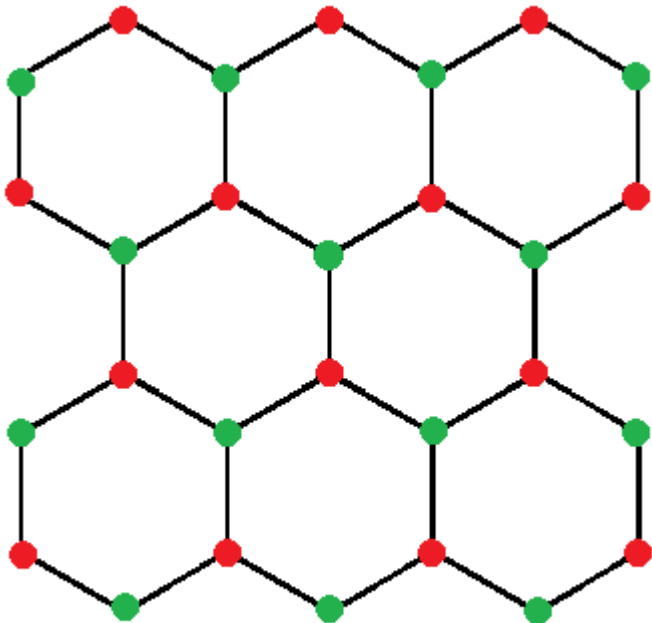


МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ М.В.ЛОМОНОСОВА  
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
КАФЕДРА ФИЗИКИ ЧАСТИЦ И КОСМОЛОГИИ

# СВОЙСТВА ГРАФЕНА И (2+1)-МЕРНОЕ УРАВНЕНИЕ ДИРАКА



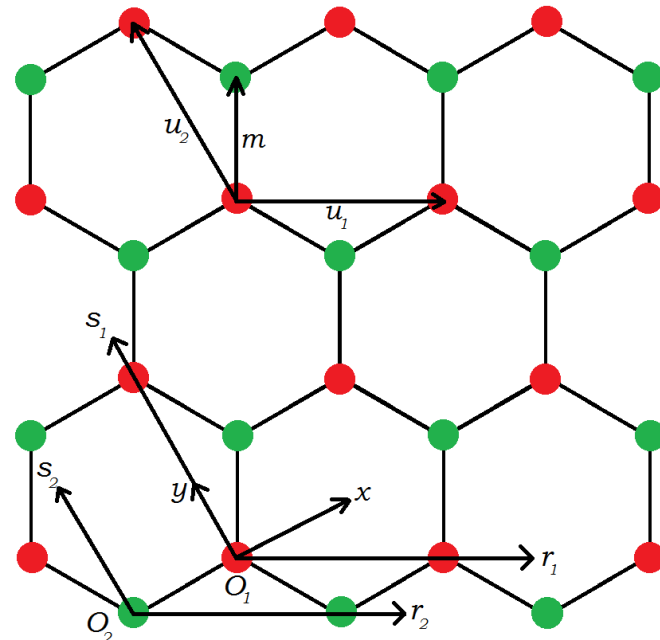
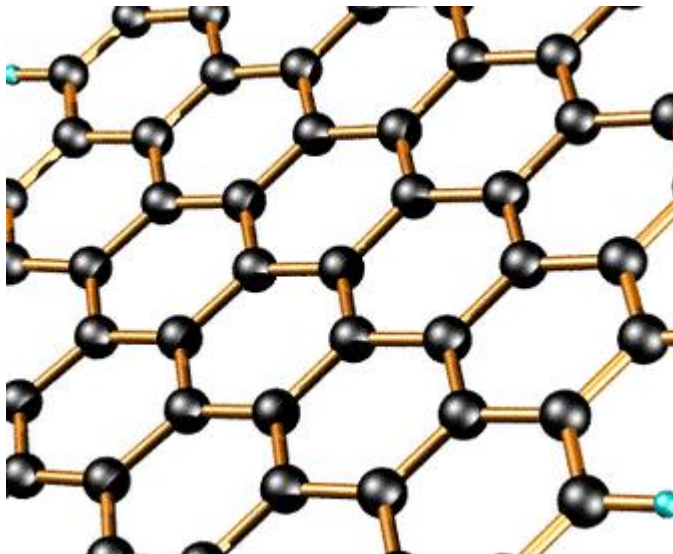
Курсовая работа  
студента 207 группы  
Маслова Василия

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

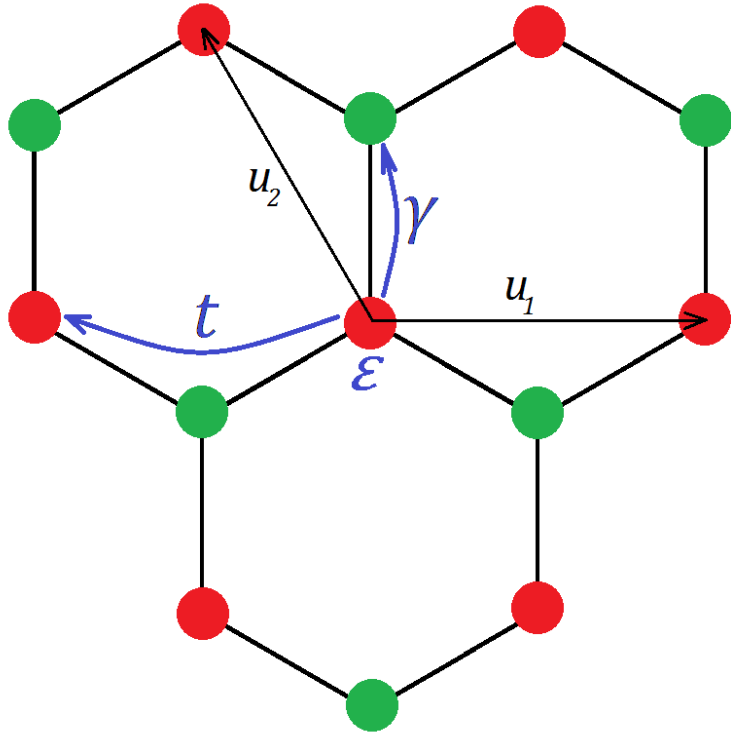
МОСКВА, 2015 Г.

# ВВЕДЕНИЕ

- Графен представляет собой двумерный кристалл углерода с шестиугольной решеткой.
- Впервые был теоретически описан при изучении графита, может быть представлен как изолированный плоский слой атомов кристалла графита.
- Впервые получен в 2004 году.



# ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ



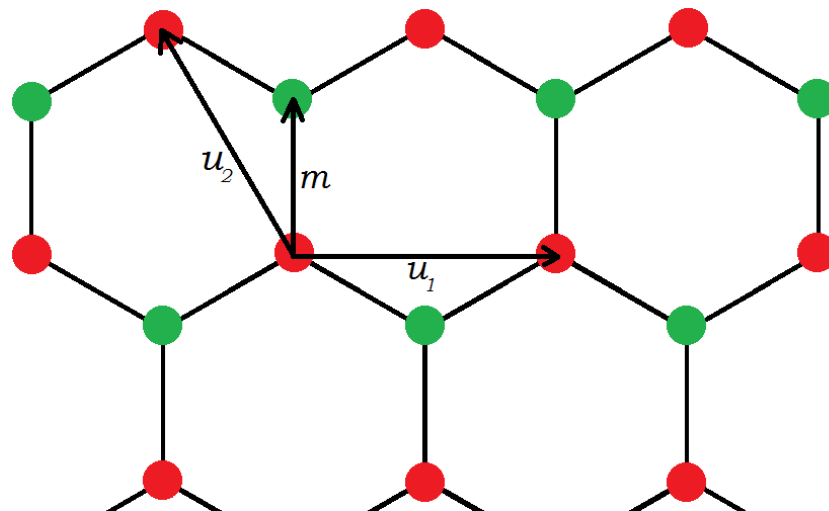
- Рассматривается электрон, находящийся в кристаллической решетке графена. Пусть энергия его нахождения в узле  $\varepsilon$ , а переходить он может только на соседние узлы с энергией перехода  $\gamma$ , а также на узлы, ближайšie к соседним, с энергией перехода  $t$ . *Требуется найти спектр электронов в данной модели.*
- Рассматривается релятивистская частица, удовлетворяющая уравнению Дирака. *Найти её спектр.*
- Электрон в графене налетает на полубесконечный прямоугольный потенциальный барьер. *Найти коэффициенты прохождения и отражения.*

# СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В ГРАФЕНЕ

- Графен можно разбить на две одинаковые треугольные решетки
- Волновая функция электрона в графене представима как  $\begin{pmatrix} \xi_1^z \\ \xi_2^z \end{pmatrix}$ .
- Действие гамильтониана на волновую функцию определяется как:

$$(\hat{H}\Psi)^z = \varepsilon\Psi^z + \gamma \left( \Psi^{z+m} + \Psi^{z+m-\vec{u}_2} + \Psi^{z+m-\vec{u}_1-\vec{u}_2} \right) + \\ + t \left( \Psi^{z+\vec{u}_1} + \Psi^{z-\vec{u}_1} + \Psi^{z+\vec{u}_2} + \Psi^{z-\vec{u}_2} + \Psi^{z+\vec{u}_1+\vec{u}_2} + \Psi^{z-\vec{u}_1-\vec{u}_2} \right),$$

$$(\hat{H}\Psi)^{z+m} = \varepsilon\Psi^{z+m} + \gamma \left( \Psi^z + \Psi^{z+\vec{u}_2} + \Psi^{z+\vec{u}_1+\vec{u}_2} \right) + \\ + t \left( \Psi^{z+m+\vec{u}_1} + \Psi^{z+m-\vec{u}_1} + \Psi^{z+m+\vec{u}_2} + \Psi^{z+m-\vec{u}_2} + \Psi^{z+m+\vec{u}_1+\vec{u}_2} + \Psi^{z+m-\vec{u}_1-\vec{u}_2} \right).$$



# СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В ГРАФЕНЕ

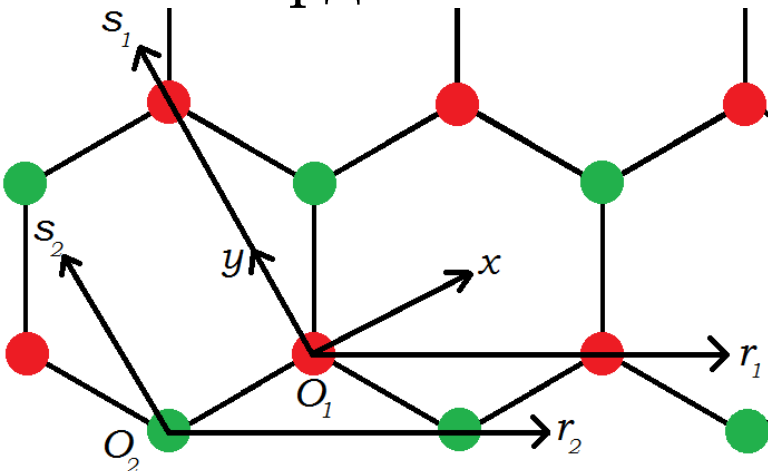
- $\hat{U}_1, \hat{U}_2$  - операторы сдвига на  $\vec{u}_1, \vec{u}_2$ .

- $[\hat{H}, \hat{U}_1] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{U}_2] = 0, \quad [\hat{U}_1, \hat{U}_2] = 0 .$



- У  $\hat{H}, \hat{U}_1$  и  $\hat{U}_2$  есть общий набор собственных функций

- Эти собственные функции в косоугольной системе координат имеет вид:



$$\psi_H^{(l^1, l^2)_w} = \exp\left(i \frac{p_1 l^1 + p_2 l^2}{\hbar}\right) \psi_H^{(0,0)_w}$$

# СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В ГРАФЕНЕ

- Получаем матричное уравнение:

$$\hat{H} \begin{pmatrix} \xi_1^{\mathbf{z}} \\ \xi_2^{\mathbf{z}+\mathbf{m}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1^{\mathbf{z}} \\ \xi_2^{\mathbf{z}+\mathbf{m}} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \xi_1^{\mathbf{z}} \\ \xi_2^{\mathbf{z}+\mathbf{m}} \end{pmatrix}$$

- Спектр электронов в графене:

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon + t f(\mathbf{k}) \pm \gamma \sqrt{3 + f(\mathbf{k})}, \text{ где}$$

$$f(\mathbf{k}) \equiv 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right)$$

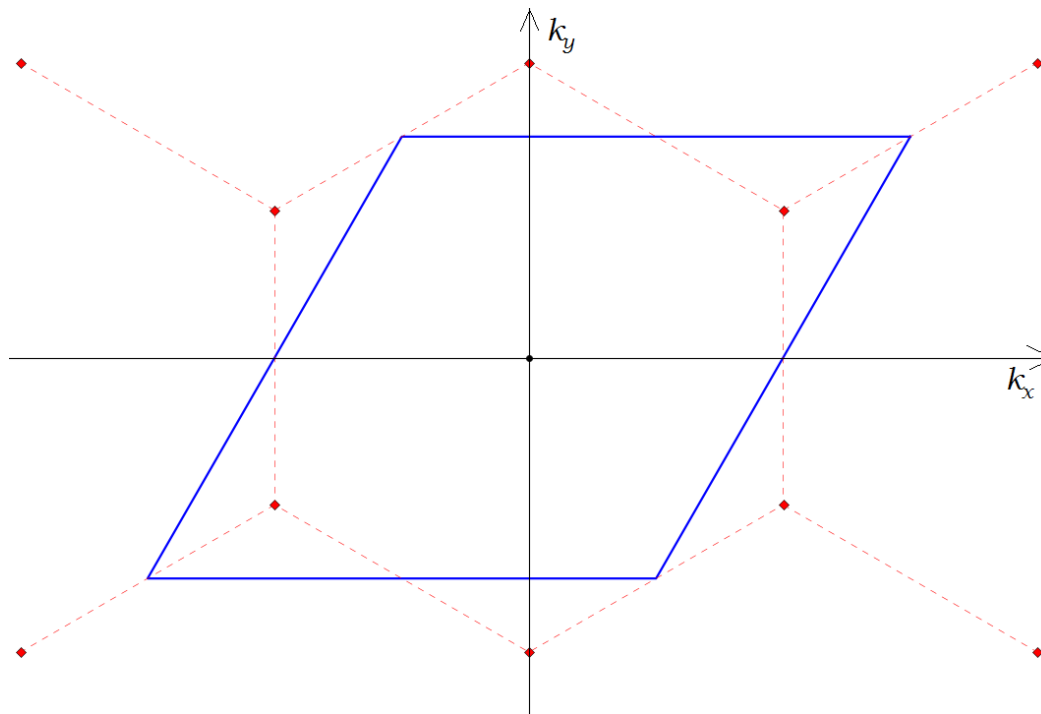
Собственные функции, соответствующие этому спектру, образуют базис в пространстве волновых функций



Найдены все собственные функции и собственные значения

# ТОЧКИ ДИРАКА

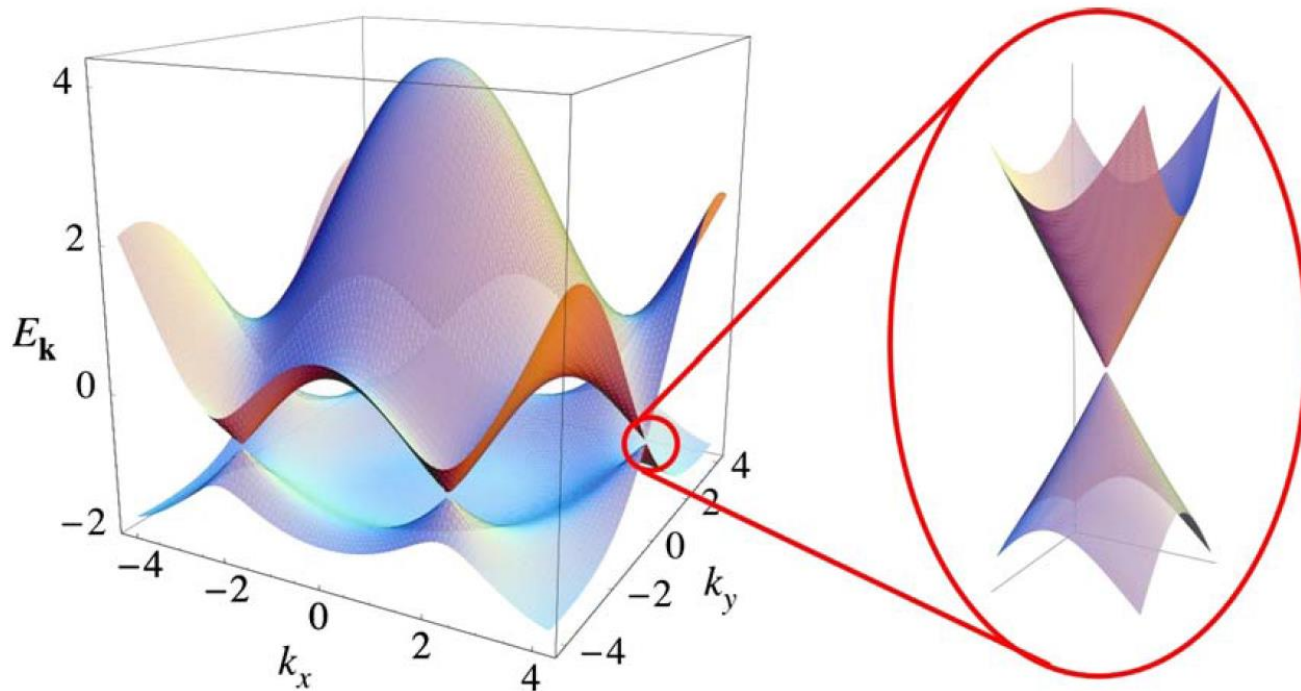
- Точки минимума функции  $f(\mathbf{k})$  называются точками Дирака, и образуют шестиугольную решетку, аналогичную решетке графена.
- В область физических значений  $\mathbf{k}$ , являющую собой параллелограмм, попадают только 2 точки Дирака.



# ТОЧКИ ДИРАКА

- В окрестности точек Дирака спектр линейно зависит от  $|\Delta\mathbf{k}|$ :

$$E(\mathbf{k}_0 + \Delta\mathbf{k}) = \varepsilon - 3t \pm \frac{3}{2} \gamma a |\Delta\mathbf{k}|$$





# УРАВНЕНИЕ ДИРАКА

- Релятивистские (2+1)-мерные частицы удовлетворяют уравнению Дирака:

$$i\gamma^\mu \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} - m\psi = 0. \quad (\mu = 0, 1, 2)$$



$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_D \psi, \text{ где } \hat{H}_D = \alpha^j \hat{p}_j + m\beta.$$

- $[\hat{H}_D, \hat{p}_1] = 0$  ;  $[\hat{H}_D, \hat{p}_2] = 0$  ;  $[\hat{p}_1, \hat{p}_2] = 0$



- У  $\hat{H}_D, \hat{p}_1, \hat{p}_2$  есть общий набор собственных функций.

# СПЕКТР РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ЧАСТИЦЫ

- Собственные функции имеют вид:

$$\psi = u_{\mathbf{p}} \exp(-i\omega t + i\mathbf{p}\mathbf{x}).$$

- Требуя  $\hat{H}_D \psi = \omega \psi$ , получаем спектр:

$$\omega = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$$

- Для собственных функций получаем:

$$\psi = C \begin{pmatrix} m - ip_2 \\ p_1 \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} \end{pmatrix} \exp(-i\omega t + i\mathbf{p}\mathbf{x}).$$

Полученные волновые функции образуют базис пространства волновых функций



Мы нашли все собственные функции и собственные значения

# СРАВНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Спектр электронов в графене в окрестностях точек Дирака:

$$E(\mathbf{k}_0 + \Delta\mathbf{k}) = \varepsilon - 3t \pm \frac{3}{2} \gamma a |\Delta\mathbf{k}|$$



$$\Delta E = \pm \frac{3}{2} \gamma a |\Delta\mathbf{k}|$$

Спектр безмассового фермиона:

$$\omega = \pm |\mathbf{p}|.$$

Спектр электронов в графене совпадает со спектром безмассовых фермионов, движущихся со скоростью

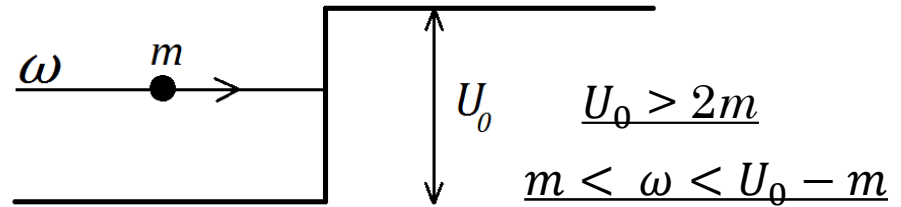
$$v_F = \frac{3}{2} a \gamma. \quad \text{- скоростью Ферми}$$

Электроны в графене описываются уравнением Дирака

# ПАРАДОКС КЛЕЙНА

- Рассмотрим релятивистскую частицу массы  $m$  с энергией  $\omega$ , налетающую вдоль оси на потенциальный барьер:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{при } x < 0, \\ U_0, & \text{при } x > 0. \end{cases}$$



- Выражение собственных функций через  $\mathbf{p}$  и  $m$  не изменится, спектр примет вид:

$$\omega = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} + U_0.$$

- Данному значению энергии  $\omega$  соответствуют две собственные функции: при  $p_1 > 0$  и  $p_1 < 0$ , как в случае наличия, так и отсутствия потенциального поля.

# ПАРАДОКС КЛЕЙНА

- Так как  $\hat{p}_1\psi = p_1\psi$ , то частице, движущейся направо, соответствует волновая функция с  $p_1 > 0$ , а движущейся налево - волновая функция с  $p_1 < 0$ .
- Ток вероятности есть:

$$\mathbf{j} \equiv \begin{pmatrix} j^1 \\ j^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi^\dagger \alpha^1 \psi \\ \psi^\dagger \alpha^2 \psi \end{pmatrix}$$

- Коэффициент отражения, определяемый как  $R = \frac{|j_B^1|}{|j_A^1|}$ , равен

$$R = \left( \frac{\tilde{p}_1 - \tilde{\tilde{p}}_1 + U}{\tilde{p}_1 + \tilde{\tilde{p}}_1 - U} \right)^2 \cdot \frac{\omega - \tilde{p}_1}{\omega + \tilde{p}_1}. \quad \begin{aligned} \tilde{p}_1 &\equiv \sqrt{\omega^2 - m^2}, \\ \tilde{\tilde{p}}_1 &\equiv \sqrt{(\omega - U)^2 - m^2}. \end{aligned}$$

- При  $m \rightarrow 0$   $R \rightarrow \infty$   **ПАРАДОКС !!!**

# РЕШЕНИЕ ПАРАДОКСА КЛЕЙНА

- Частица летит туда же, куда направлен её ток вероятности
- В случае налетающей и отраженной частицы импульс направлен туда же, куда и ток вероятности.
- Для прошедшей частицы:

$$p_1 = \tilde{p}_1 > 0: \quad j_{C+}^1 = 2|C_+|^2 \tilde{p}_1 (\tilde{p}_1 + \omega - U) < 0$$

$$p_1 = -\tilde{p}_1 < 0: \quad j_{C-}^1 = 2|C_-|^2 \tilde{p}_1 (\tilde{p}_1 - \omega + U) > 0$$

Т.е. у прошедшей частицы импульс отрицателен!

- Правильно выбирая волновую функцию прошедшей частицы, получаем:

$$R = \left( \frac{\tilde{p}_1 + \tilde{p}_1 + U}{\tilde{p}_1 - \tilde{p}_1 - U} \right)^2 \cdot \frac{\omega - \tilde{p}_1}{\omega + \tilde{p}_1} = 0 \text{ при } m = 0$$

$$T = \left( \frac{2\tilde{p}_1}{\tilde{p}_1 - \tilde{p}_1 - U} \right)^2 \cdot \frac{\tilde{p}_1}{\tilde{p}_1} \cdot \frac{\tilde{p}_1 + U - \omega}{\tilde{p}_1 + \omega} = 1 \text{ при } m = 0$$

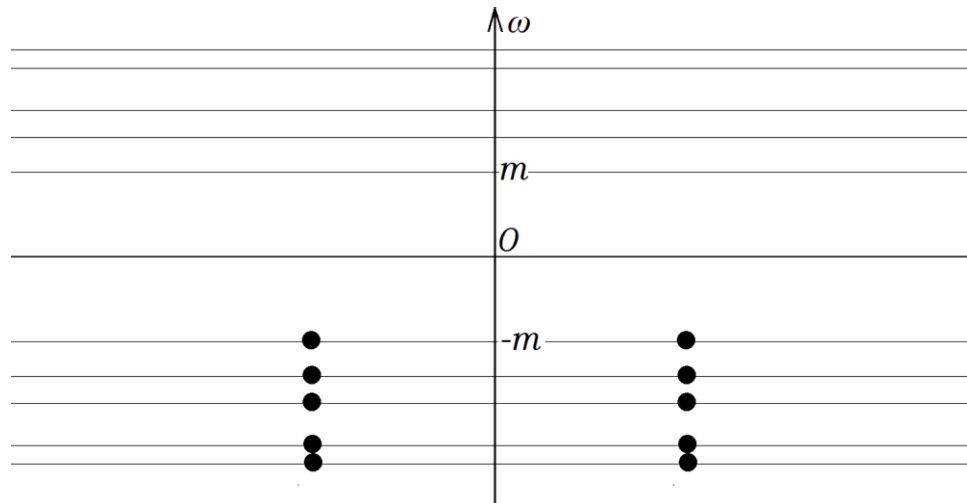
Эффект Клейна



- Безмассовые частицы полностью проходят под барьер.

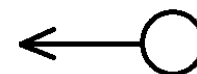
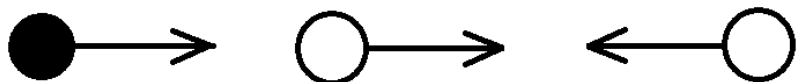
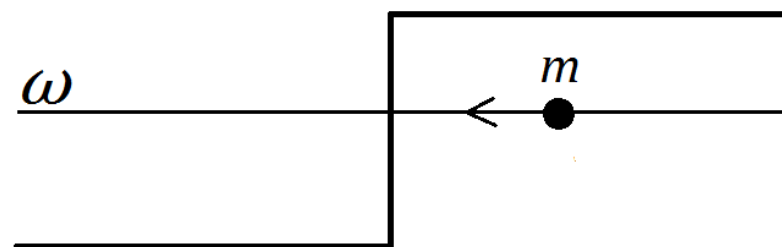
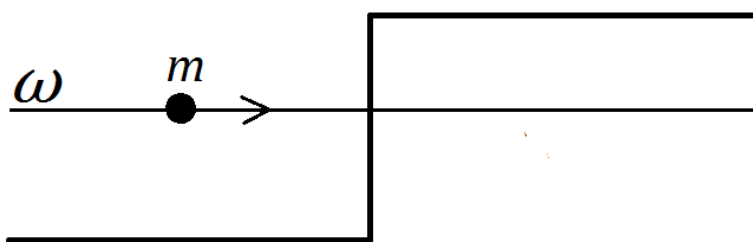
# МОРЕ ДИРАКА И ЭФФЕКТ КЛЕЙНА

- Спектр релятивистской частицы не ограничен снизу.
- Наложим на систему периодические граничные условия, тогда в системе будут энергетические уровни
- «Дираковский вакуум»: полностью заполнены все отрицательные энергетические уровни, положительные — полностью свободны.
- «Частица» ( $\mathbf{p}, \omega$ ): частица с импульсом  $\mathbf{p}$  на положительном уровне  $\omega > 0$ .
- «Античастица» ( $-\mathbf{p}, \omega$ ): отсутствие частицы с импульсом  $\mathbf{p}$  на отрицательном уровне  $-\omega < 0$ .



# МОРЕ ДИРАКА И ЭФФЕКТ КЛЕЙНА

- Энергетический уровень, на котором находится частица, слева от барьера находится в верхней части спектра, а справа – в нижней.
- Сначала слева – частица, летящая направо, справа – 2 античастицы, летящие в разных направлениях.
- После прохождения под барьер слева – вакуум, справа – античастица, летящая налево.
- Таким образом, процесс прохождения частицы под барьер есть процесс аннигиляции частицы, летящей направо и античастицы, летящей направо.





# ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе получены следующие результаты:

- Получен спектр электронов в микроскопической модели графена

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon + t f(\mathbf{k}) \pm \gamma \sqrt{3 + f(\mathbf{k})}, \text{ где } f(\mathbf{k}) \equiv 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right)$$

- Исследован низкоэнергетический спектр в окрестностях точек минимума функции  $f(\mathbf{k})$ , называемых точками Дирака.

$$E(\mathbf{k}_0 + \Delta\mathbf{k}) = \varepsilon - 3t \pm \frac{3}{2} \gamma a |\Delta\mathbf{k}|$$

- Получен спектр (2+1)-мерного релятивистского фермиона, описываемого уравнением Дирака:

$$\omega = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$$

- Произведено сравнение спектров электронов в графене и безмассового (2+1)-мерных релятивистских фермионов. Показано, что электроны в графене можно описать уравнением Дирака для безмассовых фермионов, движущихся со скоростью Ферми  $v_F = \frac{3}{2}a\gamma$ .
- Получен и разрешен парадокс Клейна. Показано, что в случае полубесконечного прямоугольного барьера коэффициент подбарьерного прохождения безмассовых фермионов равен 1.

# СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] A.H.Castro Neto et al., “The electronic properties of graphene,” Rev.Mod.Phys., 81, 109 (2009)
- [2] В.А.Рубаков «Классические калибровочные поля. Некоммутативные теории. Теории с фермионами.» М., 2005
- [3] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц «Теоретическая физика. Т.3. Квантовая механика»
- [4] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц «Теоретическая физика. Т.4. Квантовая электродинамика»

**СПАСИБО ЗА  
ВНИМАНИЕ!**