséges elméleti alapok részletes átadásáért. Oroszlány Lászlónak, kinek a fizika numerikus módszerei óráin elsajátítottak nagyban segítettek a dolgozatban felmerülő problémák megoldását. Szeretnék köszönetet mondani mindkettejüknek az összes hasznos tanácsukért is, amik jelentős segítséget nyújtottak a dolgozat elkészítésében, valamint segítőkész, türelmes hozzáállásukért.

7. Függelék

7.1. Az impulzus és az impulzusmomentum operátorok kapcsolata

Vegyük emlékeztetőül a dolgozat során használt impulzus és impulzusmomentum operátorokat:

$$\hat{p}_{\pm} = \hat{p}_x \pm i\hat{p}_y, \quad (44a)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (44b)$$

A következő állítást szeretnénk belátni:

$$[\hat{L}_z, \hat{p}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{p}_{\pm} \Rightarrow [\hat{L}_z, \hat{p}_{\pm}^N] = \pm \hbar N \hat{p}_{\pm}^N. \quad (45)$$

Bizonyítás: Ennek belátásához írjuk fel az impulzus operátort polárkoordinátákban:

$$\hat{p}_{\pm} = -i\hbar e^{\pm i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]. \quad (46)$$

Ezután számítsuk ki a kiszámítandó kommutátort. Mivel ez differenciál-operátorokat tartalmaz, ezt legegyszerűbben úgy tehetjük meg, ha hattatjuk egy függvényre, majd kihasználjuk a Leibniz-szabályt:

$$[\hat{L}_z, \hat{p}_{\pm}] \Psi(r, \varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[(-i\hbar) e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] \Psi(r, \varphi) - (-i\hbar) e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \cdot (-i\hbar) \frac{\partial \Psi(r, \varphi)}{\partial \varphi}. \quad (47a)$$

Végezzük el a fentiek alapján a parciális deriváltakat:

$$-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial \Psi(r, \varphi)}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial \Psi(r, \varphi)}{\partial \varphi} \right) \right] + \hbar^2 \left[e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial^2 \Psi(r, \varphi)}{\partial r \partial \varphi} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial^2 \Psi(r, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right) \right]. \quad (47b)$$

Vonjuk össze a megfelelő tagokat, végül végezzük el az adódó átalakításokat:

$$-\hbar^2 \left[(\pm i) e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial \Psi(r, \varphi)}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial \Psi(r, \varphi)}{\partial \varphi} \right) + e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial^2 \Psi(r, \varphi)}{\partial \varphi \partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial^2 \Psi(r, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right) \right] + \quad (47c)$$

$$+\hbar^2 \left[e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial^2 \Psi(r, \varphi)}{\partial r \partial \varphi} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial^2 \Psi(r, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right) \right] = \pm \hbar (-i\hbar) \cdot e^{\pm i\varphi} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Psi(r, \varphi) = \pm \hbar \hat{p}_{\pm} \Rightarrow \quad (47d)$$

$$\Rightarrow [\hat{L}_z, \hat{p}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{p}_{\pm}. \quad (47e)$$

Ezt az azonosságot N -szer alkalmazva megkapjuk a fenti állítást, tehát általában a következő kommutációs reláció igaz az impulzus, valamint az impulzusmomentum operátor között:

$$[\hat{L}_z, \hat{p}_{\pm}^N] = \pm \hbar N \hat{p}_{\pm}^N. \quad (48)$$

7.2. A kausztikák görbeseregének egyenleteinek levezetése

Pozitív törésmutató esetén Érkezzon a nyaláb jobbról, x irányban! Miután belép az n törésmutatóval jellemzett közegbe, törést fog szenvedni a Snellius-Descartes-törvénynek megfelelően:

$$n \sin \beta = \sin \alpha. \quad (49)$$

Felvéve egy Descartes-koordinátarendszert, leolvasható, hogy az első töréspontba mutató $\mathbf{v}_0$ vektor $\varphi = \pi - \alpha$, a $\mathbf{v}_1$ visszaverődési pontba mutató vektor pedig

$$\varphi_1 = \pi - (\alpha + \pi - 2\beta) = -\alpha + 2\beta \text{ szöget fog}$$

bezárni az x tengellyel.

Jelölje p a körön belüli húrok számát!

Ekkor könnyű látni, hogyha a nyaláb a karikán belül $p - 1$ reflexiót szenved, a megfelelő pontba mutató $\mathbf{v}_p$ vektor

$$\varphi_p = \varphi_0 - (\pi - 2\beta)p = \pi(1 - p) - \alpha + 2\beta p \text{ szöget fog bezárni a vízszintessel.}$$

Felírva általában egy töréspont koordinátáit:

$$\mathbf{v}_p = \begin{pmatrix} \cos \varphi_p \\ \sin \varphi_p \end{pmatrix} = (-1)^{1-p} \begin{pmatrix} \cos(-\alpha + 2\beta \cdot p) \\ \sin(-\alpha + 2\beta \cdot p) \end{pmatrix}. \quad (50)$$

Ebből már könnyen fel tudjuk írni a p számhoz tartozó szakasz paraméteres egyenletét:

$$\mathbf{r}_p(t, \alpha) = \mathbf{v}_{p-1} + (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_{p-1}) \cdot t. \quad (51)$$

ahol $t \in [0, 1]$. A fenti egyenesek burkológörbét a katasztrófaelmélet szerint a fenti paraméteres egyenlet Jacobi-mátrix determinánsának eltűnésének feltételéből kapjuk [16]:

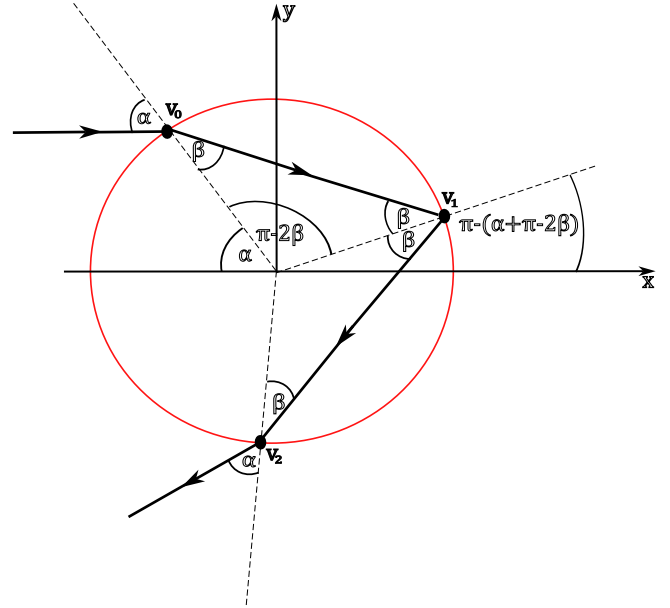
$$\begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial x}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial \alpha} \end{vmatrix} = 0. \quad (52)$$

Ezt kiszámítva, az alábbi egyenlethez jutunk:

$$t^*(\alpha) = \frac{1 + 2(1 - p)\beta'(\alpha)}{2[1 + (1 - 2p)\beta'(\alpha)]}. \quad (53)$$

Végül kiszámítva a $\beta'(\alpha)$ deriváltat felhasználva a Snellius-Descartes törvényt, arra a következő eredményt kapjuk:

$$\beta'(\alpha) = \frac{\partial \beta}{\partial \alpha} = \frac{\cos \alpha}{n \cos \beta} = \frac{\cos \alpha}{\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}. \quad (54)$$



14. ábra. A bejövő nyaláb a körrel határolt tartományba belépve többszörös reflexiót szenved az ábra szerint.

Végül a kausztikák, azaz a fenti egyenesek burkológörbéinek egyenleteit a fenti (53)-as feltételből kapott t^* mennyiség az (51)-es egyenletbe való behelyettesítésével kapjuk:

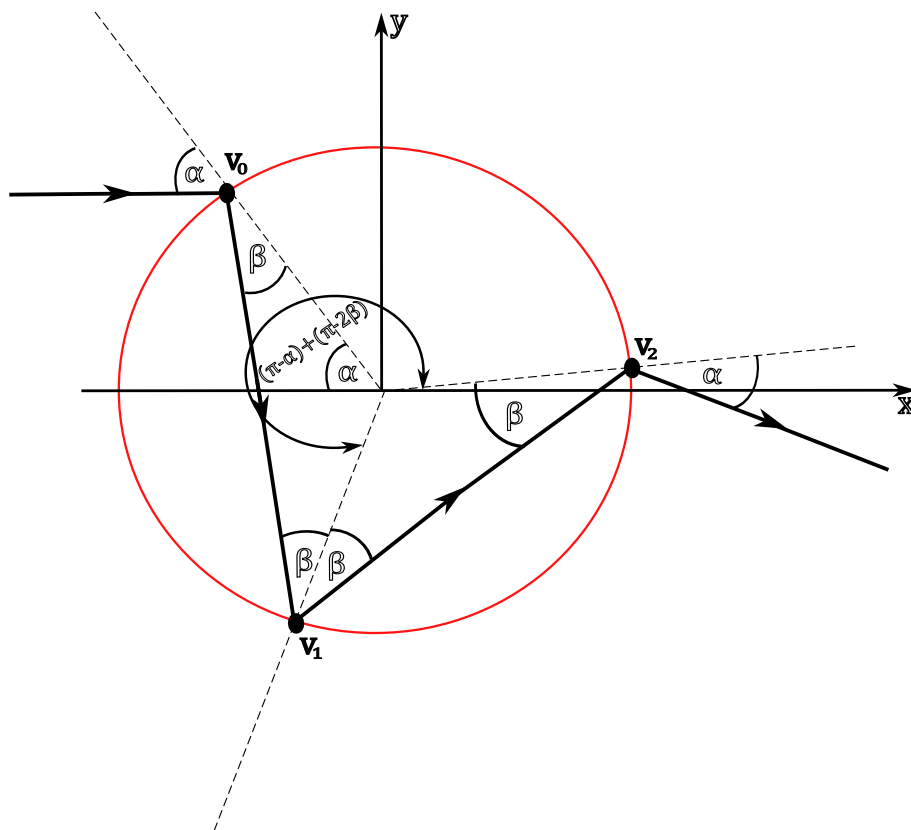
$$\mathbf{r}_K^{(p)}(\alpha) = \mathbf{r}_p(t = t^*(\alpha)) = \mathbf{v}_{p-1} + (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_{p-1})t^*(\alpha). \quad (55)$$

A csúcsok helyét pedig az $\alpha \rightarrow 0$ határesetből kapjuk:

$$x_{cusp}^{(p)} = x_K^{(p)}(\alpha \rightarrow 0) = \frac{(-1)^p}{2p - n - 1}. \quad (56)$$

Negatív törésmutató esetén Vegyük ugyanazt a konfigurációt, mint az $n > 0$ esetben. Miután belép az n törésmutatóval jellemzett közegbe, a nyaláb negatív szögű törést fog szenvedni a Snellius-Descartes-törvénynek megfelelően:

$$n \sin \beta = \sin \alpha. \quad (57)$$



15. ábra. A bejövő nyaláb a körrel határolt tartományba belépve negatív szögben megtörik, majd többszörös reflexiót szenved az ábra szerint.

Felvéve itt is egy Descartes-koordinátarendszert, leolvasható, hogy az első töréspontba mutató $\mathbf{v}_0$ vektor $\varphi = \pi - \alpha$ szöget, a $\mathbf{v}_1$ visszaverődési pontba mutató vektor pedig $\varphi_1 = \varphi_0 + (\pi - 2\beta) = 2\pi - \alpha - 2\beta$ szöget fog bezárni az x tengellyel. Az előző alfejezethez hasonlóan, hogyha a nyaláb a karikán belül $p - 1$ reflexiót szenved, a megfelelő pontba mutató $\mathbf{v}_p$ vektor $\varphi_p = \varphi_0 + (\pi - 2\beta)p = \pi(p + 1) - \alpha - 2\beta \cdot p$

szöget fog bezárni a vízszintessel. Felírva általában egy töréspont koordinátáit:

$$\mathbf{v}_p = \begin{pmatrix} \cos \varphi_p \\ \sin \varphi_p \end{pmatrix} = (-1)^{1+p} \begin{pmatrix} \cos(-\alpha - 2\beta \cdot p) \\ \sin(-\alpha - 2\beta \cdot p) \end{pmatrix}. \quad (58)$$

Ebből már könnyen fel tudjuk írni a p számhoz tartozó szakasz paraméteres egyenletét:

$$\mathbf{r}_p(t, \alpha) = \mathbf{v}_{p-1} + (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_{p-1}) \cdot t. \quad (59)$$

ahol $t \in [0, 1]$. Kiszámítva itt is a Jacobi-mátrix determinánsát, majd azt nullával egyenlővé téve, a következő feltételhez jutunk:

$$t^*(\alpha) = \frac{1 + 2(p-1)\beta'(\alpha)}{2[1 + (2p-1)\beta'(\alpha)]}. \quad (60)$$

Végül kiszámítva a $\beta'(\alpha)$ deriváltat felhasználva a Snellius-Descartes törvényt, a következő eredményt kapjuk:

$$\beta'(\alpha) = \frac{\partial \beta}{\partial \alpha} = \frac{\cos \alpha}{n \cos \beta} = \frac{\cos \alpha}{\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}. \quad (61)$$

Végül a kausztikák, azaz a fenti egyenesek burkológörbéinek egyenleteit a fenti feltételből kapott t^* mennyiség behelyettesítésével kapjuk:

$$\mathbf{r}_K^{(p)}(\alpha) = \mathbf{r}_p(t = t^*(\alpha)) = \mathbf{v}_{p-1} + (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_{p-1})t^*(\alpha). \quad (62)$$

A csúcsok helyét pedig az $\alpha \rightarrow 0$ határesetből kapjuk:

$$x_{cusp}^{(p)} = x_K^{(p)}(\alpha \rightarrow 0) = \frac{(-1)^p}{|n| - 1 + 2p}. \quad (63)$$

Hivatkozások

- [1] Kostya S Novoselov, Andre K Geim, Sergei V Morozov, De-eng Jiang, Yanshui Zhang, Sergey V Dubonos, Irina V Grigorieva, and Alexandr A Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, 306(5696):666–669, 2004.
- [2] Kostya S Novoselov, Andre K Geim, Sergei Vladimirovich Morozov, Dingde Jiang, Michail I Katsnelson, IVa Grigorieva, SVb Dubonos, and andAA Firsov. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *nature*, 438(7065):197–200, 2005.
- [3] Andre K Geim and Konstantin S Novoselov. The rise of graphene. In *Nanoscience and technology: a collection of reviews from nature journals*, pages 11–19. World Scientific, 2010.
- [4] B Van Duppen and FM Peeters. Klein paradox for a pn junction in multilayer graphene. *EPL (Europhysics Letters)*, 102(2):27001, 2013.
- [5] MI Katsnelson, KS Novoselov, and AK Geim. Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene. *Nature physics*, 2(9):620–625, 2006.
- [6] Edward McCann. Asymmetry gap in the electronic band structure of bilayer graphene. *Physical Review B*, 74(16):161403, 2006.
- [7] Haonan Xiong, Wentao Jiang, Yipu Song, and Luming Duan. Bound state properties of abc-stacked trilayer graphene quantum dots. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(21):215002, 2017.
- [8] M Mirzakhani, M Zarenia, DR Da Costa, SA Ketabi, and FM Peeters. Energy levels of abc-stacked trilayer graphene quantum dots with infinite-mass boundary conditions. *Physical Review B*, 94(16):165423, 2016.
- [9] Fan Zhang, Bhagawan Sahu, Hongki Min, and Allan H MacDonald. Band structure of a b c-stacked graphene trilayers. *Physical Review B*, 82(3):035409, 2010.
- [10] Edward McCann and Vladimir I Fal’ko. Landau-level degeneracy and quantum hall effect in a graphite bilayer. *Physical review letters*, 96(8):086805, 2006.
- [11] B Partoens and FM Peeters. Normal and dirac fermions in graphene multilayers: Tight-binding description of the electronic structure. *Physical Review B*, 75(19):193402, 2007.
- [12] József Cserti. Kétdimenziós kvantumrendszerek nanoszerkezetekben, MTA doktori értekezés. 2008.

- [13] Hongki Min and Allan H MacDonald. Electronic structure of multilayer graphene. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 176:227–252, 2008.
- [14] Taisuke Ohta, Aaron Bostwick, Thomas Seyller, Karsten Horn, and Eli Rotenberg. Controlling the electronic structure of bilayer graphene. *Science*, 313(5789):951–954, 2006.
- [15] Cs. Péterfalvi, A. Pályi, and J. Cserti. Electron flow in circular n – p junctions of bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 80:075416, Aug 2009.
- [16] Michael Berry. Singularities in waves and rays. *H.H. Wills Physics Laboratory, Tyndall Avenue, Bristol, BS8 1TL, U.K.*