



UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI  
FAKULTET  
DEPARTMAN ZA FIZIKU



MASTER RAD:

---

## Elektronska svojstva grafena

---

**MENTOR:**

PROF. DR MILAN PANTIĆ

**KANDIDAT:**

ALEKSANDAR LJEOPOJA

---

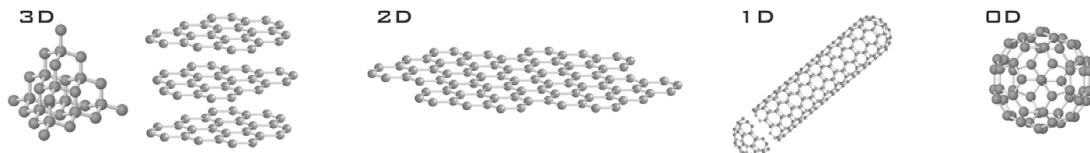
NOVI SAD, 2015

# SADRŽAJ

<b>1. Uvod</b>	<b>1</b>
<b>2. Atom Ugljenika i Hibridizacije</b>	<b>3</b>
2.1. $sp^1$ hibridizacija . . . . .	3
2.2. $sp^2$ hibridizacija . . . . .	4
2.3. $sp^3$ hibridizacija . . . . .	4
<b>3. Kristalna struktura grafena</b>	<b>6</b>
<b>4. Elektronska struktura grafena</b>	<b>9</b>
4.1. Model jake veze . . . . .	9
4.2. Model jake veze u grafenu . . . . .	11
4.2.1. Rešavanje sekularne jednačine . . . . .	13
4.3. Dirakova jednačina za grafen . . . . .	16
4.3.1. Hiralnost elektrona u grafenu . . . . .	19
4.4. Habardov model za Grafen . . . . .	20
4.4.1. Habardov model za najbliže susede . . . . .	21
4.4.2. Habardov model za druge najbliže susede . . . . .	24
<b>5. Grafen u magnetnom polju</b>	<b>28</b>
5.1. Landauova kvantizacija u grafenu . . . . .	28
5.2. Degeneracija Landauovih nivoa . . . . .	32
5.3. Paralelno Električno polje u grafenu . . . . .	33
<b>6. Kvantni Holov efekat</b>	<b>35</b>
6.1. Klasični Holov efekat . . . . .	35
6.2. IQHE u nerelativističkom slučaju . . . . .	37
6.3. Kvantni Holov efekat u garfenu . . . . .	41
<b>7. Zaključak</b>	<b>43</b>
<b>A. Blohova teorema</b>	<b>44</b>
A.1. Dokaz Blohove teoreme . . . . .	44
<b>B. Dirakova jednačina</b>	<b>46</b>
<b>C. Furije transformacija</b>	<b>49</b>
<b>D. Kvantni Harmonijski Oscilator</b>	<b>51</b>
<b>E. Nerelativistički 2DEG u magnetnom polju</b>	<b>54</b>
<b>F. Landauerov formalizam</b>	<b>56</b>
<b>G. Tenzorski proizvod</b>	<b>58</b>

## 1. UVOD

Grafen predstavlja prvu sintetisanu 2D kristalnu strukturu. Sastoji se od ugljenikovih atoma rasporedjenih u šestougaonu rešetku. Grafit, poznat još od šesnestog veka je alotropska modifikacija ugljenika i sastoji se od slojeva grafena medjusobno povezanih slabim Wan der Valsovim silama, što mu i omogućava da se koristi za pisanje. Od



*Slika 1: Različite slotropske modifikacije ugljenika. Sa leva ne desno: trodimenzionalni dijamant i grafit (3D), dvodimenzionalni grafen (2D), jednodimenzionalno ugljenično vlakno (1D) i nuladimenzionalni Bakministerfuleren (0D).*

drugih modifikacija ugljenika poznate su: dijamant, fuleren i ugljenična vlakna. Ove modifikacije su prikazane na slici 1. Sve ove alotropske modifikacije ugljenika u svojoj osnovi imaju grafen. Grafen je kao teorijski model 2D strukture proučavan još krajem 40-ih godina 20. veka, kada je P. R. Wallace odredjivao njegovu elektronsku strukturu radi boljeg razumevanja grafita, tada jako važnog materijala koji se koristio u nuklearnim reaktorima. Na sintetisanje grafena je trebalo čekati nekih 60 godina sve do 2004. godine kada je grupa fizičara, ruskog porekla, na univerzitetu u Manče-seteru (Velika Britanija) pod vodstvom Kostantina Novoselova i Andrea Geima, uspela da sintetiše male uzorke grafena, koristeći naizgled jednostavnu selotep metodu.



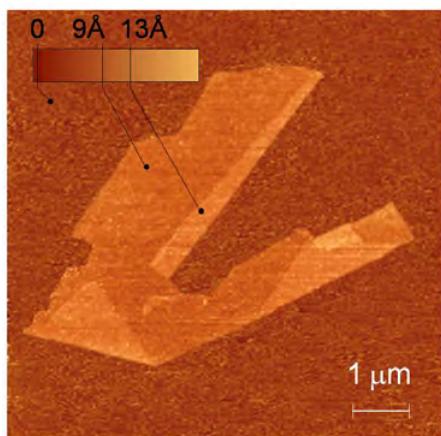
*Slika 2: Andre Geim (levo) i Konstantin Novoselov (desno)*

Metoda je poprilično jednostavana i sastoji se od toga da se krene od trodimenzionog uzorka grafita koji se sastoje od slojeva grafena i selotep trakom se skidaju slojevi. Za ovo otkriće Konstantin Novoselov i Andrea Geim su podelili nobelovu nagradu za fiziku 2010. godine. Tajna tako velikog interesovanja za grafen upravo leži u njegovoj dvodimenzionalnosti koja mu daje termodinamičke osobine koje ga izdvajaju od dotad poznatih 3D struktura, kao i činjenica da je postojanje 2D strukture, do sintetisanja grafena, smatrano nemogućim jer narušava tzv. Mermin-Wagnerovu teoremu o stabilnosti, koja kaže da sistem sa kontinualnom simetrijom ne pokazuje spontano narušenje simetrije. Prema ovoj teoremi dvodimenzionalna struktura bi imala ogromne vanravanske flktuacije koje bi dovele do "gužvanja" materijala, odnosno gubljenja njegove dvodimenzionalnosti. Ovaj problem je zaobidjen time što se grafen obično nalazi na nekom, najčešće SiO supstratu koji stabilizuje njegove oscilacije i sprečava "gužvanje" grafena. Medjutim eksperimenti koji koriste Elektronsku transmisionu mikroskopiju [18], kao i numeričke simulacije[19] su pokazali da iako je gužvanje sprečeno struktura grafena je talasasta kao što je to ilustrovano na slici 3. Ključno otkriće koje je stavilo grafen u žiju naučnog interesovanja je otkriće neobičnog, anomalnog Holovog efekta u grafenu, koji su

menje poznat. Holovog efekta je počeo da se istražuje u 1950-ih godina 20. veka, kada je David Hume Krook i njegovi suradnici u Engleskoj demonstrirali da se elektroni mogu prenositi kroz metalne površine, ali samo u jednom smjeru. Ovaj efekt je bio poznat pod nazivom "one-dimensional conductance". U 1980-ih godina, kada je Andre Geim i Konstantin Novoselov uspeli da sintetišu male uzorke grafena, su se pojavile i novije teorije o Holovom efektu u grafenu. Teorije su predviđale da će se u grafenu pojaviti novi tip Holovog efekta, koji je nazvan "two-dimensional conductance". Ovaj novi tip Holovog efekta je bio posebno interesantan jer je bio u skladu sa teorijom Mermin-Wagnerove teoreme o stabilnosti, koja kaže da sistem sa kontinualnom simetrijom ne pokazuje spontano narušenje simetrije. Prema ovoj teoremi dvodimenzionalna struktura bi imala ogromne vanravanske flktuacije koje bi dovele do "gužvanja" materijala, odnosno gubljenja njegove dvodimenzionalnosti. Ovaj problem je zaobidjen time što se grafen obično nalazi na nekom, najčešće SiO supstratu koji stabilizuje njegove oscilacije i sprečava "gužvanje" grafena. Medjutim eksperimenti koji koriste Elektronsku transmisionu mikroskopiju [18], kao i numeričke simulacije[19] su pokazali da iako je gužvanje sprečeno struktura grafena je talasasta kao što je to ilustrovano na slici 3. Ključno otkriće koje je stavilo grafen u žiju naučnog interesovanja je otkriće neobičnog, anomalnog Holovog efekta u grafenu, koji su

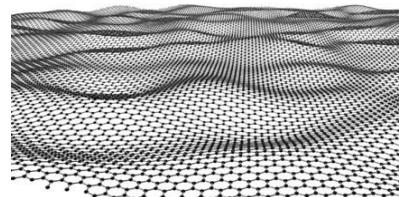
nezavisno otkrile dve grupe naučnika: grupa na univerzitetu u Mančesteru pod vodjstvom Andrea Geima[16] i grupa nastala kolaboracijom Univerziteta u Prinstonu i Kolumbija Univerziteta pod vodjstvom Filipa Kima i Horeta Stormera [17].

Ovo otkriće je bila eksperimentalna potvrda jednog od najinteresantnijih aspekata fizike grafena, a to je činjenica da se elektroni u njemu ponašaju kao bezmasni, hiralni, Dirakovi fermioni. Ovu pojavu imamo zahvaliti specifičnom obliku disperzione relacije u okolini temena Brillouinove zone. U okolinama tih tačaka disperzija je linearna i elektroni se ponašaju kao Dirakovi fermioni. Zbog toga je grafen pored svih svojih praktičnih primena zanimljiv i za fundamentalna istraživanja jer predstavlja savršen poligon za testiranje Kvantne elektrodinamike. Efektivno ponašanje nosilaca nanelektrisanja kao bezmasnih Dirakovih fermiona u grafenu dovodi do jako interesantnih fenomena naročito kad se grafen stavi u magnetno polje. Dirakovi fermioni se u magnetnom polju ponašaju znatno drugačije od Šredingerovih elektrona što u krajnjoj liniji i dovodi do pojave anomalnog polubrojnog kvantnog Holovog efekta koji se u grafenu, za razliku od drugih materijala, javlja na sobnim temperaturama. Grafen je danas, 10-ak godina nakon prvog uspešnog sintetisanja, predmet velikih i multidisciplinarnih studija, prevašodno zbog njegove elektronske strukture koja ima do sad nevidjene karakteristike, i velike mogućnosti primene, kako u industriji, tako i u fundamentalnoj nauci.



*Slika 4: Mikroskopska slika sloja grafena na silicijumskom supstratu. Svetliji delovi kristala prestavljaju savijene rubove[21].*

videti kako Dirakova priroda elektrona deluje na taj efekat u grafenu. Uočavaće se razlike u odnosu na kvantni Holov efekat u nerelativističkom elektronском gasu.



*Slika 3: Prikaz pojave talasanju grafenu koje se javlja kao posledica dvodimenzionalnosti grafena.*

Grafen je zbog svoje provodnosti dobar kandidat za proizvodnju balističkih tranzistora sa efektom polja. Međutim da bi se neka praktična primena ostvarila potrebno je sintetisati uzorke na industrijskim razmerama, što još uvek nije lako ostvarivo. Takodje, prepreka pravljenju tranzistora od grafena je i činjenica da grafen nema proces izmedju provodne i valentne zone kao što ćemo videti u trećem poglavljju. Odnosno grafen predstavlja poluprovodnik bez gepa. U ovom radu ćemo krenuti prvo od kristalne strukture grafena, a nakon toga ćemo odrediti elektronski spektar grafena, koristeći tzv. model jake veze. Pokazaćemo kako se dobijaju famozni bezmasni Dirakovi fermioni u grafenu i kako njihova pojava utiče na tzv Landauovu kvantizaciju grafena u četvrtom poglavljju. Na kraju ćemo dati opis celobrojnog kvantnog Holovog efekta i

## 2. ATOM UGLJENIKA I HIBRIDIZACIJE

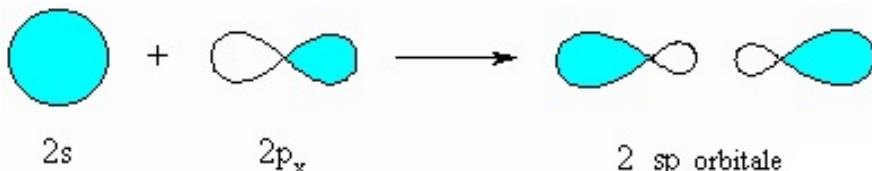
Ugljenik je šesti atom periodnog sistema elemenata. Postoje tri izotopa ugljnika  $C^{12}$ ,  $C^{13}$  i radioaktivni izotop  $C^{14}$ . Svaki ugljenikova atom ima šest elektrona rasporedjenih u  $1s^2$ ,  $2s^2$  i  $2p^2$  atomske orbitale.  $1s^2$  orbitala sadrži dva jako vezana elektrona, dok se u orbitalama  $2s^2$  i  $2p^2$  nalaze četiri tzv. valentna elektrona koja učestvuju u gradjenju hemijskih veza. Budući da  $2p$  orbitale imaju, otprilike  $4\text{ eV}$  višu energiju od  $2s$  orbitale, energetski povoljna konfiguracija je kada u  $2s$  stanju imamo dva elektrona i dva elektrona u  $2p$  stanju. Ispostavlja se da u prisustvu drugih atoma H, O ili C, povoljnije je eksicitovati jedan elektron iz  $2s$  stanja u treću  $2p$  orbitalu, da bi se formirale kovalentne veze sa drugim atomima. U eksicitovanom stanju imamo 4 ekvivalentna kvantno-mehanička stanja  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$  i  $2p_z$ . Superpozicija  $2s$  stanja sa nekim (ili svim)  $2p$  stanjima se naziva hibridizacija i može da bude  $sp^1$ ,  $sp^2$  ili  $sp^3$  hibridizacija, gde broj u superskriptu govori sa koliko se  $2p$  orbitala  $2s$  orbitala meša, odnosno hibridizuje.

### 2.1. $sp^1$ HIBRIDIZACIJA

U  $sp^1$  hibridizaciji, formira se linearna kombinacija  $2s$  i neke od  $2p$  orbitala, u našem primeru neka to bude  $2p_x$  orbitala. Od ove dve orbitale dobijamo dve nove hibridizovane orbitale, koje odgovaraju simetričnoj i antisimetričnoj kombinaciji početnih orbitala. Hibridizovane orbitale označićemo kao  $|sp_a\rangle$  i  $|sp_b\rangle$ .

$$|sp_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle + |2p_x\rangle), \quad |sp_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle - |2p_x\rangle). \quad (2.1)$$

Primer jedinjanja koje ima  $sp$  hibridizaciju je acetilen ( $HC \equiv HC$ ), gde su sa tri crtice označena trostruka veza, od kojih je jedna  $\sigma$  veza koju grade po jedna hibridizovana orbitala sa svakog ugljenikovog atoma, tačnije  $|sp_a\rangle$  orbitala jednog C atoma sa  $|sp_b\rangle$  orbitalom drugog C atoma, ostale dve veze su  $\pi$  veze koje grade preostale ne-hibridizovane  $2p$  orbitalne,  $2p_y$  i  $2p_z$ . Takođe po jedna  $|sp\rangle$  orbitala sa svakog C atoma gradi po jednu  $\sigma$  vezu sa  $1s$  orbitalom vodonikovog atoma.



Slika 2.1: Izgled hibridizovanih  $sp^1$  orbitala. Orbitala  $|sp_a\rangle$  je izdužena na levo dok je  $|sp_b\rangle$  izdužena na desno.

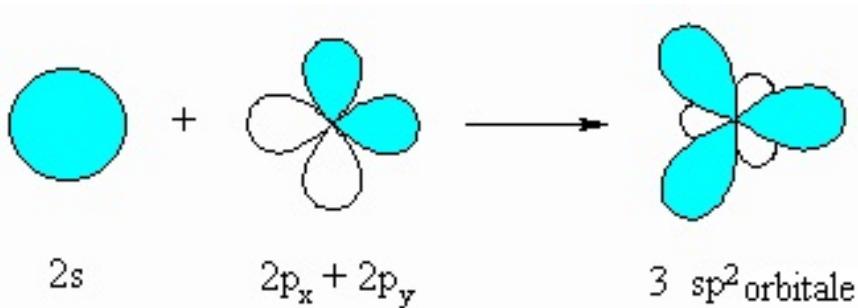
## 2.2. $sp^2$ HIBRIDIZACIJA

U slučaju superpozicije  $2s$  i dve  $2p$  orbitale koje možemo izabrati da su:  $2p_x$  i  $2p_y$  dobijamo planarnu  $sp^2$  hibridizaciju, kakva se javlja u slučaju grafena. Kombinovanjem orbitala dobijaju se tri hibridizovane orbitale koje se nalaze u ravni pod uglom od  $120^\circ$ . Šematski prikaz  $sp^2$  hibridizacije je dat na slici 2.3.

Tri hibridizovane orbitale su predstavljene sa:

$$\begin{aligned} |sp_a^2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|2p_y\rangle \\ |sp_b^2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}|2p_x\rangle + \frac{1}{2}|2p_y\rangle\right) \\ |sp_c^2\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}|2p_x\rangle + \frac{1}{2}|2p_y\rangle\right). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Preostala  $2p_z$  orbitala je noramalna na ravan u kojoj leže tri hibridizovane orbitale. U grafenu ove tri hibridizovane orbitale grade  $\sigma$  vezu izmedju ugljenikovih atoma, rasporedjenih u šestouganu strukturu, dok preostale  $sp_z$  orbitala gradi  $\pi$  vezu. Ova dodatna  $\pi$  veza dovodi do pojave dvostrukе veze izmedju atoma ugljenika koja menja položaj unutar šestougaonika. Zbog toga je rastojanje izmedju ugljenika u grafenu jednako  $0.142\text{ nm}$ , što je srednja vrednost izmedju jednostrukе veze ( $0.147\text{ nm}$ ) i dvostrukе veze ( $0.135\text{ nm}$ ). Elektroni koji su u  $2p_z$  orbitali, tzv.  $\pi$  elektroni su delokalizovani i oni su odgovorni za električne osobine grafena. Kad budemo radili elektronsku strukturu grafena posmatraćemo ove  $\pi$  elektrone. U narednom poglavljiju ćemo videti kako se ove  $sp^2$  hibridizovane orbitale rasporedjuju u kristalnu rešetku garfena.

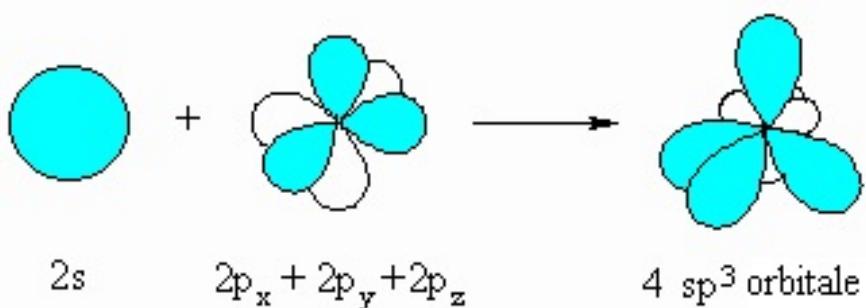


Slika 2.2: Izgled hibridizovanih  $sp^2$  orbitala. Vidimo da ih ima tri i da se nalaze u jednoj ravni pod uglom od  $120^\circ$

## 2.3. $sp^3$ HIBRIDIZACIJA

Slučaj u kojem dolazi do superpozicije  $2s$  i sve tri  $2p$  orbitale naziva se  $sp^3$  hibridizacija. Ova hibridizacija je prikazana na slici 2.4.

Nastale četiri  $sp^3$  orbitale obrazuju tetraedar i nalaze se pod medjusobnim uglom od  $109,5^\circ$ . Ovakva hibridizacija se nalazi u osnovi dijamantske strukture, U dijamantu

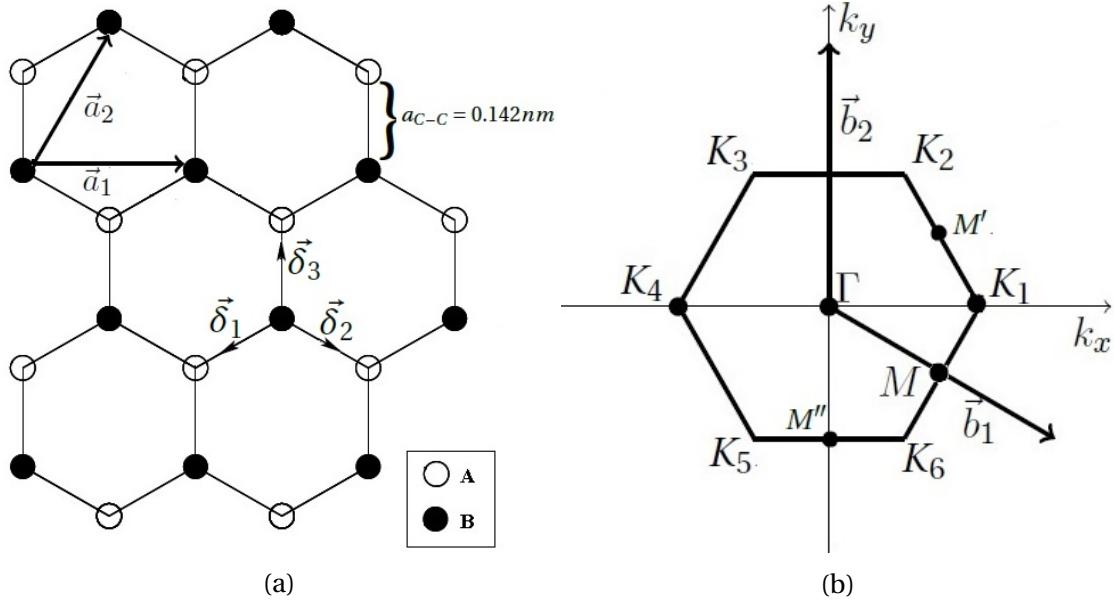


Slika 2.3: Izgled hibridizovanih  $sp^3$  orbitala. Vidimo da ih imačetri i da obrazuju tetraedar

su ugljenikovi atomi medjusobno vezani  $\sigma$  vezama, odnosno vezama nastalim  $\sigma$  prklapanjem sve 4  $sp^3$  hibridizovane orbitale i to je ono što dijamantu daje čvrstinu.

### 3. KRISTALNA STRUKTURA GRAFENA

Grafen predstavlja 2D kristal u kome su atomi ugljenika rasporedjeni u strukturu oblika saća (eng. Honeycomb structure). Ta struktura naravno nije Braveova rešetka jer dva susedna atoma ugljenika nisu ekvivalentna, kao što se vidi na slici 3.1



Slika 3.1: (a) Kristalna struktura grafena na kojoj se vide dve podrešetke A i B. (b) Briluenova zona gde su sa  $K_1$  i  $K_4$  označene Dirakove tačke.

Za Braveovu rešetku se uzima heksagonalna rešetka koja sadrži dva atoma po elementarnoj celiji, označena sa A i B na slici 3.1. Na slici su sa  $\vec{a}_1$  i  $\vec{a}_2$  označeni bazisni vektori koji definisu elementarnu celiju i imaju vrednost:

$$\vec{a}_1 = \sqrt{3}a(1, 0), \quad \vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2}(1, \sqrt{3}) \quad (3.1)$$

Bazisni vektori recipročne rešetje  $\vec{b}_1$  i  $\vec{b}_2$  prikazani na slici 3.1 (b) se dobijaju iz uslova:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (3.2)$$

odklesledi:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}), \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{3a}(0, 1). \quad (3.3)$$

Dužina  $a$  iznosi  $0.142\text{nm}$ , to je dužina ugljenik-ugljenik (C-C) veze. Za fiziku grafena su jako bitne tačke koje se nalaze u temenima Briluenove zone. Ima ih ukupno šest. Na slici 3.1 (b) su označene sa  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$ ,  $K_4$ ,  $K_5$  i  $K_6$ . Problem je što ne možemo sve ove tačke uvrstiti u definiciju Briluenove zone jer su neke od njih medjusobno ekvivalentne.<sup>1</sup> Za dve tačke se kaže da su medjusobno ekvivalentne tačke ako se razlikuju za vektor recipročne rešetke :

$$\vec{B} = n\vec{b}_1 + m\vec{b}_2, \quad (3.4)$$

<sup>1</sup>Strogo gledano neće ni sve stranice šestougla na slici 3.1 (b) ući u definiciju Briluenove zone već samo tri koje sadrže medjusobno neekvivalentne tačke. Možemo da izaberemo stranice  $K_2K_1$ ,  $K_1K_6$  i  $K_6K_5$

gde su  $n$  i  $m$  celi brojevi.

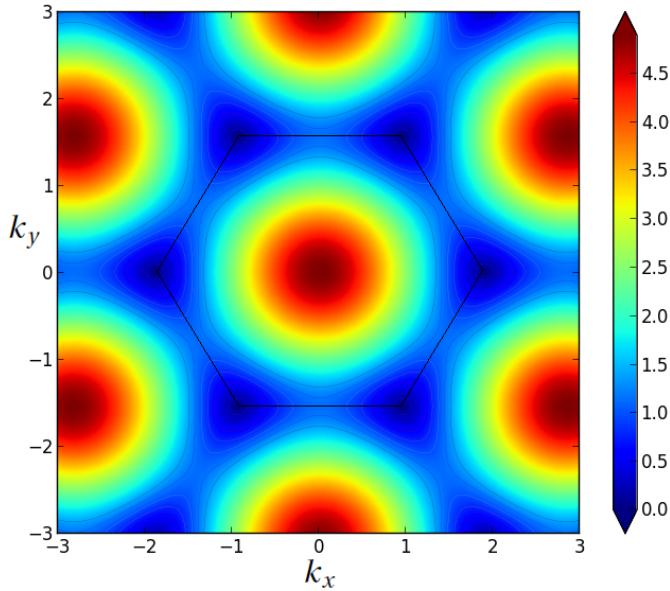
Temena Briluenove zone (tačke  $K_1, K_2, K_3, K_4, K_5$  i  $K_6$ ) možemo podeliti u dva skupa medjusobno ekvivalentnih tačaka:

$$\begin{aligned} K &= \{K_1, K_3, K_5\} \\ K' &= \{K_2, K_4, K_6\}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Tačke iz skupa  $K$  nisu ekvivalentne tačkama iz skupa  $K'$ , stoga možemo da biramo po predstavnika iz svakog skupa bez bojazni da će odabrane tačke biti medjusobno ekvivalentne.<sup>2</sup> Iz skupa  $K$  biramo tačku  $K_1$ , a iz skupa  $K'$  biramo tačku  $K_4$  i redefinišemo ih:

$$K_+ \equiv K_1 = \left( \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right), \quad K_- \equiv K_4 = \left( -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right). \quad (3.6)$$

Mogli smo da biramo bilo koji drugi par tačaka (bitno je samo da budu neekvivalentne), ali ovaj izbor je pogodniji jer obe tačke leže na  $k_x$  osi što znatno olakšava račun. Kada odredimo disperzionu relaciju ispostaviće se da se u ovim tačkama dodiruju provodna i valentna zona i oko njih je moguće linearizovati hamiltonijan, tada se te tačke nazivaju Dirakovim tačkama. Vektori  $\vec{\delta}_1$  i  $\vec{\delta}_2$  povezuju najbliže susede



Slika 3.2: Grafik disperzije relacije na kojoj se jasno uočavaju Dirakove tačke i prva Briluenova zona.

odnosno atome A i B:

$$\vec{\delta}_1 = -\frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -1), \quad \vec{\delta}_3 = a(0, 1). \quad (3.7)$$

<sup>2</sup>Uzmimo, na primer, tačke iz skupa  $K$ . Iz geometrijske analize Briluenove zone dobije se:

$$\vec{K}_3 = \vec{K}_1 - \vec{b}_1, \quad \vec{K}_5 = \vec{K}_1 - \vec{b}_1 - \vec{b}_2.$$

Odnosno tačke  $K_1, K_3$  i  $K_4$  su medjusobno ekvivalentne. Analogno se može pokazati i medjusobna ekvivalentnost tačaka iz skupa  $K'$

Pored vektora koji povezuju najbliže susede tu su i vektori  $\pm \vec{a}_1$ ,  $\pm \vec{a}_2$  i  $\pm(\vec{a}_1 - \vec{a}_2)$ , koji povezuju šest drugih najbližih suseda. Na slici 3.1 smo obeležili i tri neekivalentne M tačke ( $M$ ,  $M'$  i  $M''$ ) koje predstavljaju središta ivica Briluenove zone. Na slici 3.2 je predstavljen grafik disperzije relacije, odnosno pogled "odozgo" na provodnu zonu koju ćemo dobiti u sledećem poglavlju. Ovde smo je prikazali čisto da se ilustruje priča o prvoj Briluenovoj zoni. Na slici jasno vidimo minumume disperzije koji definišu K tačke kao i cela prva Briluenova zona koju smo označili na slici crnim šestougaonikom.

## 4. ELEKTRONSKA STRUKTURA GRAFENA

Prvo izračunavanje energetskih zona za  $\pi$  elektrone unutar aproksimacije jake veze uradio je P. R. Wallace [4] 1947. godine. U svom radu Wallace je razmatrao interakciju izmedju prvih i drugih suseda zanemarujući preklapanje orbitala na različitim atomima. On je pokazao da se u temenima Briluenove zone provodna i valentna zona dodiruju i da u okolinama tih tačaka disperzija postaje linearna. U nastavku poglavljajućemo primeniti aproksimaciju jake veze ali ćemo uzeti u obzir i prekrivanje orbitala, onako kako je to radio Saito et al. u u referenci [5], da bismo dobili disperzionu relaciju. Posmatraćemo ponašanje disperzione relacije u blizini temena Briluenove zone (tzv. K tačaka). U odeljku 4.4 ćemo posmatrati Habardov model primanjena na grafen gde ćemo razmatrati i uticaj drugih suseda na disperziju.

### 4.1. MODEL JAKE VEZE

Problem nalaženja elektronske strukture realnih kristala ne može se egzaktno rešiti. Stoga se mora pribegavati određenim aproksimacijama. Jedna od takvih aproksimacija je model jake veze, gde se talasne funkcije elektrona u kristalu aproksimiraju atomskim talasnim funkcijama, odnosno njihovom superpozicijom koja mora zadovoljavati Blohovu teoremu (Videti Dodatak A). Ovde ćemo uopšteno prikazati model jake veze, sistema od  $n$  orbitala  $\phi_j$  po elementarnoj ćeliji. U ovom modelu se pretpostavlja da se elektron može dobro opisati atomskom funkcijom stanja koja se dobija rešavanjem svojstvenog problema atomskog hamiltonijana:

$$H_l^a = -\frac{\hbar^2}{2m_l} \Delta_l + V(\vec{r}_l - \vec{R}_l), \quad (4.1)$$

dok se uticaj ostalih jona  $\delta V = \sum_{j \neq l}^N V(\vec{r}_l - \vec{R}_j)$  može posmatrati kao perturbacija. Zbog translacione invarijantnosti u kristalu, funkcija stanja kristala  $\Psi$  mora zadovoljavati Blohovu teoremu:

$$T_{\vec{a}} \Psi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \Psi, \quad (4.2)$$

gde je  $T_{\vec{a}}$  operator translacije, a  $\vec{a}$  je vektor rešetke ( $\vec{a} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2$ ). Jedan od mogućih izbora za funkciju koja zadovoljava Blohovu teoremu su tzv. Blohove funkcije:

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{i,j}} \phi_j(\vec{r}, \vec{R}_{i,j}), \quad (j = 1, \dots, n) \quad (4.3)$$

gde suma ide po N elementarnih ćelija pri čemu je  $\vec{R}_{i,j}$  položaj j-te orbitale u i-toj elementarnoj ćeliji. Očigledno je da funkcija (4.3) zadovoljava Blohovu teoremu:

$$\begin{aligned} \Phi_j(\vec{k}, \vec{r} + \vec{a}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_j(\vec{r} + \vec{a} - \vec{R}) \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \sum_{\vec{R} - \vec{a}}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{a})} \phi_j(\vec{r} - (\vec{R} - \vec{a})) \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \Phi_j(\vec{k}, \vec{r}), \end{aligned} \quad (4.4)$$

gde smo uzeli  $\vec{R}_{i,j} \equiv \vec{R}$ .

U opštem slučaju funkcija stanja kristala je linearna kombinacija Blohovih funkcija:

$$\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{l=1}^n c_{j,l} \Phi_l(\vec{k}, \vec{r}). \quad (4.5)$$

Uz pomoć funkcija (4.3) tražimo rešenje Šredingerove jednačine:

$$H\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = E_j(\vec{k})\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}). \quad (4.6)$$

Energiju  $j$ -te trake u funkciji od  $\vec{k}$  računamo kao:

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | \Psi_j \rangle} = \frac{\sum_{i,l}^n c_{ji}^* c_{jl} \langle \Phi_i | H | \Phi_l \rangle}{\sum_{i,l}^n c_{ji}^* c_{jl} \langle \Phi_i | \Phi_l \rangle} = \frac{\sum_{i,l}^n H_{il} c_{ji}^* c_{jl}}{\sum_{i,l}^n S_{il} c_{ji}^* c_{jl}}. \quad (4.7)$$

Ovde su  $H_{il} = \langle \Phi_i | H | \Phi_l \rangle$  matrični elementi tzv. matrice prelaza (eng. Transfer Matrix), dok su  $S_{il} = \langle \Phi_i | \Phi_l \rangle$  matrični elementi matrice koja karakteriše medjusobno prekrivanje funkcija stanja, tzv. matrica prekrivanja (eng. Overlap Matrix). Minimizirajmo  $E_j(\vec{k})$  u odnosu na koeficijent  $c_{jm}^*$ :

$$\frac{\partial E_j(\vec{k})}{\partial c_{jm}^*} = \frac{\sum_l^n H_{ml} c_{jl}}{\sum_{i,l}^n S_{il} c_{ji}^* c_{jl}} - \frac{\sum_{i,l}^n H_{il} c_{ji}^* c_{jl} \sum_l^n S_{ml} c_{jl}}{[\sum_{i,l}^n S_{il} c_{ji}^* c_{jl}]^2} = 0. \quad (4.8)$$

Ako pomnožimo gornju jednačinu sa  $\sum_{i,l}^n S_{il} c_{ji}^* c_{jl}$  i iskoristimo jednačinu (4.7), dobijamo izraz:

$$\sum_{l=1}^n H_{ml} c_{jl} - E_j \sum_{l=1}^n S_{ml} c_{jl} = 0, \quad (4.9)$$

ili u matričnom obliku:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{j1} \\ c_{j2} \\ \vdots \\ c_{jn} \end{pmatrix} = E_j \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & S_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{n1} & S_{n2} & \cdots & S_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{j1} \\ c_{j2} \\ \vdots \\ c_{jn} \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Što se može napisati i kao:

$$H\psi_j = E_j S\psi_j, \quad (4.11)$$

gde smo definisali matricu vrstu kao  $\psi_j$  kao:

$$\psi_j = \begin{pmatrix} c_{j1} \\ c_{j2} \\ \vdots \\ c_{jn} \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Vrednosti energije  $E_j(\vec{k})$  dobijemo rešavanjem tzv. Sekularne jednačine:

$$\det|H - E_j S| = 0, \quad (4.13)$$

koja će u slučaju grafena imati dva rešenja jer je matrica prelaza  $2 \times 2$  matrica. Rešenja koja nadjemo će odgovarati provodnoj i valentnoj zoni.

## 4.2. MODEL JAKE VEZE U GRAFENU

U grafenu imamo dva atoma (A i B) po elementarnoj čeliji, odnosno dve  $\pi$  ( $2p_z$ ) orbitale. To znači da je u slučaju jednog sloja grafena  $n = 2$ . Čisto radi lakšeg praćenja računa u sumiranju po orbitalama indeks po kome se sumira umesto da ide od 1 do n, uzima dve vrednosti A i B. Funkcija stanja kristala (4.5) postaje  $\Psi_j = c_{j,A}\Phi_A(\vec{k}, \vec{r}) + c_{j,B}\Phi_B(\vec{k}, \vec{r})$ , odnosno linearna kombinacija Blohovih funkcija za atom A i atom B.

Krenimo prvo sa računanjem dijagonalnih elemenata matrice  $H$  i matrice  $S$ . Koristeći definiciju za matrične elemente  $H_{il}$  i  $S_{il}$  ( $i, l = A, B$ ) i jednačinu za Blohove funkcije (4.3), za dijagonalni element matrice prelaza dobijamo:

$$H_{BB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{B,i} - \vec{R}_{B,j})} \langle \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,i}) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,j}) \rangle \quad (4.14)$$

Ako uzmemo da dominantni član dolazi od interakcije na istom atomu, odnosno uzmemo da je  $i = j$ , gornja suma prelazi u:

$$H_{BB} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \epsilon_{2p} = \epsilon_{2p}. \quad (4.15)$$

Parametar  $\epsilon_{2p}$  predstavlja energiju  $2p_z$  orbitale i dat je kao:

$$\epsilon_{2p} = \langle \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,i}) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,i}) \rangle. \quad (4.16)$$

Ovaj član je jednak za sve atome, i zbog toga može da izadje ispred sume u jednačini (4.15). Naravno, mogli smo u sumi (4.14) uzeti i prelaze izmedju drugih najbližih suseda<sup>3</sup>, ako stavimo da je  $\vec{R}_{B,i} - \vec{R}_{B,j} = \vec{a}_j$ . Suma (4.14) će pored člana (4.15) dobiti dodatni član:

$$\frac{1}{N} t_{nnn} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 (e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_j} - e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_j}) = 2t_{nnn} \sum_{j=1}^3 \cos \vec{k} \cdot \vec{a}_j \quad (4.17)$$

Gde su sa  $\vec{a}_j$  dati vektori drugih najbližih suseda od atoma B kojih ima ukupno šest ( $\pm \vec{a}_1, \pm \vec{a}_2, \pm \vec{a}_3$ ). Vektori  $\vec{a}_1$  i  $\vec{a}_2$  su prikazani na slici 3.1 dok je  $\vec{a}_3 = \vec{a}_1 - \vec{a}_2$ . Parametar  $t_{nnn}$  je parametar koji karakteriše prelaze izmedju drugih najbližih suseda (eng. next-nearest-neighbours) i on je dat sa:

$$t_{nnn} = \langle \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,i}) | H | \phi_B(\vec{r}, \vec{R}_{B,i+1}) \rangle \quad (4.18)$$

Medjutim, mi ćemo u daljem računu uzimati samo najbliže susede. Ako izračunamo drugi dijagonalni član matrice prelaza  $H_{AA}$  dobijamo da je:

$$H_{AA} = H_{BB} = \epsilon_{2p}. \quad (4.19)$$

Time smo odredili dijagonalne članove matrice prelaza. Računanje dijagonalnih matričnih elemenata matrice prekrivanja ide slično kao i za maticu prelaza ( $H_{BB}$ ). U računanju matričnih elemenata matrice prekrivanja uzimamo da je prekrivanje izmedju  $2p_z$  orbitala koje pripadaju istom atomu jednako 1, tj:

$$\langle \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,i}) | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,i}) \rangle = 1. \quad (4.20)$$

<sup>3</sup>Prelazi izmedju prvih suseda su, kao što ćemo videti u narednom odeljku, uračunati u  $H_{AB}$  i  $H_{BA}$

Dobijamo, takodje kao i u prethodnom slučaju pretpostavljajući da glavni doprinos daju samo prekrivanja na istom atomu:

$$\begin{aligned} S_{BB} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{B,j} - \vec{R}_{B,i})} \langle \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,i}) | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,j}) \rangle \\ &\simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,i}) | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,i}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 1 = 1. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Postupajući analogno dobijamo isti rezultat kao u (4.21) i za  $S_{AA}$ . Odnosno:

$$S_{AA} = 1. \quad (4.22)$$

Sada ćemo preći na na nalaženje vandijagonalnih matričnih elemenata. Naime, vandijagonalni matrični elementi matrice prelaza,  $H_{AB}$  i  $H_{BA}$ , opisuju prelazak elektrona izmedju A i B podrešetke. Oni se dobijaju iz jednačine:

$$H_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{B,j} - \vec{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,j}) \rangle. \quad (4.23)$$

U nastavku računa podrazumevamo da dominantni doprinos prelaska dolazi od prelaza izmedju najbližih suseda. Svaki A (B) atom ima oko sebe tri B (A) atoma kao najbliže susede, koje ćemo označiti indeksom  $l$ ,  $l = (1, 2, 3)$ :

$$\begin{aligned} H_{AB} &\simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{B,l} - \vec{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,l}) \rangle \\ &= t \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_l} = t \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{k}) = t f(\vec{k}), \end{aligned} \quad (4.24)$$

gde je

$$f(\vec{k}) = \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_l}.$$

U jednačini (4.24) smo uveli amplitudu prelaza izmedju najbližih suseda kao:

$$t = \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}_{A,I}) | H | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,I}) \rangle. \quad (4.25)$$

Amplituda prelaza  $t$  je jednaka za sve atome, i zbog toga može izaći ispred sume po  $i$ . Takodje, uveli smo i vektore,  $\vec{\delta}_l = \vec{R}_{B,l} - \vec{R}_{A,i}$ , kao vektore koji povezuju najbliže susede i koji su dati izrazima (3.7) i prikazani na slici 3.1. Oni povezuju svaki atom A(B) sa tri B(A) atoma koji ga okružuju. Kada u jednačinu (4.24) ubacimo vrednosti za vektore  $\vec{\delta}_l$  iz izraza (3.7) dobijemo:

$$f(\vec{k}) = e^{iak_y} + 2e^{-i\frac{ak_y}{2}} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right). \quad (4.26)$$

Drugi vandijagonalni element dobijemo kad kompleksno konjugujemo jednačinu (4.23), odnosno:

$$H_{BA} = H_{AB}^* = t f^*(\vec{k}). \quad (4.27)$$

Vandijagonalni elementi matrice prekrivanja  $S_{AB}$  dobijamo kao:

$$\begin{aligned} S_{AB} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{B,j} - \vec{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,j}) \rangle \\ &\simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{B,l} - \vec{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,l}) \rangle \\ &= s \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_l} = s \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{k}) = sf(\vec{k}). \end{aligned} \quad (4.28)$$

U poslednjem redu u jednčini (4.28) smo uveli parametar prekrivanja  $s = \langle \phi_A(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,l}) \rangle$ . Kao i u prethodnom slučaju, važi:

$$S_{BA} = S_{AB}^* = sf^*(\vec{k}). \quad (4.29)$$

Postojanje člana  $s$  koji nije jednak 0, nam govori da atomske orbitale na susednim atomima nisu ortogonalne, odnosno da postoji malo prekrivanje medju njima.

#### 4.2.1. REŠAVANJE SEKULARNE JEDNAČINE

Na osnovu matričnih elemenata odredjenih u prethodna dva odeljaka, dobijamo dve matrice:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} & tf(\vec{k}) \\ tf^*(\vec{k}) & \epsilon_{2p} \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & sf(\vec{k}) \\ sf^*(\vec{k}) & 1 \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

Ubacujući ove matrice u sekularnu jednačinu (4.13) dobijamo:

$$\det \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} - E & (t - Es)f(\vec{k}) \\ (t - Es)f^*(\vec{k}) & \epsilon_{2p} - E \end{pmatrix} = 0 \quad , \quad (4.31)$$

odakle sledi:

$$(\epsilon_{2p} - E)^2 - (t - Es)^2 |f(\vec{k})|^2 = 0. \quad (4.32)$$

Nakon sredjivanja dobijamo kvadratnu jednačinu po E:

$$E^2 \left( 1 - s^2 |f(\vec{k})|^2 \right) - E \left( 2\epsilon_{2p} - 2ts|f(\vec{k})|^2 \right) + \epsilon_{2p}^2 - t^2 |f(\vec{k})|^2 = 0. \quad (4.33)$$

Rešavajući ovu kvadratnu jednačinu po  $E(\vec{k})$  dobijamo disperzionu relaciju za sloj grafena:

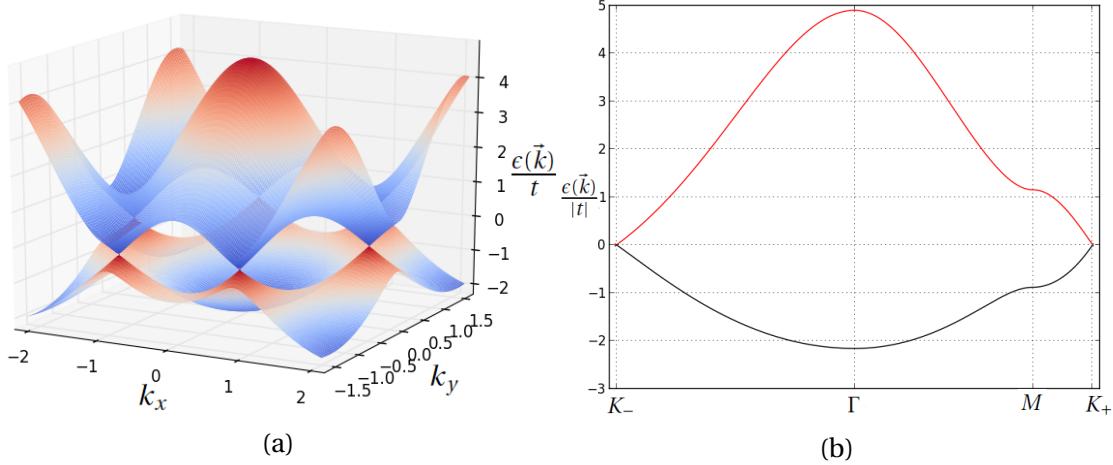
$$E_{\pm} = \frac{\epsilon_{2p} \mp t|f(\vec{k})|}{1 \mp s|f(\vec{k})|}. \quad (4.34)$$

Pozitivan i negativan predznak odgovaraju provodnoj i valentnoj zoni, respektivno. Dve zone se dodiruju u K tačkama. Parametri  $t$  i  $s$  se računaju ili iz eksperimenta ili pomoću nekih drugih numeričkih metoda. Za vrednosti parametara uzimamo:  $t = -2.7eV$ , kao u [6],  $s = 0.129eV$  dato u [5], a za vrednost  $\epsilon_{2p}$  se obično uzima da je jednaka nuli, odnosno nivo u odnosu na koji računamo energiju je energija  $2p_z$  orbitale.

Ovde se uočava velika razlika izmedju grafena koji sadrži istovetne atome i neke druge dvodimenzione (2D) strukture, kao što je recimo bor-nitrid ( $\alpha$ BN) koji kao i grafen ima 2D heksagonalnu strukturu ali atomi u dve podrešetke nisu isti, jedna podrešetka je sastavljena od atoma bora a druga od atoma azota. Takva struktura znatno menja disperzionu relaciju jer u izrazu za matricu prelaza (4.30) dijagonalni elementi više nisu isti. Ovo dovodi do toga da disperziona relacija ima oblik (kao u referenci [11]):

$$\epsilon(\vec{k}) = \pm \sqrt{\Delta^2 + |f(\vec{k})|^2},$$

gde je  $\Delta = \epsilon_B - \epsilon_N$  razlika energija  $\pi$  elektrona na atomima bora i azota. Iz izraza za disperzionu relaciju bor-nitrida vidi se da u okolini temena Briluenove zone, u kojima je funkcija  $f(\vec{k}) = 0$ , disperzija više nije linearna i da se u samim temenima javlja procep širine  $\Delta$ , izmedju provodne i valentne zone. Razvijanjem hamiltonijana u okolinama temena Briluenove zone dobija se jednačina za masivne Dirakove fermione, za razliku od grafene kod koga, kao što ćemo u narednom poglavljtu videti, razvijanje u okolinama temena Briluenove zone (Dirakovim tačkama) dovodi do pojavе efektivnog Dirakovog hamiltonijana za čestice bez mase.

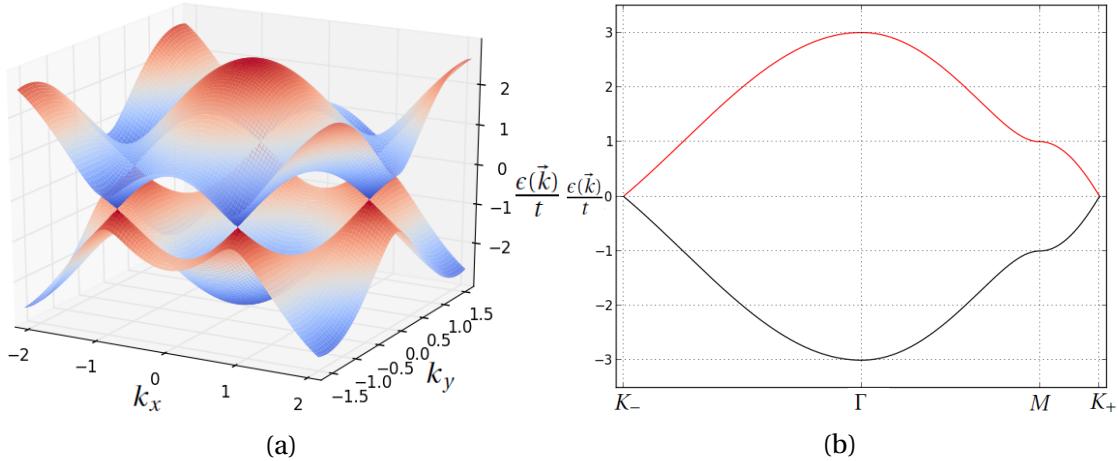


Slika 4.1: (a) 3D grafik disperzije relacije (4.31) računate za najblže susede u blizini prve Briluenove zone, sa  $s = 0.129$ . Disperzija je izražena u jedinicama od  $|t|$ . Vidi se da se provodna i valentna zona dodiruju u uglovim prve Briluenove zone. To su Dirakove tačke. (b) Presek disperzije relacije duž pravca  $K_- \rightarrow \Gamma \rightarrow M \rightarrow K_+$  za  $s = 0.129$

Uzimanjem u obzir prelaze izmedju drugih najbližih suseda pojavio bi se parametar  $t_{nnn}$  koji bi bio približno jednak  $0.1 t$ . Iz toga vidimo da je interakcija izmedju drugih najbližih suseda mala u odnosu na interakciju izmedju najbližih suseda, zbog toga smo je u ovom modelu i izbacili iz računa. Pošto je  $t$  negativno pogodno ga je napisati u obliku  $t = -|t|$ . Tako da disperziona relacija (4.34), ako uzmemo  $\epsilon_{2p} = 0$ , postaje:

$$E_{\pm} = \frac{\pm |t| \cdot |f(\vec{k})|}{1 \mp s|f(\vec{k})|}. \quad (4.35)$$

Na slici 4.1 je prikazan trodimenzioni grafik disperzije relacije (4.35) za  $s = 0.129$  i  $\epsilon_{2p} = 0$ , kao i presek duž pravca  $K_- \rightarrow \Gamma \rightarrow M \rightarrow K_+$ . Crvenom bojom je označena



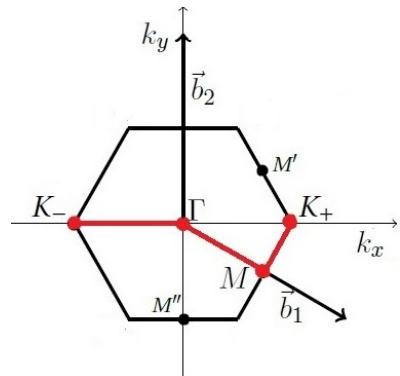
Slika 4.2: (a) 3D grafik disperzije relacije (4.31) merene u jedinicama od  $|t|$  za  $s = 0$  (b) Presek grafika disperzije relacije za pravac  $K_- \rightarrow \Gamma \rightarrow M \rightarrow K_+$ .

provodna a crnom valentna zona. Sa grafiku se jasno vidi da provodna i valentna zona nisu simetrične. Asimetrija se javlja zbog parametra  $s$  za koji smo uzeli da je različit od nula, odnosno uzeli smo da orbitale na susednim atomima nisu ortogonalne već da ima malo preklapanje. Slučaj kada je preklapanje zanemareno je prikazan na slici (4.2). Asimetričnost izmedju provodne i valentne zone je u ovom slučaju uklonjena. U oba slučaja se provodna i valentna zona dodiruju u temenima Briluenove zone. Sa grafika a i iz računa se vidi da je u  $K$  tačkama, koje možemo napisati kao:

$$\vec{K}_\xi = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} (\xi, 0), \quad \xi = \pm 1 \quad (4.36)$$

disperzija jednaka nuli. To znači da se Dirakove tačke u grafenu poklapaju sa  $K$  tačkama (temenima Briluenove zone)<sup>4</sup>. Drugim rečima, možemo da kažemo da  $K_\xi$  tačke obrazuju Fermijevu površ. Kad uvedemo interakciju izmedju drugih suseda disperzija u ovim tačkama više neće biti jednaka nuli, ali će i dalje tačke  $K_\xi$  biti Dirakove tačke, odnosno tačke dodira valentne i provodne zone u okolini kojih će disperzija postati linearna i dobićemo Dirakove bezmasne fermione. Iz prethodne analize elektronske strukture grafena vidi se da je čist grafen tzv. poluprovodnik bez procepa (bez gepa) izmedju valentne i provodne zone. Ovo predstavlja jednu od osnovnih prepreka u upotrebi grafena u elektronici i proizvodnji tranzistora.

Sa slikama 4.1 i 4.2 vidimo da se u okolini Dirakovih tačaka disperzija ne menja drastično ako stavimo da je parametar  $s$  jednak nuli. U oba slučaja je disperzija u okolinih ovih tačaka linearna. U nastavku rada, preteći referencu [6], uzimamo  $s = 0$ . Odnosno



Slika 4.3 Pravac  $K_- \rightarrow \Gamma \rightarrow M \rightarrow K_+$ .

<sup>4</sup>Ovde je potrebno uočiti razliku izmedju  $K$  tačaka kao kristalografskih tačaka koje definišu temena Briluenove zone i Dirakovih tačaka kao tačaka dodira provodne i valentne zone. U grafenu se poklapaju ali u opštem slučaju to ne mora da važi.

radimo u tzv. Slater-Koster šemi u kojoj je matrica prekrivanja  $S$ , jednaka jediničnoj matrići.

### 4.3. DIRAKOVA JEDNAČINA ZA GRAFEN

Za većinu fizičkih karakteristika materijala bitno je ponašanje elektrona u okolini Fermijeve površi, a nju u grafenu, kao što smo u prethodnom poglavlju videli, obrazuju K tačke. Slika 4.1 i 4.2 pokazuju da je energija, u okolini Dirakovih tačaka, linearno zavisna od talasnog vektora. To možemo iskoristiti da razvijamo funkciju  $f(\vec{k})$ , koja ulazi u izraz za disperziju (4.34) i za koju važi  $f(\vec{K}_\xi) = 0$ , u red oko  $K_\xi$  tačaka. Ako se zadržimo samo na linearnim članovima dobijamo Dirakov hamiltonijan koji opisuje relativističke čestice bez mase. Uvedimo talasni vektor  $\vec{q}$  koji predstavlja odstupanje od tačke  $K_\xi$  na sledeći način:

$$\vec{k} = \vec{q} + \vec{K}_\xi = \left( q_x + \xi \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, q_y \right). \quad (4.37)$$

Funkcija  $f(\vec{k})$  u tom slučaju postaje:

$$f(\vec{k}) = e^{iaq_y} + 2e^{-i\frac{a}{2}q_y} \cos \frac{\sqrt{3}a}{2} \left( q_x + \xi \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \right). \quad (4.38)$$

Uzimamo da je odstupanje malo i razvijamo funkciju  $f(\vec{k})$  u red do drugog stepena po  $\vec{q}$ :

$$\begin{aligned} f(\vec{k}) &\cong (1 + iaq_y) + 2 \left( 1 - \frac{ia}{2} q_y \right) \cdot \left( \cos \left( \frac{\sqrt{3}a}{2} q_x \right) \cos \left( \xi \frac{2\pi}{3} \right) - \sin \left( \frac{\sqrt{3}a}{2} q_x \right) \sin \left( \xi \frac{2\pi}{3} \right) \right) \\ &\cong (1 + iaq_y) + \left( 1 - \frac{ia}{2} q_y \right) \cdot \left( -1 - \xi \frac{3a}{2} q_x \right) \\ &\cong 1 + iaq_y - 1 - \xi \frac{3a}{2} q_x + \frac{ia}{2} q_y = -\frac{3a}{2} (\xi q_x - iq_y). \end{aligned} \quad (4.39)$$

Koristeći jednačinu (4.39), dobijamo da matrica prelaza  $H$  postaje:

$$\begin{aligned} H &= \begin{pmatrix} 0 & t(-\frac{3a}{2}) \cdot (\xi q_x - iq_y) \\ t(-\frac{3a}{2}) \cdot (\xi q_x + iq_y) & 0 \end{pmatrix} \\ &= -t \frac{3a}{2\hbar} \begin{pmatrix} 0 & \xi p_x - ip_y \\ \xi p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} = \nu_F \begin{pmatrix} 0 & \xi p_x - ip_y \\ \xi p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

U poslednjoj relaciji, u izrazu (4.40), smo kombinujući parametre  $t$  i  $a$  definisali tzv. Fermijevu brzinu  $\nu_F = -\frac{3ta}{2\hbar} = \frac{3|t|a}{2\hbar}$ . Takodje, uzeli smo u obzir i izraz  $\vec{q} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ . Za matricu prekrivanja u linearnoj aproksimaciji dobijamo da je jedinična matriča jer smo uzeli da je  $s = 0$ . Jednačina svojstvenog problema (4.11) postaje:  $H\psi_j = E_j\psi_j$ , odnosno dobijamo jednačinu svojstvenog problema matrice prelaza. To znači

da ulogu efektivnog hamiltonijana, u blizini Dirakovih tačaka, igra upravo matrica prelaza. Hamiltonian možemo napisati u obliku:

$$H^{eff} = H = v_F(\xi p_x \sigma_x + p_y \sigma_y) \quad (4.41)$$

Ovde su  $\sigma_x$  i  $\sigma_y$  Paulijeve matrice, koje su date sledećim izrazima:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

Izraz (4.41) podseća na Dirakov hamiltonijan za česticu bez mase (videti Dodatak B) u relativističkoj kvantnoj mehanici. Razlika je u tome što je kod grafena brzina svetlosti  $c$  zamjenjena Fermijevom brzinom  $v_F \approx \frac{c}{300}$  [7]. Svojstvene funkcije efektivnog hamiltonijana (4.41) su dvokomponentni spinori, ali za razliku od standardne forme rešenja Dirakove jednačine, gde jedna komponenta predstavlja spin "up" stanje, a druga komponenta spin "down" samog elektrona, u slučaju grafena radi se o tzv. pseudospinu koji govori o relativnim amplitudama Blohovih funkcija na podrešetkama A i B. Tako da ako se elektroni nalaze na podrešetci A onda govorimo o stanju sa pseudospinom "up", a ako se elektroni nalaze na podrešetci B onda se radi o stanju sa pseudospinom "down". Pošto se elektroni u grafenu nalaze na obe podrešetke onda su svojstvene funkcije linearne kombinacija stanja sa pseudospinom "up" i pseudospinom "down". Uzimajući u obzir rečeno svojstvene funkcije hamiltonijana tražimo u obliku:

$$\Psi_{\vec{p}, \xi=+} = \begin{pmatrix} \psi_{\vec{p},+}^A \\ \psi_{\vec{p},+}^B \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\vec{p}, \xi=-} = \begin{pmatrix} \psi_{\vec{p},-}^A \\ \psi_{\vec{p},-}^B \end{pmatrix}. \quad (4.43)$$

Vidimo da funkcije stanja zavise od vrednosti  $\xi$  koju nazivamo Izospin udoline (eng. Valley Isospin) koji govori u okolini koje tačke smo vršili razvoj, dok je energija, koja je linearna po  $p$  i oblika:

$$E_{\vec{p}, \xi=\pm}^\lambda = \lambda v_F p, \quad \lambda = \pm 1, \quad (4.44)$$

nezavisna od znaka  $\xi$ . Dakle, imamo dvostruku degeneraciju po udolinskom izospinu. Ono što je praktično uraditi je izmeniti mesta komponentama spinora za tačku  $K_-$  ( $\xi = -1$ ). Tako efektivni hamiltonijan dobija oblik:

$$H_\xi^{eff} = \xi v_F (p_x \sigma_x + p_y \sigma_y) = \xi v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}. \quad (4.45)$$

Ovo je praktično jer efektivni hamiltonijan možemo predstaviti i u obliku  $4 \times 4$  dijagonalne blok matrice:

$$H^{eff} = \begin{pmatrix} H_{\xi=+1} & 0 \\ 0 & H_{\xi=-1} \end{pmatrix} = v_F \begin{pmatrix} -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \end{pmatrix} = v_F \tau^z \otimes \vec{\sigma} \cdot \vec{p}. \quad (4.46)$$

Gde je sa  $\tau^z$  označena Paulijeva matrica:

$$\tau^z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.47)$$

a sa  $\otimes$  je označen tensorski proizvod. Svojstvene funkcije u ovom slučaju postaju četvero-komponentni spinori:

$$\Psi_{\vec{p}} = \begin{pmatrix} \psi_{\vec{p},+}^A \\ \psi_{\vec{p},+}^B \\ \psi_{\vec{p},-}^B \\ \psi_{\vec{p},-}^A \end{pmatrix}. \quad (4.48)$$

Sada ćemo rešiti svojstveni problem Dirakovog hamiltonijana za grafenu. Pošto posmatramo rešenja za slobodne elektrone odnosno rešavamo slobodnu Dirakovu jednačinu pretpostavljamo rešenje oblika:

$$\Psi_{\vec{p},\lambda}^{\xi}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}. \quad (4.49)$$

Jednačina za svojstveni problem postaje:

$$\begin{pmatrix} 0 & \xi(p_x - i p_y) \\ \xi(p_x + i p_y) & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \lambda p \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad (4.50)$$

gde smo uzeli u obzir da su svojstvene vrednosti hamiltonijana  $\pm v_F p = \lambda v_F p$ . Kad raspišemo gornju matričnu jednačinu dobijemo homogen sistem od dve jednčine sa dve nepoznate ( $u$  i  $v$ ):

$$\begin{aligned} \xi(p_x - i p_y) \cdot v &= \lambda p \cdot u \\ \xi(p_x + i p_y) \cdot u &= \lambda p \cdot v. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Iz druge jednačine dobijamo:

$$v = \xi \frac{p_x + i p_y}{\lambda p} u = \xi \lambda \frac{p_x + i p_y}{p} u. \quad (4.52)$$

Kada izraz (4.52) ubacimo u sistem jednačina (4.51) vidimo da je  $u$  neodredjeno. Ako uočimo da važi:  $p_x = p \cos(\varphi)$  i  $p_y = p \sin(\varphi)$  jednačina (4.52) se može napisati u obliku:

$$v = \xi \lambda \frac{p_x + i p_y}{p} u = \xi \lambda \frac{p [\cos(\varphi) + i \sin(\varphi)]}{p} u = \xi \lambda \frac{p e^{i\varphi}}{p} u = \xi \lambda e^{i\varphi} u. \quad (4.53)$$

Iz prethodne analize sledi da su svojstvene funkcije Dirakovog hamiltonijana u grafenu oblika:

$$\Psi_{\vec{p},\lambda}^{\xi}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} u \\ \xi \lambda e^{i\varphi} u \end{pmatrix} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \quad (4.54)$$

Ako iskoristimo uslov normiranja dobijamo:

$$\Psi^* \cdot \Psi = (u^* \quad \xi \lambda e^{-i\varphi} u^*) \cdot \begin{pmatrix} u \\ \xi \lambda e^{i\varphi} u \end{pmatrix} = |u|^2 + |\xi \lambda e^{i\varphi} u|^2 = 1, \quad (4.55)$$

odakle sledi da je:

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (4.56)$$

Konačno, dobijamo svojstvenu funkciju u obliku:

$$\Psi_{\lambda,\vec{p}}^{\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \xi \lambda e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \quad (4.57)$$

Dobijene svojstvene funkcije možemo napisati u obliku četvero-komponentnog spinora:

$$\Psi_{\vec{p},\lambda}^{\xi=+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\varphi} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\vec{p},\lambda}^{\xi=-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -\lambda e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (4.58)$$

gde ne smemo zaboraviti da se treća komponenta svojstvenog spinora za  $\xi = -1$  odnosi na podrešetku B a četvrta na podrešetku A.

### 4.3.1. HIRALNOST ELEKTRONA U GRAFENU

U fizici visokih energija se definiše helicitet čestice, kao projekcija njenog spina na pravac kretanja. On je dat operatorom:

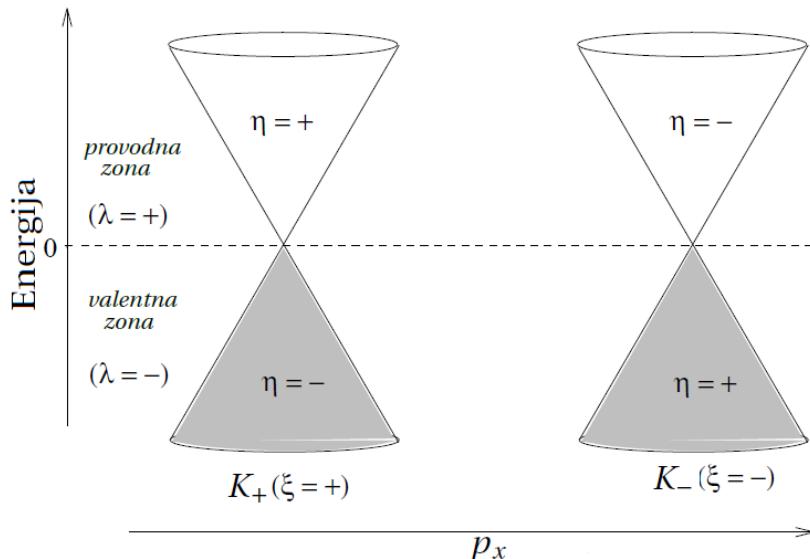
$$\hat{h}_{\vec{p}} = \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{p}|} \quad (4.59)$$

Operator heliciteta je unitaran i ermitski operator koji ima dve svojstvene vrednosti:

$$\eta_{\pm} = \pm 1, \quad (4.60)$$

i dva svojstvena stanja:

$$\hat{h}_{\vec{p}} |\eta = \pm 1\rangle = \pm |\eta = \pm 1\rangle. \quad (4.61)$$



Slika 4.4: Šematski prikaz hiralnosti elektrona u grafenu. Vidimo da elektroni u provodnoj zoni, u okolini  $K_+$  tačke, imaju negativnu hiralnost, dok je za šupljinei hiralnost negativna. Suprotno važi za  $K_-$  tačku.

U slučaju relativističkih čestica bez mase operator heliciteta komutira sa Dirakovim hamiltonijanom i helicitet postaje dobar kvantni broj. U fizici visokih energija u opisu neutrina, koji nemaju masu, dobije se da su svi neutrini "levoruki", odnosno imaju helicitet  $\eta = -1$  dok se za antineutrino dobije da su "desnoruki" ( $\eta = +1$ ). Kod grafena operator  $\vec{\sigma}$  više ne predstavlja operator spina elektrona nego operator pseudospina. Zbog ovoga se u slučaju grafena operator  $\hat{h}_{\vec{p}}$  naziva operatorom hiralnosti umesto operatorom heliciteta. Lako je uočiti da operator hiralnosti (4.59) komutira sa Dirakovim hamiltonijanom za grafen (4.45). Hamiltonian možemo izraziti preko operatora hiralnosti kao:

$$H_{\xi}^{eff} \Psi_{\vec{p}}^{\xi} = \xi v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \Psi_{\vec{p}}^{\xi} = \xi v_F |\vec{p}| \hat{h}_{\vec{p}} \Psi_{\vec{p}}^{\xi} = \lambda v_F |\vec{p}| \Psi_{\vec{p}}^{\xi}. \quad (4.62)$$

Iz jednačine (4.62) dobijamo da važi:

$$\hat{h}_{\vec{p}} \Psi_{\vec{p}}^{\xi} = \lambda \xi \Psi_{\vec{p}}^{\xi}. \quad (4.63)$$

Dakle, dobijamo vezu izmedju hiralnosti, izospina udoline i indeksa  $\lambda$ , koji karakteriše zonu:

$$\lambda = \xi \eta \quad (4.64)$$

Analizirajući jednačinu (4.64) dolazimo do zaključka da elektroni u okolini  $K_+$  tačke imaju pozitivnu hiralnost dok su šupljine negativno hiralne. U okolini  $K_-$  tačke važi obrnuto. Ovo je šematski prikazano na slici 4.4.

#### 4.4. HABARDOV MODEL ZA GRAFEN

Ono što smo dobili u prethodnom odeljku je disperziona relacija u modelu jake veze za najbliže susede u grafenu. Dobili smo da u okolinama karakterističnih tačaka, tzv. Dirakovih tačaka (tačaka u kojima se dodiruju provodna i valentna zona), disperziona relacija postaje linearна, odnosno, ima relativistivcki oblik pri čemu je brzina svetlosti  $c$  zamenjenom Fermijevom brzinom  $v_F$ . Fermijeva brzina ima vrednost  $v_F \cong 1 \times 10^6 \frac{m}{s} \cong \frac{c}{300}$  [7]. Potrebno je sad izračunati disperzionu relaciju za druge najbliže susede da bismo proverili stabilnost Dirakovih tačaka. Ilustrativno je za izračunavanja u ovom delu napustiti kordinatnu reprezentaciju i koristiti formalizam druge kvantizacije odnosno koristiti Habardov model. Prvo ćemo primeniti Habardov model na prve suseda a kasnije ćemo odrediti disperziju za druge najbliže susede. U tom smislu uvedimo operatore kreacije i anihilacije:

- $c_{s,\vec{x}}^\dagger \rightarrow$  operator koji kreira elektron sa spinom  $s$  na čvoru  $\vec{x}$
- $c_{s,\vec{x}} \rightarrow$  operator koji anihilira elektron sa spinom  $s$  na čvoru  $\vec{x}$

Ovo su fermionski operatori i za njih važe antikomutacione relacije:

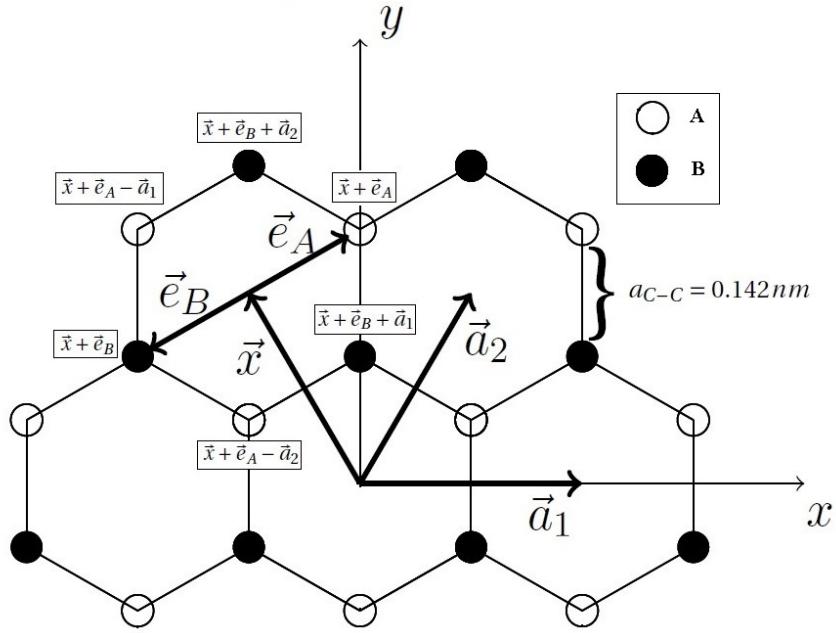
$$\begin{aligned} \{c_{s,\vec{x}}, c_{s',\vec{x}'}^\dagger\} &= \delta_{s,s'} \delta_{\vec{x},\vec{x}'}, \\ \{c_{s,\vec{x}}, c_{s',\vec{x}'}\} &= \{c_{s,\vec{x}}^\dagger, c_{s',\vec{x}'}^\dagger\} = 0. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Definišemo vakuum stanje  $|0\rangle$  kao:

$$C_{s,\vec{x}} |0\rangle = 0. \quad (4.66)$$

Posmatraćemo šestougaonu rešetku grafena sa po jednim elektronom na svakom čvoru. Zanemarujemo unutrašnju strukturu ugljenikovih atoma i dopuštamo elektronima da tuneluju, prvo izmedju najbližih a potom i izmedju drugih najbližih suseda. Da bismo opisali ovo preskakanje elektrona koristimo Habardov model, u kojem smo zanemarili interakciju elektrona na istom čvoru (tzv. "on site" interakciju  $U$ ). Hamiltonian je definisan kao:

$$H = -t \sum_s \sum_{\vec{x}, \vec{y}} \left[ c_{\vec{x},s}^\dagger c_{\vec{y},s} + c_{\vec{y},s}^\dagger c_{\vec{x},s} \right], \quad (4.67)$$



Slika 4.5: Kristalna rešetka grafena gde smo za razliku od slike 2.1 vektore rešetke  $\vec{a}_1$  i  $\vec{a}_2$  translirali u središte šestougaonika.

gde sumiramo po spinovima i koordinatama čvorova rešetke i gde je sa  $t$  označena apsolutna vrednost amplitude prelaza.

Na slici 4.5 je prikazana kristalna rešetka sa koordinatama čvorova u jednom šestougaoniku. Za razliku od slike 3.1 središte koordinatnog sistema je pomereno u središte šestougaonika. Ova translacija za vektor rešetke ne menja fiziku grafena, jer je Hamiltonijan invarijantan u odnosu na takve translacije, ali znatno olakšava dalji račun. Parametri rešetke nakon ove translacije prelaze u:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \sqrt{3}a(1, 0), & \vec{a}_2 &= \sqrt{3}a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \\ \vec{e}_A &= \sqrt{3}a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{6}\right), & \vec{e}_B &= -\sqrt{3}a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{6}\right), \\ \vec{e}_A &= -\vec{e}_B.\end{aligned}\tag{4.68}$$

gde smo sa  $a$ , kao i do sada, označili rastojanje izmedju najbližih suseda  $a = a_{C-C} = 0.142\text{nm}$ . Uveli smo vektore  $\vec{e}_A$  i  $\vec{e}_B$  koji definisu položaj čvorova u odnosu na centar šestougaonika.

#### 4.4.1. HABARDOV MODEL ZA NAJBLIŽE SUSEDE

Odredimo prvo disperziju za najbliže susede koristeći Habardov model:

$$H = -t \sum_{\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle} \sum_s \left[ c_{s, \vec{x}}^\dagger c_{s, \vec{y}} + c_{s, \vec{y}}^\dagger c_{s, \vec{x}} \right] = \sum_{\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle} \sum_s \left[ c_{s, \vec{x}}^\dagger c_{s, \vec{y}} + h.c. \right].\tag{4.69}$$

Sa  $\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle$  je označeno sumiranje po najbližim susedima. Prelazi koje opisuje hamiltonijan (4.69) su prelazi izmedju podrešetki A i B. Dijagonalizaciju hamiltonijana započinjemo tako što posmatramo sve prelaze u jednom smeru izmedju najbližih suseda u šestougaoniku čije je centar dat sa vektorom  $\vec{x}$ , kao što je prikazano na slici 4.5. Krenimo od prelaza sa čvora na podrešetki A, definisanog sa koordinatama  $\vec{x} + \vec{e}_A$  na čvor na podrešetki B sa koordinatama  $\vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_1$ . Odnosno anihiliramo elektron na čvoru  $\vec{x} + \vec{e}_A$  i kreiramo na čvoru  $\vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_1$ . Nakon toga prelazimo na čvor  $\vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_2$  na kome anihiliramo elektron i kreiramo ga na čvoru  $\vec{x} + \vec{e}_A$ . Nastavljamo tako u smeru suprotnom od smera kazaljke na satu dok ne prodjemo sve čvorove u jednom šestougaoniku. Translacijom ovog šestougaonika možemo reprodukovati sve moguće prelaze izmedju najbližih suseda u celoj rešetki. Zbog toga suma po  $\vec{x}$  i  $\vec{y}$  u (4.69) prelazi u sumu po  $\vec{x}$ :

$$H = -t \sum_{\vec{x}} \sum_s \left[ c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_1}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A} + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_2} + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_2}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A - \vec{a}_1} \right. \\ \left. + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A - \vec{a}_1}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B} + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A - \vec{a}_2} + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A - \vec{a}_2}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_1} \right]. \quad (4.70)$$

Da bismo dijagonalizovali ovaj hamiltonijan uvedimo Furije transformaciju:

$$\begin{aligned} c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A} &= \frac{\nu_0}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k} \tilde{c}_{s, A}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} + \vec{e}_A)}, \\ c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B} &= \frac{\nu_0}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k} \tilde{c}_{s, B}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} + \vec{e}_B)}, \\ c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A}^\dagger &= \frac{\nu_0}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k} \tilde{c}_{s, A}^\dagger(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{x} + \vec{e}_A)}, \\ c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B}^\dagger &= \frac{\nu_0}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k} \tilde{c}_{s, B}^\dagger(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{x} + \vec{e}_B)}, \end{aligned} \quad (4.71)$$

gde smo sa  $\nu_0$  označili zapreminu elementarne ćelije u direktnom prostoru koja iznosi  $\nu_0 = \frac{3\sqrt{3}a^2}{2}$ . Ako izvršimo Furije transformaciju hamiltonijana dobijemo:

$$H = -t \sum_{\vec{x}, s} \left( \frac{\nu_0}{(2\pi)^2} \right)^2 \int \int d^2 \vec{k} d^2 \vec{k}' \cdot e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}} \cdot \left[ \tilde{c}_{s, B}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, A}(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{e}_A - i\vec{k} \cdot (\vec{e}_B + \vec{a}_1)} + \right. \\ \left. \tilde{c}_{s, A}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, B}(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{e}_B + \vec{a}_2) - i\vec{k} \cdot \vec{e}_A} + \tilde{c}_{s, B}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, A}(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{e}_A - \vec{a}_1) - i\vec{k} \cdot (\vec{e}_B + \vec{a}_2)} + \right. \\ \left. \tilde{c}_{s, A}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, B}(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{e}_B - i\vec{k} \cdot (\vec{e}_A - \vec{a}_1)} + \tilde{c}_{s, B}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, A}(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{e}_A - \vec{a}_2) - i\vec{k} \cdot \vec{e}_B} + \right. \\ \left. \tilde{c}_{s, A}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, B}(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{e}_B + \vec{a}_1) - i\vec{k} \cdot (\vec{e}_A - \vec{a}_2)} \right]. \quad (4.72)$$

Ako sada iskoristimo definiciju za Delta funkciju (videti Dodatak C):

$$\delta(\vec{k} - \vec{k}') = \frac{\nu_0}{(2\pi)^2} \sum_{s, \vec{x}} e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}}. \quad (4.73)$$

Izraz za hamiltonijan se pojednostavljuje i postaje:

$$H = -t \sum_s \frac{\nu_0}{(2\pi)^2} \int_B d^2 \vec{k} \cdot \left[ \tilde{c}_{s, B}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, A}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot (\vec{e}_A - \vec{e}_B - \vec{a}_1)} + \right. \\ \left. \tilde{c}_{s, A}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, B}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot (\vec{e}_B - \vec{e}_A + \vec{a}_2)} + \tilde{c}_{s, B}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, A}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot (\vec{e}_A - \vec{e}_B - \vec{a}_1 - \vec{a}_2)} + \right. \\ \left. \tilde{c}_{s, A}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, B}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot (\vec{e}_B - \vec{e}_A + \vec{a}_1)} + \tilde{c}_{s, B}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, A}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot (\vec{e}_A - \vec{e}_B - \vec{a}_2)} + \right. \\ \left. \tilde{c}_{s, A}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s, B}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot (\vec{e}_B - \vec{e}_A + \vec{a}_1 - \vec{a}_2)} \right], \quad (4.74)$$

$$H = -t \sum_s \frac{\nu_0}{(2\pi)^2} \int d^2\vec{k} \left[ \epsilon^*(\vec{k}) \tilde{c}_{s,B}^\dagger \tilde{c}_{s,A}(\vec{k}) + \epsilon(\vec{k}) \tilde{c}_{s,A}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s,B}(\vec{k}) \right]. \quad (4.75)$$

Ovde smo definisali funkciju  $\epsilon(\vec{k})$  na sledeći način:

$$\begin{aligned} \epsilon(\vec{k}) &= e^{i\vec{k}\cdot(\vec{e}_B-\vec{e}_A+\vec{a}_1)} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{e}_B-\vec{e}_A+\vec{a}_1+\vec{a}_2)} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{e}_B-\vec{e}_A+\vec{a}_2)} \\ &= e^{-2i\vec{k}\cdot\vec{e}_A} \cdot \left( e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{a}_1+\vec{a}_2)} \right). \end{aligned} \quad (4.76)$$

U poslednjoj jednakosti smo iskoristili identitet  $\vec{e}_B = -\vec{e}_A$ . hamiltonijan dat izrazom (4.75) se može napisati u matričnom obliku, gde su  $\epsilon(\vec{k})$  i  $\epsilon^*(\vec{k})$  van-dijagonalni elementi neke matrice koju ćemo označiti sa  $\hat{M}$ . Ova matrica kupljuje (povezuje) operator kreacije na čvoru B sa operatorom anihilacije na čvoru A i obrnuto. Dakle:

$$H = -t \sum_s \frac{\nu_0}{(2\pi)^2} \int d^2\vec{k} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{s,A}^\dagger(\vec{k}) & \tilde{c}_{s,B}^\dagger(\vec{k}) \end{pmatrix} \hat{M} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{s,A}(\vec{k}) \\ \tilde{c}_{s,B}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (4.77)$$

gde je matrica  $\hat{M}$  definisana na sledeći način:

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon(\vec{k}) \\ \epsilon^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.78)$$

Da bismo dobili disperzionu relaciju potrebno je da dijagonalizujemo hamiltonijan, odnosno da dijagonalizujemo matricu  $\hat{M}$ . Ova matrica ima dve svojstvene vrednosti:

$$\lambda_{1,2} = \pm |\epsilon(\vec{k})|, \quad (4.79)$$

što znači da će ova matrica u dijagonalnom bazisu, nakon unitarne transformacije U imati oblik:

$$\hat{D} = U \hat{M} U^\dagger = \begin{pmatrix} |\epsilon(\vec{k})| & 0 \\ 0 & -|\epsilon(\vec{k})| \end{pmatrix}. \quad (4.80)$$

Iz jednačine (4.80), ako uradimo inverznu unitarnu transformaciju, sledi izraz za  $\hat{M}$ :

$$\hat{M} = U^\dagger \hat{D} U = U^\dagger \begin{pmatrix} |\epsilon(\vec{k})| & 0 \\ 0 & -|\epsilon(\vec{k})| \end{pmatrix} U. \quad (4.81)$$

Zamenjujući dobijeni izraz za matricu  $\hat{M}$  u izrazu (4.77) dobijamo dijagonalni hamiltonijan:

$$H = -t \sum_s \frac{\nu_0}{(2\pi)^2} \int d^2\vec{k} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{s,A}^\dagger(\vec{k}) & \tilde{c}_{s,B}^\dagger(\vec{k}) \end{pmatrix} U^\dagger \begin{pmatrix} |\epsilon(\vec{k})| & 0 \\ 0 & -|\epsilon(\vec{k})| \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} \tilde{c}_{s,A}(\vec{k}) \\ \tilde{c}_{s,B}(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (4.82)$$

Odakle vidimo da je disperziona relacija oblika:

$$E_\pm = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}a k_x) + 4 \cos(\frac{\sqrt{3}a}{2} k_x) \cos \frac{3a}{2} k_y} \quad (4.83)$$

Izraz (4.83) je identičan sa disperzionom relacijom koju smo dobili koristeći aproksimaciju jake veze, odnosno jednčini (4.35), kad se uzme da je  $s=0$ .

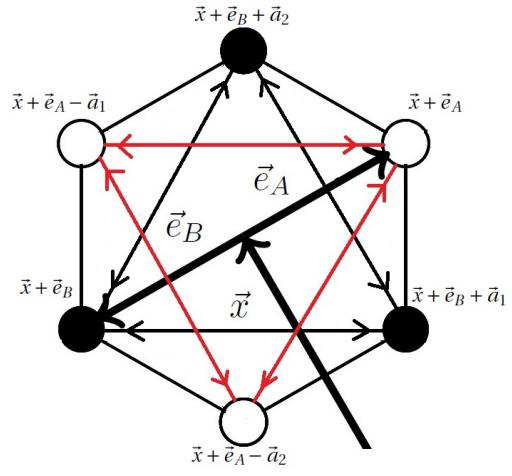
#### 4.4.2. HABARDOV MODEL ZA DRUGE NAJBLIŽE SUSEDJE

Posmatrajmo sad prelaze izmedju drugih najbližih suseda, odnosno prelaze unutar podrešetke ( $A \rightarrow A$  i  $B \rightarrow B$ ). Računanje ovih prelaza radimo jer želimo da vidimo kako interakcija izmedju drugih suseda menja disperziju u okolini Dirakovih tačaka. Hoćem da proverimo da li je i u slučaju interakcija višeg reda disperziona realacija u blizini Dirakovih tačaka linearne. Hamiltonian u kome su uključeni i prvi i drugi susedi ima oblik:

$$H = H' + H'' = -t \sum_{\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle} \sum_s [c_{\vec{x},s}^\dagger c_{\vec{y},s} + c_{\vec{y},s}^\dagger c_{\vec{x},s}] - t' \sum_{\langle\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle\rangle} \sum_s [c_{\vec{x},s}^\dagger c_{\vec{y},s} + c_{\vec{y},s}^\dagger c_{\vec{x},s}]. \quad (4.84)$$

Prvi član u izrazu (4.84) predstavlja hamiltonijan za prelaze izmedju prvih suseda i njega smo u prethodnom odeljku dijagonalizovali. Nas zanima drugi član koji opisuje prelaske elektrona izmedju drugih suseda gde  $t'$  predstavlja verovatnoću prelaza. Sa  $\langle\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle\rangle$  označeno je sumiranje po drugim najbližim susedima. Potrebno je da dijagonalizujemo  $H''$ . Kao i u prethodnom slučaju cilj nam je da sa sumiranja po drugim susedima odnosno da sa  $\langle\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle\rangle$  predjemo na sumiranje po  $\vec{x}$ . Posmatrajmo sve moguće prelaze u oba smera izmedju drugih najbližih suseda u jednom šestougaoniku. Prelazi su šematski prikazani na slici 4.6, gde smo izdvojili šestougaonik okarakterisan vektorom rešetke  $\vec{x}$ . Postoji ukupno 12 ovih prelaza. Translacijom ovog šestougaonika za vektor direktnе rešetke dobijamo sve moguće prelaze izmedju drugih suseda u kristalnoj rešetki. Time smo efektivno prešli sa sumiranja po  $\langle\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle\rangle$  na sumiranje po  $\vec{x}$ . Konačno za hamiltonijan  $H''$  dobijamo:

$$\begin{aligned} H'' = & -t' \sum_{\vec{x}} \sum_s [c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A - \vec{a}_1} + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A - \vec{a}_1}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A} + \\ & c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A - \vec{a}_2} + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A - \vec{a}_2}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A} + \\ & c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A + \vec{a}_1}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A - \vec{a}_2} + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A - \vec{a}_2}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_A + \vec{a}_1} + \\ & c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_1} + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_1}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B} + \\ & c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_2} + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_2}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B} + \\ & c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_1}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_2} + c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_2}^\dagger c_{s, \vec{x} + \vec{e}_B + \vec{a}_1}]. \end{aligned} \quad (4.85)$$



Slika 4.6: Prikaz svih mogućih prelaza izmedju drugih najbližih suseda u jednom šestougaoniku.

Koristeći Furije transformaciju (4.71), kao i izraz za Dirakovu delta funkciju u  $\vec{k}$  prostoru (4.73), dobijamo analogno kao i u slučaju interakcije sa prvim susedima izraz za

hamiltonijan u  $\vec{k}$  prostoru u obliku:

$$H'' = -t' \sum_s \frac{v_0}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k} \left[ h(\vec{k}) \tilde{c}_{s,A}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s,A}(\vec{k}) + h(\vec{k}) \tilde{c}_{s,B}^\dagger(\vec{k}) \tilde{c}_{s,B}(\vec{k}) \right], \quad (4.86)$$

gde je:

$$\begin{aligned} h(\vec{k}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{a}_2-\vec{a}_1)} + e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{a}_2-\vec{a}_1)} \\ &= 2\cos(ak_x) + 4\cos\left(\frac{a}{2}k_x\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y\right). \end{aligned} \quad (4.87)$$

Kao i u prethodnom slučaju hamiltonijan (4.86) možemo napisati u matričnom obliku:

$$H'' = -t' \sum_s \frac{v_0}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{s,A}^\dagger(\vec{k}) & \tilde{c}_{s,B}^\dagger(\vec{k}) \end{pmatrix} \hat{N} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{s,A}(\vec{k}) \\ \tilde{c}_{s,B}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (4.88)$$

gde smo definisali matricu  $\hat{N}$  kao:

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} h(\vec{k}) & 0 \\ 0 & h(\vec{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.89)$$

Vidimo da je matrica  $\hat{N}$  dijagonalna, odnosno hamiltonijan koji opisuje interakciju sa drugim susedima je već dijagonalan. Ukupan hamiltonijan je zbir hamiltonijana za prve i druge susede. Dakle:

$$H = H' + H'' = - \sum_s \frac{v_0}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{s,A}^\dagger & \tilde{c}_{s,B}^\dagger \end{pmatrix} (t\hat{M} + t'\hat{N}) \begin{pmatrix} \tilde{c}_{s,A} \\ \tilde{c}_{s,B} \end{pmatrix}, \quad (4.90)$$

gde je:

$$t\hat{M} + t'\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & t\epsilon(\vec{k}) \\ t\epsilon^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t'h(\vec{k}) & 0 \\ 0 & t'h(\vec{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t'h(\vec{k}) & t\epsilon(\vec{k}) \\ t\epsilon^*(\vec{k}) & t'h(\vec{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.91)$$

Da bismo dijagonalizovali hamiltonijan potrebno je dijagonalizovati matricu  $t\hat{M} + t'\hat{N}$ . Ova matrica ima dve svojstvene vrednosti:

$$\lambda_{1,2} = t'h(\vec{k}) \pm t|\epsilon(\vec{k})|. \quad (4.92)$$

To znači da će matrica  $t\hat{M} + t'\hat{N}$  u dijagonalnom bazisu, nakon unitarne transformacije, imati oblik:

$$D = U(t\hat{M} + t'\hat{N})U^\dagger = \begin{pmatrix} t'h(\vec{k}) + t|\epsilon(\vec{k})| & 0 \\ 0 & t'h(\vec{k}) - t|\epsilon(\vec{k})| \end{pmatrix}. \quad (4.93)$$

Imajući ovo u vidu hamiltonijan nakon dijagonalizacije postaje:

$$H = - \sum_s \frac{v_0}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{s,A}^\dagger(\vec{k}) & \tilde{c}_{s,B}^\dagger(\vec{k}) \end{pmatrix} U^\dagger \begin{pmatrix} t'h(\vec{k}) + t|\epsilon(\vec{k})| & 0 \\ 0 & t'h(\vec{k}) - t|\epsilon(\vec{k})| \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} \tilde{c}_{s,A}(\vec{k}) \\ \tilde{c}_{s,B}(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (4.94)$$

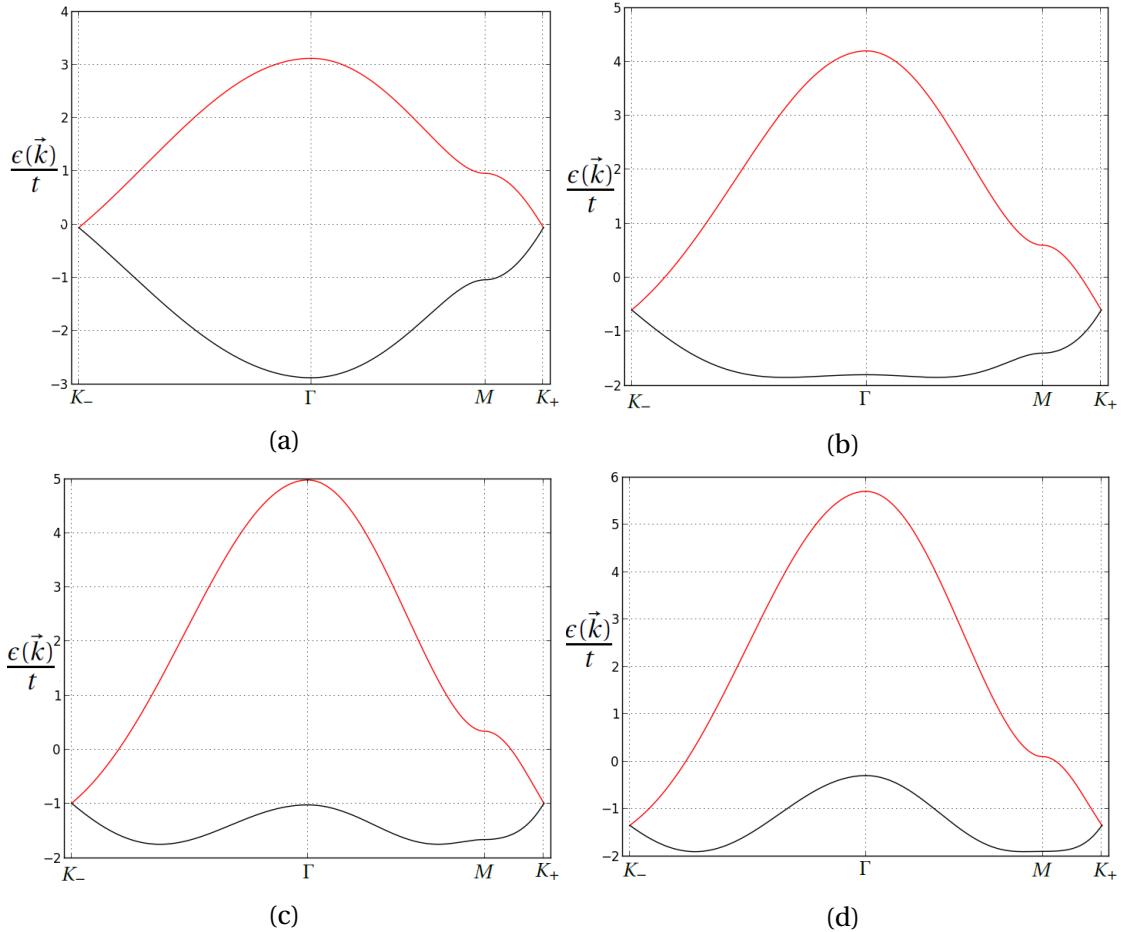
Odavde lako nalazimo disperzionu relaciju koja je jednaka:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t|\epsilon(\vec{k})| + t'h(\vec{k}) = \pm t\sqrt{3 + g(\vec{k}) - t'g(\vec{k})} \quad (4.95)$$

gde je funkcija  $g(\vec{k})$  definisana kao:

$$g(\vec{k}) = 2\cos(\sqrt{3}ak_x) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x\right)\cos\left(\frac{3a}{2}k_y\right). \quad (4.96)$$

Iz jednačine (4.95) vidimo da u slučaju  $t' = 0$  disperziona relacija prelazi u disper-



Slika 4.7: Presek disperzione relacije za pravac  $K_- \rightarrow \Gamma \rightarrow M \rightarrow K_+$ , dat na slici (4.3), za različite odnose parametara  $t'$  i  $t$ : (a)  $\frac{t'}{t} = 0.02$ , (b)  $\frac{t'}{t} = 0.2$ , (c)  $\frac{t'}{t} = 0.33$ , (d)  $\frac{t'}{t} = 0.45$

iju za najbliže susede, datu jednačinom (4.83) i prikazanu na slici 4.2. Zanimljivo je pogledati presek disperzione relacije (4.95) u pravcu  $K_- \rightarrow \Gamma \rightarrow M \rightarrow K_+$  (prikazan na slici 4.4), za različite odnose amplitude prelaza za prve i druge susede ( $\frac{t'}{t}$ ). Četiri takva preseka su prikazana na slici 4.7. Crvenom bojom je označena provodna a crnom valentna zona. Vidimo da su Dirakove tačke stabilne, odnosno temene Briluenove zone su i dalje tačke dodira provodne i valentne zone. Dodatna interakcija izmedju drugih najbližih suseda je dovela do asimetrije izmedju valentne i provodne zone koje su u slučaju  $t' = 0$  potpuno simetrične. Za odnose amplituda  $\frac{t'}{t}$  izmedju 0.02 i 0.45 moguće je i dalje linearizovati disperzionu relaciju u okolini Dirakovih tavnaka. Sa grafika se takodje vidi da kad je amplituda prelaza za druge

najbliže susede  $t'$  veća od  $\frac{t}{3}$  Fermijev nivo više nije odredjen Dirakovim tačkama, jer imamo stanja u valentnoj zoni koja imaju veću energiju od nekih stanja u provodnoj zoni. Numeričke simulacije za vrednost  $\frac{t'}{t}$  daju:  $0.02 < \frac{t'}{t} < 0.2$ , dok eksperimenti sa ciklotronskom rezonancijom daju vrednost  $\frac{t'}{t} \approx 0.04$  [7]. Zbog toga što se disperzija za vrednosti parametara dobijenih eksperimentalno i numerički, u okolini Dirakovih tačaka, kao što vidimo sa slike, ne menja drastično, obično se interakcija izmedju drugih suseda zanemaruje.

## 5. GRAFEN U MAGNETNOM POLJU

Jedan od klučnih eksperimenata u fizici grafena bilo je otkriće specifičnog, polubrojnog kvantnog Holovog efekta u garfenu[16]. Ovo otkriće je jasno ukazalo na relativističku prirodu nosilaca nanelektrisanja. Da bismo stekli dublje razumevanje ovog polubrojnog Holovog efekta u narednih nekoliko poglavljia analiziramo ponašanje Dirakovih elektrona bez mase u spoljašnjem magnetnom polju. Prvo ćemo odrediti Landauove nivoe, nakon toga prelazimo na degeneraciju dobivenih Landauovih nivoa, koja je jako vžna u opisu kvantnog Holovog efekta i na kraju dajemo kratak opis onoga šta se dešava sa grafenom u ukrštenom homogenom električnom i magnetnom polju. Takodje posmatramo i razlike izmedju grafena i standardnog dvodimenzionog gasa elektrona.

### 5.1. LANDAUOVA KVANTIZACIJA U GRAFENU

Posmatrajmo efektivni hamiltonijan u okolini  $K_+$  tačke ( $\xi = +1$ ):

$$H_K = \nu_F \begin{pmatrix} 0 & p_x + i p_y \\ p_x - i p_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Uvedimo magnetno polje koje je okomito na ravan u kojoj se nalazi grafen:

$$\vec{B} = B \cdot \vec{e}_z. \quad (5.2)$$

Da bi se opisalo kretanje elektrona u magnetnom polju impuls  $\vec{p}$  elektrona se zamjenjuje gejdž invarijantnim kinetičkim impulsom  $\vec{\Pi}$ :

$$\vec{p} \rightarrow \vec{\Pi} = \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}, \quad (5.3)$$

gde je  $e$  nanelektrisanje elektrona,  $c$  brzina svetlosti a  $\vec{A}$  vektorski potencijal. Ovo je tzv. Minimalno kuplovanje ili Pierlesova zamena. Da bi ovo važilo rastojanje izmedju čvorova rešetke mora biti mnogo manja od magnetne dužine:

$$\Lambda_B = \sqrt{\frac{c\hbar}{eB}}. \quad (5.4)$$

Za grafen je uslov da je magnetna dužina mnogo veća od rastojanja čvorova postignut za vrednosti polja od  $\sim 45T$ [7]. Pošto važi da je  $\vec{B} = \text{rot}(\vec{A})$ , postoje različiti izbori vektorskog potencijala. Najčešće korišten je tzv. Landauov gejdž:

$$\vec{A} = (-By, 0, 0). \quad (5.5)$$

Dobijamo da:

$$\begin{aligned} p_x &\rightarrow p_x - \frac{eB}{c}, \\ p_y &\rightarrow p_y. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Dakle naš efektivni hamiltonijan postaje:

$$H_K = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - \frac{eB}{c}y + ip_y \\ p_x - \frac{eB}{c}y - ip_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

Pošto hamiltonijan (5.7) komutira sa operatorom  $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ , to znači da su svojstvene funkcije operatora  $\hat{p}_x$  koje su oblika  $e^{ikx}$ , istovremeno i svojstvene funkcije operatora  $H_K$ . Zbog toga rešenja možemo tražiti u obliku:

$$\Psi(x, y) = e^{ikx} \begin{pmatrix} \phi^A(y) \\ \phi^B(y) \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

Hajde da rešimo svojstveni problem operatora (5.7):

$$v_F \begin{pmatrix} 0 & \hbar k + \hbar\partial_y - \frac{eB}{c}y \\ \hbar k - \hbar\partial_y - \frac{eB}{c}y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^A(y) \\ \phi^B(y) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi^A(y) \\ \phi^B(y) \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

Iz jednačine (5.9) lako dobijamo homogen sistem od dve jednačine sa dve nepoznate:

$$\begin{aligned} v_F \left( \hbar k + \hbar\partial_y - \frac{eB}{c}y \right) \phi^B(y) &= E\phi^A(y), \\ v_F \left( \hbar k - \hbar\partial_y - \frac{eB}{c}y \right) \phi^A(y) &= E\phi^B(y). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Ako uvedemo magnetnu dužinu:  $\Lambda_B = \sqrt{\frac{c\hbar}{eB}}$  naš sistem postaje:

$$\begin{aligned} \frac{v_F \hbar}{\Lambda_B} \left( \Lambda_B k + \Lambda_B \partial_y - \frac{y}{\Lambda_B} \right) \phi^B(y) &= E\phi^A(y), \\ \frac{v_F \hbar}{\Lambda_B} \left( \Lambda_B k - \Lambda_B \partial_y - \frac{y}{\Lambda_B} \right) \phi^A(y) &= E\phi^B(y). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Nakon smene:

$$\begin{aligned} \Lambda_B k - \frac{y}{\Lambda_B} &= \tilde{y}, \\ \partial_y = \frac{\partial \tilde{y}}{\partial y} \partial_{\tilde{y}} &= -\frac{1}{\Lambda_B} \partial_{\tilde{y}}, \end{aligned} \quad (5.12)$$

jednačine (5.11) postaju:

$$\begin{aligned} \frac{v_F \hbar}{\Lambda_B} (\tilde{y} - \partial_{\tilde{y}}) \phi^B(\tilde{y}) &= E\phi^A(\tilde{y}), \\ \frac{v_F \hbar}{\Lambda_B} (\tilde{y} + \partial_{\tilde{y}}) \phi^A(\tilde{y}) &= E\phi^B(\tilde{y}). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Ako izrazimo  $\phi^B(\tilde{y})$  iz druge od jednačina (5.13) i taj izraz iskoristimo u prvoj jednačini dobijamo izraz analogan jednačini za svojstveni problem linearog harmonijskog oscilatora:

$$(\tilde{y} - \partial_{\tilde{y}})(\tilde{y} + \partial_{\tilde{y}})\phi^A(\tilde{y}) = \frac{E^2 \Lambda_B^2}{v_F^2 \hbar^2} \phi^A(\tilde{y}). \quad (5.14)$$

Slično kao kod linearne harmonijske oscilatora uvedimo operatore kreacije i anihilacije pobudjenja:

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{y} + \partial_{\tilde{y}}), \\ \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{y} - \partial_{\tilde{y}}).\end{aligned}\quad (5.15)$$

Jednačina (5.14) prelazi u jednačinu svojstvenog problema operatora broja pobudjenja:

$$2\hat{a}^\dagger \hat{a} \phi^A(\tilde{y}) = \frac{E^2 \Lambda_B^2}{v_F^2 \hbar^2} \phi^A(\tilde{y}). \quad (5.16)$$

Iz jednačine (5.16) dobijamo da je funkcija  $\phi^A(\tilde{y})$  srazmerna svojstvenoj funkciji hamiltonijana linearne harmonijske oscilatora. Odnosno dobijamo:

$$\begin{aligned}\phi^A(\tilde{y}) &= c_1 \varphi_n(\tilde{y}), \\ n &= \frac{E^2 \Lambda_B^2}{2 v_F^2 \hbar^2},\end{aligned}\quad (5.17)$$

gde je  $c_1$  neka konstanta. Iz druge od jednačina (5.17) dobijamo izraz za energiju grafena u magnetnom polju:

$$E_n = \pm v_F \sqrt{\frac{eB\hbar}{c}} 2n = \pm \hbar \tilde{\omega}_c \sqrt{n}, \quad (5.18)$$

gde smo uveli ciklotronsnu frekvenciju  $\tilde{\omega}_c = \frac{\sqrt{2}v_F}{\Lambda_B} = \frac{v_F \sqrt{2eB}}{\hbar c}$ . Dakle dobijemo da je energija diskretna. Javljuju se tzv. Landaurovi nivoi. Uočava se jasna razlika između Landaurove kvantizacije energije u slučaju grafena i standardnog nerelativističkog 2D elektronskog gasa, opisanog Šredingerovom jednačinom, za koji važi (dodatak E):

$$E_n = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.19)$$

gde je  $\omega_c = \frac{eB}{m}$  ciklotronska frekvencija elektrona mase  $m$ , u magnetnom polju  $B$ . Glavne dve razlike koje se uočavaju između izraza za energiju nerelativističkog elektronskog gasa (5.19) i izraza za Landaurovu kvantizaciju energije u grafenu (5.18) su:

- Landaurovi nivoi u grafenu nisu ekvidistantni kao u slučaju elektronskog gasa. To se dešava zbog kvadratnog korena koji se javlja u jednačini (5.16)
- ciklotronska frekvencija u slučaju elektronskog gasa je linearno zavisna od magnetsnog polja, dok u slučaju grafena važi:

$$\tilde{\omega}_c \sim \sqrt{B}. \quad (5.20)$$

Ove razlike su posledica pojave efektivnog relativističkog ponašanja elektrona u grafenu. U jednačini (5.17)  $\varphi_n(\tilde{y})$  je svojstvena funkcija operatora broja pobudjenja, a

samim tim i hamiltonijana linearog harmonijskog oscilatora, dok je  $n$  broj pobudjenja. Funkciju  $\phi^B(\tilde{y})$  dobijamo iz druge jednačine iz sistema (5.13):

$$\begin{aligned} \frac{\nu_F \hbar}{\Lambda_B} (\tilde{y} + \partial_{\tilde{y}}) \phi^A(\tilde{y}) &= E \phi^B(\tilde{y}), \\ \frac{\nu_F \hbar}{\Lambda_B} \sqrt{2} \hat{a} \phi^A(\tilde{y}) &= E \phi^B(\tilde{y}), \\ \hat{a} \phi^A(\tilde{y}) &= \frac{\Lambda_B E}{\nu_F \hbar \sqrt{2}} \phi^B(\tilde{y}). \end{aligned} \quad (5.21)$$

Pošto je  $\phi^A = c_1 \varphi_n(\tilde{y})$  i važi  $\hat{a} \varphi_n = \sqrt{n} \varphi_{n-1}$  dobijemo:

$$\frac{\Lambda_B E}{\nu_F \hbar \sqrt{2}} \phi^B(\tilde{y}) = c_1 \sqrt{n} \varphi_{n-1}(\tilde{y}), \quad (5.22)$$

odakle sledi, nakon zamene  $\sqrt{n} = \pm \frac{E \Lambda_B}{\sqrt{2} \nu_F \hbar}$ , da je funkciju  $\phi^B(\tilde{y})$  oblika:

$$\phi^B(\tilde{y}) = \pm c_1 \varphi_{n-1}(\tilde{y}). \quad (5.23)$$

U slučaju  $n = 0$  postoji samo A komponenta, odnosno  $\phi^A = c_1 \varphi_0(\tilde{y})$ , dok je po definiciji  $\phi^B = a \phi^A = a \varphi_0 = 0$ . Uzimajući ovo u obzir konačno rešenje je oblika:

$$\begin{aligned} \Psi_{n,k}^K(x, y) &= c_1 e^{ikx} \begin{pmatrix} \varphi_n(\tilde{y}) \\ \pm \varphi_{n-1}(\tilde{y}) \end{pmatrix}, \\ \Psi_{n=0,k}^K(x, y) &= c_1 e^{ikx} \begin{pmatrix} \varphi_0(\tilde{y}) \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Iz uslova normiranja lako dobijemo konstantu  $c_1$ :

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & \text{za } n \neq 0, & \text{i} \\ c_1 &= 1, & \text{za } n = 0. & \end{aligned} \quad (5.25)$$

Oba rešenja možemo kombinovati u jedan izraz:

$$\begin{aligned} \Psi_n^{K+}(x, y) &= c_n e^{ikx} \begin{pmatrix} \varphi_n(\tilde{y}) \\ \pm \varphi_{n-1}(\tilde{y}) \end{pmatrix} \\ c_n &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} & n \neq 0 \\ 1 & n = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (5.26)$$

Potpuno analogno dobijamo rešenje za i za  $K_-$  tačku:

$$\Psi_n^{K-}(x, y) = c_n e^{ikx} \begin{pmatrix} \mp \varphi_{n-1}(\tilde{y}) \\ \varphi_n(\tilde{y}) \end{pmatrix}, \quad (5.27)$$

gde je konstanta  $C_n$  ista kao i u jednačini (5.26).

## 5.2. DEGENERACIJA LANDAUOVIH NIVOA

U prethodnom odeljku smo videli da magnetno polje normalno na ravan grafena dovodi do pojave Landauove kvantizacije. Kao što vidimo iz jednačine (5.18) energija elektrona u grafenu u megnetnom polju zavisi od kvantnog broja  $n$ , medjutim iz jednačine (5.23) vidimo da funkcije stanja zavise i od kvantnog broja  $k$  (talasni vektor u smeru  $x$ ) i od  $n$ . Vidimo da imamo degeneraciju, odnosno za svaki Landauov nivo imamo onoliko degenerisanih stanja koliko imamo različitih kvantnih brojeva  $k$ . Da bismo odredili kolika je degeneracija posmatrajmo uzorak grafena širine  $L_y$  i dužine  $L_x$ . Funkcije stanja linearног harmonijskog oscilatora koje se javljaju u jednačinama (5.24) su oblika:

$$\varphi_n(\tilde{y}) \sim e^{-\frac{\tilde{y}^2}{2}} H_n(\tilde{y}) = e^{-\frac{(\Lambda_B^2 k - y)^2}{2\Lambda_B^2}} H_n\left(\frac{\Lambda_B^2 k - y}{\Lambda_B}\right), \quad (5.28)$$

gde su  $H_n(\tilde{y})$  Ermitovi polinomi. Ove funkcije predstavljaju oscilacije oko ravnotežnog položaja datog sa:

$$Y_o = k\Lambda_B^2. \quad (5.29)$$

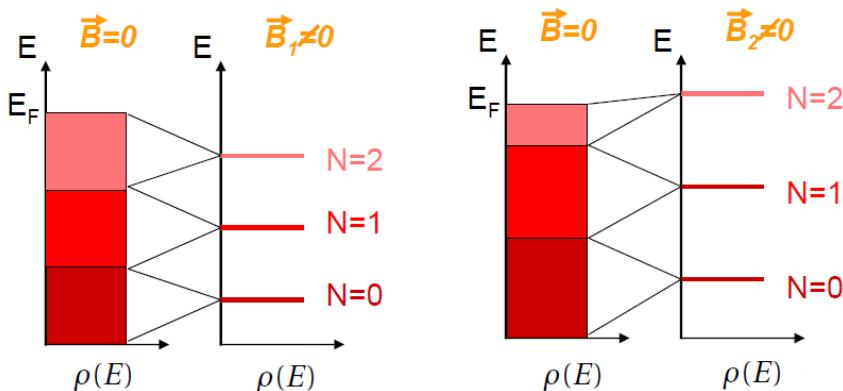
Pošto smo ograničili uzorak u  $y$  pravcu dobijamo da je  $0 < Y_0 < L_y$ , a samim tim dobijamo i  $0 < k < \frac{L_y}{\Lambda_B^2}$ . Takođe zbog ograničenosti uzorka u  $x$  pravcu,  $k$ , je kvantovano:  $k = \frac{2\pi}{L_x} m$ , odnosno razlika izmedju dva  $k$  stanja je:

$$\delta k = \frac{2\pi}{L_x}. \quad (5.30)$$

Ukupan broj stanja  $k$  dobijamo kao:

$$N = \frac{\frac{L_y}{\Lambda_B^2}}{\frac{2\pi}{L_x}} = \frac{BL_x L_y}{\frac{hc}{e}} = \frac{BL_x L_y}{\Phi_0} = N_\Phi, \quad (5.31)$$

gde smo uveli kvant fluksa kao  $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$  i dobili da je ukupan broj Landauovih stanja koji odgovaraju istoj energiji jednak broju kvanata fluksa koji prolaze kroz uzorak.



Slika 5.1: Šematski prikaz Landauove kvantizacije za dve vrednosti polja  $B_1 < B_2$ . Prikazana je gustina stanja u zavisnosti od energije. Vidimo da je u odsustvu polja spektar kontinualan dok se uvedenjem polja spektar postaje diskretan.

Definišimo tzv. faktor punjenja  $v$  koji nam govori koliko je Landauovih nivo popunjeno:

$$v = \frac{N_e}{N_\Phi} = \frac{n_e}{n_\Phi}, \quad (5.32)$$

gde smo sa  $N_e$  označili ukupan broj elektrona u uzorku. Dakle faktor punjenja predstavlja odnos broja elektrona i broja stanja koji mogu biti zauzeti tim elektronima. Za celobrojne vrednosti faktora punjenja imamo kompletno pune Landauove nivoe. Na slici 5.1 je šematski prikazano kako se menja degeneracija Landauovih nivoa sa promenom magnetnog polja. Za vrednosti polja  $B_1$  svi Landauovi nivoi su popunjeni dok za vrednosti polja  $B_2 > B_1$ , degeneracija se povećava, samim tim i broj elektrona koje možemo smestiti na jedan Landauov nivo, tako da poslednji nivo ( $N=2$ ) ostaje delimično popunjen. Ova promena degeneracije sa promenom magnetnog polja je ključna za opis Kvantnog Holovog efekta u grafenu.

### 5.3. PARALELNO ELEKTRIČNO POLJE U GRAFENU

Uvodjenjem spoljašnjeg električnog polja  $\vec{E} = E\hat{e}_y$  paralelnog sa uzorkom a normalnog na magnetno polje i orijentisanog duž y ose, efektivnom hamiltonijanu u grafenu se dodaje dodatni član oblika:

$$-eV\hat{I} = -eEy\hat{I}, \quad (5.33)$$

gde je  $V$  potencijal, uvedenog spoljašnjeg električnog polja, a  $\hat{I}$  je  $2 \times 2$  jedinična matrica. Efektivni hamiltonijan postaje:

$$H = v_F \begin{pmatrix} \frac{-eEy}{v_F} & p_x + i p_y - \frac{e}{c} B y \\ p_x - i p_y - \frac{e}{c} B y & \frac{-eEy}{v_F} \end{pmatrix}. \quad (5.34)$$

Translaciona invarijantnost duž pravca x je očuvana tako da možemo da pišemo:

$$\Psi(x, y) = e^{ikx} \phi(y). \quad (5.35)$$

Za jednačinu svojstvenog problema dobijamo:

$$v_F \begin{pmatrix} \frac{-eEy}{v_F} & \hbar k + i p_y - \frac{e}{c} B y \\ \hbar k - i p_y - \frac{e}{c} B y & \frac{-eEy}{v_F} \end{pmatrix} \phi(y) = \epsilon \phi(y). \quad (5.36)$$

Rešavanjem ovog svojstvenog problema dobija se energija elektrona u grafenu u ukrštenom magnetnom i električnom polju i ona ima oblik[8]:

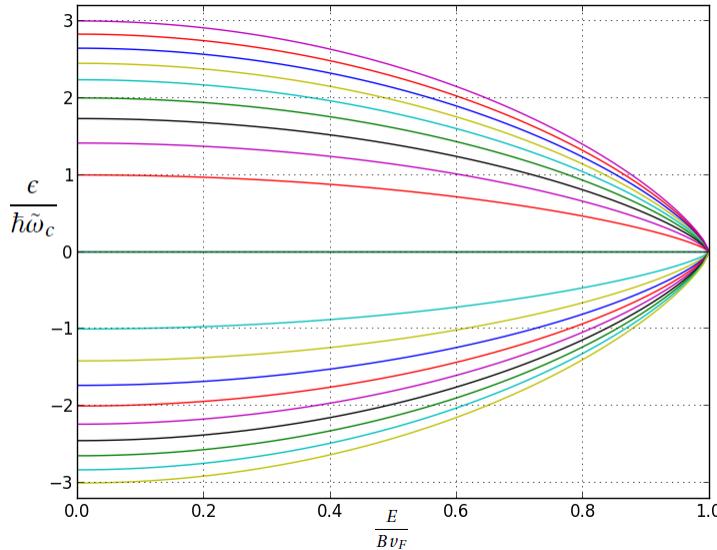
$$\epsilon(n, k) = -eE\Lambda_B^2 k \mp \hbar\Omega_c \sqrt{n}, \quad (5.37)$$

gde je sa:

$$\Omega_c = \sqrt{2} \frac{v_F}{\Lambda_B} \left(1 - \frac{E^2}{B^2 v_F^2}\right)^{\frac{3}{4}}. \quad (5.38)$$

označena nova ciklotronska frekvencija.

Vidimo da je uvodjenjem električnog polja degeneracija Landauovih nivoa uklonjena jer energija sad zavisi i od kvantnog broja  $k$ . Opet se primećuje velika razlika u



Slika 4.1: Prvih deset Landauovih nivoa u funkciji od  $\frac{E}{Bv_F}$

odnosu na standardni 2D gas elektrona za koji dodatno električno upolje uvodi samo pomeraj u energiji (videti Dodatak E):

$$\epsilon(n, k) = -eE\Lambda_B^2 k - \frac{e^2 E^2 \Lambda_B^2}{2\hbar\omega_c} + \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}). \quad (5.39)$$

U slučaju grafena električno polje pored pomeranja u energetskih nivoa, dovodi i do reparametrizacije ciklotronske frekvencije koja teži  $\tilde{\omega}_c$  kad  $E \rightarrow 0$ . Za vrednosti polja  $|E| = |B|\hbar v_F$  dolazi do kolapsa Landauovih nivoa. Na slici 4.1 je prikazano prvih deset Landauovih nivoa u zavisnosti od  $\frac{E}{Bv_F}$ . Vidi se da rešenja postoje samo za  $\frac{E}{Bv_F} \leq 1$ . Za vrednosti  $\frac{E}{Bv_F} \geq 1$  energija postaje imaginarna i rešenje više ne važi. Takođe sa gornje slike se vidi da rastojanje izmedju Landauovih nivoa nije konstantno. To je zbog toga važi da je energija proporcionalna kvadratnom korenu iz kvantnog broja  $n$ , tj.  $E_n \sim \sqrt{n}$ .

## 6. KVANTNI HOLOV EFEKAT

Kvantni Holov efekat je jedan od najznačajnijih fenomena u fizici kondenzovanog stanja, otkrivenih u drugoj polovini 20. veka. Efekat se javlja u dvodimenzionom elektronском gasu (2DEG) pod uticajem jakih magnetnih polja. Manifestuje se kao nestajanje longitudinalne otpornosti uzorka:

$$\rho_{xx} = 0, \quad (6.1)$$

i kvantovanja njegove transverzalne, odnosno Holove otpornosti:

$$\rho_{xy} = \frac{1}{n} \left( \frac{h}{e^2} \right). \quad (6.2)$$

Ona više nije linearno zavisno od jačine magnetnog polja već pokazuje platoe za odredjene vrednosti magnetnog polja. Kvantizacija Holove provodljivosti je univerzalan fenomen, odnosno ne zavisi od osobina uzorka niti od njegove geometrije i što je najvažnije ne zavisi ni od koncentracija nečistoća u uzorku i od njihove raspodele. Ova univerzalnost je razlog za ogromnu preciznost u merenju kvantizacije Holove otpornosti i od 1990 godine se koristi kao standard otpornosti, kao i za merenje konstante fine stukture, jako važne konstante u kvantnoj elektrodinamici. Postoje dve vrste Kvantnog Holovog efekta:

- celobrojni kvantni Holov efekat (IQHE) za vrednosti  $n$  koje su celi brojevi. Otkrili su ga 1980 godine K. v. Klitzig, G. Dorda i M. Pepper [11]. Za ovo otkriće K. v. Klitzig je dobio Nobelovu negradu 1985 godine
- frakcioni Holov efekat (FQHE), gde  $n$  uzima racionalne vrednosti odnosno  $n$  nije više celi broj. Ovaj efekat su 1983. godine otkrili D.C. Tsui, H.L. Stormer i A.C. Gossard [12] koji su uočili kvantovan Holovu otpornost sa  $n = \frac{1}{3}$ .

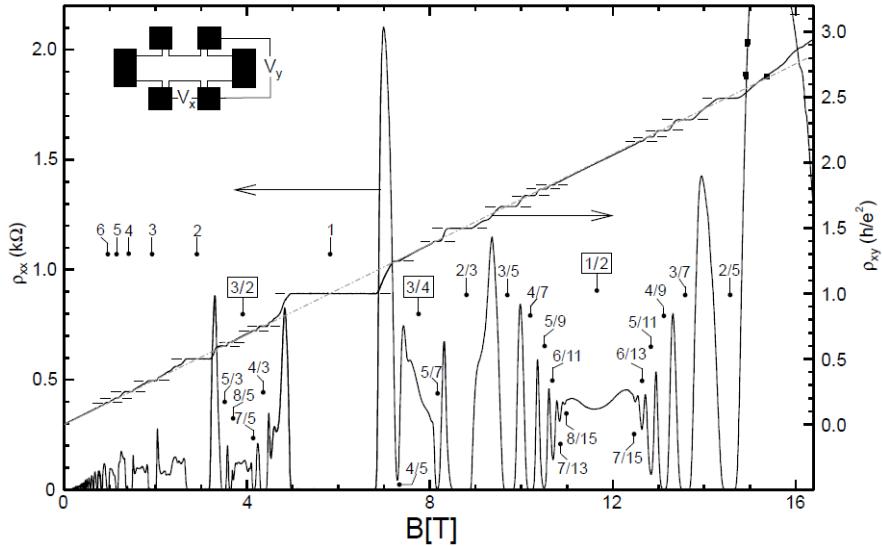
U nastavku poglavlja prvo ćemo napraviti kratak osvrt na klasični Holov efekat, a nakon toga prelazimo na IQHE i na kraju dajemo opis anomalnog IQHE za grafen, koji se javlja kao posledica pojave bezmasnih Dirakovih fermiona u grafenu. Frakcioni Holov efekat u čijoj osnovi leže jake elektronske korelacije koje se javljaju kad su Landauovi nivoi delimično popunjeni, nećemo razmatrati jer to izlazi iz okvira ovog rada.

### 6.1. KLASIČNI HOLOV EFEKAT

Klasični Holov efekat je otkriven nekih sto godina pre otkrića kvantnog Holovog efekta, kada je 1879. godine Edvin Herber Hol pokazao da je za tanke metalne ploče u ukrštenom magnetnom i električnom polju, transverzalna otpornost, nazvana Holova otpornost, linearno zavisna od jačine magnetnog polja:

$$R_H = \frac{B}{qn_{el}}. \quad (6.3)$$

Ovde je  $q$  nalektrisanje nosilaca ( $q = -e$  za elektrone), a  $n_{el}$  je gustina nosilaca nalektrisanja. Uzrok pojavi transverzalne otpornosti je Lorencova sila koja menja putanju



Slika 6.1: Prikaz kvantnog Holovog efekta na kojoj se jasno vide platoi u Holovoj otpornosti. Za svaki plato u Holovoj otpornosti, longitudinalna otpornost je jednaka nuli. brojevi označavaju nivoje. Ako je broj celi onda je u pitanju celobrojni Holov efekat (IQHE), a ako je broj oblika:  $n = \frac{p}{q}$  gde su  $p$  i  $q$  celi brojevi onda je reč o frakcionoom Holovom efektu (FQHE)

elektrona. Klasični Holov efekat se i danas koristi u teoriji materijala za određivanje prirode nosilaca nanelektrisanja. Pojava klasičnog Holovog efekta može se razumeti u okviru Drude-ovog modela difuznog transporta u metalima. U ovom modelu se posmatraju nezavisni nosioci nanelektrisanja, čiji impulsi zadovoljavaju jednačinu:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -e \left( \vec{E} + \frac{\vec{p}}{m_b} \times \vec{B} \right) - \frac{\vec{p}}{\tau}. \quad (6.4)$$

Poslednji član u jednačini opisuje rasejavanje nosilaca nanelektrisanja na nečistoćama u uzorku,<sup>5</sup> sa karakterističnim vremenom relaksacije  $\tau$ . Makroskopse osobine sistema dobijamo iz stacionarnog rešenja jednačine (6.4), odnosno kad je  $\frac{d\vec{p}}{dt} = 0$ . Dobijamo:

$$\begin{aligned} eE_x &= -\frac{1}{\tau} p_x - \frac{eB}{m_b} p_y, \\ eE_y &= \frac{eB}{m_b} p_x - \frac{1}{\tau} p_y. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Jednačina (6.5) se može zapisati matrično:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau e} & -\frac{B}{m_b} \\ \frac{B}{m_b} & -\frac{1}{\tau e} \end{pmatrix} \vec{p}. \quad (6.6)$$

Ako iskoristimo relaciju za gustinu struje  $\vec{j} = -\frac{en_{el}}{m_b} \vec{p}$ , jednačina (6.6) prelazi u:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} -\frac{m_b}{e^2 n_{el} \tau} & -\frac{B}{en_{el}} \\ \frac{B}{en_{el}} & -\frac{m_b}{e^2 n_{el} \tau} \end{pmatrix} \vec{j} = \hat{\rho} \vec{j}, \quad (6.7)$$

<sup>5</sup>Ovaj član je analogan otporu sredine u mehanici fluida, i može se posmatrati kao nekakav "otpor" metala kretanju nosilaca nanelektrisanja.

gde je  $\rho$  tenzor otpornosti. Iz jednačine (6.7) dobijamo izraz za Holovu provodnost, kao vandijagonalne elemente tenzora otpornosti:

$$\rho_H = \frac{B}{en_{el}} = \frac{\omega_c \tau}{\sigma_o}. \quad (6.8)$$

Ovde smo uveli ciklotronsku frekvenciju kao  $\omega_c = \frac{eB}{m_b}$ , i Drude provodljivost kao  $\sigma_0 = \frac{n_{el} e^2 \tau}{m_b}$ .

## 6.2. IQHE U NERELATIVISTIČKOM SLUČAJU

U poglavlju 5.3 smo videli kako se ponašaju elektroni u ukrštenom homogenom magnetnom i električnom polju. Videli smo da u u slučaju nerelativističkog elektronskog gasa uključivanje paralelnog električnog polja u  $\hat{y}$  pravcu dovodi do pomeraju u energiji i do dizanje degeneracije sa Landauovih nivoa (jednačina E.17). Energija zavisi od talasnog vektora u pravcu  $x$ , odnosno od pozicije ravnotežnog položaja kvantnog linearног harmonijskog oscilatora preko relacije  $Y_0 = k\Lambda_B^2$ . Brzinu elektrona u  $x$  pravcu dobijamo kao:

$$\langle v_x \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial k} = c \frac{E}{B} = \bar{v}. \quad (6.9)$$

Jednačina (6.9) predstavlja brzinu drifta centara rotacije. Struju dobijamo tako što izraz za brzinu drifta pomnožimo sa  $-e$ , odnosno za srednju vrednost struje dobijamo:

$$\langle j_x \rangle = -en_e \bar{v}. \quad (6.10)$$

U gornjoj relaciji smo sa  $n_e$  označili koncentraciju elektrona. Dakle, dobijamo struju normalno na pravac električnog i magnetnog polja. Jednačinu (6.10) možemo drugačije napisati ako iskoristimo izraz za faktor punjenja, (izraz (5.32) u prethodnom odeljku):

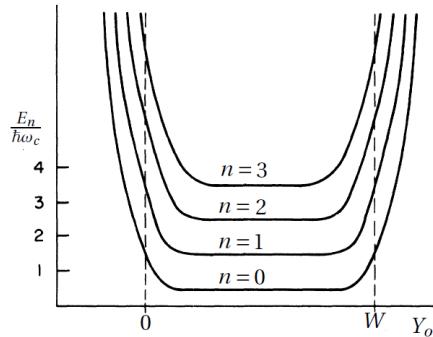
$$\langle j_x \rangle = -ec \frac{E}{B} v n_\phi = v \frac{e^2}{h} E. \quad (6.11)$$

Iz gornje jednačine nalazimo da je Holova otpornost jednaka:  $\rho_{xy} = \frac{h}{ve^2}$ , što je slično izrazu (6.2). U relaciji (6.11) ništa nas ne ograničava da uzmemo bilo koje vrednosti za faktor punjenja, međutim, u merenju kvantnog Holovog efekta jasno se dobijaju platoi za celobrojne vrednosti ovog faktora. To znači da prethodno razmatranje ne može da objasni pojavu ovih platoa kao ni celobrojne vrednosti za  $\rho_{xy}$ . Takodje za vrednosti polja za koje imamo platoe u Holovoj otpornosti longitudinalna otpornosti bi trebalo da je nula, dobijajući konačne vrednosti tek ne prelazima izmedju platoa. O longitudinalnoj otpornosti iz izraza ne možemo zaključiti ništa jer je struja u  $\hat{y}$  pravcu nula a električno polje u pravcu  $\hat{x}$  takodje ne postoji. Potrebno je promeniti pristup problemu. Da bismo razumeli kako se javlja IQHE moramo preći sa dosadašnjeg razmatranje koje važi za idealan uzorak, odnosno onaj koji nije ograničen i koji se nalazi u homogenom električnom polju na realističniju sliku uzorka ograničene dužine, sa nečistoćama, odnosno neuredjenostima. Da bi modelirali ovakav uzorak uvodimo tzv. ograničavajući potencijal (eng. confinement potential)  $V_{conf}(y)$  koji ograničava širinu ( $W$ ) uzorka i koji zavisi od koordinate  $y$ .

Dakle i dalje važi da je translaciona simetriju duž pravca  $\hat{x}$  održana. Za dužinu ( $L$ ) uzimamo da je monoga veća od širine uzorka. Uvodjenjem ograničavajućeg potencijala dobijamo da je energetski spektar dat sa:

$$\epsilon_{n,k} = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) + V(k\Lambda_B^2). \quad (6.12)$$

Ovaj izraz ima isti oblik kao izraz (E.15), u dodatku E.<sup>6</sup> Možemo reći da se Landauovi nivoi "savijaju na gore" kao na slici 6.2.



Slika 6.2 :Izgled Landauovih nivoa u spoljašnjem ograničavajućem potencijalu  $V_{conf}(y)$

Određivanje struje i Holovog napona radimo u tzv. Landauerovom formalizmu[14] (videti dodatak F) u kojem posmatramo struju koja prolazi kroz uzorak i na osnovu nje određujemo napon i električno polje. Struju dobijamo iz dva rezervoara na potencijalima  $\mu_1$  i  $\mu_4$ , kao što je prikazano na slici 6.3, između kojih se nalazi uzorak. Uzorak se posmatra kao zona u kojoj se rasejavaju elektroni. U ovom pristupu struja koja potiče od jednog kompletno popunjenoj Landauovog nivoa na niskim temperaturama je

$$I_n = -\frac{e}{L} \sum_k \langle n, k | v_x | n, k \rangle = -\frac{e}{L} \sum_k \langle v_x \rangle, \quad (6.13)$$

gde suma ide po svim stanjima  $k$  koji se nalaze u jednom Landauovom nivou. Srednju vrednost brzine dobijamo kao i u jednačini (6.9) ali sada primećujemo, posmatrajući sliku 6.2 da je na gornjoj ivici uzorka ova brzina pozitivna, jer na tom rubu energija raste sa  $k$ , odnosno  $Y_0$ , dok je na donjoj ivici brzina negativna jer energija opada sa porastom  $k$ . U sredini uzorka brzina je jednaka nuli jer nemamo disperzije za sredinu uzorka. Tako da slika koju dobijamo je da imamo rubne kanale koji provode struju i to u različitim smerovima, dok u središtu uzorka nema struje. Pošto  $k$  uzima diskretne vrednosti:  $k = \frac{2\pi}{L} m$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$ , za brzinu u pravcu  $\hat{x}$  možemo pisati:

$$\langle v_x \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{n,k}}{\partial k} = \frac{L}{2\pi\hbar} \frac{\Delta \epsilon_{n,m}}{\Delta m}. \quad (6.14)$$

Stavljujući da je  $\Delta m = 1$  dobijamo:

$$\langle v_x \rangle = \frac{L}{\hbar} (\epsilon_{n,m+1} - \epsilon_{n,m}). \quad (6.15)$$

Nakon ubacivanja izraza (6.15) u jednačinu za struju (6.13) dobijamo:

$$I_n = -\frac{e}{\hbar} \sum_m (\epsilon_{n,m+1} - \epsilon_{n,m}). \quad (6.16)$$

<sup>6</sup>U jednačini (E.15) smo imali homogeno električno polje pa smo dobili da je

$$V(k\Lambda_B^2) = -k\Lambda_B^2 eE - \frac{1}{2} \frac{(eE)^2}{m\omega_c^2}.$$

U slučaju nehomogenog potencijala zavisnost od  $k$  je drugčijeg oblika.

Primetimo da u sumi u jednačini (6.16) svi članovi se potiru osim graničnih članova  $\epsilon_{n,m_{min}}$  i  $\epsilon_{n,m_{max}}$  koji odgovaraju hemijskim potencijalima  $\mu_{min}$  i  $\mu_{max}$  respektivno. Razlika izmedju ova dva hemijska potencijala se može izraziti pomoću napona izmedju gornje i donje ivice uzorka:

$$\mu_{max} - \mu_{min} = -eV. \quad (6.17)$$

Ovaj napon je upravo Holov napon. Pomoću njega dobijamo konačan rezultat:

$$I_n = -\frac{e}{h}(\mu_{max} - \mu_{min}) = \frac{e^2}{h} V \quad (6.18)$$

Dakle, dobijamo da je provodljivost jednog Landauovog nivoa:  $G_n = \frac{e^2}{h}$ . Ako imamo  $n$  pounjenih Landauovih nivoa dobijamo da ju ukupna provodljivost data sa:  $G = n \frac{e^2}{h}$ , odakle dobijamo izraz za Holovu otpornost:

$$R_H = G^{-1} = \frac{h}{ne^2}. \quad (6.19)$$

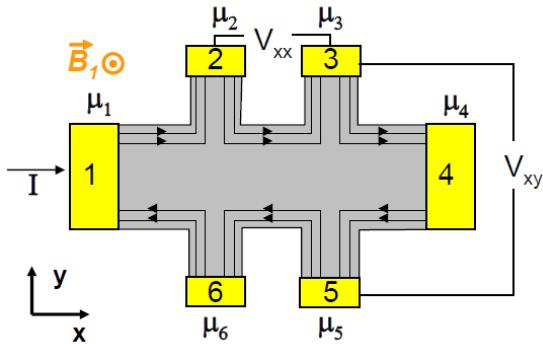
U okviru Landauerovog formalizma, za provodljivost jednog kanala se dobija:

$$G_n = \frac{e^2}{h} T_n, \quad (6.20)$$

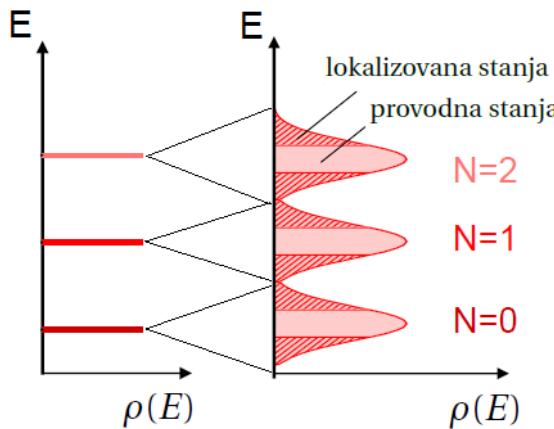
gde je  $T_n$  verovatnoća transmisije kanala.

Vidimo da se Landauovi nivou u okviru ovog formalizma mogu posmatrati kao provodni kanali sa savršenom transmisijom odnosno  $T_n = 1$ . Ovo je i razumljivo s obzirom na to da su jedina provodna stanja ona stanja koja se nalaze na gornjoj i donjoj ivici uzorka a ta stanja su hiralna, odnosno elektroni u tim stanjima se kreću u suprotnim pravcima. Jedini način da se transmisija smanji je putem rasejanja unazad (eng. backscattering). Rasejanje unazad bi podrazumevalo da se elektron koji se kreće, recimo nadesno, raseje i predje u provodno stanje koje se kreće na levo.

Medjutim provodna stanja koja se kreću nalevo i nadesno su, kao što smo videli, prostorno razdvojena tako da su takvi prelazi jako malo verovatni i time se objašnjava savršena transmisija. Geometrija u kojoj se meri Holov efekat je prikazana na slici 6.3. Na slici se vidi merenje Halovog napona u tzv. šest-terminalnom mernju (eng. six-terminal measurement), gde su sa brojevima 1 i 4 dati rezervoari koji "ubacuju" elektrone u uzorak, odnosno kreiraju struju dok se longitudinalni napon ( $V_{xx}$ ) meri izmedju terminala 2 i 3 a Holov napon ( $V_{xy}$ ) se meri izmedju terminala 3 i 5. Vidimo da kad imamo hiralna, rubna, provodna stanja da je longitudinalni napon jednak nuli jer su hemijski potencijali  $\mu_3$  i  $\mu_2$  jednaki sa potencijalom rezervoara  $\mu_1$  što znači da nema pada napona.



Slika 6.3: Geometrija u kojoj se meri Holov napon.



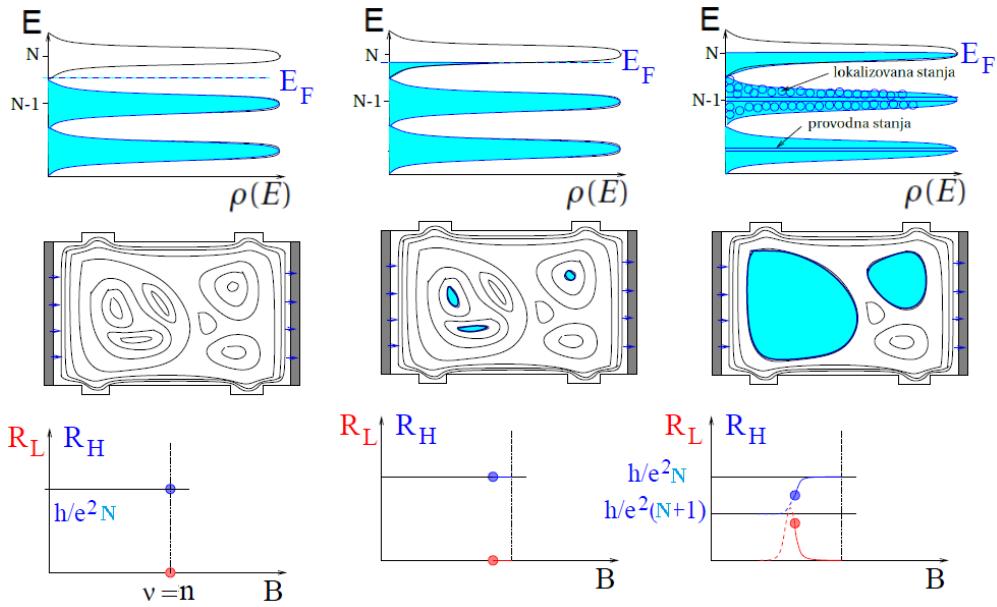
Slika 6.4: Širenje Landauovih nivoa pod uticajem nečistoća.

Na rubovima uzorka i dalje imamo provodna stanja koja se javljaju zbog ograničavajućeg potencijala, i koja se nazivaju produženim stanjima. Landauovi nivoi su zbog uticaja ovih nečistoća rašireni, odnosno grafik gustine stanja nije više niz Dirakovih delta funkcija. Provodna stanja se nalaze u sredini Landauovih nivoa dok se lokalizovana stanja nalaze na rubovima Landauovih nivoa, što je šematski prikazano na slici 6.4. Promenom magnetnog polja menja se degeneracija i razmak izmedju Landauovih nivoa, odnosno menja se položaj Fermijevog nivoa u odnosu na Landauove nivoe. Neka se isprva Fermijev nivo nalazi izmedju N-1 i N-tog Landauovog nivoa. U tom slučaju je popunjeno celih N Landauovih nivoa. Holova otpornost je data sa:

$$R_H = \frac{h}{Ne^2}, \quad (6.21)$$

dok je longitudinalan otpornost jednaka nuli. Smanjimo sada magnetno polje, degeneracija Landauovih nivoa se menja a sa tim i broj dostupnih stanja elektrona unutar jednog Landauovog nivoa, odnosno dolazi do podizanja Fermijevog nivoa i do popunjavanja sledećeg Landauovog nivoa. Prva na redu za popunjavanje su lokalizovana stanja, odnosno elektroni bivaju lokalizovani oko nečistoća. Ova stanja ne doprinose provođenju pa se ne menja ni Holova, a ni longitudinalnu otpornost. Dalje smanjivanje magnetnog polja dovodi do toga da se lokalizovani elektroni nalaze na ekvipotencijalnim linijama koje imaju dovoljno velik radijus da povežu suprotne ivice uzorka. Ovo dovodi do struje izmedju gornjeg i donjeg ruba uzorka, što smanjuje Holovu otpornost. Ova rubna stanja su, kao što smo videli, hiralna. Odnosno elektroni u njima se kreću uvek u istom pravcu. Elektroni koji prelaze izmedju gornje ivice gde je smer struje na desno na donjoj ivici bivaju raseđani unazad prema levom kontaktu i time se smanjuje struja koja ide od desnog do levog kontakta a samim tim se povećava longitudinalan otpornost. Dosadašnje razmatranje je šematski prikazano na slici 5.5, gde vidimo kako se menja položaj Fermijevog nivoa sa smanjenjem magnetnog polja. U drugom redu na slici je prikazano kako elektroni popunjavaju lokalizovana stanja sve dok domeni popunjeni elektronima ne budu dovoljno veliki da mogu da povežu gornju i donju ivicu uzorka. U donjem redu na slici 5.5 se vidi kako se menja Holova i longitudinalan otpornost. Vidimo da dok god se popunjavaju lokalizovana stanja Holova kao i longitudinalna otpornost su konstantne. Promena se dešava tek kad se počnu popunjavati provodna stanja.

Da bi objasnili pojavu platoa u grafiku Holove otpornosti, za koju smo pokazali da je kvantovana (jednačina 6.20), odnosno da bi objasnili pojavu da se Holova otpornost ne menja u određenom intervalu vrednosti magnetnog polja moramo uključiti u naše razmatranje i nečistoće u uzorku. Može se pokazati da bi lokalni elektrostaticki potencijal u okolinama ovih nečistoća doveo do toga da se centri rotacije elektrona kreću paralelno u odnosu na ekvipotencijalne površine koje obrazuju ove nečistoće. To znači da bi došlo do pojave lokalizovanih stanja u unutrašnjosti uzorka. Na



Slika 6.5: šematski prikaz Holovog efekta. U prvom redu su prikazani Landauovi nivoi, prošireni lokalizovanim stanjima koja se javljaju zbog nečistoća. U drugom redu vidimo kako se menja okupiranost lokalizovanih stanja sa smanjenjem magnetnog polja, plavi delovi su delovi okupirani elektronima. U poslednjem redu vidimo kako se menjaju otpornosti, odnosno kako dolazi do pojave platoa u grafiku Holove otpornosti.

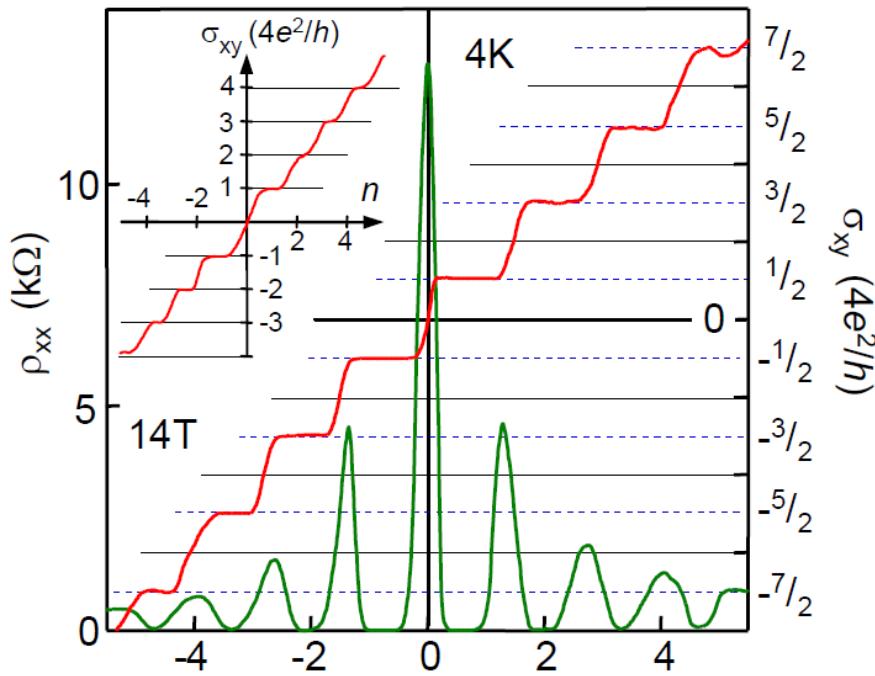
### 6.3. ANOMALNI KVANTNI HOLOV EFEKAT U GRAFENU

U odeljku 4.3 smo videli da su nosioci nanelektrisanja u grafenu opisani preko dvodimenzione Dirakove jednačine za čestice bez mase. To, kao što smo videli ima za posledicu drugačije ponašanje grafena u magnetnom polju od standardnog dvodimenzionog, nerelativističkog, elektronskog gasa. Landauovi nivoi u grafenu nisu ekvidistantni, a njihova energija je data sa (jednačina (5.18)):

$$E_n = \pm v_F \sqrt{\frac{eB\hbar}{c}} 2n = \pm \hbar \tilde{\omega}_c \sqrt{n}. \quad (6.22)$$

Znak ispred korena odgovara različitim nosiocima nanelektrisanja (pozitivan znak za elektrone, a negativan za šupljine). Za razliku od 2DEG-a u grafenu postoji nivo za koji je energija jednaka nuli. To je nivo  $n = 0$ . Ovaj nivo je popunjen pola elektronama a pola šupljinama. Zbog toga se u grafenu prvi plato u Holovoj otpornosti javlja već za faktor punjenja:  $v = \frac{1}{2}$ . Za ostale nivoe iznad nultog važi sve isto kao i kod elektronskog gasa, za koji smo razmatrali Holov efekat u prethodnom odeljku. Tako da je jedini uticaj ovog nultog nivoa, pomeranje za  $\frac{1}{2}$  faktora punjenja za koje se dešavaju Holovi platoi u odnosu na 2DEG. Setimo se da su se platoi, u slučaju nerelativističkog dvodimenzionog elektronskog gasa, javljali za celobrojne vrednosti faktora punjenja. Takodje kod grafena imamo i četverostruku degeneraciju nivoa, usled spina nosilaca i izospina udoline (eng. valley isospin). Uzmajući sve ovo u obzir dobijamo da je u slučaju grafene Holova otpornost data sa:

$$R_H = \frac{h}{e^2} \frac{1}{4(n + \frac{1}{2})}. \quad (6.23)$$



Slika 6.6: Eksperimentalni rezultati merenja Holove provodljivosti u grafenu. Jasno se vidi polubrojni karakter ove provodljivosti, a samim tim i Holove otpornosti. Unutar grafika je prikazan Holova provodljivost za dvoslojni grafen za koji se dobija kvantizacija kao kod 2DEG-a

Eksperimentalno dobijeni rezultati potvrđuju pojavu ovog polubrojnog kvantnog Holovog efekta. Rezultati su prikazani na slici 6.6. Na slici su dati rezultati uzeti iz reference [16]. Merena je Holova provodljivost ( $R_H^{-1}$ ) i longitudinalna provodljivost. Holova provodljivost je izražena u jedinicama  $4\frac{e^2}{h}$  da bi se bolje uočio polubrojni karakter Holovog efekta u grafenu.

## 7. ZAKLJUČAK

U ovom radu su teorijski opisane osnovne elektronske osobine grafena, prvog sintetisanog, dvodimenzionog materijala. Polazeći od modela jake veze odredjena je u drugom poglavlju, disperzija u aproksimaciji najbližih suseda. Na osnovu disperzije zaključeno je da grafen predstavlja poluprovodnik bez tzv. gepa (procepa). Ustvari grafen predstavlja neku vrstu prelaza izmedju metala jer nema gepa i poluprovodnika jer je gustina stanja u okolini Fermijeve energije je jednaka nuli. Za disperziju u grafenu je, takodje, utvrđeno da u okolinama karakterističnih tačaka, koje nazivamo Dirakove tačke, ima linearan karakter. U okolinama ovih tačaka elektroni su opisani Dirakovom jednačinom za fermione bez mase. Ovo "Dirakovsko" ponašanje elektrona u grafenu ima za posledicu, kao što smo videli u poglavlju 5, specifično ponasanje grafena u magnetnom polju. Naime, energija Landauovih nivoa u grafenu je srazmerna sa  $\sqrt{n}$ , za razliku od standardnog dvodimenzionog elektronskog gasa za koji važi:  $E \approx n$ . Takodje, pojava nultog nivoa energije koji je popunjen pola sa elektronima a pola sa šupljinama, dovodi do pojave tzv. anomalnog kvantnog Holovog efekta, čije je eksperimentalno merenje [16], direktni pokazatelj postojanja Dirakovih fermiona u grafenu.

U poglavlju broj dva je razmatran i Habardov model primenjen na grafen, gde je odredjena disperziju u slučaju kad u razmatranje uzmemu i druge najbliže susede. Dobili smo da linearna sproksimacija, u okolinama Dirakovih tačaka, važi i ovom slučaju. Grafen predstavlja jako interesantan materijal, pre svega zbog svoje potencijalne primene u industriji tranzistora, gde bi mogao da zameni silicijum koji već dostiže svoje limite i što se tiče dimenzija a i električne provodljivosti. Međutim prepreke ovakvoj primeni grafena su, nepostojanje tzv. "gepa" ili procepa u elektronskoj strukturi grafena, čije postojanje je neophodno da bi se uopšte razmatrala upotreba grafena kao tranzistora. Nedavno objavljeni radovi [27] i [28] pokazuju da bi se gep u grafenu mogao indukovati pomoću interakcije sa supstratom. Druga prepreka je kreiranje slojeva grafena u industrijskim razmerama koja je još uvek u početnoj fazi.

Pored ove praktične primene u elektronici, grafen se može koristiti i u fundamentalnim istraživanjima jer predstavlja pravu malu labaratoriju za testiranje teorija kvantne elektrodinamike, upravo zbog relativističkog ponašanja nosilaca nanelektrisanja.

## A. BLOHOVA TEOREMA

Problem elektronske strukture čvrstih tela je u osnovi mnogočestični problem jer hamiltonijan pored jednočestočne interakcije elektrona sa atomima koji grade rešetku sadrži i dvočestičnu elektron-elektron interakciju. U jednoelektronskoj aproksimaciji obe ove interakcije su predstavljene efektivnim jednočestičnim potencijalom  $U(\vec{r})$ . Problem odabira ovog potencijala je jako komplikovan. Međutim ako je kristal idealno periodičan, potencijal  $U(\vec{r})$ , bez obzira na sve svoje pojedinosti mora zadovoljavati:

$$U(\vec{r} + \vec{a}) = U(\vec{r}), \quad (\text{A.1})$$

gde je  $\vec{a}$  vektor rešetke ( $\vec{a} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ ). Iz priodičnosti potencijala mogu se dobiti neke osobine talasne funkcije elektrona u kristalu koje važe bez obzira na detalje efektivnog potencijala  $U(\vec{r})$ . Šredingerova jednačina za elektron u periodičnom potencijalu glasi:

$$H\Psi(\vec{r}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}). \quad (\text{A.2})$$

Funkcije stanja koje zadovoljavaju jednačinu (A.2) se nazivaju Blohova stanja i za njih važi Blohova teorema, koja kaže:

**Svojstvena stanja jednoelektronskog hamiltonijana  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r})$ , gde važi:  $U(\vec{r} + \vec{a}) = U(\vec{r})$ , za svako  $\vec{a}$  u Bravjeovoj rešetki, imaju oblik:**

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u(\vec{r}), \quad (\text{A.3})$$

gde je  $u(\vec{r})$  periodična funkcija:

$$u(\vec{r} + \vec{a}) = u(\vec{r}). \quad (\text{A.4})$$

Vektor  $\vec{k}$  je vektor u recipročnom prostoru. Primetimo da iz Blohove teoreme sledi da za svojstvena stanja hamiltonijana takođe važi:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (\text{A.5})$$

što se često navodi kao alternativna formulacija Blohove teoreme.

### A.1. DOKAZ BLOHOVE TEOREME

Uvedimo operator translacije za vektor rešetke  $\vec{a}$  kao  $\hat{T}_{\vec{a}}$  čije dejstvo definišemo kao:

$$\hat{T}_{\vec{a}} f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{a}). \quad (\text{A.6})$$

Takodje, izaberimo i periodične granične uslove:

$$\Psi(\vec{r} + N_1 \vec{a}_1 + N_2 \vec{a}_2 + N_3 \vec{a}_3) = \Psi(\vec{r}), \quad (\text{A.7})$$

gde su  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  i  $\vec{a}_3$  primitivni vektori, a brojevi  $N_1$ ,  $N_2$  i  $N_3$  kazuju koliko ukupno ima elementarnih celija duž pravaca koje određuju primitivni vektori. Pošto je hamiltonijan periodičan, vektor translacije komutira sa hamiltonijanom odnosno važi:

$$[\hat{T}_{\vec{a}}, H] = 0. \quad (\text{A.8})$$

Iz ovoga sledi da su sva svojstvena stanja hamiltonijana istovremeno i svojstvena stanja operatora translacije. Dakle, možemo pisati:

$$H\Psi(\vec{r}) = e\Psi(\vec{r}), \quad \hat{T}_{\vec{a}}\Psi(\vec{r}) = c(\vec{a})\Psi(\vec{r}) \quad (\text{A.9})$$

Za operator translacije važi sledeća relacija:

$$\hat{T}_{\vec{a}}\hat{T}_{\vec{a}'}\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r} + \vec{a} + \vec{a}') = \hat{T}_{\vec{a}+\vec{a}'}\Psi(\vec{r}), \quad (\text{A.10})$$

odakle se dobija:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{a}}\hat{T}_{\vec{a}'}\Psi(\vec{r}) &= c(\vec{a}')c(\vec{a})\Psi(\vec{r}) \\ \hat{T}_{\vec{a}}\hat{T}_{\vec{a}'}\Psi(\vec{r}) &= \hat{T}_{\vec{a}+\vec{a}'}\Psi(\vec{r}) = c(\vec{a} + \vec{a}')\Psi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Odnosno za svojstvene vrednosti operatora translacije važi:

$$c(\vec{a})c(\vec{a}') = c(\vec{a} + \vec{a}') \quad (\text{A.12})$$

Iz relacija (A.9), (A.10) i periodičnih graničnih uslova dobijamo sledeću relaciju:

$$\hat{T}_{N_i\vec{a}_i}\Psi(\vec{r}) = \hat{T}_{\vec{a}_i + \vec{a}_i + \dots}\Psi(\vec{r}) = (\hat{T}_{\vec{a}_i})^{N_i}\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}). \quad (\text{A.13})$$

Iz jednačine (A.13) sledi:

$$c(N_i\vec{a}_i) = [c(\vec{a}_i)]^{N_i} = 1. \quad (\text{A.14})$$

Odakle dobijamo da je:

$$c(\vec{a}_i) = e^{2\pi i \frac{p_i}{N_i}}, \quad p_i = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.15})$$

Pošto se vektor rešetke može napisati u obliku  $\vec{a} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ , dobijamo da važi:

$$\hat{T}_{\vec{a}}\Psi(\vec{r}) = (\hat{T}_{\vec{a}_1})^{n_1}(\hat{T}_{\vec{a}_2})^{n_2}(\hat{T}_{\vec{a}_3})^{n_3}\Psi(\vec{r}) = e^{2\pi i(n_1\frac{p_1}{N_1} + n_2\frac{p_2}{N_2} + n_3\frac{p_3}{N_3})}\Psi(\vec{r}) \quad (\text{A.16})$$

Uvodjenjem vektora u recipročnom prostoru:  $\vec{k} = \frac{p_1}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{p_2}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{p_3}{N_3}\vec{b}_3$ , gde su  $\vec{b}_1, \vec{b}_2$  i  $\vec{b}_3$  primitivni vektori recipročne rešetke, i uz korištenje uslova  $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$  dobijamo relaciju:

$$\hat{T}_{\vec{a}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}}\Psi(\vec{r}). \quad (\text{A.17})$$

Ova jednačina predstavlja Blohovu teoremu u obliku (A.5) i time je dokaz završen.

## B. DIRAKOVA JEDNAČINA

U nerelativističkoj kvantnoj mehanici kao polaznu tačku za dobijanje Šredingerove jednačine koristimo relaciju za energiju:

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad (\text{B.1})$$

koja kad iskoristimo princip korespondencije:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}^2 \quad (\text{B.2})$$

daje poznatu Šredingerovu jednačinu za slobodnu česticu:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t). \quad (\text{B.3})$$

U Šredingerovoj jednčini vremenski izvod je prvog reda dok je prostorni izvod, izvod drugog reda i zbog toga Šredingerova jednačina nije Lorenc invarijantna. Da bi dobili Lorenc invarijantnu relativističku teoriju moramo da krenemo od relativističkog izraza za energiju slobodne čestice:

$$E^2 = c^2 \vec{p}^2 + m_0^2 c^4, \quad (\text{B.4})$$

gde je  $c$  brzina svetlosti, a  $m_0$  masa mirovanja čestice. Ako iskoristimo princip korespondencije dobijamo tzv. Klajn-Gordonovu jednčinu:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Phi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = (-c^2 \hbar^2 \nabla^2 + m_0^2 c^4) \Phi(\vec{r}, t). \quad (\text{B.5})$$

Jednačinu (B.5) možemo napisati u Lorenc kovarijantnoj formi:

$$(p^\mu p_\mu - m_0^2 c^2) \Phi(x^\mu), \quad x^\mu = (ct, x, y, z) \quad (\text{B.6})$$

gde je  $p^\mu$  kvadriektor impulsa koji ima oblik:

$$p^\mu = \left( \frac{E}{c}, \vec{p} \right). \quad (\text{B.7})$$

Jednačinu (B.5) je predložio Ervin Šredinger 1926. godine kao relativističku generalizaciju Šredingerove jednačine, kasnije su je detaljnije proučavali Oskar Benjamin Klajn i Valter Gordon po kojima je ova jednačina i dobila ime. Problem kod Klajn-Gordonove jednačine je što daje gustinu verovatnoće oblika:

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\Psi^*(\vec{r}, t) \partial_t \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \partial_t \Psi^*(\vec{r}, t)). \quad (\text{B.8})$$

Ovakav izraz za gustinu verovatnoće nije pozitivno definitan i kao takav se ne može tumačiti kao verovatnoća da u vremenu  $t$  nadjemo česticu na poziciji  $\vec{r}$ . Razlog zbog kojeg gistica verovatnoće nije pozitivno definitna veličina je pojava drugog izvoda po vremenu u Klajn-Gordonovoj jednačini (B.5). Ovo je navelo Diraka da 1928. godine postulira jednačinu koja će biti prvog reda po vremenskom izvodu. Da bi takva

jednačina bila Lorenc invarijantna mora biti prvog reda i po prostornom izvodu. Dirak je postulirao jednačinu oblika:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2) \Psi(\vec{r}, t) = (\alpha^i p_i + \beta mc^2) \Psi(\vec{r}, t), \quad (\text{B.9})$$

gde se podrazumeva sumiranje po ponovljenim indeksima i gde su:  $\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3$  i  $\beta$  matrice dimenzije  $n \times n$  koje moraju biti ermitske da bi Dirakov hamiltonijan  $\hat{H}_D$  bio ermitski. Rešenja Dirakove jednačine (B.9) su vektori kolone oblika:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad (\text{B.10})$$

koje nazivamo spinorima, po analogiji sa svojstvenim stanjima spinskih operatora koji su bili dvokomponentni. Jednačina (B.9) mora zadovoljavati nekoliko uslova:

- mora biti Lorenc invarijantna
- mora da daje relativistički izraz za energiju:

$$E^2 = c^2 \vec{p}^2 + m_0^2 c^4 \quad (\text{B.11})$$

- mora da postoji Lorenc inverijantna jednačina kontinuiteta, odnosno pozitivno definitna gustina verovatnoće mora da bude vremenska komponenta četverovektora gustine struje verovatnoće.

Da bi drugi uslov bio zadovoljen komponente spinora (B.10) moraju da zadovoljavaju Klajn-Gordonovu jednačinu, odnosno mora da važi:

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= -\hbar^2 c^2 \sum_{i,j} \frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) \partial_i \partial_j \psi + \\ &+ \frac{\hbar m c^3}{i} \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \psi + \\ &+ \beta^2 m^2 c^4 \psi. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Ako jednačinu (B.12) uporedimo sa Klajn-Gordonovom jednačinom (B.5) dobijamo sledeće relacije:

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = \{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} \mathbb{1}, \quad (\text{B.13})$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = \{\alpha_i, \beta\} = 0, \quad (\text{B.14})$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = \mathbb{1}. \quad (\text{B.15})$$

Pomoću ovih relacija možemo dobiti korisne informacije o matricama  $\alpha^i$  i  $\beta$ . Iz relacije (B.13) sledi da svojstvene vrednosti matrica  $\alpha^i$  i  $\beta$  moraju biti jednake  $\pm 1$ . Pošto iz relacije (B.14) sledi:  $\alpha^i = -\beta \alpha^i \beta$  dobijamo da za trag matrice  $\alpha^i$  važi:

$$\text{Tr}(\alpha^i) = -\text{Tr}(\beta \alpha^i \beta) = -\text{Tr}(\beta^2 \alpha^i) = -\text{Tr}(\alpha^i), \quad (\text{B.16})$$

gde smo iskoristili invarijantnost traga na ciklične permutacije. Dakle dobijamo da je trag matrice  $\alpha^i$  jednak 0. Isto dobijamo i za trag matrice  $\beta$ . Pošto trag u suštini predstavlja sumu svojstvenih vrednosti koje su jednake  $\pm 1$ , vidimo da dimenzija matrica  $\alpha^i$  i  $\beta$  mora biti parna jer će samo tako u sumi svojstvenih vrednosti biti jednak broj pozitivnih i negativnih vrednosti i trag će biti jednak 0. Dimenzija  $n = 2$  nije dovoljna jer u njoj ne možemo da nadjemo četiri matrice koje zadovoljavaju algebru definisanu relacijama (B.13 - B.15). Najmanja dimenzija u kojoj možemo da izaberemo takve matrice je  $n = 4$ . Najčešća reprezentacija  $\alpha$  i  $\beta$  matrica je tzv. Diarkova reprezentacija:

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.17})$$

gde su  $\sigma^i$  Paulijeve matrice. U ovoj reprezentaciji su rešenja Diarkove jednačine četvero-spinori, odnosno spinori sa četiri komponente. Za gustinu verovatnoće i gustinu struje verovatnoće se, koristeći Dirakovu jednačinu, dobija:

$$\rho = \Psi^\dagger \Psi = \sum_{i=1}^4 \psi_i^* \psi_i, \quad j^k = c \Psi^\dagger \alpha^k \Psi. \quad (\text{B.18})$$

koji zadovoljavaju jednačinu kontinuiteta:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + d i \nu \vec{j} = 0. \quad (\text{B.19})$$

Ako nultu komponentu vektora  $j^\mu$  definišemo kao  $j^0 = c\rho$  dobijamo jednačinu kontinuiteta u kovarijantnom obliku:

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \quad (\text{B.20})$$

Vidimo da je gustina verovatnoće u Dirakovoj jednačini pozitivno definitna veličina. Uvodeći nove matrice:

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \beta \alpha^i, \quad (\text{B.21})$$

za koje važi:

$$(\gamma^0)^2 = 1, \quad (\gamma^i)^2 = -1, \quad (\gamma^k)^\dagger = -\gamma^k, \quad (\text{B.22})$$

možemo Dirakovu jednačinu napisati u kovarijantnom obliku:

$$\left( -i \gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \Psi = 0. \quad (\text{B.23})$$

U dvodimenzionom slučaju Dirakova jednačina postaje:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = (\vec{\sigma} \cdot \vec{p} + \sigma^z mc^2) \Psi(\vec{r}, t), \quad (\text{B.24})$$

gde je  $\vec{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2)$ . Dakle u dvodimenzionom slučaju koristimo  $2 \times 2$  Paulijeve matrice jer nam sad za razliku od trodimenzionog slučaja trebaju tri a ne četiri matrice. Najmanja dimenzija koja sadrži tri matrice koje zadovoljavaju algebru (B.13 - B.15) je  $n = 2$ . Rešenje Dirakve jednchine u dve dimenzije su dvokomponentni spinor za razliku od 3D jednchine gde su rešenja data sa (B.10). U slučaju dvodimenzionalih čestica koje su bez mase jednchina (B.24) prelazi u:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \Psi(\vec{r}, t) = (\sigma^x p_x + \sigma^y p_y) \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{B.25})$$

Ovakav slučaj imamo u grafenu u blizini tzv. Dirakovih tačaka gde disperzija postaje linearna.

## C. FURIJE TRANSFORMACIJA

Furije transformacija predstavlja vezu izmedju direktnog i recipročnog prostora, odnosno izmedju diskretnog prostora položaja čvorova i kontinualnog prostora talasnih vektora. Furije transformaciju za funkciju  $f_{\vec{x}}$ , gde je  $\vec{x}$  vektor rešetke, definišemo kao:

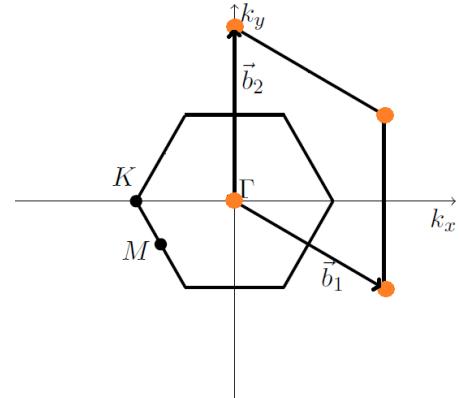
$$\tilde{f}(\vec{k}) = \sum_{\vec{x}} f_{\vec{x}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}, \quad (\text{C.1})$$

gde je  $\vec{k}$  vektor koji pripada prvoj Briluenovoj zoni. Inverzna Furije transformacija je:

$$f_{\vec{x}} = \int_B d^2\vec{k} \tilde{f}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}, \quad (\text{C.2})$$

gde  $B$  označava integraciju po prvoj Briluenovoj zoni. Da bi uradili ovu integraciju biramo drugačiju elementarnu čeliju od Briluenove zone u recipročnom prostoru jer je nad šestougaonikom teško urediti integraciju.

Prva Briluenova zona predstavlja Wigner-Seitz-ovu elementarnu čeliju u recipročnom prostoru. Ona se kreira tako da pomatramo jedan čvor u rešetki. Povežemo taj čvor sa njegovim najbližim susedima i onda povučemo prave<sup>7</sup> koje polove vektore koji povezuju najbliže susede. Poligon koji obrazuju ove prave naziva se Wigner-Seitzova čelija, koja se u recipročnom prostoru naziva Briluenova zona. Medutim mi ne moramo da za elementarnu čeliju biramo Wigner-Seitzovu čeliju, odnosno izbor elementarne čelije nije jednoznačan. Koristeći tu pogodnost možemo sebi da olakšamo posao tako što ćemo odabrati čeliju kao na slici C.1 koja je slična elementarnoj čeliji u direktnom prostoru, gde elementarni vektori povezuju najbliže čvorove. Stanja u ovoj novoj elementarnoj čeliji su data vektorima:



Slika C.1: Prelaz sa prve Briluenove zone na elementarnu čeliju čiji elementarni vektori povezuju najbliže susede u recipročnoj rešetki.

$$\vec{k} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2, \quad (\text{C.3})$$

gde važi  $0 < m_1, m_2 < 1$ . Inverznu transformaciju možemo pisati kao:

$$f_{\vec{x}} = \int_0^1 dm_1 \int_0^1 dm_2 \tilde{f}(m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2) e^{i(m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2) \cdot \vec{x}} \quad (\text{C.4})$$

Pošto važi:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{3a} (0, 1), \quad (\text{C.5})$$

<sup>7</sup>U trodimenzionom prostoru ovo bi bile ravni a čelija ne bi bila poligon nego trodimenziono telo koje te ravni obrazuju

iz jednačine (C.3) dobijamo:

$$\vec{k} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} m_1 \vec{e}_x + \left( \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} m_2 - \frac{2\pi}{3a} m_1 \right) \vec{e}_y, \quad (\text{C.6})$$

što dalje daje:

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{\sqrt{3}a}{2\pi} k_x \\ m_2 &= \frac{a}{4\pi} k_x + \frac{3a}{4\pi} k_y \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Jakobijan ove transformacije je:

$$\det \begin{vmatrix} \frac{\partial(m_1, m_2)}{\partial(k_x, k_y)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{\sqrt{3}a}{2\pi} & 0 \\ \frac{a}{4\pi} & \frac{3a}{4\pi} \end{vmatrix} = \frac{3\sqrt{3}a^2}{8\pi^2} \quad (\text{C.8})$$

Dobijamo da je Jakobijan jednak recipročnoj vrednosti površini Briluenove zone. Po-moću jednčine (C.8) integral (C.4) prelazi u oblik:

$$f_{\vec{x}} = \frac{3\sqrt{3}a^2}{8\pi^2} \int_B d^2 \vec{k} \tilde{f}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \quad (\text{C.9})$$

Ovakav oblik inverzne Furije transformacije koristimo u jednčini (3.46) kada radimo inverznu Furije transformaciju operatora kreacije i anihilacije elektrona. Sada ćemo da tražimo kako izgleda Delta funkcija u  $\vec{k}$  prostoru. Pomnožimo u tom cilju jednačinu (C.2) sa  $e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}$ , i sumirajmo po  $\vec{x}$ . Ako to uradimo dobijemo izraz:

$$\sum_{\vec{x}} f_{\vec{x}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} \equiv \tilde{f}(\vec{p}) = \frac{3\sqrt{3}a^2}{8\pi^2} \int_B \tilde{f}(\vec{k}) \sum_{\vec{x}} e^{i(\vec{k}-\vec{p})\cdot\vec{x}}. \quad (\text{C.10})$$

Pošto ovo važi za bilo koje  $\vec{k}$  i bilo koje  $\vec{p}$  jedini način na koji gornja jednakost može biti ispunjena je da važi:

$$\delta(\vec{k} - \vec{p}) = \frac{3\sqrt{3}a^2}{8\pi^2} \sum_{\vec{x}} e^{i(\vec{k}-\vec{p})\cdot\vec{x}}. \quad (\text{C.11})$$

Ovaj izraz je iskorišten u jednačini (4.73).

## D. KVANTNI HARMONIJSKI OSCILATOR

U odeljku (4.1) smo iskoristili analogiju izmedju linearog kvantnog harmonijskog osvilitora i grafena u međutom polju. Da bismo bolje razumeli tu analogiju ovde ćemo dati kratak pregled osobina linearog kvantnog harmonijskog oscilatora. Hamiltonijan kvantnog harmonijskog oscilatora je dat sa:

$$H\psi(z) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 z^2 \right) \psi(z) = E\psi(z). \quad (\text{D.1})$$

U algebarskom metodu rešavanj datog svojstvenog problema uvode se operatori kreacije i anihilacije pobudjenja:

$$\hat{a} = \frac{m\omega}{\hbar} \left( z + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dz} \right), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{m\omega}{\hbar} \left( z - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dz} \right), \quad (\text{D.2})$$

koji na funkcije stanja deluju kao:

$$\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}, \quad \hat{a}^\dagger\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}, \quad \hat{a}\psi_0 = 0. \quad (\text{D.3})$$

Koristeći operatore kreacije i anihilacije hamiltonijan postaje:

$$H = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad (\text{D.4})$$

gde je  $n = \hat{a}^\dagger \hat{a}$  operator broja pobudjenja. Dakle svojstveni problem hamiltonijana (D.1) smo preveli u svojstveni problem operatora broja pobudjenja. Iz (D.4) dobijamo svojstvene vrednosti hamiltonijana:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad (\text{D.5})$$

gde je  $n$  broj pobudjenja. Iz uslova da je:  $\hat{a}\psi_0 = 0$  dobijamo jednačinu iz koje dobijamo osnovno stanje linearog harmonijskog oscilatora:

$$\hat{a}\psi_0 = \left( \frac{d}{dz} + \frac{m\omega}{\hbar}z \right) \psi_0 = 0. \quad (\text{D.6})$$

Rešavanjem ove jednačine dobijamo osnovno stanje koje je oblika:

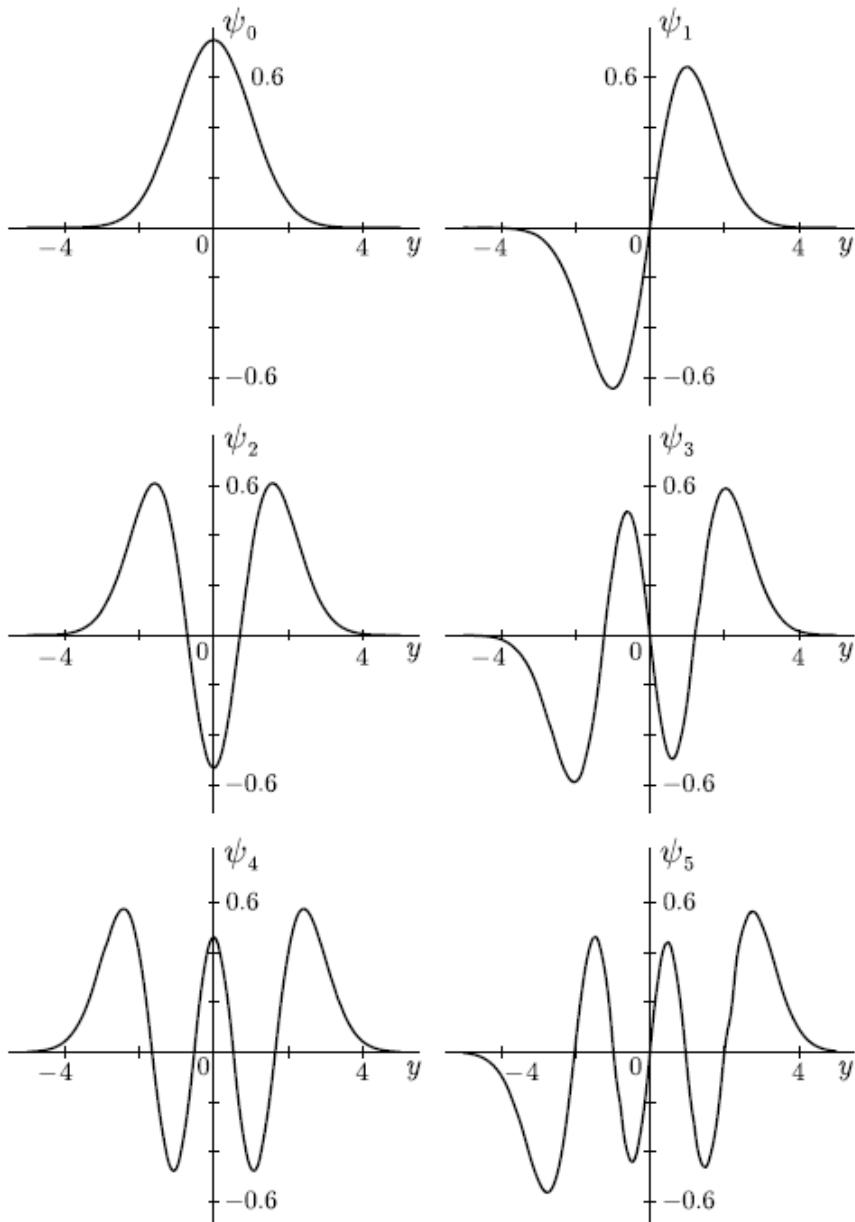
$$\psi_0 = \left( \frac{\hbar}{\pi m\omega} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}z^2}. \quad (\text{D.7})$$

Iz osnovnog stanja (D.6) dobijama sva ostala stanja uzastopnom primenom operatora kreacije:

$$\psi_n = \frac{a}{\sqrt{n!}} \left( a^\dagger \right)^n \psi_0, \quad (\text{D.8})$$

odakle dobijamo da su svojstvena stanja hamiltonijana linearog kvantnog harmonijskog oscilatora oblika:

$$\psi_n(z) = (2^n n!)^{-\frac{1}{2}} \left( \frac{\hbar}{\pi m\omega} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}z^2} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} z \right). \quad (\text{D.9})$$



Slika D.1: Prvih šest nivoa linearnog kvantnog harmonijskog oscilatora, za kvantne brojeve od  $n = 0$  do  $n = 5$ .  $y = \frac{m\omega}{\hbar} x$

Ovde su sa  $H_n(z)$  dati Ermitovi polinomi, koji su oblika:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}. \quad (\text{D.10})$$

Na slici D.1 su prikazana svojstvena stanja hamiltonijana linearnog kvantnog harmonijskog oscilatora za vrednosti  $n$  od  $n = 0$  do  $n = 5$ . Da bismo lakše uočili vezu izmedju jednačine (5.14) u odeljku (5.1) i hamiltonijana linearnog harmonijskog oscilatora transformišemo u oblik:

$$\left( \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} z^2 - \frac{d^2}{dz^2} \right) \psi(z) = \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(z) \quad (\text{D.11})$$

Ako uvedemo parametar  $\lambda = \frac{m\omega}{\hbar}$  jednačina prelazi u:

$$\left( (\lambda z)^2 - \frac{d^2}{dz^2} \right) \psi(z) = \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(z) \quad (\text{D.12})$$

Izraz na levoj strani jednačine (D.12) se može napisati kao proizvod dva operatora ali se mora paziti na to da  $z$  i  $\frac{d}{dz}$  ne komutiraju, odnosno za njih važi:

$$[z, \frac{d}{dz}] = -1. \quad (\text{D.13})$$

Ako iskoristimo relaciju (D.13), jednačina (D.12) prelazi u:

$$\left( \left( \lambda z - \frac{d}{dz} \right) \left( \lambda z + \frac{d}{dz} \right) + \lambda \right) \psi(z) = \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(z), \quad (\text{D.14})$$

odakle smenom  $\sqrt{\lambda}z = \tilde{z}$  dobijamo jednačinu oblika analognog obliku jednačine (5.14) u odeljku (5.1):

$$\left( \tilde{z} - \frac{d}{d\tilde{z}} \right) \left( \tilde{z} + \frac{d}{d\tilde{z}} \right) \tilde{\psi}(\tilde{z}) = \frac{2mE' - \hbar^2\lambda}{\lambda\hbar^2} \tilde{\psi}(\tilde{z}). \quad (\text{D.15})$$

U poslednjoj jednačini smo napravili zamenu  $E \rightarrow E'$  da ne bismo energiju oscilatora mešali sa energijom u jednačini (5.14). Odavde direktno možemo da dobijemo izraz za energiju grafena u magnetnom polju ako uporedimo jednačinu (D.15) sa jednačinom (5.14) i stavljajući da je  $E' = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ , dobijamo isti izraz kakav smo našli u jednačini (5.18).

## E. DVODIMENZIONI NERELATIVISTIČKI ELEKTRONSKI GAS (2DEG) U MAGNETNOM POLJU

hamiltonijan koji opisuje dvodimenzioni gas elektrona je oblika:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad \vec{p} = (p_x, p_y) \quad (\text{E.1})$$

Ako uključimo magnetno polje impuls  $\vec{p}$  menjamo sa gejdž invarijantnim mehaničkim impulsom:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \equiv \vec{\Pi}. \quad (\text{E.2})$$

Jednačina (E.2) predstavlja tzv. minimalno kuplovanje. Koristeći Landauov gejdž:

$$\vec{A}(\vec{r}) = (-By, 0, 0), \quad (\text{E.3})$$

hamiltonijan iz (E.1) prelazi u:

$$H = \frac{1}{2m} \left[ \left( p_x - \frac{eB}{c} y \right)^2 + p_y^2 \right]. \quad (\text{E.4})$$

Koristeći činjenicu da operator  $p_x$  komutira sa hamiltonijanom, svojstvene funkcije hamiltonijana (E.4) tražimo u obliku:

$$\Psi(x, y) = e^{ik_x x} \chi(y). \quad (\text{E.5})$$

Svojstveni problem hamiltonijana u tom slučaju je dat sa:

$$\frac{1}{2m} \left[ p_y^2 + \left( \hbar k_x - \frac{eB}{c} y \right)^2 \right] \chi(y) = \epsilon \chi(y). \quad (\text{E.6})$$

Iz jednačine (E.6) nakon malo sredjivanja izraza dobijemo:

$$\left[ \frac{1}{2m} p_y^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - \Lambda_B^2 k)^2 \right] \chi(y) = \epsilon \chi(y), \quad (\text{E.7})$$

gde smo sa  $\omega_c = \frac{eB}{mc}$  uveli tzv. ciklotronsku frekvenciju, a sa:  $\Lambda_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$  karakterističnu magnetnu dužinu: za koju se ispostavlja da u semiklasičnoj slici odgovara radijusu ciklotronske orbite elektrona. Svojstveni problem dat jednačinom (E.6) je istog oblika kao i svojstveni problem hamiltonijana harmonijskog oscilatora, datog u jednčini (D.1) u dodatku D, sa ravnotežnim položajem pomerenim na:  $Y_0 = \Lambda_B^2 k_x$ . Koristeći se rezultatima za linerani harmonijski oscilator za energiju dobijamo da je:

$$\epsilon_n = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{E.8})$$

Za svojstvene funkcije se dobija da su odredjene sa dva kvantna broja,  $k_x$  i kvantnim brojem  $n$ , i oblika su:

$$\Psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x} H_n \left( \frac{y - Y_0}{Y_0} \right) e^{-\left( \frac{y - Y_0}{2Y_0} \right)^2}. \quad (\text{E.9})$$

Na osnovu prethodno rečenog, dobijamo da u magnetnom polju elektroni vrše rotaciju oko tzv. centra rotacije (eng. guiding centre) čija je  $\hat{y}$  koordinata data sa  $Y_0$  a  $\hat{x}$  koordinata je neodredjena jer važi komutaciona relacija:

$$[Y_0, x] = i\Lambda_B^2, \quad (\text{E.10})$$

koja proizilazi iz činjenice da je koordinata  $Y_0$  odredjena kvantnim brojem  $k_x$  koji, naravno, ne komutira sa koordinatom  $x$ . Poluprečnik ove rotacije je kvantovan sa kvantnim brojem  $n$  i ti nivoi se nazivaju Landauovi nivoi. Ovi nivoi su jako degenerisani jer energija ne zavisi od kvantnog broja  $k_x$ . Ukupan broj stanja u jednom Landauovom nivou koji imaju istu energiju dobijamo na način koji je ilustrovan u odeljku (4.1), i on iznosi:

$$N = \frac{BL_x L_y}{\Phi_0} = N_\Phi. \quad (\text{E.11})$$

Odnosno broj stanja je jednak broju kvanata fluksa koji prolaze kroz površinu uzorka. Uvodjenjem homogenog električnog polja  $E$  u  $\hat{y}$  pravcu, i dalje se održava translaciona invarijantnost u  $\hat{x}$  pravcu, odnosno operator  $p_x$  komutira sa hamiltonijanom. Izraz za hamiltonijan (E.7) dobija dodatni član oblika:

$$V(y) = eEy. \quad (\text{E.12})$$

Dakle, hamiltonijan postaje:

$$H = \frac{1}{2m} p_y^2 + \frac{1}{2} m\omega_c^2 (y - Y_0)^2 + eEy \quad (\text{E.13})$$

Jednačinu (E.13) možemo srediti tako što ćemo raspisati drugi član koji ćemo dopuniti da sa trećim članom u izrazu (E.13) kompletiramo kvadrat. Končno izraz (E.13) možemo napisati u obliku:

$$H = \frac{1}{2m} p_y^2 + \frac{1}{2} m\omega_c^2 \left[ y - \left( Y_0 + \frac{eE}{m\omega_c^2} \right) \right]^2 - Y_0 eE - \frac{1}{2} \frac{(eE)^2}{m\omega_c^2}. \quad (\text{E.14})$$

Iz oblika hamiltonijana (E.14) vidimo da je u pitanju opet Linearni harmonijski oscilator sa novim ravnotežnim položajem datim sa  $Y_1 = Y_0 + \frac{eE}{m\omega_c^2}$  i sa energetskim spektrom, koji više nije degenerisan (zavis od  $k_x$ ):

$$\epsilon_{n,k} = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) - k\Lambda_B^2 eE - \frac{1}{2} \frac{(eE)^2}{m\omega_c^2}. \quad (\text{E.15})$$

Dobijeni izraz za energiju je, nakon malo sredjivanja identičan sa izrazom u odeljku 5.3. Članovi u jednačini se mogu protumčiti kao kinetička energija elektrona (prvi član), potencijalna energija centra rotacije u električnom polju (drugi član) i kinetička energija centra rotacije (treći član).

## F. LANDAUEROV FORMALIZAM

Električni transport predstavlja kvantni, neravnotežni statistički problem. U idealnom slučaju trebalo bi rešiti Šredingerovu jednačinu koja je oblika:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H\Psi(\vec{r}, t), \quad (\text{F.1})$$

i naći mnogočestičnu funkciju stanja  $\Psi(\vec{r}, t)$  u bilo kom trenutku vremena. Nakon toga bi trebalo odrediti srednju vrednost operatora struje datog sa:

$$\hat{I} = \int \hat{j}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{S}, \quad (\text{F.2})$$

gde je sa  $\hat{j}(\vec{r}, t)$  dat operator gustine struje. Međutim problem nalaženje mnogočestične funkcije stanja je u mnogim slučajevima jako komplikovan, a tako dobijena funkcija stanja bi sadržavala više informacija nego što je potrebno za objašnjavanje transporta elektrona. Zbog toga se pri rešavanju problema elektronskog transporta pribegava određenim aproksimacijama. Pre svih aproksimacija jako je važno formulisati dva načina gledanja na fenomen kvantnog transporta[15]:

- **Kubo formalizam:** Električna struja je posledica primjenjenog električnog polja. Električno polje je uzrok dok je struja odgovor sistema na uvodjenje polja.
- **Landauerov formalizam:** Fluks struje je određen graničnim uslovima na površini uzorka čije osobine posmatramo. Tok nosilaca nanelektrisanja koji pada na granice uzorka generiše nagomilavanje nanelektrisanja na površini uzorka ili u njegovoj unutrašnjosti što dovodi do pojave nehomogenog električnog polja duž uzorka. Odnosno tok struje je uzrok, a električno polje je odgovor sistema.

U odeljku o kvantnom Holovom efektu smo koristili Landauerov formalizam. Imali smo konstantnu struju koju smo puštali kroz sistem i pitanje na koje smo tražili odgovor je: koja je rezultujuća raspodela potencijala na osnovu prostorno nehomogene raspodele centara rasejanja. U Landauerovom pristupu se sistem razdvaja na tri dela, dva rezervoara: levi i desni sa hemijskim potencijalima,  $\mu_L$  i  $\mu_R$  respektivno, i uzorak koji posmatramo (slika F.1). Rezervoar predstavlja idealan sistem koji



Slika F.1:Šematski prikaz sistema koji se sastoji od dva rezervoara i uzorka u kojem se vrši rasejavanje nosilaca nanelektrisanja.

može da preda i primi proizvoljnu količinu nosilaca nanelektrisanja i energije bez da mu se promeni unutrašnje stanje. Elektroni u rezervoarima su okarakterisani Fermi-Dirakovom raspodelom. Struja koju nosi jedan elektron u stanju  $k$  je data sa:

$$J_k = ev(k)T(k), \quad (\text{F.3})$$

gde je  $T(k)$  verovatnoća za transmisiju (prolazak) elektrona kroz uzorak. Ukupna struja iz levog rezervoara je suma po svim stanjima  $k$ :

$$I_L = 2 \sum_k J_k f_{FD}(E(k), \mu_L). \quad (\text{F.4})$$

Sa  $f_{FD}$  je data Fermi-Dirakova raspodela:

$$f_{FD}(E, \mu) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right)}. \quad (\text{F.5})$$

Iz jednačine (E.4) nakon ubacivanja izraza za struju (E.3) dobijamo:

$$I_L = 2e \sum_k v(k) T(k) f_{FD}(E(k), \mu_L) \simeq \frac{2e}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} v(k) T(k) f_{FD}(E(k), \mu_L) dk. \quad (\text{F.6})$$

U izrazu (F.6) smo sa sume prešli na integraciju po stanjima  $k$ . Ako uzmemo u obzir izraz za grupnu brzinu dat sa:  $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ , jednačina (E.6) prelazi u:

$$I_L = \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) f_{FD}(E, \mu_L) dE. \quad (\text{F.7})$$

Identičan izraz dobijamo i za struju koja dolazi od desnog kontakta:

$$I_R = -\frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) f_{FD}(E, \mu_R) dE. \quad (\text{F.8})$$

Ukupnu struju dobijamo kao zbir ova dva izraza:

$$I = I_L + I_R = \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) (f_L(E) - f_R(E)) dE, \quad (\text{F.9})$$

gde smo stavili da je  $f_{FD}(E, \mu_R) \equiv f_R(E)$  i  $f_{FD}(E, \mu_L) \equiv f_L(E)$ . U slučaju kada važi  $\mu_L - \mu_R \rightarrow 0$ , odnosno kada je razlika izmedju hemijskih potencijala levog i desnog rezervoara mala, onda možemo funkciju raspodele desnog rezervoara možemo razviti u Tejlorov red, tj:

$$f_L(E) = f_R(E) - \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \Big|_{\mu_R} (\mu_L - \mu_R) + O[(\mu_L - \mu_R)^2]. \quad (\text{F.10})$$

Ako se zadržimo na linearom članu izraz za struju prelazi u:

$$I = \frac{2e}{\hbar} (\mu_L - \mu_R) \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) \left( -\frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \Big|_{\mu_R} \right) dE \quad (\text{F.11})$$

Uzimajući da nam je temperatura jednak nuli, Fermi-Dirakova funkcija postaje step funkcija, a izvod step funkcije je jednak delta funkciji centriranoj na desnom hemijskom potencijalu  $\mu_R$ , odnosno:  $\delta(E - \mu_R)$ . Formula za struju postaje:

$$I = \frac{2e}{\hbar} (\mu_L - \mu_R) T(E = \mu_R) = \frac{2e^2}{\hbar} T(E = \mu_R) V. \quad (\text{F.12})$$

Ova formula je jednaka jednačini (6.18), gde smo računali struju za jedan kanal i dobili smo da Landauovi nivoi imaju savršenu transmisiju ( $T(E = \mu_R) = 1$ ).

## G. TENZORSKI PROIZVOD

Ovde ćemo u najkraćim crtama, za potrebe ovog rada definisati tenzorski proizvod i pokazati neke njegove osobine. Neka je data  $m \times n$  matrica A, i  $p \times q$  matrica B. Tenzorski proizvod izmedju ove dve matrice<sup>8</sup> je definisan kao  $mp \times nq$  blok matrica, na sledeći način:

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{pmatrix}. \quad (\text{G.1})$$

Ili eksplicitnije:

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & \dots & a_{11}b_{1q} & \dots & \dots & a_{1n}b_{11} & a_{1n}b_{12} & \dots & a_{1n}b_{1q} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & \dots & a_{11}b_{2q} & \dots & \dots & a_{1n}b_{21} & a_{1n}b_{22} & \dots & a_{1n}b_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \dots & \dots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{11}b_{p1} & a_{11}b_{p2} & \dots & a_{11}b_{pq} & \dots & \dots & a_{1n}b_{p1} & a_{1n}b_{p2} & \dots & a_{1n}b_{pq} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1}b_{11} & a_{m1}b_{12} & \dots & a_{m1}b_{1q} & \dots & \dots & a_{mn}b_{11} & a_{mn}b_{12} & \dots & a_{mn}b_{1q} \\ a_{m1}b_{21} & a_{m1}b_{22} & \dots & a_{m1}b_{2q} & \dots & \dots & a_{mn}b_{21} & a_{mn}b_{22} & \dots & a_{mn}b_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \dots & \dots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}b_{p1} & a_{m1}b_{p2} & \dots & a_{m1}b_{pq} & \dots & \dots & a_{mn}b_{p1} & a_{mn}b_{p2} & \dots & a_{mn}b_{pq} \end{pmatrix},$$

gde su sa  $a_{ij}$  označeni elementi matrice A a sa  $b_{ij}$  elementi matrice B.

Osnovne osobine tenzorskog proizvoda dve matrice su:

1. Ako je  $\alpha$  skalar onda važi:

$$(\alpha A) \otimes B = A \otimes (\alpha B)$$

2.  $(A \otimes B)^T = A^T \otimes B^T$

3.  $(A \otimes B)^* = A^* \otimes B^*$

4.  $(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$

5.  $(A + B) \otimes C = A \otimes C + B \otimes C$

6.  $A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C$

7.  $(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$

8. Ako je A  $m \times m$  kvadratna matrica, a B je  $n \times n$  kvadratna matrica onda važi:

$$\text{tr}(A \otimes B) = \text{tr}(B \otimes A) = \text{tr}(A) \text{tr}(B)$$

$$\det(A \otimes B) = \det(B \otimes A) = (\det(A))^n (\det(B))^m$$

9. Ako su A i B, nesingularne kvadratne matrice onda važi:

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$$

---

<sup>8</sup>Ovaj tenzorski proizvod izmedju matrica se naziva još i Kronekerov proizvod

## REFERENCE

1. M.I.Katsnelson, Graphene-Carbon in two dimensions, Cambridge University Press (2012)
2. Carla Gross, Energy Spectrum of the Electrons in Graphene , Bachelor thesis, Institute for Theoretical Physics, Albert Einstein Center for Fundamental Physics, University of Bern (2011)
3. Electronic Properties of Monolayer and Bilayer Graphene, E. McCann, Department of Physics,Lancaster University, Lancaster, UK (2012)
4. P. R. Wallace, Phys. Rev. **71**, 622 (1947)
5. S. Reich, J. Maultzsch, and C. Thomsen, Tight-binding description of graphene, Phys. Rev. B **66**, 035412 (2002)
6. R. Saito, M.S.Dresselhause, G. Dresselhause, Physical Properties of Carbon Nanotubes, Imperial College Press (1998)
7. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009)
8. M.O. Goerbig, Electronic properties of graphene in a strong magnetic field, Rev. Mod. Phys **83**, 1193 (2011)
9. N M R Peres, Eduardo V Castro, Algebraic solution of a graphene layer in transverse electric and perpendicular magnetic fields, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 406231 (2007)
10. L. Landau, Z. Phys. **64**, 629 (1930)
11. K. v. Klitzing, G. Dorda, M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980)
12. Tsui, D. C., Störmer, H., and Gossard, A. C. Phys. Rev. Lett. **48**, 1559 (1983)
13. Jean-Noel Fuchs, Dirac fermions in graphene and analogues: magnetic field and topological properties, Lecture notes (2013)
14. S. Datta, Electronic transport in mesoscopic systems, Cambridge University Press, (1995)
15. M. Di Ventra, Electrical transport in nanoscale systems, Cambridge University Press, (2008)
16. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov, Two dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, Nature **438**, 197 (2005)
17. Y. Zhang, Y.W. Tan, H. L. Stormer, Kim P. , Experimental observation of the

quantum Hall effect and Berry's phase in graphene, *Nature* **438**, 201 (2005)

18. Jannik C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, S. Roth, The structure of suspended graphene sheets, *Nature* **446**, 60 (2007)
19. A. Fasolino, J. H. Los, M. I. Katsnelson, Intrinsic ripples in graphene, *Nature Materials* **6**, 858 (2007)
20. N. D. Mermin, Crystalline order in two dimensions, *Phys. Rev.* **176**, 250 (1968)
21. K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, A. K. Geim, Two-dimensional atomic crystals, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102**, 10451 (2005)
22. A. Fasolino, J. H. Los, M. I. Katsnelson, *Nature Mat.* **6**, 858 (2007)
23. K. V. Zakharchenko, R. Roldan, A. Fasolino, M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **82**, 125435 (2014)
24. K. V. Zakharchenko, M.I Katsnelson, A. Fasolino, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 046808 (2009)
25. D.R. Nelson, L. Peliti. Fluctuations in membranes with crystalline and hexatic order, *Journal de Physique* **48**, 7 (1987)
26. S. Y. Zhou, G.H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D.H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, A. Lanzara, Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene, *Nature Materials* **6**, 916 (2007)
27. E.V.Castro, K.S.Novoselov, S.V.Morozov, N.M.R.Peres, J.M.B. Lopes dos Santos, J.Nilsson, F. Guinea, A.K.Geim, A.H.Castro Neto, Biased Bilayer Graphene: Semiconductor with a Gap Tunable by the Electric Field Effect, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007)
28. C. R.Woods, L. Britnell, A. Eckmann, R. S. Ma, J. C. Lu, H. M. Guo, X. Lin, G. L. Yu, Y. Cao, R. V. Gorbachev, A. V. Kretinin, J. Park, L. A. Ponomarenko, M. I. Katsnelson, Yu. N. Gornostyrev, K. Watanabe, T. Taniguchi, C. Casiraghi, H-J. Gao, A. K. Geim, K. S. Novoselov, Commensurate -incommensurate transition in graphene on hexagonal boron nitride, *Nature Physics* **10**, 451 (2014)
29. H.Zhang, F. Ding, On the Kronecker Products and Their Applications, *Journal of Applied Mathematics* **2013**, 296185 (2013)

UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

*Redni broj:*

**RBR**

*Identifikacioni broj:*

**IBR**

*Tip dokumentacije:*

**TD**

Monografska dokumentacija

*Tip zapisa:*

**TZ**

Tekstualni štampani materijal

*Vrsta rada:*

**VR**

Master rad

*Autor:*

**AU**

Aleksandar Ljepoja

*Mentor:*

**MN**

Dr Milan Pantić, redovni profesor,  
Prirodno-Matematički Fakultet, Novi Sad

*Naslov rada:*

**NR**

Elektronska svojstva grafena

*Jezik publikacije:*

**JP**

srpski (latinica)

*Jezik izvoda:*

**JI**

srpski (latinica) / engleski

*Zemlja publikovanja:*

**ZP**

Srbija

*Uže geografsko područje:*

**UGP**

Vojvodina

*Godina:*

**GO**

2015

*Izdavač:*

**IZ**

Autorski reprint

*Mesto i adresa:*

**MA**

Prirodno-matematički fakultet,

Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

*Fizički opis rada:*

**FO**

(poglavlja/strana/citata/tabela/slika/dodataka)

(7/62/12/0/27/7)

*Naučna oblast:*

Fizika

**NO**

Teorijska fizika kondenzovane materije

**ND**

*Ključne reči:*

grafen, elektronska struktura grafena, model jake

veze, Dirakovi fermioni, kvantni Holov efekat,  
Habardov model

*Čuva se:*

**ČU**

Biblioteka departmana za fiziku,

PMF-a u Novom Sadu

*Važna napomena:*

**VN**

*Izvod:*

**IZ**

-

U radu je opisana primene modela jake veze i Hubbardovog modela na određivanje elektronske strukture grafena. Pokazano je da se u blizini tzv. Dirakovih tačaka, u recipročnom prostoru, dobija Dirakov hamiltonijan, koji opisuje hiralne fermione bez mase. Diskutovano je ponšanje grafena u magnetnom polju. Dat je kratak opis anomalnog kvantnog Holovog efekta, koji se javlja kao posledica pojave nultog Landauovog nivoa u grafenu.

*Datum prihvatanja teme od NN*

*veća:*

**DP**

*Datum odbrane:*

**DO**

*Članovi komisije:*

**KO**

*Predsednik komisije:*

Dr Slobodan Radošević, docent,  
Prirodno-Matematički Fakultet, Novi Sad  
Dr Miodrag Krmar, redovni profesor,  
Prirodno-Matematički Fakultet, Novi Sad  
Dr Milan Pantić, redovni profesor,  
Prirodno-Matematički Fakultet, Novi Sad

*Član:*

*Član:*

UNIVERSITY OF NOVI SAD  
FACULTY OF SCIENCE  
KEY WORDS DOCUMENTATION

*Accession number:*

**ANO**

*Identification number:*

**INO**

*Documentation type:*

**DT**

Monograph publication

**TR**

Textual printed material

**CC**

Final paper

*Author:*

**AU**

Aleksandar Ljepoja

*Mentor:*

**MN**

Dr Milan Pantić, full professor,  
Faculty of Science, Novi Sad

*Title:*

**TI**

Electronic properties of graphene

*Language of text:*

**LT**

Serbian (latin)

*Language of abstract:*

**JI**

English

*Country of publication:*

**CP**

Serbia

*Locality of publication:*

**LP**

Vojvodina

*Publication year:*

**PY**

2015

*Publisher:*

**PU**

Author's reprint

*Publication place:*

**PP**

Faculty of Science and Mathematics,

Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

(7/62/12/0/27/7)

**PD**

*Scientific field:*

Physics

**SF**

*Scientific discipline:*

Solid State Theory

**SD**

*Key words:*

graphene, electronic properties, Dirac fermions

tight binding description, quantum Hall effect,  
Hubbard model

*Holding data:*

Library of Department of Physics,

Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

**HD**

-

*Note:*

**N**

*Abstract:*

**AB**

The tight-binding and Hubbard model of electrons in graphene is reviewed. It is shown that in the vicinity of the, so called Dirac points in the reciprocal space, relativistic Dirac Hamiltonian is obtained. This Hamiltonian describes massless chiral fermions. The behaviour of graphene in magnetic field is discussed. Brief description of the anomalous quantum Hall effect, as a consequence of the emergence of the zeroth Landau level in graphene, is given.

*Accepted by the Scientific Board:*

**ASB**

*Defended on:*

**DE**

*Thesis defend board:*

**DB**

*President:*

Dr Slobodan Radošević, Assistant Professor, Faculty of Science, Novi Sad

*Member:*

Dr Miodrag Krmar, full professor, Faculty of Science, Novi Sad

*Member:*

Dr Milan Pantić, full professor, Faculty of Science, Novi Sad