

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ М.В.ЛОМОНОСОВА  
Физический факультет  
Кафедра физики частиц и космологии

КУРСОВАЯ РАБОТА

«Графен в магнитном поле»

студентки 2 курса, 203 группы

Розовской Анастасии Григорьевны

Научный руководитель:  
кандидат физ. - мат. наук  
Дмитрий Геннадиевич Левков

МОСКВА 2013

# 1 Введение.

Графен представляет собой монослой атомов углерода, плотно упакованных в двумерной гексагональной решётке. Для такой решётки известно, что её обратная решётка тоже будет гексагональной. В элементарной ячейке кристалла находятся два атома, обозначенные А и В. Т.е. мы имеем 2 симметричные подрешётки: каждый атом, из подрешётки А окружен тремя атомами из подрешетки В, и наоборот. Из теоремы об индексах (важная топологическая теорема, которую ещё предстоит изучить) следует, что внутренняя степень свободы - это индекс подрешётки, и в графене эта величина получила название псевдоспин. Т.е. мы можем сказать, что псевдоспин направлен вверх, если электрон принадлежит подрешетке А и вниз, если электрон принадлежит подрешётке В. Также это означает, что можно составить симметричные и антисимметричные комбинации для волновых функций электронов, которые там находятся. Волновая функция, описывающая пребывание частиц в подрешетках, представляет собой столбец:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$$

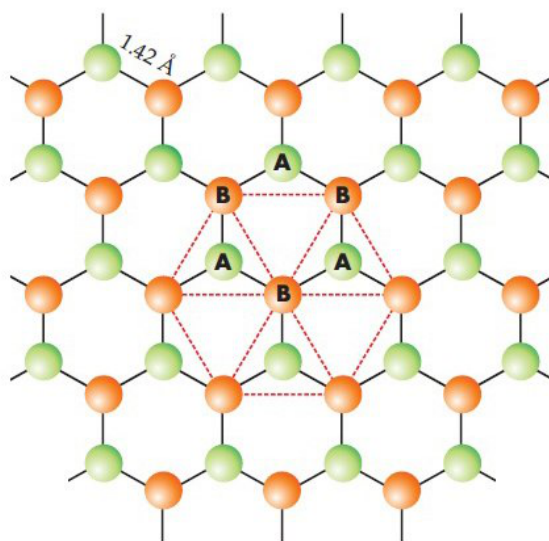


Figure 1: Гексагональная решётка графена.

Можно изобразить зонную структуру графена. Вблизи точек соприкосновения валентной зоны и зоны проводимости (K и K') закон

дисперсии для носителей (электронов) в графене линейен:  
 $E(\mathbf{p}) \simeq v_F \mathbf{p} + \mathbf{O}(\mathbf{p}^2)$ , где  $v_F$  - энергия Ферми,  $\mathbf{p}$  - квазиимпульс,  $E$  - энергия. Это означает, что электроны в графене подчиняются уравнению Дирака.

$$i\gamma^\mu \partial_\mu \psi - m\psi = 0,$$

где используем систему единиц  $\hbar = v_F = 1$ ;  $\gamma^\mu$  - матрицы Дирака,  $m$  - масса частицы,  $\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ ,  $\mu$  - пространственно-временной индекс, пробегающий значения 0,1,2,3.

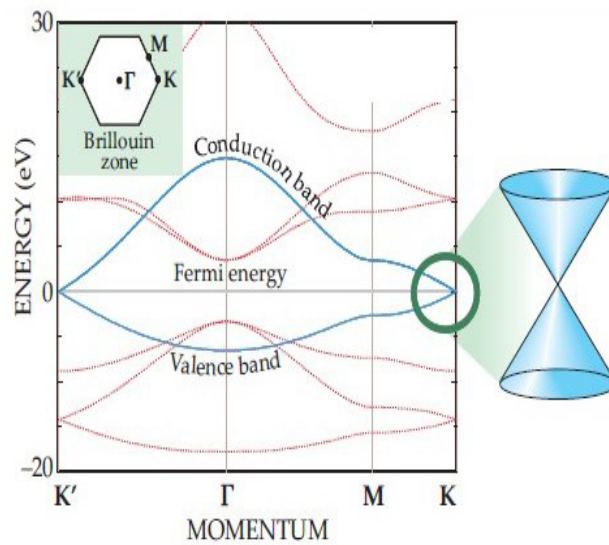


Figure 2: Зонная структура графена.

Постановка задачи.

В графене электроны распространяются со скоростью  $v_F = 10^6 \frac{m}{c}$ , это большая скорость, но всё же в 300 раз меньше скорости света, т.е. электроны в графене, вообще говоря, нерелятивистские, однако взаимодействуют они релятивистски. Для того чтобы разобраться в происходящем, поместим графен в перпендикулярное магнитное поле и найдем уровни энергии электронов в графене (уровни Ландау). Для этого будем решать уравнение Дирака. Затем рассмотрим случай нерелятивистских частиц (будем решать уравнение Шрёдингера), сравним получившиеся формулы для энергий и найдем энергии для первого уровня Ландау в обоих случаях.

## 2 Вычисления.

Нам необходимо включить электромагнитное поле. Сделать это нужно так, что уравнение Дирака было инвариантно относительно калибровочных преобразований, т.е. при калибровочном преобразовании внешнего поля набор решений уравнения Дирака должен остаться прежним. Для этого перейдём от обычной производной  $\partial_\mu$  к ковариантной производной  $D_\mu$  :

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu - \frac{ie}{c} A_\mu,$$

где  $e$  - заряд электрона,  $c$  - скорость света в вакууме,  $A_\mu$  - векторный потенциал.

При этом волновая функция -

$$\psi \rightarrow e^{i\alpha(x)}\psi$$

Уравнение Дирака примет вид

$$\left( i\gamma^\mu D_\mu - m \right) \psi = 0. \quad (1)$$

Здесь только  $\hbar = 1$ . Поместим графен в плоскость  $(x, y)$ , магнитное поле направим вдоль оси  $z$ , тогда векторный потенциал выберем :

$$A_y = \frac{Hx}{c}, \quad A_x = 0.$$

Решим уравнение (1).

Поддействуем оператором

$$(-i\gamma^\mu D_\mu - m),$$

Получим

$$(\gamma^\mu D_\mu \gamma^\nu D_\nu + m^2)\psi = 0.$$

Перепишем  $\gamma^\mu \gamma^\nu$  как

$\gamma^\mu \gamma^\nu = \frac{1}{2}(\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) + \frac{1}{2}(\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu) = \eta^{\mu\nu} + \sigma^{\mu\nu}$ , где  $\eta^{\mu\nu}$  и  $\sigma^{\mu\nu}$  - симметричный и антисимметричный "4-тензоры" соответственно.

Тогда,

$$\left[ \left( \eta^{\mu\nu} + \sigma^{\mu\nu} \right) D_\mu D_\nu + m^2 \right] \psi = 0. \quad (2)$$

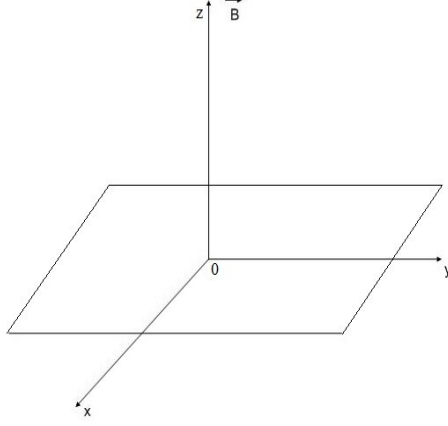


Figure 3: Графен в магнитном поле.

Под действием тензора  $\eta^{\mu\nu}$  уравнение (2) переходит в

$$\left( D_\mu D_\mu + \sigma^{\mu\nu} D_\mu D_\nu + m^2 \right) \psi = 0. \quad (3)$$

Запишем в (3) ковариантную производную в явном виде

$$\left[ \left( \partial - \frac{ie}{c} A \right)^2 + \sigma^{\mu\nu} \left( \partial_\mu - \frac{ie}{c} A_\mu \right) \left( \partial_\nu - \frac{ie}{c} A_\nu \right) + m^2 \right] \psi = 0. \quad (4)$$

Под действием тензора  $\sigma^{\mu\nu}$  из (4) уходят симметричные слагаемые  $\partial_\mu \partial_\nu$  и  $A_\mu A_\nu$ , таким образом, получаем

$$\left[ \left( \partial - \frac{ie}{c} A \right)^2 - \frac{ie}{c} \sigma^{\mu\nu} \left( \partial_\mu A_\nu + A_\mu \partial_\nu \right) + m^2 \right] \psi = 0. \quad (5)$$

Преобразуя последнее выражение, получим

$$\left[ \left( \partial - \frac{ie}{c} A \right)^2 - \frac{ie}{2c} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + m^2 \right] \psi = 0, \quad (6)$$

где  $\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = F_{\mu\nu}$  - тензор поля.

В пространстве  $(2+1)$  тензор поля  $F_{\mu\nu}$  представляется с помощью матрицы

$$\begin{pmatrix} 0 & E_1 & E_2 \\ -E_1 & 0 & H_3 \\ -E_2 & -H_3 & 0 \end{pmatrix}$$

а тензор  $\sigma^{\mu\nu}$  -

$$\begin{pmatrix} 0 & \alpha_1 & \alpha_2 \\ -\alpha_1 & 0 & -i\Sigma_3 \\ -\alpha_2 & i\Sigma_3 & 0 \end{pmatrix}$$

$\Sigma$ -матрица и  $\alpha_i$ -матрицы :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_1 = \gamma^0\gamma^1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_2 = \gamma^0\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$\gamma^i$ -матрицы выражаются через матрицы Паули следующим образом

$$\gamma^0 = \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma^1 = i\tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma^2 = i\tau_3 = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$$

Разделим в (6) слагаемое  $\left(\partial - \frac{ie}{c}A\right)^2$  на пространственную и временную части, а также преобразуем слагаемое с тензорами :

$$\left[ \left(\partial_0 - \frac{ie}{c}A_0\right)^2 - \left(\partial_{\bar{x}} - \frac{ie}{c}A_{\bar{x}}\right)^2 + \frac{e}{c}\Sigma_z H_z - ie\alpha_j E_j + m^2 \right] \psi = 0, \quad (7)$$

Исключим из (7) слагаемое с электрическим полем и раз у нас постоянное магнитное поле, то исключаем ещё и слагаемое с векторным потенциалом в первой скобке, получаем

$$\left( \partial_0^2 - \left(\partial_{\bar{x}} - \frac{ie}{c}A_{\bar{x}}\right)^2 + \frac{e}{c}\Sigma_z H_z + m^2 \right) \psi = 0, \quad (8)$$

$\psi$  - есть собственная функция оператора  $\Sigma_z$ , её собственные значения  $\sigma = \pm 1$ . Учитывая нашу калибровку и выбор ориентации поля и векторного потенциала, получаем

$$\psi = e^{-i\omega t + ip_y y} \tilde{\psi}$$

Подставляя вышеперечисленное в уравнение (8), получаем уравнение гармонического осциллятора

$$\left( \partial_x^2 - \left( \frac{eH}{c} \right)^2 \left( x - \frac{cp_y}{eH} \right)^2 + \omega^2 - \frac{e}{c} \sigma H - m^2 \right) \tilde{\psi} = 0. \quad (9)$$

Решение гармонического осциллятора нам известно

$$\varepsilon^2 = \left( n + \frac{1}{2} \right) \Omega,$$

где  $\Omega = \frac{2eH}{c}$ ,  $\varepsilon^2 = \omega^2 - \frac{e}{c} \sigma H - m^2$ , Таким образом, получаем:

$$\omega = \pm \sqrt{(2n+1) \frac{e}{c} H + \frac{e}{c} \sigma H + m^2}.$$

Нам известно, что в графене частицы - безмассовые, поэтому зануляем массу, возвращаем по размерности приведённую постоянную Планка и скорость Ферми, и тогда, преобразуя формулу для энергии, получим

$$\boxed{\omega_n = \pm v_F \sqrt{(2n+1 + \sigma) \frac{e\hbar H}{c}}}. \quad (10)$$

Вычислим энергию нулевого и первого уровней Ландау, взяв собственное значение  $\sigma = -1$ :

n=0:

$$\omega_0 = 0,$$

n=1:

$$\omega_1 = \pm v_F \sqrt{2e\hbar \frac{H}{c}}$$

Рассмотрим аналогичную задачу для нерелятивистских электронов. В классической механике функция Гамильтона заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi, \quad (11)$$

где первая скобка - есть кинетическая энергия частицы, а вторая - потенциальная энергия;  $m$  - масса частицы,  $\mathbf{p}$  - обобщенный импульс,  $e$  - заряд электрона,  $c$  - скорость света в вакууме,  $\mathbf{A}$  - векторный потенциал,  $\varphi$  - скалярный потенциал.

При переходе к квантовой механике обобщенный импульс заменяем на оператор импульса и ещё учитываем присутствие спина у частицы, то есть

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \hat{\mu} \mathbf{H} + e\varphi \quad (12)$$

Решим стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

Поле также направим по оси  $z$ , и векторный потенциал выберем в виде

$$A_y = Hx, \quad A_x = 0$$

$$\hat{\mu} = \frac{\mu}{s} \hat{\mathbf{s}},$$

где  $s$  - величина спина частицы,  $\mu$  - величина магнитного момента.

Собственные значения проекции магнитного момента равны

$$\mu_z = \frac{\mu}{s} \sigma,$$

где  $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ .

Подставляя всё это в формулу (11), получим

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p}_y - \frac{eHx}{c} \right)^2 + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} - \frac{\mu}{s} \sigma H \quad (13)$$

Тогда уравнение Шрёдингера примет вид

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_y - \frac{eHx}{c} \right)^2 + \hat{p}_x^2 \right] \psi - \frac{\mu}{s} \sigma H \psi = E\psi \quad (14)$$

или

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{eH}{c} \right)^2 \left( x - \frac{c\hat{p}_y}{eH} \right)^2 + \hat{p}_x^2 \right] \psi - \frac{\mu}{s} \sigma H \psi = E\psi \quad (15)$$

$$\psi = e^{ip_y y} \tilde{\psi} \quad (16)$$

$$\left[ \frac{1}{2m} \left( \frac{eH}{c} \right)^2 \left( x - \frac{cp_y}{eH} \right)^2 - \frac{\mu}{s} \sigma H - E \right] \tilde{\psi} = 0$$



$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_H, \quad (17)$$

$$\omega_H = \frac{|e|H}{mc}. \quad (18)$$

Для электрона  $\frac{\mu}{s} = -\frac{e\hbar}{mc}$ , тогда формула (16) принимает вид

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar e}{mc} H + \frac{e\hbar}{mc} \sigma H \quad (19)$$

$$E = \left( n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2} \right) \frac{e\hbar H}{mc} \quad (20)$$

### 3 Заключение.

В курсовой работе рассмотрены задачи нахождения уровней Ландау для электронов в графене, а также для нерелятивистских электронов. Причина различия полученных формул заключается в том, что электроны в графене ведут себя как релятивистские частицы и обладают псевдоспином, который смещает уровни энергии так, что появляется уровень с нулевой энергией. В этом нулевом уровне энергии скрывается причина "другого" (полуцелого) квантового эффекта Холла в графене.

### 4 Список литературы.

1. В.А. Рубаков, Классические калибровочные поля. Эдиториал УРСС, 1999.
2. А.К. Geim, А.Н. MacDonald, "Graphene: Exploring carbon flatland," Physics Today, 80, 35 (2007).
3. А.Н. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov and А.К. Geim, "The electronic properties of graphene," Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).
4. Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц, Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Москва, "Наука", 1989.
5. Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц, Л.П. Питаевский, Квантовая электродинамика. Москва, ФИЗМАТЛИТ, 2001.