



ΤΕΙ Κρήτης - Παράρτημα Χανίων
Σχολή Εφαρμοσμένων Επιστημών
Τμήμα Ηλεκτρονικών Μηχανικών Τ.Ε.

Πτυχιακή Εργασία:

Οι ηλεκτρονικές ιδιότητες του γραφενίου

Εισηγητής: Πλιάκης Δημήτριος

Όνοματεπώνυμο: Παππάς Ιωάννης-Αλκιβιάδης

Αριθμός Μητρώου: 4632

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Περίληψη	4
Συγγραφείς	4
I. Εισαγωγή	5
II. Στοιχειώδεις Ηλεκτρονικές Ιδιότητες του Γραφενίου	9
A. Μονό στρώμα: Προσέγγιση στενής-σύνδεσης	9
1. Μάζα κυκλότροπου	11
2. Πυκνότητα καταστάσεων	12
B. Φερμιόνια Dirac	14
1. Στροφική σήραγγα και παράδοξο Klein	16
2. Περιορισμός και τρεμάμενη κίνηση	19
Γ. Γραφένιο διπλού στρώματος: Προσέγγιση στενής-σύνδεσης	21
Δ. Κρυσταλλικό γραφένιο	25
E. Στοίβες/Σωροί γραφενίου	26
1. Η ηλεκτρονική δομή του χύμα γραφίτη	30
ΣΤ. Επιφανειακές καταστάσεις στο γραφένιο	32
Ζ. Επιφανειακές καταστάσεις στις στοίβες γραφενίου	35
Η. Το φάσμα των νανοκορδελών γραφενίου	35
1. Νανοκορδέλες μορφής ζικ-ζακ	37
2. Νανοκορδέλες μορφής πολυθρόνας	40
Θ. Τα φερμιόνια Dirac σε ένα μαγνητικό πεδίο	42
I. Το ανώμαλο ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall	45
ΙΑ. Πρότυπο στενής-σύνδεσης σε ένα μαγνητικό πεδίο	47
ΙΒ. Τα επίπεδα Landau στις στοίβες γραφενίου	49
ΙΓ. Διαμαγνητισμός	50
ΙΔ. Ζεύξη περιστροφικής-τροχιάς	52
III. Λυγισμένα Φωνόνια, Ελαστικότητα, και Τσαλάκωμα	53
IV. Αναταραχή στο Γραφένιο	57
A. Κυματισμοί	59
B. Τοπολογικά ελαττώματα πλέγματος	61
Γ. Καταστάσεις προσμείξεως	63

Δ.	Τοπικές καταστάσεις κοντά στις άκρες, τις σχισμές, και τα κενά	63
Ε.	Αυτο-ντόπινγκ	64
ΣΤ.	Διανυσματικό δυναμικό και εύρος (πλάτος) πεδίου αναταραχής	66
	1. Πλάτος πεδίου που προκαλείται από την καμπυλότητα	68
	2. Ελαστική πίεση	69
	3. Τυχαία διαμετρήματα πεδίων	70
Ζ.	Ζεύξη με μαγνητικές προσμείξεις	71
Η.	Ασθενής και ισχυρός εντοπισμός	72
Θ.	Μεταφορά κοντά στο σημείο Dirac	74
Ι.	Περιγραφή της εξίσωσης Boltzmann της συνεχούς (dc) μεταφοράς ενισχυμένου γραφενίου	75
ΙΑ.	Μαγνητομεταφορά και καθολική αγωγιμότητα	77
	1. Η πλήρης αξιοπιστία της προσέγγισης Born (FSBA)	78
V.	Φαινόμενα/Επιπτώσεις πολυ-σωμάτων	82
A.	Αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-φωτονίου	82
B.	Αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου	85
	1. Έλεγχος στις στοίβες γραφενίου	90
Γ.	Αλληλεπιδράσεις περιορισμένου φάσματος (μικρής εμβέλειας)	90
	1. Διπλοστιβάδα γραφενίου: Ανταλλαγή	92
	2. Διπλοστιβάδα γραφενίου: Αλληλεπιδράσεις περιορισμένου φάσματος	93
Δ.	Αλληλεπιδράσεις σε υψηλά μαγνητικά πεδία	93
VI.	Συμπεράσματα	94
	Πηγές-Βιβλιογραφία	95

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Αυτή η εργασία εξετάζει τις βασικές θεωρητικές πτυχές του γραφενίου, ενός ατόμου μονού πυκνού στρώματος αλλότροπου του άνθρακα, με ασυνήθιστες δυσδιάστατες διεγέρσεις ηλεκτρονίων Dirac. Τα ηλεκτρόνια Dirac μπορούν να ελεγχθούν από την εφαρμογή εξωτερικών ηλεκτρομαγνητικών πεδίων, ή μεταβάλλοντας τη γεωμετρία του δείγματος ή/και την τοπολογία. Τα ηλεκτρόνια Dirac συμπεριφέρονται με ασυνήθιστους τρόπους όταν διοχετεύονται, κρατώντας το ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall. Οι ηλεκτρονικές ιδιότητες των στοιβών του γραφενίου συζητήθηκαν και διαφέρουν από την σειρά στοιβάγματος και τον αριθμό των στρωμάτων. Η άκρη της επιφάνειας του γραφενίου εξαρτάται από την άκρη τερματισμού (η οποία μπορεί να είναι μορφής ζικ-ζακ ή μορφής πολυθρόνας) και επηρεάζουν τις φυσικές ιδιότητες των νανοκορδελών. Διάφοροι τύποι διαταραχών τροποποιούνται στην εξίσωση Dirac οδηγώντας σε ασυνήθιστες φασματοσκοπικές και μεταφορικές ιδιότητες. Έχουν επίσης παρουσιαστεί τα αποτελέσματα ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου και ηλεκτρονίου-φωτονίου που αλληλεπιδρούν σε μονή στρώση και πολυστρωματική στρώση γραφενίου.

ΣΥΓΓΡΑΦΕΙΣ

A. H. Castro Neto

Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Βοστώνης, Λεωφόρος Commonwealth 590, Βοστώνη, Μασαχουσέτη 02215, ΗΠΑ

F. Guinea

Ινστιτούτο Επιστήμης των Υλικών της Μαδρίτης, CSIC, Cantoblanco, E-28049 Μαδρίτη, Ισπανία

N. M. R. Peres

Κέντρο Φυσικής και Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο του Μίνχο, P-4710-057, Μπράγκα, Πορτογαλία

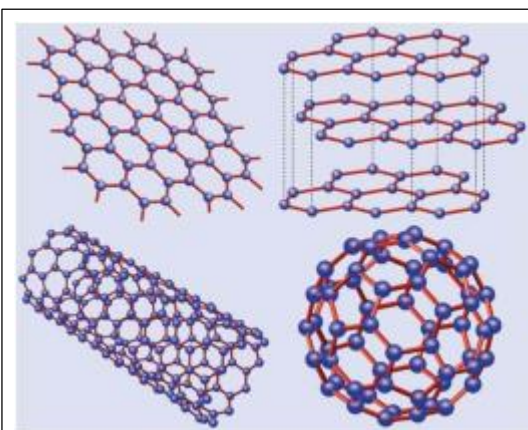
K. S. Novoselov και A. K. Geim

Τμήμα Φυσικής και Αστρονομίας, Πανεπιστήμιο του Μάντσεστερ, Μάντσεστερ, M13 9PL, Ηνωμένο Βασίλειο

(Δημοσιεύθηκε στις 14 Ιανουαρίου 2009)

I. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Ο άνθρακας είναι η πρωταρχική ύλη για τη ζωή και η βάση για όλη την οργανική χημεία. Λόγω της ευελιξίας/προσαρμοστικότητας των δεσμών του, ο άνθρακας έχει ως βάση συστήματα που παρουσιάζουν έναν απεριόριστο αριθμό διαφορετικών δομών με μία εξίσου μεγάλη πληθώρα φυσικών ιδιοτήτων. Αυτές οι φυσικές ιδιότητες είναι, σε ένα μεγάλο μέρος, το αποτέλεσμα της διάστασης αυτών των δομών. Μεταξύ των συστημάτων μόνο με άτομα άνθρακα, γραφενίου -ένα δισδιάστατο (2D) αλλότροπο άνθρακα- παίζει σημαντικό ρόλο από τότε που είναι η βάση για την κατανόηση των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων των άλλων αλλότροπων. Το γραφένιο φτιάχνεται από άτομα άνθρακα διατεταγμένα σε μια κυψελοειδή δομή σχηματίζοντας εξάγωνα (δείτε την εικόνα 1), όπου μπορούμε να τα σκεφτούμε αποτελούμενα από δαχτυλίδια βενζολίου που αφαιρέθηκαν από τα άτομα υδρογόνου τους (Pauling, 1972). Τα φουλερένια (Andreoni, 2000) είναι μόρια όπου τα άτομα του άνθρακα είναι διατεταγμένα σφαιρικά, και από εδώ κι έπειτα, από τη φυσική άποψη, είναι μηδενικής-διάστασης αντικείμενα με διακριτές ενεργειακές καταστάσεις. Τα φουλερένια μπορούμε να τα βρούμε εισάγοντας πεντάγωνο στο γραφένιο (αυτό δημιουργεί τις θετικές ατέλειες κυρτότητας), και από εδώ και στο εξής, τα φουλερένια μπορούμε να τα θεωρήσουμε ως τυλιγμένο γραφένιο. Τους νανοσωλήνες άνθρακα (Saito και άλλοι, 1998; Charlier και άλλοι, 2007) μπορούμε να τους βρούμε από κυλιόμενο γραφένιο κατά μήκος μιας δοθείσας κατεύθυνσης και επανασυνδέοντας τους δεσμούς άνθρακα. Συνεπώς οι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν μόνο εξάγωνα και μπορούμε να τους θεωρήσουμε ως μονοδιάστατα (1D) αντικείμενα. Ο γραφίτης, ένα τρισδιάστατο (3D) αλλότροπο του άνθρακα, έγινε ευρύτερα γνωστός από την εφεύρεση του μολυβιού το 1564 (Petroski, 1989), και η χρησιμότητα ως ένα όργανο γραφής ήρθε από το γεγονός ότι ο γραφίτης φτιάχνεται από στοίβες από στρώματα γραφενίου ασθενώς συζευγμένες από δυνάμεις van der Waals. Οπότε, όταν πιέζεται ένα μολύβι πάνω σε ένα φύλλο χαρτιού, αυτό πράγματι παράγει στοίβες γραφενίου και, κάπου μεταξύ τους, θα μπορούσαν να υπάρξουν μεμονωμένα στρώματα γραφενίου. Αν και το γραφένιο είναι η μητέρα όλων αυτών των αλλότροπων και πιθανώς έχει παραχθεί κάθε φορά που κάποιος γράφει με ένα μολύβι, αυτό απομονώθηκε 440 χρόνια μετά την ανακάλυψη του (Novoselov και άλλοι, 2004). Ο λόγος γι' αυτό είναι, πρώτον, ότι κανείς στην πραγματικότητα δεν περίμενε το γραφένιο να υπάρχει σε ελεύθερη κατάσταση και, δεύτερον, ακόμη και με το πλεονέκτημα της αποκτηθείσας πείρας, πειραματικά εργαλεία δεν υπήρξαν για να αναζητήσουν για φύλλα ενός ατόμου μονού πυκνού στρώματος μεταξύ των 'θραυσμάτων' του μολυβιού για την κάλυψη μακροσκοπικών περιοχών (Geim και MacDonald, 2007). Το γραφένιο τελικά εντοπίστηκε εξαιτίας της λεπτής οπτικής επίδρασης που δημιούργησε στην κορυφή ενός επιλεγμένου SiO₂ υποστρώματος (Novoselov και άλλοι, 2004) όπου επιτρέπει την παρατήρησή του με ένα συνηθισμένο οπτικό μικροσκόπιο (Abergel και άλλοι, 2007; Blake και άλλοι, 2007; Casiraghi και άλλοι, 2007). Επομένως, το γραφένιο είναι σχετικά απλό να φτιαχτεί, αλλά δεν είναι εύκολο να βρεθεί.



Εικόνα 1. Το γραφένιο (πάνω αριστερά) είναι ένα κυψελοειδές πλέγμα από άτομα άνθρακα. Ο γραφίτης (πάνω δεξιά) μπορεί να θεωρηθεί ως μια στοίβα από στρώματα γραφενίου. Οι νανοσωλήνες άνθρακα είναι σε μορφή κυλινδρικού ρολού (κάτω αριστερά). Τα φουλερένια (C₆₀) είναι μόρια που αποτελούνται από τυλιγμένο γραφένιο με την εισαγωγή των πενταγώνων στο εξαγωνικό πλέγμα. Από τον Castro Neto και άλλους, 2006a.

Η δομική ευελιξία του γραφενίου αντανακλάται στις ηλεκτρονικές του ιδιότητες. Ο sp^2 υβριδισμός μιας s τροχιάς και δύο p τροχιών οδηγεί σε μια επίπεδη τριγωνική δομή με μια σ διάταξη μεταξύ των ατόμων του άνθρακα τα οποία διαχωρίζονται από 1.42 Å. Η σ ζώνη είναι υπεύθυνη για την ευρωστία της δομής του πλέγματος σε όλα τα αλλότροπα. Εξαιτίας της αρχής/του αξιώματος Pauli, αυτές οι ζώνες έχουν ένα γεμισμένο περίβλημα και, γι' αυτό και σχηματίζουν μια βαθιά ζώνη σθένους. Η ανεπηρέαστη p τροχιά, η οποία είναι κάθετη προς την επίπεδη δομή, μπορεί να δεσμεύσει ομοιοπολικά (με τα γειτονικά) άτομα άνθρακα, οδηγώντας στον σχηματισμό μιας π ζώνης. Η κάθε p τροχιά έχει ένα εξτρά ηλεκτρόνιο, η π ζώνη είναι μισό-γεμισμένη.

Στη μετάβαση στοιχείων, οι μισο-γεμισμένες ζώνες έχουν παίξει σημαντικό ρόλο στη φυσική, συνδέοντας ισχυρά συστήματα δεδομένου ότι, λόγω του χαρακτήρα στενής-σύνδεσης, οι ενέργειες Coulomb είναι μεγάλες και οδηγούν σε ομαδικές ισχυρές επιπτώσεις, μαγνητισμού, έχοντας συμπεριφορά μόνωσης η οποία οφείλεται σε χάσματα συσχετισμού (Phillips, 2006). Στην πραγματικότητα, ο Linus Pauling την δεκαετία του 1950 πρότεινε ότι, βάσει των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων του βενζολίου, το γραφένιο θα μπορούσε να είναι μια ηχηρή δομή δεσμών σθένους (RVB) (Pauling, 1972). Οι καταστάσεις RVB έχουν γίνει δημοφιλείς στη βιβλιογραφία της μετάβασης-μετάλλων οξειδίων, και ιδιαίτερα στις μελέτες των υπεραγωγών χαλκού-οξειδίου (Maple, 1998). Αυτή η άποψη θα μπορούσε να συγκριθεί με σύγχρονες μελέτες για την δομή των ζωνών του γραφενίου (Wallace, 1947) στις οποίες έχει διαπιστωθεί πως είναι ένα ημι-μέταλλο με ασυνήθιστη γραμμική διασπορά ηλεκτρονικών διεγέρσεων που ονομάζονται ηλεκτρόνια Dirac. Ενώ τα περισσότερα τρέχοντα πειραματικά δεδομένα στο γραφένιο υποστηρίζουν αυτή την άποψη για τη δομή των ζωνών, ο ρόλος των αλληλεπιδράσεων ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου σε γραφένιο αποτελεί αντικείμενο έντονης έρευνας.

Το 1946 ο P.R.Wallace πρωτο-έγραψε για την δομή του γραφενίου και έδειξε την ασυνήθιστη ημι-μεταλλική συμπεριφορά σε αυτό το υλικό (Wallace, 1947). Εκείνη την εποχή, η σκέψη μιας καθαρά δισδιάστατης (2D) δομής δεν μπορούσε να γίνει πραγματικότητα και οι μελέτες του Wallace για το γραφένιο του χρησίμευσαν ως αφετηρία για τη μελέτη γραφίτη, ενός σημαντικού υλικού για τους πυρηνικούς αντιδραστήρες στην - μετά τον Β' Παγκόσμιο Πόλεμο - εποχή. Κατά τη διάρκεια των επόμενων ετών, η μελέτη του γραφίτη κορυφώθηκε από τους Slonczewski-Weiss-McClure (SWM) για την δομή της ζώνης του γραφίτη, η οποία παρείχε μια περιγραφή των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων σε αυτό το υλικό (McClure, 1957; Slonczewski και Weiss, 1958) και ήταν επιτυχής στην περιγραφή των πειραματικών δεδομένων (Boyle και Nozières, 1958; McClure, 1958; Spry και Scherer, 1960; Soule και άλλοι, 1964; Williamson και άλλοι, 1965; Dillon και άλλοι, 1977). Από το 1957 έως το 1968, η εκχώρηση των ηλεκτρονίων και των οπών στο πρότυπο SWM ήταν αντίθετη στο τι είναι αποδεκτό σήμερα. Το 1968, ο Schroeder και άλλοι (Schroeder και άλλοι, 1968) καθόρισαν την παρούσα αποδεκτή τοποθεσία του ηλεκτρονίου και των οπών τσέπης (McClure, 1971). Το πρότυπο SWM έχει επανεξεταστεί τα τελευταία χρόνια λόγω της αδυναμίας να περιγράψει τις αλληλεπιδράσεις van der Waals μεταξύ των επιπέδων γραφενίου, ένα πρόβλημα όπου απαιτείται η κατανόηση των αποτελεσμάτων πολλών σωμάτων που υπερβαίνουν την περιγραφή της δομής της ζώνης (Rydberg και άλλοι, 2003). Ωστόσο, τα θέματα αυτά, δεν προκύπτουν στο πλαίσιο ενός μοναδικού κρυσταλλικού γραφενίου αλλά εμφανίζονται όταν τα στρώματα γραφενίου στοιβάζονται το ένα πάνω στο άλλο, όπως στην περίπτωση, για παράδειγμα, της διπλής στιβάδας γραφενίου. Η συσσώρευση μπορεί να αλλάξει τις ηλεκτρονικές ιδιότητες σημαντικά και η δομή της διαστρωμάτωσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί προκειμένου να ελεγχθούν οι ηλεκτρονικές ιδιότητες.

Μια από τις πιο ενδιαφέρουσες πτυχές ενός προβλήματος γραφενίου είναι ότι οι διεγέρσεις (χαμηλής καταναλώσεως ενέργειας) είναι χωρίς μάζα, στροφικά, φερμιόνια Dirac. Σε ουδέτερο γραφένιο, το χημικό δυναμικό διασχίζει ακριβώς το σημείο Dirac. Αυτή η ιδιαίτερη διασπορά, η οποία ισχύει μόνο στις χαμηλές ενέργειες, μιμείται τη φυσική της κβαντικής ηλεκτροδυναμικής (QED) για τα φερμιόνια χωρίς

μάζα για το γεγονός ότι στο γραφένιο τα φερμιόνια Dirac μετακινούνται με μια ταχύτητα v_F , η οποία είναι 300 φορές μικρότερη από την ταχύτητα του φωτός c . Επομένως, πολλές από τις ασυνήθιστες ιδιότητες του QED μπορούν να παρουσιάσουν στο γραφένιο αλλά με τις πολύ μικρότερες ταχύτητες (Castro Neto και άλλοι, 2006a; Katsnelson και άλλοι, 2006; Katsnelson και Novoselov, 2007). Τα φερμιόνια Dirac, εάν υποβληθούν σε μαγνητικά πεδία, συμπεριφέρονται με ασυνήθιστους τρόπους, σε σύγκριση με τα συνηθισμένα ηλεκτρόνια και οδηγούνται σε νέα φυσικά φαινόμενα (Gusynin και Sharapov, 2005; Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a) όπως το ανώμαλο ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall (IQHE) όπου μετριέται πειραματικά (Novoselov, Geim, Morozov, και άλλοι, 2005a; Zhang και άλλοι, 2005). Πέραν του ότι είναι ποιοτικά διαφορετικό από το IQHE, παρατηρήθηκαν σε συσκευές πυριτίου και σε διόδους GaAlAs (ετεροδομές) (Stone, 1992), το IQHE (στο γραφένιο) μπορεί να παρατηρηθεί σε θερμοκρασία δωματίου λόγω των μεγάλων ενεργειών κυκλοτρονίων για τα «συγγενή» ηλεκτρόνια (Novoselov και άλλοι, 2007). Στην πραγματικότητα, το ανώμαλο IQHE είναι το σήμα κατατεθέν της συμπεριφοράς του φερμιονίου Dirac.

Ένα άλλο ενδιαφέρον χαρακτηριστικό των φερμιονίων Dirac είναι η ευαισθησία τους σε εξωτερικά ηλεκτροστατικά δυναμικά όπου οφείλεται στο αποκαλούμενο παράδοξο Klein, δηλαδή, το γεγονός ότι τα φερμιόνια Dirac μπορούν να διαβιβάζονται με πιθανότητα 1 μέσω μιας κλασικά απαγορευμένης περιοχής (Calogeracos και Dombey, 1999; Itzykson και Zuber, 2006). Στην πραγματικότητα, τα φερμιόνια Dirac συμπεριφέρονται με έναν ασυνήθιστο τρόπο με την παρουσία του περιορισμού των δυνατοτήτων, που οδηγούν στο φαινόμενο Zitterbewegung, ή της νευρικής κίνησης της κυματοσυνάρτησης (Itzykson και Zuber, 2006). Στο γραφένιο, αυτές οι ηλεκτροστατικές δυνατότητες μπορούν να παραχθούν εύκολα από την αναταραχή. Δεδομένου ότι η αναταραχή είναι αναπόφευκτη σε οποιοδήποτε υλικό, έχει υπάρξει πολύ μεγάλο ενδιαφέρον στην προσπάθεια να γίνει κατανοητό πως η αναταραχή επηρεάζει τη φυσική των ηλεκτρονίων στο γραφένιο και τις ιδιότητες μεταφοράς του. Στην πραγματικότητα, κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες, τα φερμιόνια Dirac έχουν ανοσία στα αποτελέσματα που παρατηρήθηκαν σε συνηθισμένα ηλεκτρόνια (Lee και Ramakrishnan, 1985) και έχει αποδειχθεί πειραματικά ότι τα ηλεκτρόνια μπορούν να διαδοθούν χωρίς να διασκορπιστούν σε αποστάσεις της τάξης των μικρομέτρων πάνω στο γραφένιο (Novoselov και άλλοι, 2004). Οι πηγές της αναταραχής στο γραφένιο είναι πολλές και μπορούν να διαφέρουν από τα συνηθισμένα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα συνήθως στους ημιαγωγούς, όπως οι ιονισμένες προσμείξεις στο υπόστρωμα του πυριτίου, σε ξένα άτομα και διάφορα μόρια που προσροφούνται στην επιφάνεια του γραφενίου, στις πιο ασυνήθιστες ατέλειες όπως οι κυματισμοί που σχετίζονται με τη μαλακή δομή του γραφενίου (Meyer, Geim, Katsnelson, Novoselov, Booth, και άλλοι, 2007a). Πράγματι, το γραφένιο είναι μοναδικό υπό την έννοια ότι μοιράζεται τις ιδιότητες των μαλακών μεμβρανών (Nelson και άλλοι, 2004) και την ίδια στιγμή συμπεριφέρεται με έναν μεταλλικό τρόπο, έτσι ώστε τα φερμιόνια Dirac διαδίδονται μέσα σε ένα τοπικό κυρτό χώρο. Εδώ οι αντιστοιχίες με τα προβλήματα της κβαντικής βαρύτητας γίνονται προφανείς (Fauser και άλλοι, 2007). Η απαλότητα του γραφενίου σχετίζεται με το γεγονός ότι εκτός του επιπέδου έχει παλμικές λειτουργίες (φωνόνια) τις οποίες δεν συναντούμε στα τρισδιάστατα (3D) στερεά. Αυτές οι λειτουργίες, είναι υπεύθυνες για τις ιδιότητες κάμψης του γραφενίου, κι επίσης ευθύνονται ότι στις μαλακές μεμβράνες έχουν μικρής εμβέλειας δομική διάταξη κάτι το οποίο οδηγεί στο φαινόμενο του τσαλακώματος (Nelson και άλλοι, 2004). Παρ' όλα αυτά, η παρουσία ενός υποστρώματος ή ικρωμάτων (σκαλωσιών) όπου διατηρούν το γραφένιο σε θέση να μπορεί να σταθεροποιήσει έναν ορισμένο βαθμό της τάξης του γραφενίου αλλά αφήνει πίσω του τους αποκαλούμενους κυματισμούς (οι οποίοι μπορούν να αντιμετωπιστούν ως παγωμένες λειτουργίες κάμψης).

Έγινε αντιληπτό νωρίτερα ότι στο γραφένιο θα πρέπει επίσης να παρουσιαστούν τα ασυνήθιστα μεσοσκοπικά αποτελέσματα. (Peres, Castro Neto, και Guinea, 2006a; Katsnelson, 2007a). Αυτές οι επιδράσεις έχουν την προέλευσή τους στις συνοριακές συνθήκες που απαιτούνται για τις κυματοσυναρτήσεις σε μεσοσκοπικά δείγματα με διάφορους τύπους που μπορούν να έχουν οι ακμές του γραφενίου (Nakada και άλλοι, 1996; Wakabayashi και άλλοι, 1999; Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a;

Akhmerov και Beenakker, 2008). Οι πιο πολλές μελέτες για τις άκρες, μορφής ζικ-ζακ και μορφής πολυθρόνας, έχουν δραστικά διαφορετικές ηλεκτρονικές ιδιότητες. Οι ζικ-ζακ άκρες μπορούν να διατηρήσουν την άκρη (επιφάνεια) από διάφορες καταστάσεις και συντονισμούς οι οποίες δεν υπάρχουν στην περίπτωση της πολυθρόνας. Επιπλέον, οι συνοριακές συνθήκες όταν συνδέονται με τη διεύθυνση των αγωγών, για μια κορδέλα γραφενίου, επηρεάζουν σημαντικά την αγωγιμότητα του και η στροφική φύση των φερμιονίων Dirac στο γραφένιο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για εφαρμογές όπου μπορεί κανείς να ελέγξει τη μορφή της κοιλιάδας που παρουσιάζουν τα ηλεκτρόνια εκτός από το φορτίο, τα λεγόμενα valleytronics (Rycerz και άλλοι, 2007). Επιπλέον, όταν οι υπεραγωγίμες επαφές συνδέονται με το γραφένιο, αυτές οδηγούν στην ανάπτυξη της παροχής υπερ-ρεύματος και ο Andreev επεξεργάζεται τα χαρακτηριστικά της εγγύτητας της επίδρασης της υπερ-αγωγιμότητας. (Heersche και άλλοι, 2007). Το γεγονός ότι τα ζεύγη Cooper μπορούν να διαδοθούν τόσο καλά στο γραφένιο επιβεβαιώνει την ισχυρή ηλεκτρονική συνοχή που υπάρχει σε αυτό το υλικό. Στην πραγματικότητα, τα κβαντικά φαινόμενα παρεμβολής, έχουν ως γνώρισμα τον ασθενή εντοπισμό, τις καθολικές διακυμάνσεις αγωγιμότητας (Morosov και άλλοι, 2006), και το φαινόμενο Aharonov-Bohm στα δαχτυλίδια γραφενίου έχει ήδη παρατηρηθεί πειραματικά (Recher και άλλοι, 2007; Russo, 2007). Η βαλλιστική ηλεκτρονική εξάπλωση στο γραφένιο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για συσκευές πεδίου-επίδρασης όπως p-n (Cheianov και Fal'ko, 2006; Cheianov, Fal'ko, και Altshuler, 2007; Huard και άλλοι, 2007; Lemme και άλλοι, 2007; Tworzydło και άλλοι, 2007; Williams και άλλοι, 2007; Fogler, Glazman, Novikov, και άλλοι, 2008; Zhang και Fogler, 2008) και p-n-p (Ossipov και άλλοι, 2007) και ως διακλαδώσεις (Berry και Modragon, 1987; Miao και άλλοι, 2007). Επίσης, έχει υποστηριχθεί ότι οι αλληλεπιδράσεις Coulomb είναι σημαντικά ενισχυμένες σε μικρότερες γεωμετρίες, όπως οι κβαντικές κουκκίδες γραφενίου (Milton Pereira και άλλοι, 2007), οδηγώντας σε ασυνήθιστες επιπτώσεις αποκλεισμού Coulomb (Geim και Novoselov, 2007) και ίσως σε μαγνητικά φαινόμενα όπως το φαινόμενο Kondo. Οι μεταφορικές ιδιότητες του γραφενίου, επιτρέπουν για τη χρήση τους, σε μια πληθώρα εφαρμογών που κυμαίνονται από τον ενιαίο εντοπισμό μορίων (Schedin και άλλοι, 2007; Wehling και άλλοι, 2008) ως την έγχυση περιστροφής (Cho και άλλοι, 2007; Hill και άλλοι, 2007; Ohishi και άλλοι, 2007; Tombros και άλλοι, 2007).

Λόγω της ασυνήθιστης δομικής και ηλεκτρονικής ευελιξίας του, το γραφένιο μπορεί να προσαρμοστεί χημικά ή/και δομικά με πολλούς διαφορετικούς τρόπους:

- (α) εναπόθεση των μεταλλικών ατόμων (Calandra και Mauri, 2007; Uchoa και άλλοι, 2008) ή των μορίων (Schedin και άλλοι, 2007; Leenaerts και άλλοι, 2008; Wehling και άλλοι, 2008) στην κορυφή
- (β) παρεμβολή [όπως γίνεται στον γραφίτη που παρεμβάλλεται με ενώσεις (Dresselhaus και άλλοι, 1983; Tanuma και Kamimura, 1985; Dresselhaus και Dresselhaus, 2002)]
- (γ) ενσωμάτωση του αζώτου ή/και του βορίου στη δομή του (Martins και άλλοι, 2007; Peres, Klironomos, Tsai, και άλλοι, 2007) [κατ' αναλογία με ότι έχει γίνει στους νανοσωλήνες (Stephan και άλλοι, 1994)] και
- (δ) χρησιμοποιώντας διαφορετικά υποστρώματα που τροποποιούν την ηλεκτρονική δομή (Calizo και άλλοι, 2007; Giovannetti και άλλοι, 2007; Varchon και άλλοι, 2007; Zhou και άλλοι, 2007; Das και άλλοι, 2008; Faugeras και άλλοι, 2008).

Ο έλεγχος των ιδιοτήτων του γραφενίου μπορεί να επεκταθεί σε νέες κατευθύνσεις που επιτρέπουν τη δημιουργία συστημάτων που είναι βασισμένα στο γραφένιο με μαγνητικές και υπεραγωγίμες ιδιότητες (Uchoa και Castro Neto, 2007) που είναι μοναδικές στις δισδιάστατές τους (2D) ιδιότητες. Παρά το γεγονός πως ο τομέας του γραφενίου είναι ακόμα σε πρώιμο στάδιο, οι επιστημονικές και τεχνολογικές δυνατότητες αυτού του νέου υλικού φαίνονται να είναι απεριόριστες. Η κατανόηση και ο έλεγχος των ιδιοτήτων αυτού του υλικού μπορούν να ανοίξουν πόρτες και να επεκτείνουν τα σύνορα της ηλεκτρονικής. Δεδομένου ότι η παρούσα κατάσταση του πειράματος και οι πιθανές εφαρμογές έχουν εξεταστεί πρόσφατα (Geim και Novoselov, 2007), σε αυτό το έγγραφο επικεντρωνόμαστε στη θεωρία και τις τεχνικές πλευρές των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων με αυτό το νέο συναρπαστικό υλικό.

II. ΣΤΟΙΧΕΙΩΔΕΙΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ

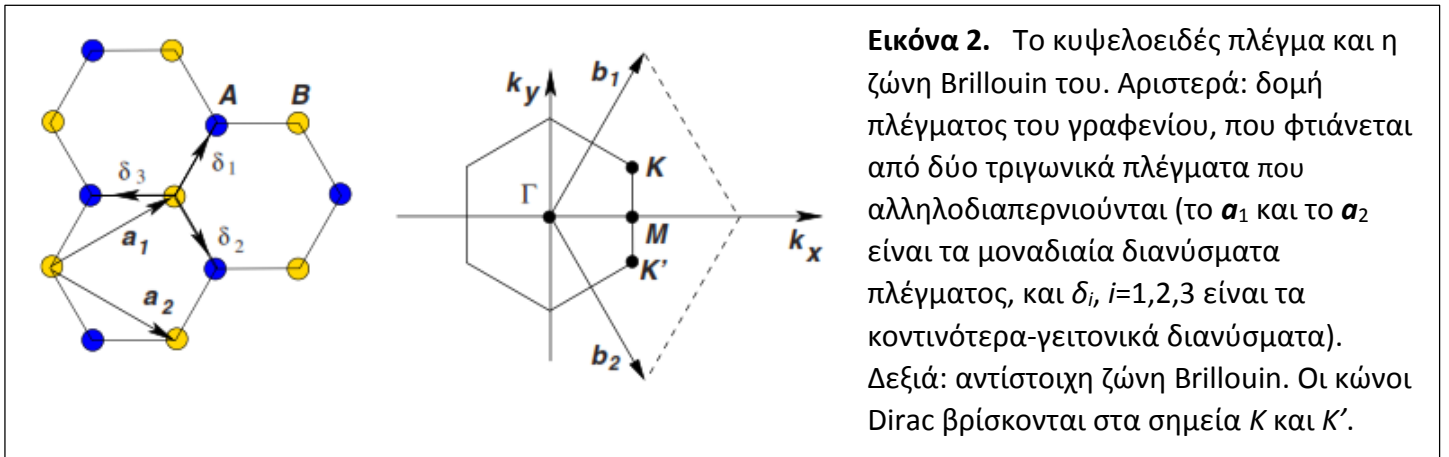
A. Μονό στρώμα: Προσέγγιση στενής-σύνδεσης

Το γραφένιο φτιάχνεται από άτομα άνθρακα που είναι τοποθετημένα σε εξαγωνική δομή, όπως φαίνεται στην εικόνα 2. Η δομή μπορεί να θεωρηθεί ως ένα τριγωνικό πλέγμα με μια βάση δύο ατόμων ανά μοναδιαία κυψελίδα. Τα διανύσματα του πλέγματος μπορούν να γραφτούν ως

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

Όπου $a \approx 1.42 \text{ \AA}$ είναι η απόσταση άνθρακα-άνθρακα. Τα διανύσματα αμοιβαίου-πλέγματος δίνονται από

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



Για τη φυσική του γραφενίου, ιδιαίτερα σημαντικά είναι τα δύο σημεία K και K' στις γωνίες ζώνης Brillouin του γραφενίου (BZ). Αυτά ονομάζονται σημεία Dirac για λόγους που θα γίνουν ξεκάθαροι αργότερα. Οι θέσεις τους στο χώρο ώθησης δίνονται από

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right). \quad (3)$$

Τα τρία κοντινότερα-γειτονικά διανύσματα στον πραγματικό χώρο δίνονται από

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}) \quad \delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad \delta_3 = -a(1, 0) \quad (4)$$

ενώ τα έξι δεύτερα-κοντινότερα γειτονικά βρίσκονται στα

$$\delta'_1 = \pm \mathbf{a}_1, \quad \delta'_2 = \pm \mathbf{a}_2, \quad \delta'_3 = \pm (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1).$$

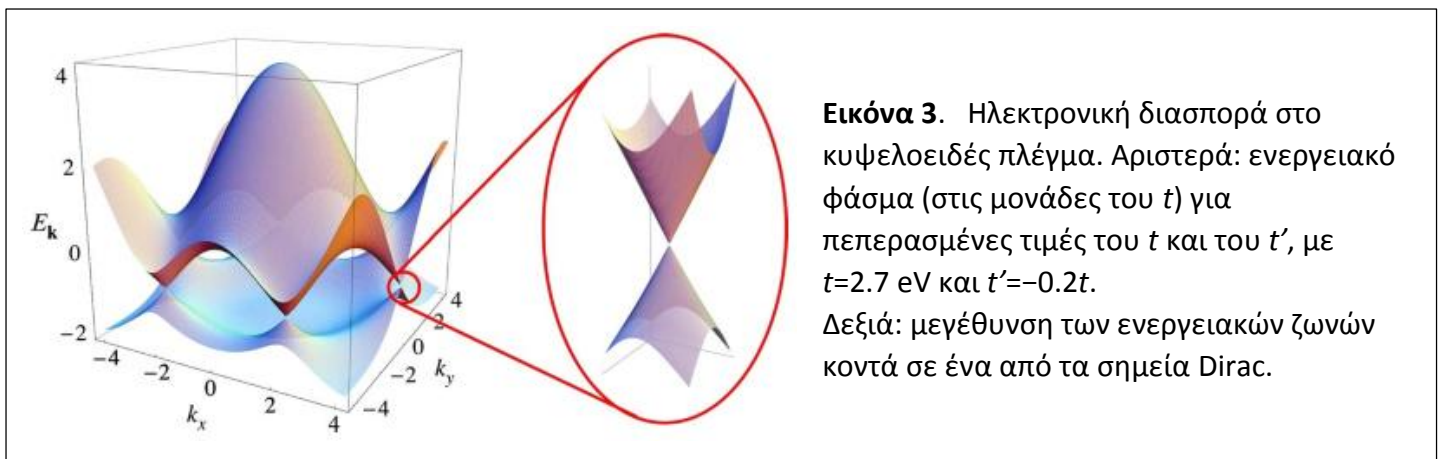
Θεωρώντας ότι τα ηλεκτρόνια μπορούν αναπηδήσουν στα δύο πλησιέστερα και στα επόμενα-κοντινότερα-γειτονικά άτομα, η Χαμιλτονιανή στενής-σύνδεσης για τα ηλεκτρόνια στο γραφένιο έχει τη μορφή (χρησιμοποιούμε τις μονάδες έτσι ώστε $\hbar = 1$)

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + \text{H.c.}) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j} + b_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + \text{H.c.}), \quad (5)$$

όπου $\alpha_{i,\sigma}$ ($\alpha_{i,\sigma}^\dagger$) εκμηδενίζει (δημιουργεί) ένα ηλεκτρόνιο με την περιστροφή σ ($\sigma=\uparrow, \downarrow$) στην περιοχή \mathbf{R}_i στο υπόπλεγμα A (ένας ισοδύναμος ορισμός χρησιμοποιείται για το υπόπλεγμα B), $t(\approx 2.8 \text{ eV})$ είναι η κοντινότερη-γειτονική ενέργεια αναπήδησης (αναπήδηση μεταξύ διαφορετικών υποπλεγμάτων), και το t' είναι η επόμενη κοντινότερη-γειτονική ενέργεια αναπήδησης¹ (αναπήδηση στο ίδιο υπόπλεγμα). Οι ενεργειακές ζώνες που προέρχονται από αυτή της Χαμιλτονιανής έχουν τη μορφή (Wallace, 1947)

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t\sqrt{3 + f(\mathbf{k})} - t'f(\mathbf{k}),$$

¹ Η τιμή του t' δεν είναι επαρκώς γνωστή αλλά οι υπολογισμοί από την αρχή (Reich και άλλοι, 2002) βρίσκουν $0.02t \leq t' \leq 0.2t$ ανάλογα με την παραμετροποίηση στενής-σύνδεσης. Οι υπολογισμοί αυτοί περιλαμβάνουν επίσης το αποτέλεσμα της επίδρασης αναπήδησης ενός τρίτου-κοντινότερου-γειτονικού, το οποίο έχει μια τιμή γύρω στα 0.07 eV. Καθιερώθηκε μια εφαρμογή στενής-σύνδεσης για πειράματα συντονισμού κυκλοτρονίων (Deacon και άλλοι, 2007) όπου βρίσκουν $t' \approx 0.1 \text{ eV}$.



$$f(\mathbf{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right), \quad (6)$$

Όπου το σύμβολο της πρόσθεσης ισχύει για την ανώτερη (π^*) και το σύμβολο της αφαίρεσης για τη χαμηλότερη (π) ζώνη. Είναι ξεκάθαρο από την εξίσωση (6) ότι το φάσμα είναι συμμετρικό γύρω περίπου μηδενικής κατανάλωσης ενέργειας, εάν $t'=0$. Για πεπερασμένες τιμές του t' η συμμετρία ηλεκτρονίων-οπών διασπάται και οι π και π^* ζώνες γίνονται ασύμμετρες. Στην εικόνα 3, δείχνουμε την πλήρη δομή της ζώνης του γραφενίου με αμφότερα τα t και t' . Στην ίδια εικόνα, μπορούμε επίσης να δείξουμε μια μεγέθυνση της δομής της ζώνης κοντά σε ένα από τα σημεία Dirac (στο K ή στο K' σημείο στο BZ). Αυτή η διασπορά μπορεί να επιτευχθεί με την επέκταση της πλήρους δομής της ζώνης, εξίσωση (6), κοντά στο \mathbf{K} (ή στο \mathbf{K}') διάνυσμα, εξίσωση (3), ως $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$, με $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{K}|$ (Wallace, 1947),

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \approx \pm v_F |\mathbf{q}| + O[(q/K)^2], \quad (7)$$

όπου το \mathbf{q} είναι η ορμή που μετρήθηκε σε σχέση με τα σημεία Dirac και η v_F είναι η ταχύτητα Fermi, που δίνεται από $v_F = 3ta/2$, με μια τιμή $v_F \approx 1 \times 10^6 \text{ m/s}$. Το αποτέλεσμα αυτό αρχικά λήφθηκε από τον Wallace (1947).

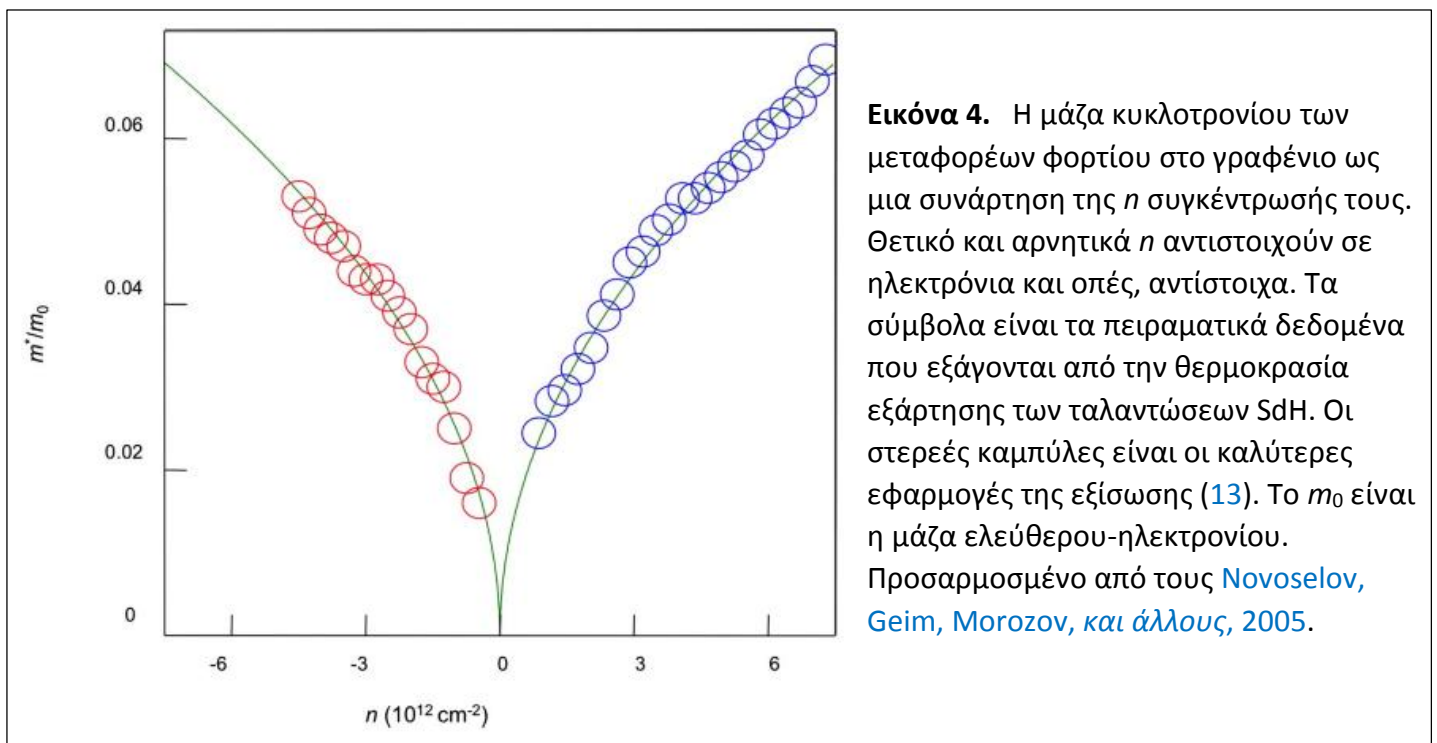
Η πιο εντυπωσιακή διαφορά μεταξύ αυτού του αποτελέσματος και της συνηθισμένης περίπτωσης, $\epsilon(\mathbf{q}) = q^2/(2m)$, όπου m είναι η μάζα του ηλεκτρονίου, είναι ότι η ταχύτητα Fermi στην εξίσωση (7) δεν

εξαρτάται από την ενέργεια ή την ορμή: στη συνηθισμένη περίπτωση έχουμε $v = k/m = \sqrt{2E/m}$ και γι' αυτό και η ταχύτητα ουσιαστικά αλλάζει με την ενέργεια. Η επέκταση του φάσματος γύρω από το σημείο Dirac συμπεριλαμβανομένου του t' μέχρι και τη δεύτερη σειρά στο q/K δίνεται από

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \approx 3t' \pm v_F |\mathbf{q}| - \left(\frac{9t'a^2}{4} \pm \frac{3ta^2}{8} \sin(3\theta_{\mathbf{q}}) \right) |\mathbf{q}|^2, \quad (8)$$

όπου $\theta_{\mathbf{q}} = \arctan\left(\frac{q_x}{q_y}\right)$ (9) είναι η γωνία στο διάστημα ορμής.

Εξ ου και, η παρουσία των t' μετατοπίσεων σε ενέργεια, η θέση του σημείου Dirac σπάει/κόβει τη συμμετρία ηλεκτρονίου και οπής. Σημειώστε ότι μέχρι να διαταχτεί $(q/K)^2$ η διασπορά εξαρτάται από την κατεύθυνση στο χώρο ορμής και έχει τριπλάσια συμμετρία. Αυτό είναι η αποκαλούμενη τρίγωνη παραμόρφωση του ηλεκτρονικού φάσματος (Ando και άλλοι, 1998, Dresselhaus και Dresselhaus, 2002).



Εικόνα 4. Η μάζα κυκλοτρονίου των μεταφορέων φορτίου στο γραφένιο ως μια συνάρτηση της n συγκέντρωσής τους. Θετικό και αρνητικά n αντιστοιχούν σε ηλεκτρόνια και οπές, αντίστοιχα. Τα σύμβολα είναι τα πειραματικά δεδομένα που εξάγονται από την θερμοκρασία εξάρτησης των ταλαντώσεων SdH. Οι στερεές καμπύλες είναι οι καλύτερες εφαρμογές της εξίσωσης (13). Το m_0 είναι η μάζα ελεύθερου-ηλεκτρονίου. Προσαρμοσμένο από τους [Novoselov, Geim, Morozov, και άλλους, 2005](#).

1. Μάζα κυκλότροπου

Η διασπορά της ενέργειας (7) θυμίζει την ενέργεια των υπερ-σχετικιστικών μορίων. Τα μόρια αυτά είναι μέρος της κβαντικής μηχανικής που περιγράφεται από τη άμαξη εξίσωση Dirac (δείτε την ενότητα II.B για περισσότερες πληροφορίες για αυτήν την αναλογία). Μια άμεση συνέπεια αυτής της άμαξης dirac - όπως η διασπορά είναι μια μάζα κυκλοτρονίου που εξαρτάται από την ηλεκτρονική πυκνότητα ως τετραγωνική ρίζα της (Novoselov, Geim, Morozov, και άλλοι, 2005; Zhang και άλλοι, 2005). Η μάζα κυκλοτρονίου ορίζεται, εντός της ημι-κλασσικής προσέγγισης (Ashcroft και Mermin, 1976), όπως

$$m^* = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{\partial A(E)}{\partial E} \right]_{E=E_F}, \quad (10)$$

με την $A(E)$ περιοχή στον k χώρο που οριοθετείται από την τροχιά και δίνεται από

$$A(E) = \pi q(E)^2 = \pi \frac{E^2}{v_F^2}. \quad (11)$$

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (11) στην εξίσωση (10), λαμβάνουμε την

$$m^* = \frac{E_F}{v_F^2} = \frac{k_F}{v_F}. \quad (12)$$

Η ηλεκτρονική πυκνότητα n σχετίζεται με την ορμή Fermi k_F ως $k_F^2/\pi=n$ (με συνεισφορές από τα δύο σημεία Dirac K και K' και συμπεριλαμβανομένης περιστροφής), η οποία οδηγεί σε

$$m^* = \frac{\sqrt{\pi}}{v_F} \sqrt{n}. \quad (13)$$

Προσαρμόοντας την εξίσωση (13) στα πειραματικά δεδομένα (δείτε την εικόνα 4) παρέχει μια εκτίμηση για την ταχύτητα Fermi και την παράμετρο αναπύδησης ως $v_F \approx 10^6 \text{ ms}^{-1}$ και $t \approx 3 \text{ eV}$, αντίστοιχα. Η πειραματική παρατήρηση της \sqrt{n} εξάρτησης από τη μάζα κυκλοτρονίου, παρέχει αποδεικτικά στοιχεία για την ύπαρξη εν μέρη άμαζων σωματιδίων Dirac στο γραφένιο (Novoselov, Geim, Morozov, και άλλοι, 2005; Zhang και άλλοι, 2005; Deacon και άλλοι, 2007; Jiang, Henriksen, Tung, και άλλοι, 2007) – η συνήθης παραβολική (Schrödinger) διασπορά προϋποθέτει ένα κυκλοτρόνιο σταθερής μάζας.

2. Πυκνότητα καταστάσεων

Η πυκνότητα των καταστάσεων ανά μοναδιαίο κύτταρο, που προέρχεται από την εξίσωση (5), δίνεται στην εικόνα 5 και για το $t' = 0$ και για το $t' \neq 0$, δείχνοντας σε δύο περιπτώσεις ημι-μεταλλικές συμπεριφορές (Wallace, 1947; Bena και Kivelson, 2005). Για $t' = 0$, είναι δυνατό να καθοριστεί μια αναλυτική σχέση για την πυκνότητα των καταστάσεων ανά μοναδιαίο κύτταρο, η οποία έχει τη μορφή (Hobson και Nierenberg, 1953)

$$\rho(E) = \frac{4}{\pi^2} \frac{|E|}{t^2} \frac{1}{\sqrt{Z_0}} \mathbf{F} \left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{Z_1}{Z_0}} \right),$$

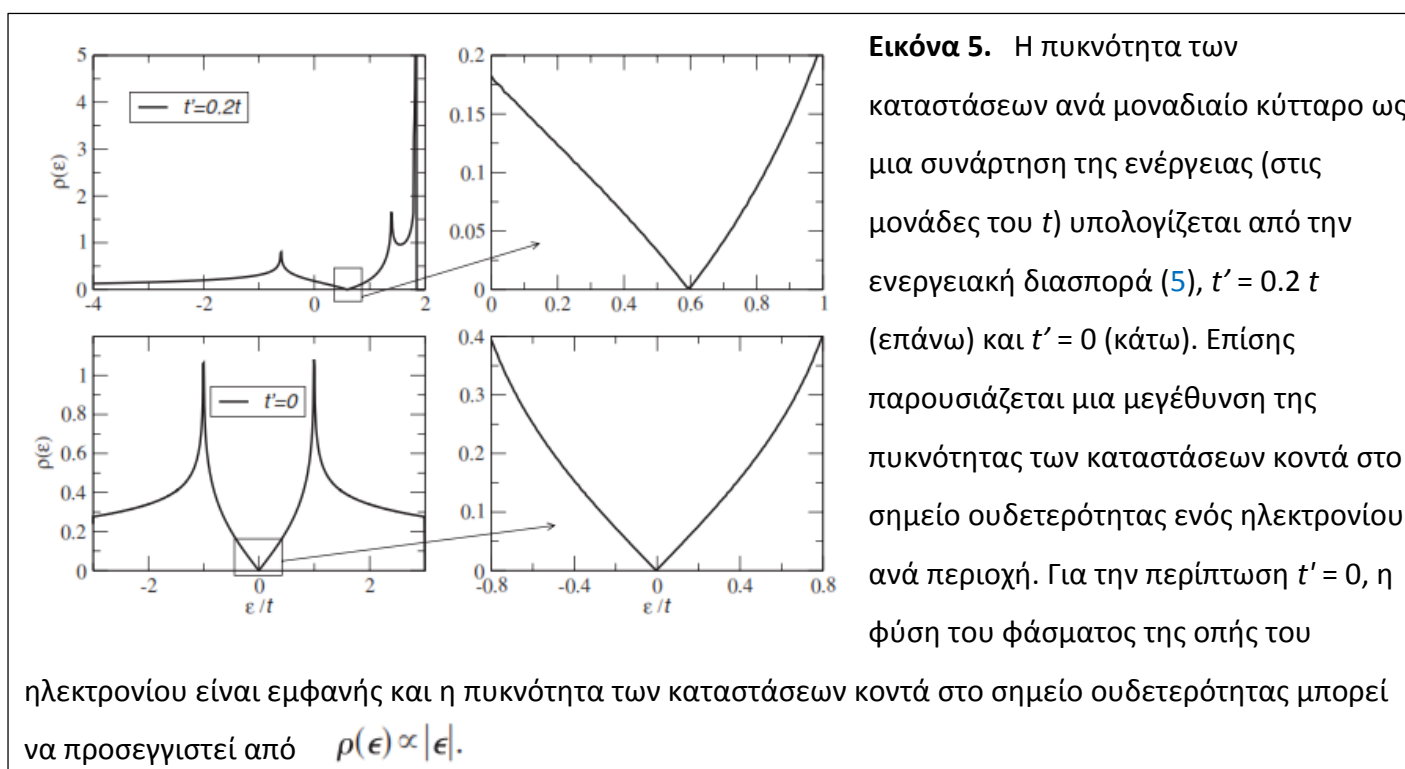
$$Z_0 = \begin{cases} \left(1 + \left|\frac{E}{t}\right|\right)^2 - \frac{[(E/t)^2 - 1]^2}{4}, & -t \leq E \leq t \\ 4 \left|\frac{E}{t}\right|, & -3t \leq E \leq -t \vee t \leq E \leq 3t, \end{cases} \quad (14)$$

$$Z_1 = \begin{cases} 4 \left|\frac{E}{t}\right|, & -t \leq E \leq t \\ \left(1 + \left|\frac{E}{t}\right|\right)^2 - \frac{[(E/t)^2 - 1]^2}{4}, & -3t \leq E \leq -t \vee t \leq E \leq 3t, \end{cases}$$

όπου $F(\pi/2, x)$ είναι το πλήρες ελλειπτικό ολοκλήρωμα του πρώτης κατηγορίας. Κοντά στο σημείο Dirac, η διασπορά υπολογίζεται κατά προσέγγιση από την εξίσωση (7) και η πυκνότητα των καταστάσεων ανά μοναδιαίο κύτταρο δίνεται από

$$\rho(E) = \frac{2A_c |E|}{\pi v_F^2}, \quad (15)$$

όπου A_c είναι η μοναδιαία κυτταρική περιοχή που δίνεται από $A_c = 3\sqrt{3}\alpha^2/2$. Αξίζει να σημειωθεί ότι η πυκνότητα των καταστάσεων για το γραφένιο είναι διαφορετική από την πυκνότητα των καταστάσεων των νανοσωλήνων άνθρακα (Saito και άλλοι, 1992a, 1992b). Η τελευταία παρουσιάζει $1/\sqrt{E}$ μοναδικότητες λόγω της μονοδιάστατης (1D) φύσης του ηλεκτρονικού φάσματός τους, το οποίο εμφανίζεται λόγω της κβαντοποίησης της ορμής στην κάθετη κατεύθυνση του άξονα του σωλήνα. Από αυτήν την άποψη, οι νονοκορδέλες γραφενίου, οι οποίες έχουν επίσης ορμή κβαντισμού κάθετη στο μήκος της κορδέλας, έχουν παρόμοιες ιδιότητες με τους νανοσωλήνες άνθρακα.



B. Φερμιόνια Dirac

Θεωρούμε ότι η Χαμιλτονιανή (5) με $t' = 0$ και ο μετασχηματισμός Fourier των ηλεκτρονίων φορέων,

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} a(\mathbf{k}), \quad (16)$$

όπου N_c είναι ο αριθμός των μοναδιαίων κυττάρων. Χρησιμοποιώντας αυτόν τον μετασχηματισμό, γράφουμε το πεδίο a_n ως άθροισμα των δύο όρων, που προέρχονται από την διεύρυνση του αθροίσματος Fourier γύρω από το \mathbf{K}' και το \mathbf{K} . Αυτό δημιουργεί μια προσέγγιση για την αναπαράσταση του πεδίου a_n ως άθροισμα των δύο νέων πεδίων, γραμμένο σαν

$$a_n \simeq e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_n} a_{1,n} + e^{-i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_n} a_{2,n}, \quad (17)$$

$$b_n \simeq e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_n} b_{1,n} + e^{-i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_n} b_{2,n},$$

όπου ο δείκτης $i=1$ ($i=2$) αναφέρεται στο σημείο K (K'). Αυτά τα νέα πεδία, $a_{i,n}$ και $b_{i,n}$, υποτίθεται ότι μεταβάλλονται αργά μέσα στο μοναδιαίο κύτταρο. Η διαδικασία για την εξαγωγή μιας θεωρίας που ισχύει κοντά στο σημείο Dirac, περιλαμβάνει τη χρησιμοποίηση αυτής της αντιπροσώπευσης στη Χαμιλτονιανή στενής-σύνδεσης και την ενίσχυση των φορέων μέχρι μια γραμμική διάταξη στο δ . Στην παραγωγοποίηση, που χρησιμοποιεί κάποιος το γεγονός ότι $\sum_{\delta} e^{\pm i\mathbf{K}\cdot\delta} = \sum_{\delta} e^{\pm i\mathbf{K}'\cdot\delta} = 0$.

Μετά από απλή/άμεση άλγεβρα, καταλήγουμε στο (Semenoff, 1984)

$$\begin{aligned} H \simeq -t \int dx dy & \hat{\Psi}_1^\dagger(\mathbf{r}) \left[\begin{pmatrix} 0 & 3a(1-i\sqrt{3})/4 \\ -3a(1+i\sqrt{3})/4 & 0 \end{pmatrix} \partial_x + \begin{pmatrix} 0 & 3a(-i-\sqrt{3})/4 \\ -3a(i-\sqrt{3})/4 & 0 \end{pmatrix} \partial_y \right] \hat{\Psi}_1(\mathbf{r}) \\ & + \hat{\Psi}_2^\dagger(\mathbf{r}) \left[\begin{pmatrix} 0 & 3a(1+i\sqrt{3})/4 \\ -3a(1-i\sqrt{3})/4 & 0 \end{pmatrix} \partial_x + \begin{pmatrix} 0 & 3a(i-\sqrt{3})/4 \\ -3a(-i-\sqrt{3})/4 & 0 \end{pmatrix} \partial_y \right] \hat{\Psi}_2(\mathbf{r}) \\ & = -iv_F \int dx dy [\hat{\Psi}_1^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \hat{\Psi}_1(\mathbf{r}) + \hat{\Psi}_2^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \nabla \hat{\Psi}_2(\mathbf{r})], \end{aligned} \quad (18)$$

με τους πίνακες Pauli $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, $\boldsymbol{\sigma}^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$, και $\hat{\Psi}_i^\dagger = (a_i^\dagger, b_i^\dagger)$ ($i=1,2$). Είναι προφανές ότι η αποτελεσματική Χαμιλτονιανή (18) αποτελείται από δύο αντίγραφα του άμαζου Dirac όπως η Hamiltonian, ενός χώρου εκμεταλλεύσεως για το \mathbf{p} γύρω από το \mathbf{K} και το άλλο \mathbf{p} γύρω από \mathbf{K}' . Λάβετε υπόψη ότι, στην πρώτη κβαντοποιημένη γλώσσα, η κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r})$ δύο συνιστωσών ηλεκτρονίων, κοντά στο σημείο K , υπακούει τη δισδιάστατη (2D) εξίσωση Dirac,

$$-iv_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}). \quad (19)$$

Η κυματοσυνάρτηση, στο χώρο ορμής, για τη δυναμική γύρω από το \mathbf{K} έχει τη μορφή

$$\psi_{\pm, \mathbf{K}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\mathbf{k}}/2} \\ \pm e^{i\theta_{\mathbf{k}}/2} \end{pmatrix} \quad (20)$$

για $H_{\mathbf{K}} = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$, όπου οι ενδείξεις \pm αντιστοιχούν στις ιδιοενέργειες $E = \pm v_F k$, δηλαδή, για τις ζώνες π^* και π , αντίστοιχα, και η $\theta_{\mathbf{k}}$ δίνεται από την εξίσωση (9). Η κυματοσυνάρτηση για την ορμή γύρω από το \mathbf{K}' έχει τη μορφή

$$\psi_{\pm, \mathbf{K}'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta_{\mathbf{k}}/2} \\ \pm e^{-i\theta_{\mathbf{k}}/2} \end{pmatrix} \quad (21)$$

για $H_{\mathbf{K}'} = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$. Σημειώστε ότι οι κυματοσυναρτήσεις στο \mathbf{K} και στο \mathbf{K}' σχετίζονται από τον αντίστροφο χρόνο συμμετρίας: αν ορίσουμε την προέλευση των συντεταγμένων, στο χώρο ορμής, στο σημείο M του BZ (δείτε την εικόνα 2), η αντιστροφή του χρόνου γίνεται ισοδύναμη με μια αντανάκλαση κατά μήκος του k_x άξονα, $(k_x, k_y) \rightarrow (k_x, -k_y)$. Επίσης σημειώστε πως εάν η φάση θ περιστρέφεται κατά 2π , η κυματοσυνάρτηση αλλάζει πρόσημο υποδεικνύοντας μια φάση του π (στη βιβλιογραφία αυτό συνήθως καλείται ως φάση του Berry). Αυτή η αλλαγή της φάσης κατά π υπό περιστροφή είναι χαρακτηριστικό των σπινωρίων (spinors). Στην πραγματικότητα, η κυματοσυνάρτηση είναι ένα σπινόριο δύο συνιστωσών.

Μια σχετική ποσότητα που χρησιμοποιείται για να χαρακτηρίσει τις ιδιοσυναρτήσεις είναι η ελικότητα τους που ορίζεται ως η προβολή της δυναμικής του φορέα κατά μήκος της (ψευδο)περιστροφής κατεύθυνσης. Ο φορέας κβαντομηχανικής για την ελικότητα έχει τη μορφή¹

$$\hat{h} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}. \quad (22)$$

Είναι ξεκάθαρο από τον ορισμό του \hat{h} ότι οι καταστάσεις $\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ και $\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$ είναι επίσης ιδιοκαταστάσεις του \hat{h} ,

$$\hat{h} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \pm \frac{1}{2} \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \quad (23)$$

Και μια ισοδύναμη εξίσωση για $\psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$ με ανεστραμμένο σήμα. Συνεπώς, τα ηλεκτρόνια (οι οπές) έχουν μία θετική (αρνητική) ελικότητα. Η εξίσωση (23) υποδηλώνει ότι το $\boldsymbol{\sigma}$ έχει τις δύο ιδιοτιμές του είτε προς την κατεύθυνση του (\uparrow) ή απέναντι (\downarrow) της ορμής \mathbf{p} . Αυτή η ιδιότητα αναφέρει ότι οι καταστάσεις του συστήματος κοντά στο σημείο Dirac έχουν καθορίσει αρκετά καλά τη *στροφικότητα* ή την ελικότητα. Σημειώστε ότι η στροφικότητα δεν καθορίζεται όσον αφορά την πραγματική περιστροφή του ηλεκτρονίου (που δεν έχει ακόμη εμφανιστεί στο πρόβλημα) αλλά σε μια μεταβλητή ψευδοπεριστροφής που συνδέεται με τις δύο συνιστώσες της κυματοσυνάρτησης. Οι τιμές ελικότητας είναι καλοί κβαντικοί αριθμοί εφ' όσον η Χαμιλτονιανή (18) ισχύει. Επομένως, η ύπαρξη της ελικότητας κβαντικών αριθμών

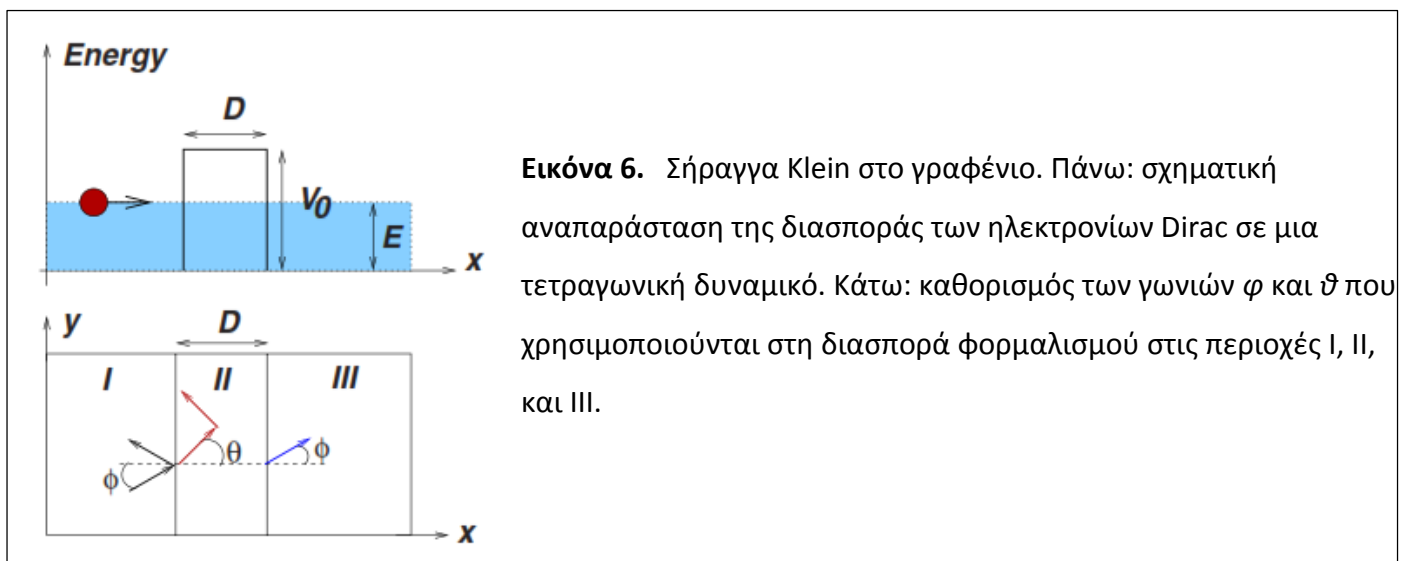
ισχύει μόνο ως μια ασυμπτωτική ιδιοκτησία, η οποία είναι καλά ορισμένη κοντά στα σημεία Dirac \mathbf{K} και \mathbf{K}' . Είτε σε μεγαλύτερες ενέργειες είτε λόγω της παρουσίας ενός πεπερασμένου t' , η ελικότητα παύει να είναι ένας καλός κβαντικός αριθμός.

1. Στροφική σήραγγα και παράδοξο Klein

Σε αυτήν την ενότητα, θα εξετάσουμε τη διασπορά των στροφικών ηλεκτρονίων σε δύο διαστάσεις από ένα τετραγωνικό φράγμα (Katsnelson και άλλοι, 2006; Katsnelson, 2007b). Η μονοδιάστατη (1D) διασπορά των στροφικών ηλεκτρονίων συζητήθηκε νωρίτερα στο πλαίσιο των νανοσωλήνων (Ando και άλλοι, 1998; McEuen και άλλοι, 1999).

Αρχίζουμε με τη σημείωση ότι από έναν μετασχηματισμό πλάτους η κυματοσυνάρτηση (20) μπορεί να γραφτεί ως

$$\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (24)$$



Επιπλέον υποθέτουμε ότι η διασπορά δεν αναμιγνύει τις ορμές γύρω από τα σημεία \mathbf{K} και \mathbf{K}' . Στην εικόνα 6, απεικονίζουμε τη διαδικασία διασποράς που οφείλεται στο τετραγωνικό φράγμα του πλάτους D .

Η κυματοσυνάρτηση σε διάφορες περιοχές μπορεί να γραφτεί σε όρους προσπίπτουσας και ανακλώμενων κυμάτων. Στην περιοχή I, έχουμε

$$\psi_I(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{r}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i(\pi - \phi)} \end{pmatrix} e^{i(-k_x x + k_y y)}, \quad (25)$$

με $\varphi = \arctan(k_y/k_x)$, $k_x = k_F \cos \varphi$, $k_y = k_F \sin \varphi$, και k_F η ορμή Fermi. Στην περιοχή II, έχουμε

$$\psi_{II}(\mathbf{r}) = \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s' e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(q_x x + k_y y)} + \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s' e^{i(\pi-\theta)} \end{pmatrix} e^{i(-q_x x + k_y y)}, \quad (26)$$

με $\vartheta = \arctan(k_y/q_x)$ και

$$q_x = \sqrt{(V_0 - E)^2/(v_F^2) - k_y^2}, \quad (27)$$

και τελικά στην περιοχή III έχουμε ένα μεταδιδόμενο κύμα μόνο,

$$\psi_{III}(\mathbf{r}) = \frac{t}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (28)$$

με $s = \text{sgn}(E)$ και $s' = \text{sgn}(E - V_0)$. Οι συντελεστές r, a, b , και t προσδιορίζονται από τη συνέχεια της κυματοσυνάρτησης, πράγμα που σημαίνει ότι η κυματοσυνάρτηση πρέπει να υπακούσει τους όρους $\psi_I(x=0, y) = \psi_{II}(x=0, y)$ και $\psi_{II}(x=D, y) = \psi_{III}(x=D, y)$. Σε αντίθεση με την εξίσωση Schrödinger, πρέπει μόνο να ταιριάξουμε τη κυματοσυνάρτηση αλλά όχι το παράγωγό της. Η μετάδοση μέσω του φράγματος επιτυγχάνεται από $T(\varphi) = tt^*$ και έχει τη μορφή

$$T(\varphi) = \frac{\cos^2 \theta \cos^2 \phi}{[\cos(Dq_x) \cos \phi \cos \theta]^2 + \sin^2(Dq_x)(1 - ss' \sin \phi \sin \theta)^2}. \quad (29)$$

Η παράσταση αυτή δεν λαμβάνει υπόψη τη συμβολή από τα παροδικά κύματα στην περιοχή II, η οποία είναι συνήθως αμελητέα, εκτός αν το χημικό δυναμικό στην περιοχή II είναι στην ενέργεια Dirac (δείτε την ενότητα IV.A).

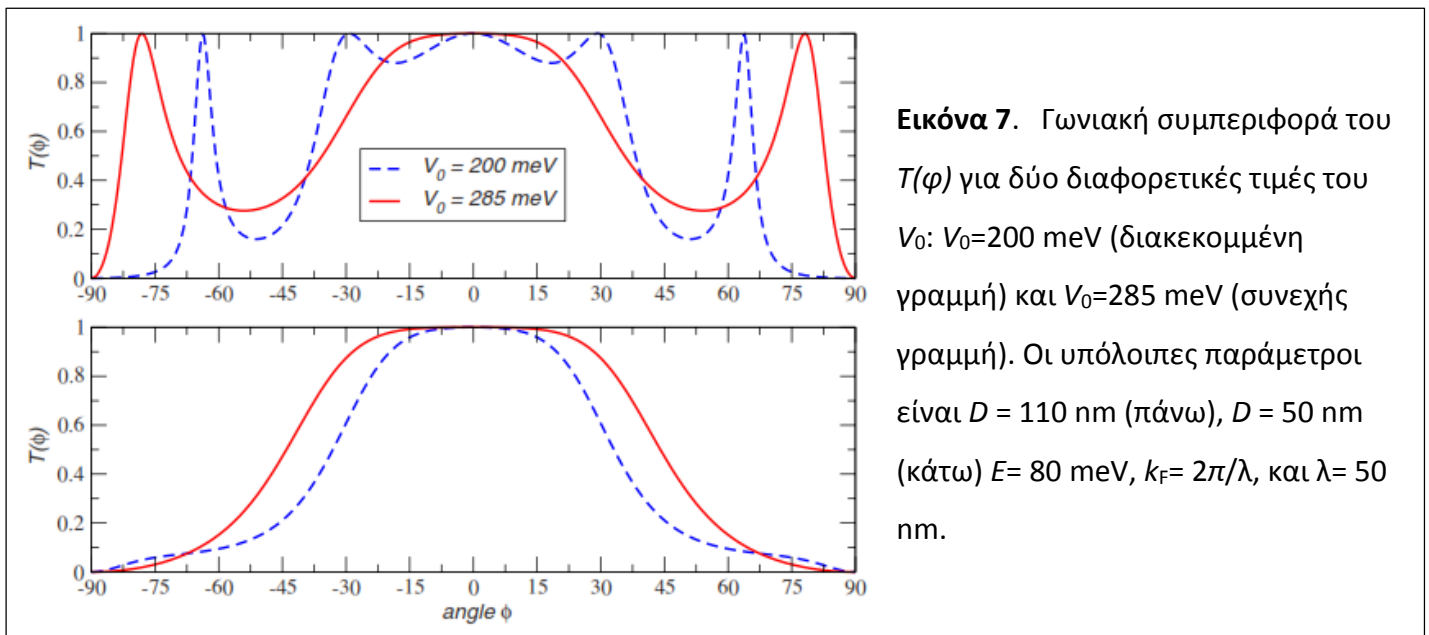
Σημειώστε ότι $T(\varphi) = T(-\varphi)$, και για τις τιμές του Dq_x η σχέση $Dq_x = n\pi$ πληρείται, με n έναν ακέραιο, το φράγμα γίνεται εντελώς διαφανές δεδομένου $T(\varphi) = 1$, ανεξάρτητα από την τιμή του φ . Επίσης, για τυπική γωνία πρόσπτωσης ($\varphi \rightarrow 0$ και $\theta \rightarrow 0$) και οποιαδήποτε τιμή του Dq_x , λαμβάνουμε το $T(0) = 1$, και το φράγμα είναι και πάλι εντελώς διαφανές. Αυτό το αποτέλεσμα αποτελεί έκφραση του παραδόξου Klein (Calogeracos και Dombey, 1999; Itzykson και Zuber, 2006) και δεν παρουσιάζεται για τα μη σχετικιστικά ηλεκτρόνια. Σε αυτήν την τελευταία περίπτωση και για την τυπική γωνία πρόσπτωσης, η μετάδοση είναι πάντοτε μικρότερη από 1. Στο όριο $|V_0| \gg |E|$, η εξίσωση (29) έχει την παρακάτω ασυμπτωτική μορφή:

$$T(\varphi) \simeq \frac{\cos^2 \phi}{1 - \cos^2(Dq_x) \sin^2 \phi}. \quad (30)$$

Στην εικόνα 7, δείχνουμε τη γωνιακή εξάρτηση του $T(\varphi)$ για δύο διαφορετικές τιμές του δυναμικού V_0 . Είναι σαφές ότι υπάρχουν αρκετές κατευθύνσεις για τις οποίες η μετάδοση είναι 1. Παρόμοιοι υπολογισμοί έγιναν για ένα διπλού-στρώματος γραφένιο (Katsnelson και άλλοι, 2006) με την απουσία σήραγγας στην μπροστινή κατεύθυνση ($k_y = 0$) στην πιο χαρακτηριστική συμπεριφορά του.

Το απλούστερο παράδειγμα ενός πιθανού φράγματος είναι ένα τετραγωνικό δυναμικό που συζητήθηκε προηγουμένως. Όταν παραμεληθεί η διασπορά και η έλλειψη συμμετρίας μεταξύ των υποπλεγμάτων, ένα πιθανό φράγμα δεν εμφανίζει περιστατικά ανάκλασης για τα προσπίπτοντα ηλεκτρονία στην κανονική κατεύθυνση (Katsnelson και άλλοι, 2006). Ακόμα και όταν το φράγμα διαχωρίζει τις περιοχές όπου η επιφάνεια Fermi μοιάζει με ηλεκτρόνιο από τη μια πλευρά και με οπή από την άλλη, ένα φυσιολογικά προσπίπτον ηλεκτρόνιο συνεχίζει τη διάδοσή του ως μια οπή με 100% αποδοτικότητα. Αυτό το φαινόμενο είναι μια άλλη εκδήλωση της στροφικότητας των ηλεκτρονίων Dirac μέσα σε κάθε κοιλάδα, η οποία γενικά αποτρέπει την σκέδαση προς τα πίσω. Οι πιθανότητες μετάδοσης και ανάκλασης των ηλεκτρονίων στις διάφορες γωνίες εξαρτώνται από το δυναμικό προφίλ κατά μήκος του φράγματος. Ένα αργά μεταβαλλόμενο φράγμα είναι αποδοτικότερο στην ανάκλαση των ηλεκτρονίων σε μη-μηδενικές προσπίπτουσες γωνίες (Cheianov και Fal'ko, 2006).

Τα ηλεκτρόνια που κινούνται μέσα από ένα φράγμα που διαχωρίζει p - και n -προσμείξεις γραφενίου, ενός p - n κόμβου, μεταδίδονται ως οπές.



Η σχέση μεταξύ της ταχύτητας και της ορμής για μια οπή είναι η αντίστροφη αυτής για ένα ηλεκτρόνιο. Αυτό συνεπάγεται ότι, εάν η παράλληλη ορμή συντηρείται προς το φράγμα, η ταχύτητα του ημισωματιδίου αντιστρέφεται. Όταν τα προσπίπτοντα ηλεκτρονία προκύψουν από μια πηγή, οι οπές μετάδοσης εστιάζουν σε μια εικόνα της πηγής. Η συμπεριφορά αυτή είναι η ίδια με εκείνη των φωτονίων που κινούνται εντός ενός μέσου με αρνητικό δείκτη ανάκλασης (Cheianov, Fal'ko, και Altshuler, 2007). Παρεμφερή αποτελέσματα μπορούν να προκύψουν σε κβαντικές κουκκίδες γραφενίου, όπου οι εσωτερικές και εξωτερικές περιοχές περιέχουν ηλεκτρόνια και οπές, αντίστοιχα (Cserti, Palyi, και Peterfalvi, 2007). Σημειώστε πως το γεγονός ότι τα φράγματα δεν εμποδίζουν τη μετάδοση των φυσιολογικά προσπιπτόντων ηλεκτρονίων δεν αποκλείει την ύπαρξη απότομων συντονισμών, λόγω του

περιορισμού των ηλεκτρονίων με μια πεπερασμένη παράλληλη ορμή. Αυτό οδηγεί στη δυνατότητα κατασκευής κβαντικών κουκκίδων με πιθανά φράγματα (Silvestrov και Efetov, 2007). Τελικά, στο μισό γέμισμα, λόγω της αναταραχής του γραφενίου μπορεί να χωριστεί σε λακούβες ηλεκτρονίου και οπής φορτίου (Katsnelson και άλλοι, 2006; Martin και άλλοι, 2008). Η μεταφορά καθορίζεται από τη μετάδοση κατά μήκος των p - n κόμβων ανάμεσα σε αυτές τις λακούβες (Cheianov, Fal'ko, Altshuler, και άλλοι, 2007; Shklovskii, 2007). Υπάρχει μεγάλη πρόοδος στη μέτρηση των ιδιοτήτων μεταφοράς των κορδελών γραφενίου με επιπρόσθετες τις επάνω εισόδους που διαδραματίζουν το ρόλο των συντονισιμων πιθανών φραγμάτων (Han και άλλοι, 2007; Huard και άλλοι, 2007; Lemme και άλλοι, 2007; Özyilmaz και άλλοι, 2007; Williams και άλλοι, 2007).

Το μαγνητικό πεδίο και οι διακυμάνσεις δυναμικού διασπάνε τόσο την ανάστροφη συμμετρία του πλέγματος και τη συμμετρία ανάστροφου χρόνου. Ο συνδυασμός αυτών των επιδράσεων διασπά επίσης τη συμμετρία μεταξύ των δύο κοιλάδων. Ο συντελεστής μετάδοσης μεταμορφώνεται σε εξαρτώμενη κοιλάδα, και, σε γενικές γραμμές, τα ηλεκτρόνια από διαφορετικές κοιλάδες διαδίδονται κατά μήκος διαφορετικών μονοπατιών. Έτσι υπάρχει η δυνατότητα χειρισμού του δείκτη της κοιλάδας (Tworzydło και άλλοι, 2007) (valleytronics) με ένα τρόπο παρόμοιο με τον έλεγχο της περιστροφής στις μεσοσκοπικές συσκευές (spintronics). Για τα μεγάλα μαγνητικά πεδία, μια p - n επαφή διαχωρίζει τις περιοχές με διαφορετικές κβαντοποιημένες Hall αγωγιμότητες. Στους κόμβους, τα στροφικά ρεύματα μπορούν να ρέουν και στις δύο άκρες (Abanin και Levitov, 2007), προκαλώντας σκέδαση προς τα πίσω μεταξύ των ρευμάτων Hall στις άκρες του δείγματος.

Η διασπορά των ηλεκτρονίων κοντά στο σημείο Dirac από υπεραγωγίσιμους κόμβους γραφενίου διαφέρει από τη διαδικασία σκέδασης Andreev στα φυσιολογικά μέταλλα (Titov και Beenakker, 2006). Όταν η απόσταση μεταξύ της ενέργειας Fermi και της ενέργειας Dirac είναι μικρότερη από το υπεραγωγίσιμο χάσμα, η υπεραγωγική αλληλεπίδραση διασταυρώνει τα ημι-σωματίδια από μια ζώνη με τις ημι-οπές στην άλλη. Όπως στην περίπτωση της διασποράς σε έναν p - n κόμβο, οι τροχιές του εισερχόμενου ηλεκτρονίου και της αντανακλώμενης οπής (σημειώστε ότι η οπή εδώ αποσκοπεί στη BCS θεωρία της υπεραγωγιμότητας) είναι διαφορετικές από εκείνες σε παρεμφερείς διαδικασίες στα μέταλλα με μόνο έναν τύπο μεταφοράς (Bhattacharjee και Sengupta, 2006; Maiti και Sengupta, 2007).

2. Περιορισμός και τρεμάμενη κίνηση

Η νευρική/τρεμάμενη κίνηση (ή *Zitterbewegung*) της κυματοσυνάρτησης του προβλήματος Dirac, εμφανίζεται όταν κάποιος προσπαθεί να περιορίσει τα ηλεκτρόνια Dirac (Itzykson και Zuber, 2006). Ο εντοπισμός ενός πακέτου κυμάτων οδηγεί, λόγω της αρχής του Heisenberg, αβεβαιότητα στην ορμή. Για ένα σωματίδιο Dirac με μηδενική μάζα ηρεμίας, η αβεβαιότητα στην ορμή μεταφράζεται σε αβεβαιότητα

στην ενέργεια του σωματιδίου καθώς και (αυτό έρχεται σε αντίθεση με τη μη σχετικιστική περίπτωση, όπου η σχέση αβεβαιότητας θέσης-ορμής είναι ανεξάρτητη από τη σχέση αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου). Κατά συνέπεια, για ένα υπερσχετικιστικό σωματίδιο, η κατάσταση ενός όμοιου-σωματιδίου μπορεί να έχει όμοιες οπές στις καταστάσεις της χρονικής εξέλιξής του. Εξετάζουμε, για παράδειγμα, εάν κάποιος προσπαθεί να κατασκευάσει ένα πακέτο κυμάτων κάποια στιγμή $t=0$, και υποθέτουμε, για απλότητα, ότι αυτό το πακέτο έχει μια γκαουσιανή μορφή πλάτους w με την ορμή κοντά στο K ,

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r^2/2w^2}}{\sqrt{\pi w}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \phi, \quad (31)$$

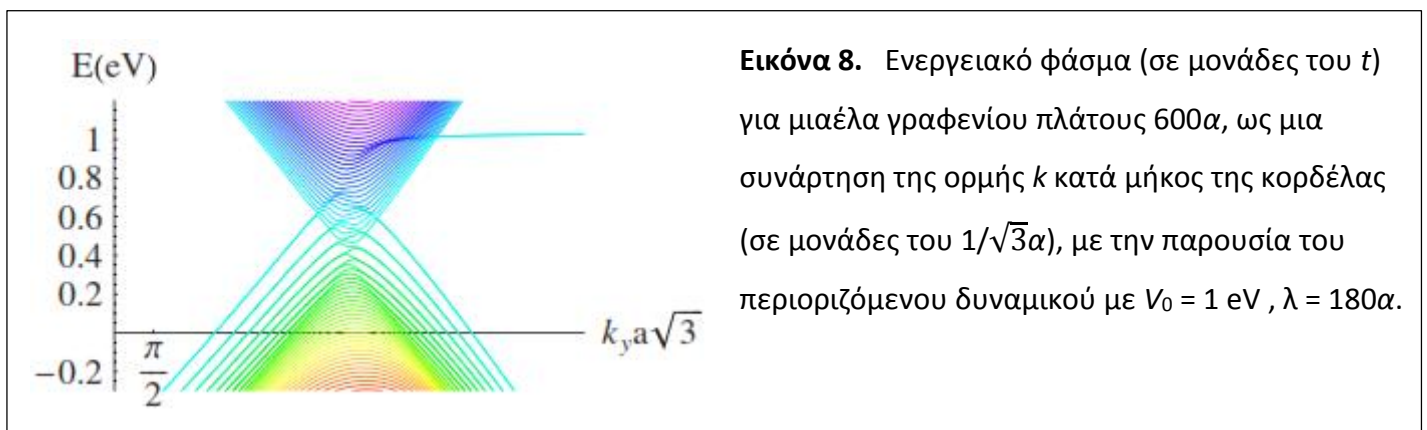
όπου ϕ είναι ένα σπινόνιο αποτελούμενο από θετικές ενεργειακές καταστάσεις [που σχετίζονται με $\psi_{+,k}$ της εξίσωσης (20)]. Η ιδιοσυνάρτηση της εξίσωσης Dirac μπορεί να γραφτεί σε σχέση με τη λύση της εξίσωσης (20) ως

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{a=\pm 1} \alpha_{a,\mathbf{k}} \psi_{a,\mathbf{K}}(\mathbf{k}) e^{-ia(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + v_F k t)}, \quad (32)$$

όπου $\alpha_{\pm,k}$ είναι οι συντελεστές Fourier. Μπορούμε να ξαναγράψουμε την εξίσωση (31) με όρους της εξίσωσης (32) με αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier και να βρούμε ότι

$$\alpha_{\pm,\mathbf{k}} = \sqrt{\pi w} e^{-k^2 w^2/2} \psi_{\pm,\mathbf{K}}^\dagger(\mathbf{k}) \phi. \quad (33)$$

Να σημειωθεί ότι το σχετικό βάρος των θετικών ενεργειακών καταστάσεων σε σχέση με τις αρνητικές ενεργειακές καταστάσεις $|\alpha_+/\alpha_-|$, που δίνεται από την εξίσωση (20) είναι 1, δηλαδή, υπάρχουν τόσο πολλές θετικές ενεργειακές καταστάσεις όσο και αρνητικές ενεργειακές καταστάσεις σε ένα πακέτο κυμάτων. Επομένως, αυτές θα αναγκάσουν τη κυματοσυνάρτηση να είναι μετατοπισμένη ανά πάσα στιγμή $t \neq 0$. Κατά συνέπεια, ένα πακέτο κυμάτων των καταστάσεων ενός όμοιου-ηλεκτρονίου έχει όμοια συστατικά οπών, ένα αποτέλεσμα που προβλημάτισε πολλούς ερευνητές τις πρώτες μέρες της QED (Itzykson και Zuber, 2006).



Εικόνα 8. Ενεργειακό φάσμα (σε μονάδες του t) για μια έλα γραφενίου πλάτους $600a$, ως μια συνάρτηση της ορμής k κατά μήκος της κορδέλας (σε μονάδες του $1/\sqrt{3}a$), με την παρουσία του περιοριζόμενου δυναμικού με $V_0 = 1$ eV, $\lambda = 180a$.

Ας εξετάσουμε την περιγραφή στενής-σύνδεσης (Peres, Castro Neto, και Guinea, 2006b; Chen, Aralkov, και Chakraborty, 2007) της ενότητας II.A όταν όταν ένα δυναμικό V_i στον χώρο \mathbf{R}_i προστίθεται στο πρόβλημα,

$$H_e = \sum_i V_i n_i, \quad (34)$$

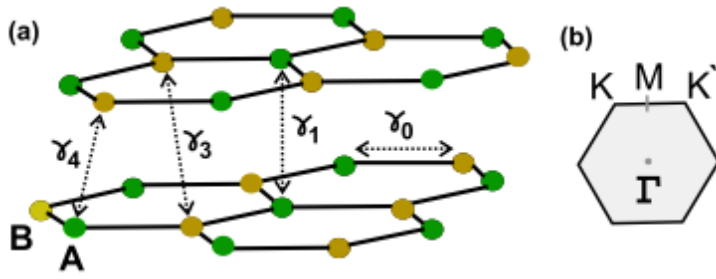
όπου n_i είναι η τοπική ηλεκτρονική πυκνότητα. Για λόγους απλότητας, υποθέτουμε ότι το περιοριζόμενο δυναμικό είναι 1D, δηλαδή, ότι το V_i εξαφανίζεται στο μεγαλύτερο μέρος αλλά γίνεται μεγάλο στην άκρη του δείγματος. Υποθέτουμε ένα δυναμικό που μειώνεται εκθετικά μακριά από τις άκρες σε όλη τη μάζα με ένα βάθος διεύθυνσης λ . Στην εικόνα 8, δείχνουμε το ηλεκτρονικό φάσμα για μια κορδέλα γραφενίου πλάτους $L=600a$, παρουσία ενός περιορισμού δυναμικού,

$$V(x) = V_0 [e^{-(x-L/2)/\lambda} + e^{-(L/2-x)/\lambda}], \quad (35)$$

όπου x είναι η κατεύθυνση του περιορισμού και V_0 είναι η ένταση του δυναμικού. Μπορεί κανείς να δει ότι με την παρουσία του περιορισμού δυναμικού η συμμετρία ηλεκτρονίου και οπής έχει καταστραφεί και, για $V_0 > 0$, το μέρος του φάσματος όπου βρίσκεται η οπή είναι παραμορφωμένο. Ειδικότερα, για το k κοντά στο σημείο Dirac, βλέπουμε ότι η διασπορά οπών δίνεται από το $E_{n,\sigma=-1}(k) \approx -\gamma_n k^2 - \zeta_n k^4$, όπου n είναι ένας θετικός ακέραιος, και $\gamma_n < 0$ ($\gamma_n > 0$) για $n < N^*$ ($n > N^*$). Ως εκ τούτου, με $n = N^*$ η αποτελεσματική μάζα της οπής αποκλίνει ($\gamma_{N^*} = 0$) και, ρυθμίζοντας το χημικό δυναμικό μ μέσω μιας «πίσω πόρτας» στην περιοχή οπών του φάσματος ($\mu < 0$) θα πρέπει να είναι σε θέση να παρατηρήσει μια ανωμαλία στις ταλαντώσεις Shubnikov-de Haas (SdH). Έτσι η *Zitterbewegung* θα μπορούσε να εκδηλωθεί σε μαγνητομεταφορά.

Γ. Γραφένιο διπλού στρώματος: Προσέγγιση στενής-σύνδεσης

Το πρότυπο στενής-σύνδεσης που αναπτύχθηκε για το γραφίτη μπορεί εύκολα να επεκταθεί στους σωρούς (στις στοίβες) με έναν πεπερασμένο αριθμό στρωμάτων γραφενίου. Η πιο απλή γενίκευση είναι μιας διπλοστιβάδας (McCann και Fal'ko, 2006). Μια διπλοστιβάδα έχει ενδιαφέρον διότι η IQHE παρουσιάζει ανωμαλίες, αν και διαφέρει από εκείνες που παρατηρήθηκαν στο μονό στρώμα (Novoselov και άλλοι, 2006), και επίσης μπορεί να ανοίξει ένα κενό μεταξύ της αγωγιμότητας και της ζώνης σθένους (McCann και Fal'ko, 2006). Η δομή διπλού στρώματος, με την AB συσσώρευση/στοίβαξη του τρισδιάστατου (3D) γραφίτη, παρουσιάζεται στην εικόνα 9.



Εικόνα 9. Η δομή πλέγματος του διπλού στρώματος γραφενίου, είναι αντίστοιχη των ηλεκτρονικών ενεργειών αναπήδησης, και της ζώνης Brillouin. (a) Δομή πλέγματος του διπλού στρώματος με τις διάφορες παραμέτρους αναπήδησης σύμφωνα με το πρότυπο SWM. Τα υποπλέγματα A υποδεικνύονται από τις σκουρότερες σφαίρες. (b) Ζώνη Brillouin. Προσαρμοσμένο από τον [Malard και άλλους, 2007](#).

Η Χαμιλτονιανή στενής-σύνδεσης για αυτό το πρόβλημα γίνεται:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{t.b.} = & -\gamma_0 \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ m,\sigma}} (a_{m,i,\sigma}^\dagger b_{m,j,\sigma} + \text{H.c.}) \\
 & -\gamma_1 \sum_{j,\sigma} (a_{1,j,\sigma}^\dagger a_{2,j,\sigma} + \text{H.c.}), \\
 & -\gamma_4 \sum_{j,\sigma} (a_{1,j,\sigma}^\dagger b_{2,j,\sigma} + a_{2,j,\sigma}^\dagger b_{1,j,\sigma} + \text{H.c.}) \\
 & -\gamma_3 \sum_{j,\sigma} (b_{1,j,\sigma}^\dagger b_{2,j,\sigma} + \text{H.c.}), \tag{36}
 \end{aligned}$$

όπου το $a_{m,i,\sigma}$ ($b_{m,i,\sigma}$) εκμηδενίζει ένα ηλεκτρόνιο με περιστροφή σ , στο υπόπλεγμα A (B), στο επίπεδο που $m=1,2$, στην περιοχή \mathbf{R}^* . Εδώ χρησιμοποιούμε την ονοματολογία που εφαρμόζεται στον γραφίτη για τις παραμέτρους: $\gamma_0=t$ είναι στο επίπεδο αναπήδησης ενέργειας και γ_1 [$\gamma_1 = t_\perp \approx 0.4$ eV στον γραφίτη ([Brandt και άλλοι, 1988](#); [Dresselhaus και Dresselhaus, 2002](#))] είναι η ενέργεια αναπήδησης μεταξύ του ατόμου A_1 και του ατόμου A_2 (δείτε την εικόνα 9), γ_4 [$\gamma_4 \approx 0.04$ eV στον γραφίτη ([Brandt και άλλοι, 1988](#); [Dresselhaus και Dresselhaus, 2002](#))] είναι η ενέργεια αναπήδησης μεταξύ του ατόμου A_1 (A_2) και του ατόμου B_2 (B_1), και γ_3 [$\gamma_3 \approx 0.3$ eV στον γραφίτη ([Brandt και άλλοι, 1988](#); [Dresselhaus και Dresselhaus, 2002](#))] που συνδέει τα B_1 και B_2 .

Στο συνεχές όριο, με την επέκταση της ορμής κοντά στο σημείο K στο BZ, η Χαμιλτονιανή έχει ως εξής

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot \mathcal{H}_K \cdot \Psi_{\mathbf{k}}, \tag{37}$$

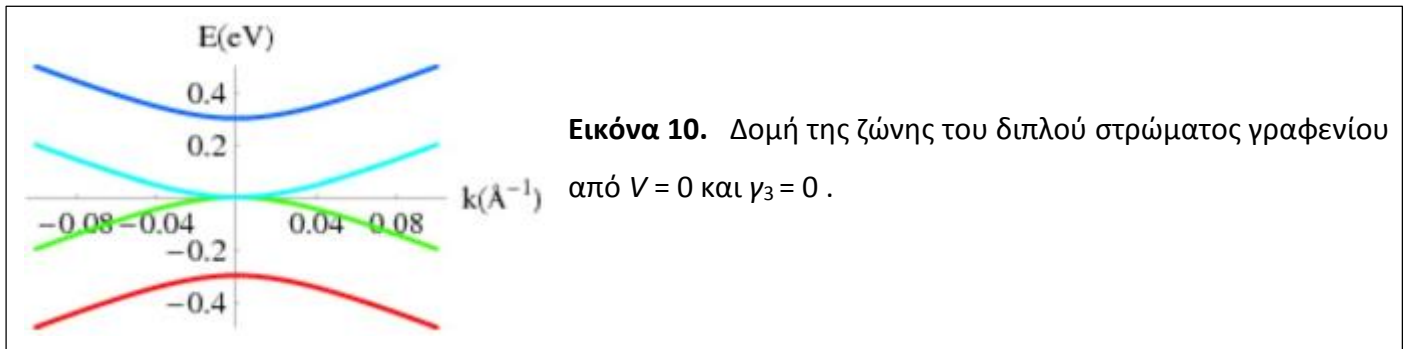
όπου (αγνοώντας του γ_4 προς το παρόν)

$$\mathcal{H}_K \equiv \begin{pmatrix} -V & v_F k & 0 & 3\gamma_3 a k^* \\ v_F k^* & -V & \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & V & v_F k \\ 3\gamma_3 a k & 0 & v_F k^* & V \end{pmatrix}, \tag{38}$$

και $k = k_x + ik_y$ είναι ένας μιγαδικός αριθμός. Έχουμε προσθέσει το V , το οποίο είναι εδώ το μισό της μετατόπισης στο ηλεκτροχημικό δυναμικό μεταξύ των δύο στρωμάτων (η έννοια αυτή θα εμφανιστεί εάν μια δυναμική τάση εφαρμοστεί μεταξύ των στρωμάτων), και

$$\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = (b_1^\dagger(\mathbf{k}), a_1^\dagger(\mathbf{k}), a_2^\dagger(\mathbf{k}), b_2^\dagger(\mathbf{k})) \quad (39)$$

είναι ένα σπινόριο (spinor) τεσσάρων στοιχείων/συνιστωσών.



Εάν $V = 0$ και γ_3 , $v_F k \ll \gamma_1$, μπορεί κανείς να εξαλείψει τις υψηλά διαταρασόμενες ενεργειακές καταστάσεις και να γράψει μια αποτελεσματική Χαμιλτονιανή,

$$\mathcal{H}_K \equiv \begin{pmatrix} 0 & \frac{v_F^2 k^2}{\gamma_1} + 3\gamma_3 a k^* \\ \frac{v_F^2 (k^*)^2}{\gamma_1} + 3\gamma_3 a k & 0 \end{pmatrix}. \quad (40)$$

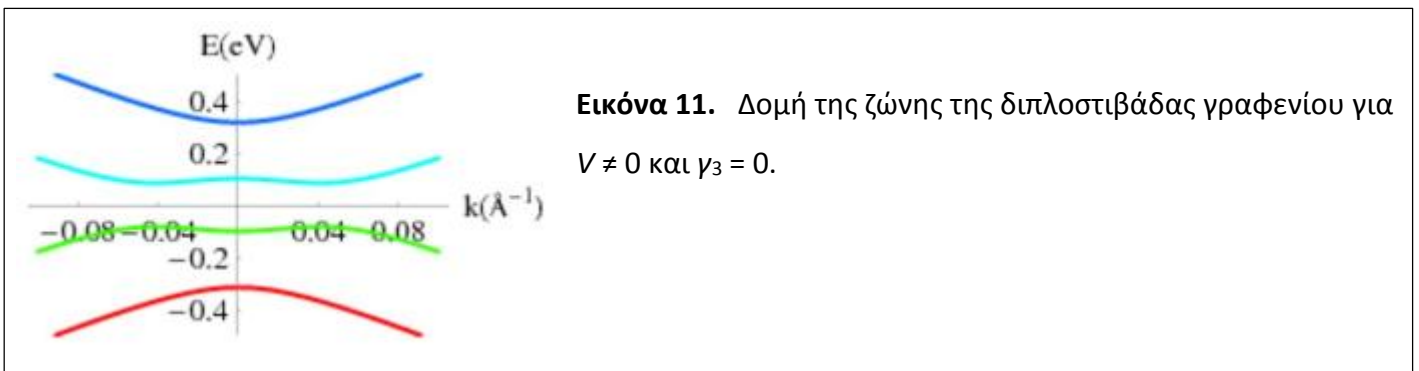
Η αναπήδηση γ_4 σε μια k -εξαρτώμενη σύζευξη μεταξύ των υποπλεγμάτων ή μια μικρή επανακανονικοποίηση του γ_1 . Ο ίδιο ρόλος διαδραματίζεται από την μη-ισοδυναμία μεταξύ των υποπλεγμάτων μέσα σε ένα στρώμα.

Για $\gamma_3 = 0$, η εξίσωση (40) δίνει δύο παραβολικές ζώνες, $\epsilon_{k,\pm} \approx \pm v_F^2 k^2 / t_\perp$, οι οποίες έρχονται σε επαφή με το $\epsilon = 0$ (όπως φαίνεται στην Εικόνα 10). Το φάσμα ηλεκτρονίου και οπής είναι συμμετρικό. Υπάρχουν δύο επιπρόσθετες ζώνες που ξεκινούν από $\pm t_\perp$. Εντός αυτής της προσέγγισης, οι δύο στρώσεις είναι μεταλλικές, με μια σταθερή πυκνότητα των καταστάσεων. Ο όρος γ_3 αλλάζει ποιοτικά το φάσμα στις χαμηλές ενέργειες δεδομένου ότι εισάγει μια τρίγωνη παραμόρφωση, ή στρέβλωση, των ζωνών [σημειώστε ότι αυτή η τρίγωνη παραμόρφωση, σε αντίθεση με αυτήν που θεσπίστηκε από τη μεγάλη ορμή στην εξίσωση (8), εμφανίζεται στις χαμηλές ενέργειες]. Η συμμετρία ηλεκτρονίου και οπής διατηρείται αλλά, αντί δύο ζωνών που αγγίζουν στο $k = 0$, παίρνουμε τρία σύνολα Dirac-ομοειδών γραμμικών ζωνών. Ένα σημείο Dirac είναι στο $\epsilon = 0$ και στο $k = 0$, ενώ τα τρία άλλα σημεία Dirac, επίσης

στο $\epsilon = 0$, βρίσκονται σε τρία ισοδύναμα σημεία με μια πεπερασμένη ορμή. Η σταθερότητα των σημείων όπου οι ζώνες ακουμπούν μπορεί να γίνει κατανοητή χρησιμοποιώντας τοπολογικά επιχειρήματα (Mañes και άλλοι, 2007). Ο αριθμός περιέλιξης μιας κλειστής καμπύλης στο επίπεδο γύρω από ένα δοσμένο σημείο είναι ένας ακέραιος που αντιπροσωπεύει το συνολικό αριθμό των φορών που η καμπύλη μετακινείται αντίθετα από τη φορά των δεικτών του ρολογιού (αριστερόστροφα) γύρω από το σημείο έτσι ώστε η κυματοσυνάρτηση να παραμένει αμετάβλητη. Ο αριθμός περιέλιξης του σημείου όπου οι δύο παραβολικές ζώνες ενώνονται για $\gamma_3 = 0$ έχει τον αριθμό περιέλιξης +2. Ο τριγωνικός όρος παραμόρφωσης γ_3 διασπάται σε ένα σημείο Dirac με $k = 0$ και με αριθμό περιέλιξης -1, και στα τρία σημεία Dirac με $k \neq 0$ και με αριθμό περιέλιξης +1. Ένα μαγνητικό πεδίο εντός του επιπέδου, ή μια μικρή περιστροφή ενός στρώματος σε σχέση με το άλλο, διαχωρίζει το $\gamma_3 = 0$ μέσα σε δύο σημεία Dirac με τον αριθμό περιέλιξης +1.

Ο όρος V στην εξίσωση (38) διασπά την ισοδυναμία των δύο στρωμάτων, ή, εναλλακτικά, την ανάστροφη συμμετρία. Σε αυτήν την περίπτωση, η σχέση διασποράς γίνεται

$$\epsilon_{\pm, k}^2 = V^2 + v_F^2 k^2 + t_{\perp}^2 / 2 \pm \sqrt{4V^2 v_F^2 k^2 + t_{\perp}^2 v_F^2 k^2 + t_{\perp}^4 / 4}, \quad (41)$$



Εικόνα 11. Δομή της ζώνης της διπλοστιβάδας γραφενίου για $V \neq 0$ και $\gamma_3 = 0$.

προκαλώντας τη διασπορά που παρουσιάζεται στην εικόνα (11), και με το άνοιγμα ενός κενού κοντά (αλλά όχι άμεσα) στο σημείο K . Για τις μικρές ορμές, και για $V \ll t$, η ενέργεια της ζώνης αγωγιμότητας μπορεί να επεκταθεί,

$$\epsilon_k \approx V - 2V v_F^2 k^2 / t_{\perp} + v_F^4 k^4 / 2 t_{\perp}^2 V. \quad (42)$$

Η διασπορά για τη ζώνη σθένους μπορεί να επιτευχθεί με την αντικατάσταση του ϵ_k από το $-\epsilon_k$. Η διπλή στιβάδα έχει ένα κενό στο $k^2 \approx 2V^2 / v_F^2$. Σημειώστε, επομένως, ότι το χάσμα στο πολωμένο σύστημα διπλού στρώματος εξαρτάται από την εφαρμοσμένη πόλωση και επομένως μπορεί να μετρηθεί πειραματικά (McCann, 2006; McCann και Fal'ko, 2006; Castro, Novoselov, Morozov, και άλλοι, 2007). Η δυνατότητα να ανοιχτεί ένα χάσμα κάνει ενδιαφέρον ένα γραφένιο διπλού στρώματος για τις τεχνολογικές εφαρμογές.

Δ. Κρυσταλλικό γραφένιο

Έχει γίνει γνωστό εδώ και πολύ καιρό ότι τα μονά στρώματα του γραφενίου θα μπορούσαν να αυξηθούν/αναπτυχθούν με ταξινομημένο τρόπο στις μεταλλικές επιφάνειες χρησιμοποιώντας την καταλυτική αποσύνθεση των υδρογονανθράκων ή του οξειδίου άνθρακα (Shelton και άλλοι, 1974; Eizenberg και Blakely, 1979; Campagnoli και Tosatti, 1989; Oshima και Nagashima, 1997; Sinitsyna και Yaminsky, 2006). Όταν τέτοιες επιφάνειες θερμαίνονται, το οξυγόνο ή το υδρογόνο απορροφάται, και τα άτομα άνθρακα σχηματίζουν ένα γραφένιο μονού στρώματος. Οι προκύπτουσες δομές γραφενίου μπορούν να φθάσουν μέχρι και σε μεγέθη ενός μικρομέτρου έχοντας ελάχιστες ανωμαλίες, και αυτές έχουν χαρακτηριστεί από διαφορετικές επιφανειακές-επιστημονικές τεχνικές και τοπικούς ανιχνευτές σάρωσης (Himpfel και άλλοι, 1982). Για παραδείγμα, το γραφένιο ανέπτυξε το ρουθίνιο το οποίο έχει ζικζακ άκρες και επίσης κυματισμούς που συνδέονται με μια (10×10) ανακατασκευή (Vázquez de Parga και άλλοι, 2008).

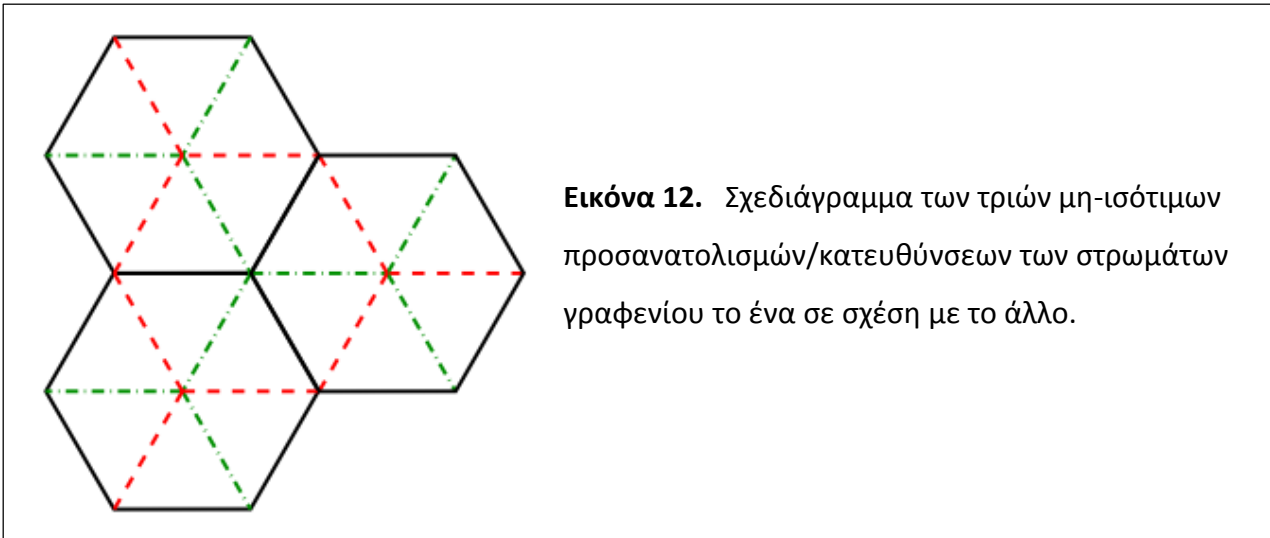
Το γραφένιο μπορεί επίσης να σχηματιστεί στην επιφάνεια του SiC. Κατά τη θέρμανση, το πυρίτιο από τα αρχικά στρώματα απορροφάται, και μερικά στρώματα του γραφενίου αφήνονται στην επιφάνεια (Bommel και άλλοι, 1975; Forbeaux και άλλοι, 1998; Coey και άλλοι, 2002; Berger και άλλοι, 2004; Rollings και άλλοι, 2006; Hass, Feng, Millán-Otaya, και άλλοι, 2007; de Heer και άλλοι, 2007). Ο αριθμός των στρωμάτων μπορεί να ελεγχθεί με περιορισμό του χρόνου ή της θερμοκρασίας επεξεργάζοντας τη θέρμανση. Η ποιότητα και ο αριθμός των στρωμάτων στα δείγματα εξαρτώνται από την επιφάνεια SiC που χρησιμοποιείται για την αύξησή τους (de Heer και άλλοι, 2007) (η ολοκληρωμένη επιφάνεια του άνθρακα παράγει μερικά στρώματα αλλά με χαμηλή κινητικότητα, ενώ η ολοκληρωμένη επιφάνεια του πυριτίου παράγει αρκετά στρώματα αλλά με υψηλότερη κινητικότητα). Τα ανεπτυγμένα κρυσταλλικά πολυστρώματα παρουσιάζουν ταλαντώσεις SdH με μια Berry μετατόπιση φάσης του π (Berger και άλλοι, 2006), η οποία είναι ίδια με τη μετατόπιση φάσης για τα φερμιόνια Dirac που παρατηρούνται σε ένα μονό στρώμα καθώς επίσης και για μερικές υποζώνες παρούσες σε πολυστρωματικό γραφένιο και γραφίτη (Luk'yanchuk και Kopelevich, 2004). Το στρώμα του άνθρακα ακριβώς στην κορυφή του υποστρώματος αναμένεται για να συνδεθεί ισχυρά με αυτό, και δεν παρουσιάζει π ζώνες (Varchon και άλλοι, 2007). Το επόμενο στρώμα παρουσιάζει μια $(6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3})$ ανακατασκευή λόγω του υποστρώματος, και έχει τις ιδιότητες του γραφενίου. Ένας εναλλακτικός τρόπος για να παραχθούν μερικά στρώματα του γραφενίου είναι βασισμένος στη σύνθεση από νανοδιαμάντια (Affoune και άλλοι, 2001).

Τα γωνιακά-επιλυμένα πειράματα φωτοεκπομπής (ARPES) δείχνουν ότι το κρυσταλλικό γραφένιο που αυξάνεται στο SiC έχει διασκορπίσει γραμμικά ημισωματίδια (φερμιόνια Dirac) (Zhou, Gweon, και άλλοι, 2006; Bostwick, Ohta, Seyller, και άλλοι, 2007; Ohta και άλλοι, 2007), σύμφωνα με τη θεωρία. Εντούτοις, αυτά τα πειράματα δείχνουν ότι οι ηλεκτρονικές ιδιότητες μπορούν να αλλάξουν τοπικά στο χώρο, υποδεικνύοντας έναν ορισμένο βαθμό ανομοιογένειας που οφείλετε στη μέθοδο ανάπτυξης (Zhou και

άλλοι, 2007). Παρόμοιες ανομοιογένειες λόγω της διαταραχής του προσανατολισμού του c-άξονα στα επιπέδα του γραφενίου παρατηρήθηκαν στον γραφίτη. (Zhou, Gweon, και Lanzara, 2006). Επιπλέον, το γραφένιο που αναπτύσσεται με αυτόν τον τρόπο ενισχύεται υπερβολικά λόγω της μεταφοράς φορτίου από το υπόστρωμα στο στρώμα γραφενίου (με το χημικό δυναμικό αρκετά πιο πάνω από το σημείο Dirac) και επομένως όλα τα δείγματα έχουν ισχυρό μεταλλικό χαρακτήρα με μεγάλες ηλεκτρονικές κινητικότητες (Berger και άλλοι, 2006; de Heer και άλλοι, 2007). Υπάρχουν επίσης στοιχεία για την ισχυρή αλληλεπίδραση μεταξύ ενός υποστρώματος και του στρώματος γραφενίου που οδηγούν στην εμφάνιση των κενών στο σημείο Dirac (Zhou και άλλοι, 2007). Πράγματι, τα κενά μπορούν να δημιουργηθούν με το σπάσιμο της συμμετρίας του υποπλέγματος και, όπως στην περίπτωση άλλων συστημάτων βασισμένων στον άνθρακα όπως το πολυαιθυλένιο (Su και άλλοι, 1979, 1980), μπορεί να οδηγήσει σε σολιτονικές διεγέρσεις (Jackiw και Rebbi 1976; Hou και άλλοι, 2007). Το πολυστρωματικό γραφένιο που αναπτύσσεται στο SiC έχει μελετηθεί επίσης με ARPES (Bostwick, Ohta, McChesney, και άλλοι, 2007; Ohta και άλλοι, 2007) και τα αποτελέσματα φαίνεται να συμφωνούν αρκετά καλά με τους υπολογισμούς της δομής της ζώνης (Mattausch και Pankratov, 2007). Οι μετρήσεις φασματοσκοπίας παρουσιάζουν επίσης τις μεταβάσεις που συνδέονται με τα επίπεδα Landau (Sadowski και άλλοι, 2006) και οι επιδράσεις ασθενούς-εντοπισμού στα χαμηλά μαγνητικά πεδία, αναμένονται επίσης για τα φερμιόνια Dirac (Wu και άλλοι, 2007). Οι τοπικοί ανιχνευτές αποκαλύπτουν μια πλούσια δομή των αναβαθμίδων (Mallet και άλλοι, 2007) και των πρότυπων παρεμβολών λόγω των ανωμαλιών/βλαβών στα ή κάτω από τα στρώματα γραφενίου (Rutter και άλλοι, 2007).

E. Στοιίβες/Σωροί γραφενίου

Σε στοιίβες με περισσότερα από ένα στρώματα γραφενίου, δύο διαδοχικά στρώματα είναι προσανατολισμένα κατά τέτοιο τρόπο ώστε τα άτομα σε ένα από τα δύο υποπλέγματα A_n της κυψελοειδούς δομής ενός στρώματος είναι ακριβώς επάνω από το μισό των ατόμων στο γειτονικό στρώμα, υπόπλεγμα $A_{n\pm 1}$. Το δεύτερο σύνολο ατόμων σε ένα στρώμα βρίσκεται πάνω από το (άδειο) κέντρο του εξαγώνου στο άλλο στρώμα. Η πιο σύντομη απόσταση μεταξύ των ατόμων άνθρακα στα διαφορετικά στρώματα είναι $d_{A_n A_{n\pm 1}} = c = 3.4 \text{ \AA}$. Η επόμενη απόσταση είναι $d_{A_n B_{n\pm 1}} = \sqrt{c^2 + a^2}$.



Εικόνα 12. Σχεδιάγραμμα των τριών μη-ισότιμων προσανατολισμών/κατευθύνσεων των στρωμάτων γραφενίου το ένα σε σχέση με το άλλο.

Αυτή είναι η πιο κοινή διάταξη που παρατηρείται στη φύση για τα κοντινότερα-γειτονικά στρώματα, αν και μια σειρά συσσώρευσης για την οποία όλα τα άτομα σε ένα στρώμα καταλαμβάνουν τις θέσεις ακριβώς επάνω από τα άτομα στα γειτονικά στρώματα (εξαγωνική συσσώρευση) έχει εξεταστεί θεωρητικά (Charlier και άλλοι, 1991) και εμφανίζεται σε ενώσεις παρεμβολής του γραφίτη (Dresselhaus και Dresselhaus, 2002).

Η σχετική θέση των δύο γειτονικών στρωμάτων επιτρέπει δύο διαφορετικούς προσανατολισμούς του τρίτου στρώματος. Εάν ονομάσουμε τις θέσεις των πρώτων δύο ατόμων ως 1 και 2, το τρίτο στρώμα μπορεί να είναι τύπου 1, που οδηγεί με την ακολουθία 121, ή αυτό μπορεί να καλύψει μια τρίτη θέση διαφορετική από τις 1 και 2 (δείτε την εικόνα 12), την επονομαζόμενη θέση 3. Δεν υπάρχουν άλλες μη ισότιμες θέσεις όπου ένα νέο στρώμα μπορεί να τοποθετηθεί, έτσι ώστε οι παχύτερες στοίβες μπορούν να περιγραφούν σε σχέση με αυτούς τους τρεις προσανατολισμούς. Στην πιο διαδεδομένη εκδοχή του χύμα γραφίτη, η διάταξη της στοίβας είναι 1212... (συσσώρευση Bernal). Περιοχές με τη συσσώρευση 123123... (ρομβοεδρική συσσώρευση) έχουν παρατηρηθεί επίσης σε διάφορα είδη γραφίτη (Bacon, 1950; Gasparoux, 1967). Τέλος, τα δείγματα χωρίς την ευδιάκριτη σειρά συσσώρευσης (στροβιλοστρωματικού γραφίτη) είναι επίσης συχνά αναφερόμενα.

Πέρα από τα δύο στρώματα, η διάταξη της στοίβας μπορεί να είναι αυθαίρετα σύνθετη. Οι απλές αναλυτικές εκφράσεις για τις ηλεκτρονικές ζώνες μπορούν να επιτευχθούν για την τέλεια Bernal (1212...) και ρομβοεδρική (123123...) συσσώρευση (Guinea και άλλοι, 2006; Partoens και Peeters, 2006). Ακόμα κι αν λάβουμε υπόψη μια αναπήδηση ενδιάμεσου στρώματος $t_{\perp} = \gamma_1$, οι δύο διατάξεις στοιβών παρουσιάζουν διαφορετικές δομές ζωνών κοντά στο $\epsilon=0$. Μια στοίβα Bernal με N στρώματα, το N έστω, έχει $N/2$ παρόμοια ηλεκτρόνια όπως και $N/2$ παρόμοιες οπές παραβολικής υποζώνης που αγγίζουν το $\epsilon=0$. Όταν ο αριθμός N είναι περιττός, προκύπτει μια πρόσθετη υποζώνη με τη γραμμική (Dirac) διασπορά. Τα ρομβοεδρικά συστήματα έχουν μόνο δύο υποζώνες που αγγίζουν στο $\epsilon=0$. Αυτές οι υποζώνες διασκορπίζονται ως k^N , και αποτελούν επιφανειακές καταστάσεις που εντοπίζονται στα άνω και κάτω στρώματα όταν το $N \rightarrow \infty$. Σε αυτό το όριο, οι υπόλοιπες $2N-2$ υποζώνες μιας ρομβοεδρικής στοίβας

γίνονται παρόμοιες με την Dirac, με την ίδια ταχύτητα Fermi σαν ένα μονό στρώμα γραφενίου. Η δομή μιας υποζώνης τριών στρωμάτων με τη συσσώρευση Bernal περιλαμβάνει δύο σχετικές παραβολικές ζώνες, και μια με τη διασπορά Dirac, που συνδυάζει τα χαρακτηριστικά γνωρίσματα της διπλής στιβάδας και μονοστιβάδας γραφενίου.

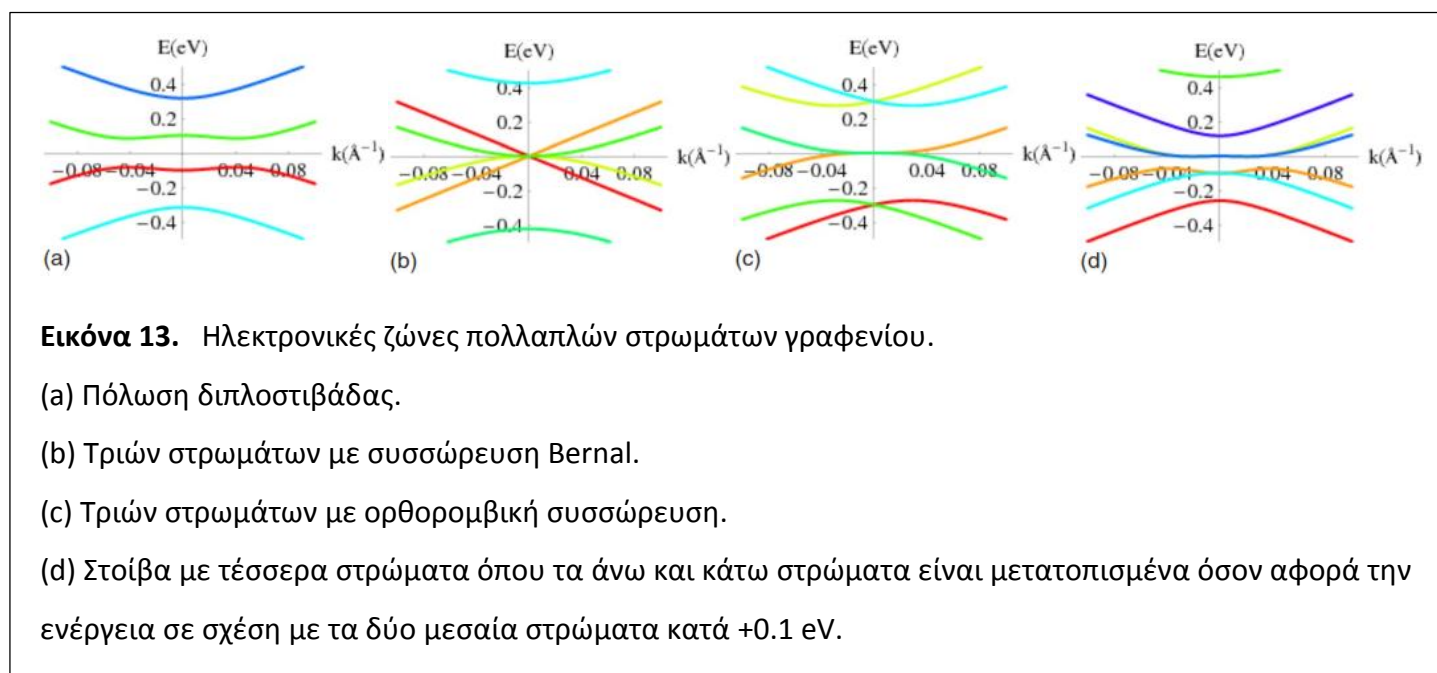
Οι χαμηλές-ενεργειακές ζώνες έχουν διαφορετική βαρύτητα για τα δύο υποπλέγματα του κάθε στρώματος γραφενίου. Οι καταστάσεις σε ένα σημείο που συνδέεται άμεσα με τα γειτονικά επίπεδα ωθούνται σε ενέργειες $\epsilon \approx \pm t_{\perp}$. Οι ζώνες κοντά στο $\epsilon=0$ είναι εντοπισμένες κατά κύριο λόγο στα σημεία χωρίς γειτονικές στα επόμενα στρώματα. Για τη συσσώρευση Bernal, αυτό το χαρακτηριστικό συνεπάγεται ότι η πυκνότητα των καταστάσεων στο $\epsilon=0$ σε σημεία χωρίς κοντινότερες γειτονικές στα παρακείμενα στρώματα είναι πεπερασμένη, ενώ χάνεται γραμμικά στις άλλες καταστάσεις. Στις στοιβές με τη ρομβοεδρική συσσώρευση, όλες οι περιοχές έχουν μια γειτονική σε ένα άλλο επίπεδο, και η πυκνότητα των καταστάσεων χάνεται στο $\epsilon=0$ (Guinea και άλλοι, 2006). Αυτό το αποτέλεσμα έρχεται σε συμφωνία με το αρκετά γνωστό γεγονός ότι μόνο ένα από τα δύο υποπλέγματα από μια επιφάνεια γραφίτη μπορεί να επιλυθεί με σάρωση της μικροσκοπικής σήραγγας (STM) (Tománek και άλλοι, 1987).

Όπως στην περίπτωση ενός διπλής στρώματος, μια διανομή ανομοιογενούς φορτίου μπορεί να αλλάξει το ηλεκτροστατικό δυναμικό στα διαφορετικά στρώματα. Για περισσότερα από δύο στρώματα, αυτή η διάσπαση της ισοδυναμίας μεταξύ των στρωμάτων μπορεί να πραγματοποιηθεί ακόμη και ελλείψει ενός εφαρμοσμένου ηλεκτρικού πεδίου. Αξίζει να σημειωθεί ότι ένα κενό μπορεί να ανοίξει σε μια στοιβα με διάταξη Bernal και τέσσερα στρώματα εάν η ηλεκτρονική δαπάνη στα δύο επιφανειακά στρώματα είναι διαφορετική από αυτήν στα δύο εσωτερικά. Τα συστήματα με υψηλότερο αριθμό στρωμάτων δεν παρουσιάζουν κενό, ακόμη και παρουσία της ανομοιογένειας φορτίου. Τέσσερα αντιπροσωπευτικά παραδείγματα παρουσιάζονται στην εικόνα 13. Η δομή της ζώνης που αναλύεται εδώ θα τροποποιηθεί από το συνυπολογισμό του τριγωνικού όρου στρέβλωσης, γ_3 . Οι πειραματικές μελέτες των στοιβών γραφενίου έχουν δείξει ότι, με την αύξηση του αριθμού των στρωμάτων, το σύστημα γίνεται όλο και περισσότερο μεταλλικό (η συγκέντρωση των φορέων φορτίου σε μηδενική ενέργεια αυξάνεται βαθμιαία), και εμφανίζονται διάφοροι τύποι μεταφοράς παρόμοιοι των ηλεκτρονίων και των οπών (Novoselov και άλλοι, 2004; Morozov και άλλοι, 2005). Μια ανομοιογενή κατανομή του φορτίου μεταξύ των στρωμάτων γίνεται πολύ σημαντική σε αυτήν την περίπτωση, οδηγώντας σε δισδιάστατα (2D) συστήματα ηλεκτρονίων και οπών που καταλαμβάνουν μερικά μόνο στρώματα γραφενίου κοντά στην επιφάνεια, και μπορούν να υπερिσχύσουν απόλυτα τις ιδιότητες μεταφοράς των στοιβών γραφενίου (Morozov και άλλοι, 2005).

Οι εκφυλισμοί των ζωνών στο $\epsilon=0$ μπορούν να μελετηθούν με τη χρήση τοπολογικών επιχειρημάτων (Mañes και άλλοι, 2007). Τα πολλαπλά στρώματα (με έναν άρτιο αριθμό στρωμάτων) και η συσσώρευση Bernal έχουν αντίστροφη συμμετρία, κάτι που οδηγεί σε εκφυλισμούς με αριθμό τυλίγματος +2, όπως στην περίπτωση μιας διπλής στιβάδας. Η τριγωνική συμμετρία του πλέγματος συνεπάγεται ότι αυτά τα

σημεία μπορούν να οδηγήσουν, το πολύ-πολύ στην καλύτερη περίπτωση, σε τέσσερα σημεία Dirac. Στις στοίβες με περιττό αριθμό στρωμάτων, αυτοί οι εκφυλισμοί μπορούν να απομακρυνθούν πλήρως. Ο αριθμός τυλίγματος των εκφυλισμών που βρέθηκαν στις στοίβες με N στρώματα και ορθορομβική διάταξη είναι $\pm N$. Η ενσωμάτωση των όρων τριγωνικής στρέβλωσης θα οδηγήσει στην ύπαρξη πολλών ασθενέστερων εκφυλισμών κοντά στο $\epsilon=0$.

Επιπλέον, είναι γνωστό ότι στο γραφίτη, τα επίπεδα μπορούν να περιστραφούν το ένα σε σχέση με το άλλο μοτίβα/σχέδια Moiré που παρατηρούνται στο STM των επιφανειών γραφίτη (Rong και Kuiper, 1993). Τα στρώματα γραφενίου μπορούν να περιστραφούν το ένα σε σχέση με το άλλο λόγω της ασθενούς ζεύξης μεταξύ των επιπέδων που επιτρέπουν την παρουσία πολλών διαφορετικών προσανατολιστικών καταστάσεων που είναι ημι-εκφυλισμένες σε ενέργεια. Για ορισμένες γωνίες, τα στρώματα γραφενίου γίνονται ισοδύναμα το ένα με το άλλο κάτι που οδηγεί μια μείωση της ηλεκτρονικής ενέργειας. Ένα τέτοιο φαινόμενο είναι αρκετά παρόμοιο με τις ισοδύναμες-δυσανάλογες μεταβάσεις που παρατηρούνται σε ορισμένα συστήματα φόρτισης-πυκνότητας-κύματος ή εφίζηση των αερίων στο γραφίτη (Bak, 1982).



Το είδος της ηλεκτρονικής δομής εξάρτησης στη σχετική γωνία περιστροφής μεταξύ των στρωμάτων γραφενίου οδηγεί σε αυτό που αποκαλείται υπερ-ολισθηρότητα στο γραφίτη (Dienwiebel και άλλοι, 2004), ειδικότερα, η εξαφάνιση της τριβής μεταξύ των στρωμάτων ως συνάρτηση της γωνίας περιστροφής. Στην περίπτωση της διπλοστιβάδας γραφενίου, μια περιστροφή από μια μικρή ισοδύναμη γωνία οδηγεί στην αποτελεσματική αποσύνδεση μεταξύ των στρωμάτων και στην ανάκτηση του γραμμικού φάσματος Dirac του μονού στρώματος, έστω και με μια τροποποίηση στην τιμή της ταχύτητας Fermi (Lopes dos Santos και άλλοι, 2007).

1. Η ηλεκτρονική δομή του χύμα γραφίτη

Η περιγραφή στενής-σύνδεσης του γραφενίου που περιγράφηκε νωρίτερα μπορεί να επεκταθεί και σε συστήματα με έναν άπειρο αριθμό στρωμάτων. Η ζεύξη μεταξύ των στρωμάτων οδηγεί σε όρους αναπήδησης μεταξύ των π τροχιακών στα διάφορα στρώματα, οι οποίοι με τη σειρά τους οδηγούν στο ενονομαζόμενο πρότυπο Slonczewski-Weiss-McClure (Slonczewski και Weiss, 1958). Αυτό το πρότυπο περιγράφει τη δομή της ζώνης του χύμα γραφίτη με τη συσσώρευση Bernal στον ΠΙΝΑΚΑ I. Παράμετροι της δομής της ζώνης του γραφίτη (Dresselhaus και Dresselhaus, 2002).

γ_0	3.16 eV
γ_1	0.39 eV
γ_2	-0.020 eV
γ_3	0.315 eV
γ_4	0.044 eV
γ_5	0.038 eV
Δ	-0.008 eV

ταξινομώντας τους όρους των επτά παραμέτρων: $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \gamma_5$, και Δ . Η παράμετρος γ_0 περιγράφει την αναπήδηση μέσα σε κάθε στρώμα, και έχει εξεταστεί προηγουμένως. Η σύνδεση μεταξύ των τροχιακών στα άτομα που είναι κοντινότερα γειτονικά στα διαδοχικά στρώματα είναι γ_1 , την οποία νωρίτερα την ονομάσαμε t_{\perp} . Οι παράμετροι γ_3 και γ_4 περιγράφουν την αναπήδηση μεταξύ των τροχιακών στα αμέσως επόμενα πλησιέστερα γειτονικά στα διαδοχικά στρώματα όπου συζητήθηκαν στην περίπτωση της διπλής στιβάδας. Οι σύνδεσμοι μεταξύ των τροχιακών στα επόμενα-κοντινότερα-γειτονικά στρώματα είναι γ_2 και γ_5 . Τέλος, το Δ είναι μια ενέργεια στο χώρο που απεικονίζει την ισοδυναμία μεταξύ των δύο υποπλεγμάτων σε κάθε στρώμα γραφενίου μόλις γίνει αντιληπτή η παρουσία γειτονικών στρωμάτων. Οι τιμές αυτών των παραμέτρων, και η εξάρτησή τους με την πίεση, ή, ισοδύναμα, οι διατομικές αποστάσεις, έχουν μελετηθεί εκτεταμένα (McClure, 1957, Nozières, 1958; Dresselhaus και Mavroides, 1964; Soule και άλλοι, 1964; Dillon και άλλοι, 1977; Brandt και άλλοι, 1988). Ένα αντιπροσωπευτικό σύνολο τιμών παρουσιάζεται στον Πίνακα I.

Το μοναδιαίο κύτταρο του γραφίτη με τη συσσώρευση Bernal περιλαμβάνει δύο στρώματα, και δύο άτομα μέσα σε κάθε στρώμα. Η στενής-σύνδεσης Χαμιλτονιανή που περιγράφηκε προηγουμένως μπορεί να απεικονιστεί ως ένας 4×4 πίνακας (πλέγμα). Στο συνεχές όριο, οι δύο μη-ισότιμες γωνίες του BZ μπορούν να εξεταστούν χωρία, και οι όροι του επιπέδου μπορούν να περιγραφούν από την εξίσωση Dirac. Οι επόμενοι όροι που έχουν σημασία για το ηλεκτρονικό φάσμα χαμηλής ενέργειας είναι οι πλησιέστεροι-γειτονικοί σύνδεσμοι γ_1 και γ_3 . Η επίδραση της παραμέτρου γ_4 στις χαμηλές-ενεργειακές ζώνες είναι πολύ μικρότερη, όπως θα συζητηθεί παρακάτω. Τέλος, οι μικρολεπτομέρειες του φάσματος του χύμα γραφίτη καθορίζονται από το Δ , το οποίο διασπά τη συμμετρία ηλεκτρονίου και σπής των ζωνών

που έχουν διατηρηθεί από τις παραμέτρους γ_0 , γ_1 , και γ_3 . Υποτίθεται ότι συνήθως είναι πολύ μικρότερο από τους άλλους όρους.

Τα δύο άτομα από το μοναδιαίο κύτταρο σε ένα στρώμα τα ονομάζουμε 1 και 2, και αυτά που αντιστοιχούν στο δεύτερο στρώμα τα ονομάζουμε 3 και 4. Τα άτομα 2 και 3 είναι ακριβώς το ένα πάνω από το άλλο. Έπειτα, τα στοιχεία του Χαμιλτονιανού πίνακα μπορούν να γραφτούν ως

$$\begin{aligned}
 H_{11}^K &= 2\gamma_2 \cos(2\pi k_z/c), \\
 H_{12}^K &= v_F(k_x + ik_y), \\
 H_{13}^K &= \frac{3\gamma_4 a}{2}(1 + e^{ik_z c})(k_x + ik_y), \\
 H_{14}^K &= \frac{3\gamma_3 a}{2}(1 + e^{ik_z c})(k_x - ik_y), \\
 H_{22}^K &= \Delta + 2\gamma_5 \cos(2\pi k_z/c), \\
 H_{23}^K &= \gamma_1(1 + e^{ik_z c}), \\
 H_{24}^K &= \frac{3\gamma_4 a}{2}(1 + e^{ik_z c})(k_x + ik_y), \\
 H_{33}^K &= \Delta + 2\gamma_5 \cos(2\pi k_z/c), \\
 H_{34}^K &= v_F(k_x + ik_y), \\
 H_{44}^K &= 2\gamma_2 \cos(2\pi k_z/c),
 \end{aligned} \tag{43}$$

όπου c είναι η σταθερά πλέγματος στην εξωτερική επίπεδη κατεύθυνση, και είναι ίση με το διπλάσιο της απόστασης των ενδιάμεσων στρωμάτων. Τα στοιχεία του πίνακα H^K μπορούν να ληφθούν με την αντικατάσταση του k_x από το $-k_x$ (άλλες συνθήκες για το μοναδιαίο κύτταρο και τον προσανατολισμό του πλέγματος οδηγούν σε διαφορετικές φάσεις). Πρόσφατα πειράματα ARPES (Ohta και άλλοι, 2006; Zhou, Gweon, και Lanzara, 2006; Zhou, Gweon, και άλλοι, 2006; Bostwick, Ohta, Seyller, και άλλοι, 2007) που εκτελέστηκαν με ένα ταξινομημένο τρόπο αυξάνοντας τις στοίβες γραφενίου (Berger και άλλοι, 2004) επιβεβαιώνουν τα βασικά χαρακτηριστικά αυτού του προτύπου, που σχηματίστηκαν βάσει των μετρήσεων της επιφάνειας Fermi (McClure, 1957; Soule και άλλοι, 1964). Το ηλεκτρονικό φάσμα του προτύπου μπορεί επίσης να υπολογιστεί μέσα σε ένα μαγνητικό πεδίο (de Gennes, 1964; Nakao, 1976), και τα αποτελέσματα συνάδουν επίσης με το STM στις επιφάνειες από γραφίτη (Kobayashi και άλλοι,

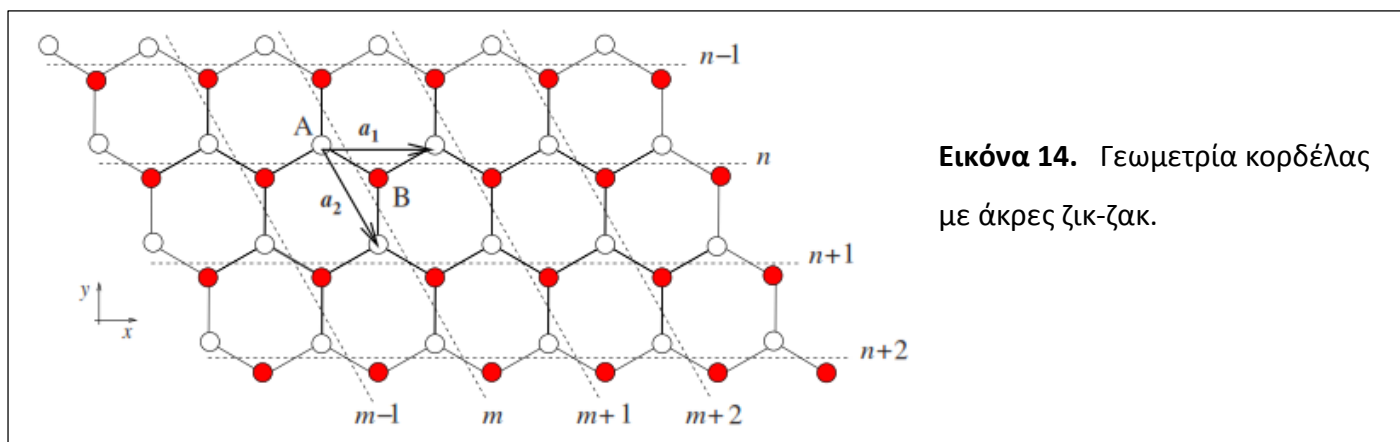
2005; Matsui και άλλοι, 2005; Niimi και άλλοι, 2006; Li και Andrei, 2007), ταξινομώντας τις αυξημένες στοιβες γραφενίου (Mallet και άλλοι, 2007), και τις οπτικές μετρήσεις στο υπέρυθρο φάσμα (Li και άλλοι, 2006).

ΣΤ. Επιφανειακές καταστάσεις στο γραφένιο

Μέχρι στιγμής έχουμε συζητήσει τις βασικές ιδιότητες του χύμα γραφενίου. Εντούτοις, το γραφένιο έχει μια πολύ ενδιαφέρουσα επιφάνεια (άκρη) καταστάσεων η οποία δεν υπάρχει σε άλλα συστήματα. Ένα ημι-άπειρο φύλλο γραφενίου με μια ζικ-ζακ άκρη έχει μια ζώνη μηδενικών-ενεργειακών καταστάσεων που εντοπίζονται στην επιφάνεια (Fujita και άλλοι, 1996; Nakada και άλλοι, 1996; Wakabayashi και άλλοι, 1999). Στην ενότητα II.H, θα συζητήσουμε την ύπαρξη ακραίων καταστάσεων χρησιμοποιώντας την εξίσωση Dirac. Εδώ συζητάμε το ίδιο πρόβλημα χρησιμοποιώντας τη Χαμιλτονιανή στενής-σύνδεσης. Για να δούμε γιατί υπάρχουν αυτές οι καταστάσεις στα άκρα, εξετάζουμε τη γεωμετρία των κορδελών με ζικ-ζακ άκρες που παρουσιάζονται στην εικόνα 14. Το πλάτος των κορδελών είναι τέτοιο που στην εγκάρσια διατομή έχει N μοναδιαία κύτταρα (κατεύθυνση y). Υποθέτουμε ότι η κορδέλα έχει άπειρο μήκος κατά τη διαμήκη κατεύθυνση (κατεύθυνση x).

Ξαναγράφουμε την εξίσωση (5), με $t' = 0$, σε όρους των ακέραιων δεικτών m και n , που εισήχθησαν στην εικόνα 14, και επισημαίνοντας τα μοναδιαία κύτταρα,

$$H = -t \sum_{m,n,\sigma} [a_{\sigma}^{\dagger}(m,n)b_{\sigma}(m,n) + a_{\sigma}^{\dagger}(m,n)b_{\sigma}(m-1,n) + a_{\sigma}^{\dagger}(m,n)b_{\sigma}(m,n-1) + \text{H.c.}]. \quad (44)$$



Εικόνα 14. Γεωμετρία κορδέλας με άκρες ζικ-ζακ.

Δεδομένου ότι η κορδέλα είναι άπειρη στην κατεύθυνση a_1 , μπορεί κανείς να εισάγει μια Fourier αποσύνθεσης των φορέων που οδηγούν σε

$$H = -t \int \frac{dk}{2\pi} \sum_{n,\sigma} [a_{\sigma}^{\dagger}(k,n)b_{\sigma}(k,n) + e^{ika}a_{\sigma}^{\dagger}(k,n)b_{\sigma}(k,n) + a_{\sigma}^{\dagger}(k,n)b_{\sigma}(k,n-1) + \text{H.c.}], \quad (45)$$

όπου $c_{\sigma}^{\dagger}(k,n)|0\rangle = |c, \sigma, k, n\rangle$ και $c = a, b$. Η Χαμιλτονιανή ενός σωματιδίου μπορεί να γραφτεί ως

$$H^{1p} = -t \int dk \sum_{n,\sigma} [(1 + e^{ika})|a, k, n, \sigma\rangle\langle b, k, n, \sigma| + |a, k, n, \sigma\rangle\langle b, k, n-1, \sigma| + \text{H.c.}]. \quad (46)$$

Η λύση της εξίσωση του Schrödinger $H^{1p}|\mu, k, \sigma\rangle = E_{\mu,k}|\mu, k, \sigma\rangle$ μπορεί γενικά να εκφραστεί ως

$$|\mu, k, \sigma\rangle = \sum_n [\alpha(k,n)|a, k, n, \sigma\rangle + \beta(k,n)|b, k, n, \sigma\rangle], \quad (47)$$

όπου οι συντελεστές α και β πληρούν τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$E_{\mu,k}\alpha(k,n) = -t[(1 + e^{ika})\beta(k,n) + \beta(k,n-1)], \quad (48)$$

$$E_{\mu,k}\beta(k,n) = -t[(1 + e^{-ika})\alpha(k,n) + \alpha(k,n+1)]. \quad (49)$$

Δεδομένου ότι η κορδέλα έχει ένα πεπερασμένο πλάτος, πρέπει να είμαστε προσεκτικοί με τις συνοριακές συνθήκες. Επειδή η κορδέλα υπάρχει μόνο μεταξύ των $n = 0$ και $n = N-1$ στο όριο, οι εξισώσεις (48) και (49) διαβάζονται

$$E_{\mu,k}\alpha(k,0) = -t(1 + e^{ika})\beta(k,0), \quad (50)$$

$$E_{\mu,k}\beta(k,N-1) = -t(1 + e^{-ika})\alpha(k,N-1). \quad (51)$$

Η επιφάνεια (η άκρη) των καταστάσεων είναι λύσεις των εξισώσεων (48)–(51) με $E_{\mu,k} = 0$,

$$0 = (1 + e^{ika})\beta(k,n) + \beta(k,n-1), \quad (52)$$

$$0 = (1 + e^{-ika})\alpha(k,n) + \alpha(k,n+1), \quad (53)$$

$$0 = \beta(k,0), \quad (54)$$

$$0 = \alpha(k,N-1). \quad (55)$$

Οι εξισώσεις (52) και (53) λύνονται εύκολα, δίνοντας

$$\alpha(k,n) = [-2 \cos(ka/2)]^n e^{i(ka/2)n} \alpha(k,0), \quad (56)$$

$$\beta(k,n) = [-2 \cos(ka/2)]^{N-1-n} \times e^{-i(ka/2)(N-1-n)} \beta(k,N-1). \quad (57)$$

θεωρήστε, για απλούστευση, ότι έχουμε ένα ημι-άπειρο σύστημα με μια ενιαία άκρη. Στην εξίσωση (57), πρέπει να απαιτήσουμε τη συνθήκη σύγκλισης $|-2 \cos(ka/2)| < 1$ επειδή αλλιώς η κυματοσυνάρτηση θα αποκλίνει στο ημι-άπειρο φύλλο γραφενίου. Επομένως, το ημι-άπειρο σύστημα έχει ακραίες καταστάσεις

για το ka στην περιοχή $2\pi/3 < ka < 4\pi/3$, οι οποίες αντιστοιχούν στο $1/3$ των πιθανών ορμών. Να σημειωθεί ότι τα εύρη (τα πλάτη) των ακραίων καταστάσεων δίνονται από

$$|\alpha(k,n)| = \sqrt{\frac{2}{\lambda(k)}} e^{-n/\lambda(k)}, \quad (58)$$

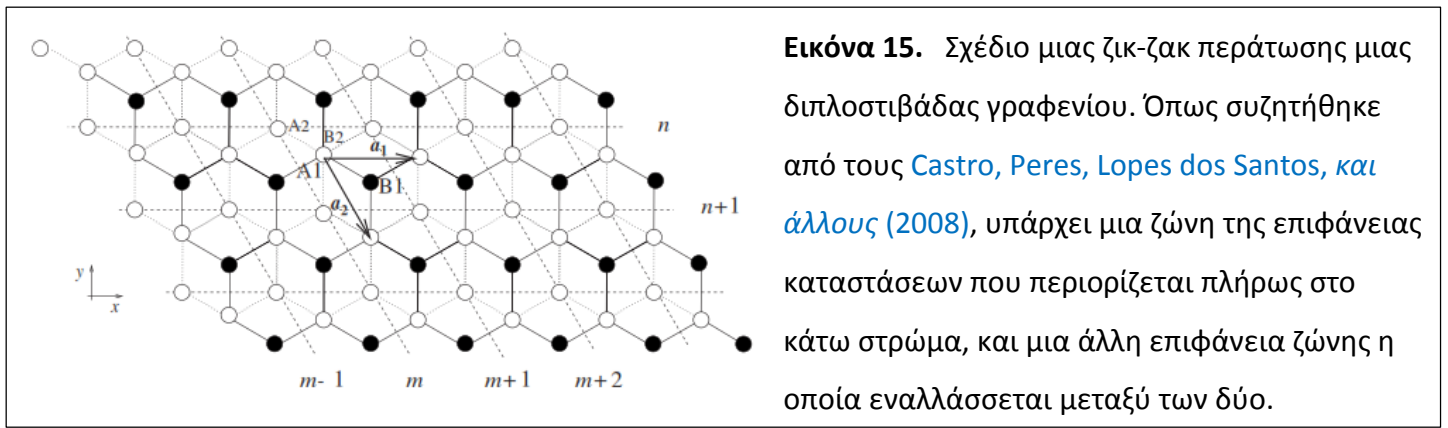
$$|\beta(k,n)| = \sqrt{\frac{2}{\lambda(k)}} e^{-(N-1-n)/\lambda(k)}, \quad (59)$$

Όπου το μήκος εισχώρησης/διείσδυσης δίνεται από $\lambda(k) = -1/\ln|2 \cos(ka/2)| \quad (60)$

Γίνεται εύκολα αντιληπτό ότι το μήκος διείσδυσης αποκλίνει όταν το ka προσεγγίζει τα όρια της περιοχής $[2\pi/3, 4\pi/3]$.

Παρά το γεγονός ότι οι συνοριακές συνθήκες ορίζονται από τις εξισώσεις (54) και (55) πληρούν τις λύσεις των (56) και (57) στο ημι-άπειρο σύστημα, δεν είναι στη γεωμετρία κορδελών. Στην πραγματικότητα, οι εξισώσεις (58) και (59) έχουν ιδιοκαταστάσεις μόνο στο ημι-άπειρο σύστημα. Στην κορδέλα του γραφενίου οι δυο ακραίες καταστάσεις, οι οποίες προέρχονται από τις δύο πλευρές της άκρης, θα επικαλυφθούν μεταξύ τους. Οι δεσμοί και οι αντι-δεσμοί των φάσεων που διαμορφώνονται από τις δύο ακραίες καταστάσεις θα είναι τότε η κορδέλα ιδιοκαταστάσεων ([Wakabayashi και άλλοι, 1999](#)) (σημειώστε ότι σε μηδενική κατανάλωση ενέργειας δεν υπάρχουν άλλες φάσεις με τις οποίες οι ακραίες καταστάσεις θα μπορούσαν να υβριδοποιηθούν). Δεδομένου ότι οι δεσμοί και οι αντι-δεσμοί των φάσεων έχουν σαν συνέπεια ένα χάσμα (ένα κενό) στην ενέργεια, οι μηδενικές-ενεργειακές επίπεδες ζώνες των ακραίων καταστάσεων θα μειώσουν ελαφρώς τη διασπορά, ανάλογα με το πλάτος N της κορδέλας. Η επικάλυψη μεταξύ των δύο ακραίων καταστάσεων είναι μεγαλύτερη ως ka προσεγγίζοντας τα $2\pi/3$ και $4\pi/3$. Αυτό σημαίνει ότι οι αποκλίσεις μηδενικής-ενεργειακής ομαλότητας θα είναι ισχυρότερες κοντά σε αυτά τα σημεία.

Οι ακραίες καταστάσεις στις νανοκορδέλες γραφενίου, όπως και στους νανοσωλήνες άνθρακα, προβλέπονται να είναι υγρά Luttinger, δηλαδή, μονοδιάστατα συστήματα ηλεκτρονίων που αλληλεπιδρούν ([Castro Neto και άλλοι, 2006b](#)). Επομένως, οι απλές νανοκορδέλες πρέπει να έχουν μονοδιάστατες (1D) ιδιομορφίες τετραγωνικής ρίζας στην πυκνότητα των καταστάσεών τους ([Nakada και άλλοι, 1996](#)) κάτι που μπορεί να εξεταστεί μέσω της φασματοσκοπίας Raman. Ωστόσο, η αναταραχή μπορεί να εξομαλύνει αυτές τις ιδιομορφίες. Παρουσία ενός μαγνητικού πεδίου, όταν οι χύμα καταστάσεις δημιουργούν κενά, οι ακραίες καταστάσεις είναι αρμόδιες για τη μεταφορά της περιστροφής και του φορτίου ([Abanin και άλλοι, 2006; Abanin, Lee, και Levitov, 2007; Abanin και Levitov, 2007; Abanin, Novoselov, Zeitler, και άλλοι, 2007](#)).



Εικόνα 15. Σχέδιο μιας ζικ-ζακ περάτωσης μιας διπλοστιβάδας γραφενίου. Όπως συζητήθηκε από τους [Castro, Peres, Lopes dos Santos, και άλλους \(2008\)](#), υπάρχει μια ζώνη της επιφάνειας καταστάσεων που περιορίζεται πλήρως στο κάτω στρώμα, και μια άλλη επιφάνεια ζώνης η οποία εναλλάσσεται μεταξύ των δύο.

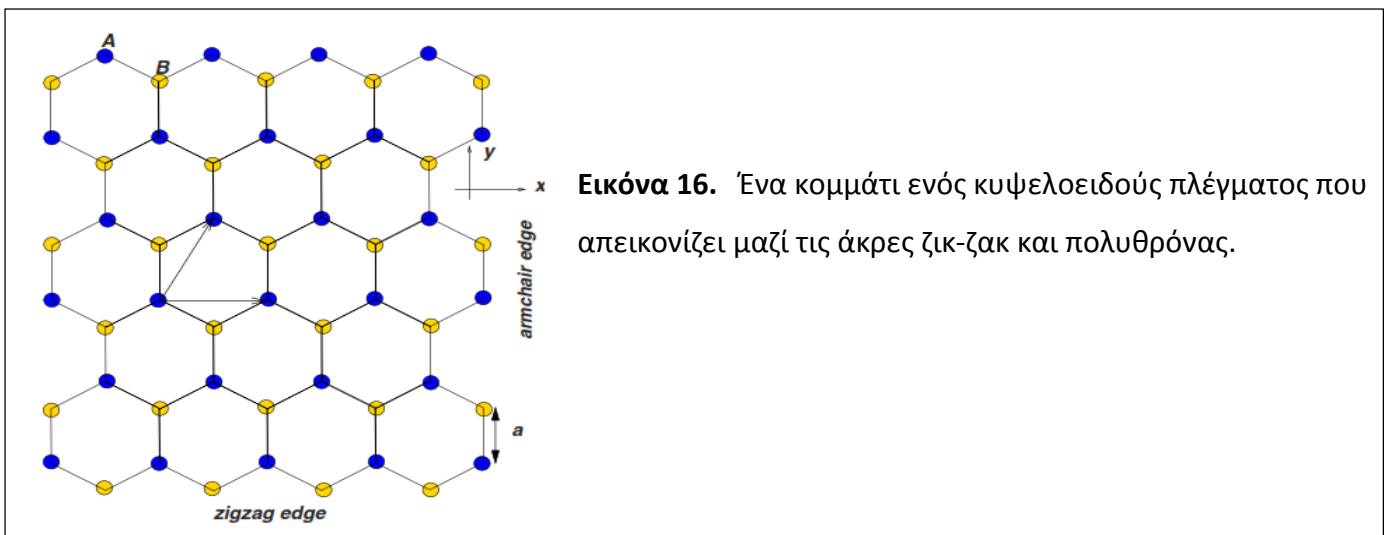
Z. Επιφανειακές καταστάσεις στις στοίβες γραφενίου

Το μονό-στρώμα γραφενίου μπορεί να θεωρηθεί ως ένας μηδενικός ημιαγωγός χάσματος, ο οποίος οδηγεί στη δυνατότητα μεσαίου-χάσματος καταστάσεων, στο $\epsilon=0$, όπως συζητήθηκε στην προηγούμενη ενότητα. Οι πιο μελετημένες τέτοιες καταστάσεις είναι εκείνες που εντοπίζονται κοντά σε μια ζικ-ζακ άκρη γραφενίου ([Fujita και άλλοι, 1996](#); [Wakayabashi και Sigrist, 2000](#)). Μπορεί να αποδειχθεί αναλυτικά ([Castro, Peres, Lopes dos Santos, και άλλοι, 2008](#)) ότι μια ζικ-ζακ άκρη διπλοστιβάδας, όπως αυτήν που παρουσιάζεται στην εικόνα 15, αναλύθηκε μέσα στην κοντινότερη-γειτονική προσέγγιση στενής-σύνδεσης που περιγράφηκε πριν, έχει δύο ζώνες των τοπικών καταστάσεων, μια πλήρως περιορισμένη στο άνω στρώμα και μια πανομοιότυπη με τις παρόμοιες καταστάσεις στο μονό-στρώμα γραφενίου, και μια άλλη ζώνη που εναλλάσσεται μεταξύ των δύο στρωμάτων. Αυτές οι καταστάσεις, στο $\epsilon=0$, έχουν πεπερασμένα εύρη (πλάτη) μόνο στο μισό των χώρων.

Αυτές οι ζώνες, όπως στο γραφένιο μονού-στρώματος, καταλαμβάνουν το ένα τρίτο του BZ μιας λωρίδας που οριοθετείται από ζικ-ζακ άκρες. Αυτές διασκορπίζονται σε μια πολωμένη διπλοστιβάδα. Δεδομένου ότι ο γραφίτης μπορεί να περιγραφεί από την άποψη των αποτελεσματικών συστημάτων διπλοστιβάδας, ένα για κάθε τιμή της κάθετης ορμής k_z , ο χύμα γραφίτης με μια ζικ-ζακ περάτωση θα πρέπει να παρουσιάσει μια ζώνη επιφάνειας ανά στρώμα.

H. Το φάσμα των νανοκορδελών γραφενίου

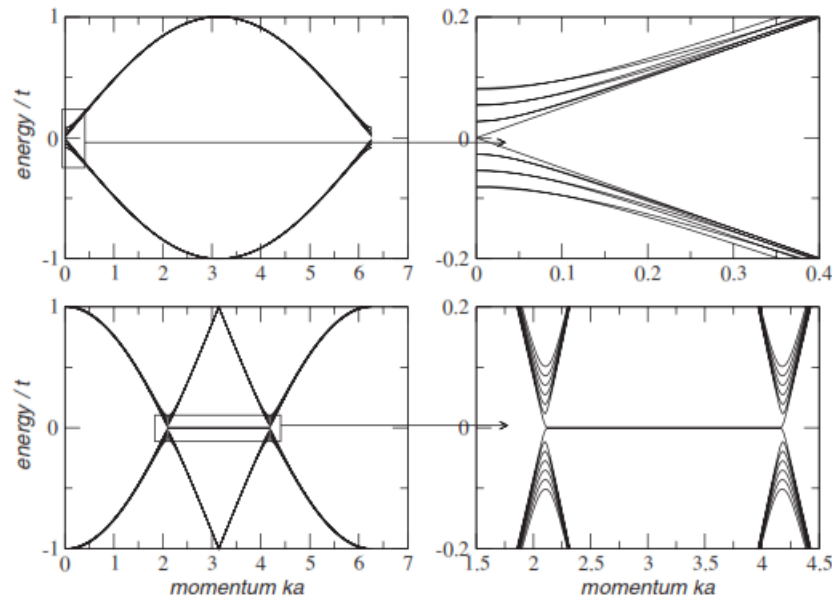
Το φάσμα των νανοκορδελών γραφενίου εξαρτάται από το είδος των ακρών τους: ζικ-ζακ ή πολυθρόνα ([Brey και Fertig, 2006a, 2006b](#); [Nakada και άλλοι, 1996](#)). Στην εικόνα 16, παρουσιάζουμε ένα κυψελοειδές πλέγμα που έχει ζικ-ζακ άκρες κατά μήκος της κατεύθυνσης x και των ακρών πολυθρόνας κατά μήκος της κατεύθυνσης y . Εάν επιλέγουμε η κορδέλα να είναι άπειρη στην κατεύθυνση x , παράγουμε μια νανοκορδέλα γραφενίου με ζικ-ζακ άκρες. Αντιθέτως, επιλέγοντας την κορδέλα να είναι μακροσκοπικά μεγάλη κατά μήκος του y αλλά πεπερασμένη κατά την κατεύθυνση x , παράγουμε μια νανοκορδέλα γραφενίου με άκρες πολυθρόνας.



Εικόνα 16. Ένα κομμάτι ενός κυψελοειδούς πλέγματος που απεικονίζει μαζί τις άκρες ζικ-ζακ και πολυθρόνας.

Στην εικόνα 17, παρουσιάζουμε 14 ενεργειακά επίπεδα, υπολογισμένα με την προσέγγιση στενής-σύνδεσης, πιο κοντά στη μηδενική ενέργεια για μια νανοκορδέλα με ζικ-ζακ άκρες και άκρες πολυθρόνας και μοναδιαία κύτταρα πλάτους $N=200$. Δείχνουμε ότι και τα δύο είναι μεταλλικά, και ότι η ζικ-ζακ κορδέλα παρουσιάζει μια ζώνη με μηδενικές-ενεργειακές λειτουργίες που είναι απύσχα στην περίπτωση της πολυθρόνας. Αυτή η ζώνη στη μηδενική ενέργεια είναι οι επιφανειακές καταστάσεις που υπάρχουν κοντά στην άκρη της κορδέλας γραφενίου. Οι πιο λεπτομερείς υπολογισμοί από την αρχή των φασμάτων στη νανοκορδέλα γραφενίου δείχνουν ότι τα αποτελέσματα της αλληλεπίδρασης μπορούν να οδηγήσουν σε ηλεκτρονικά χάσματα (Son και άλλοι, 2006b) και μαγνητικές καταστάσεις κοντά στα άκρα του γραφενίου, ανεξάρτητες από τη φύση τους (Son και άλλοι, 2006a; Yang, Cohen, και Louie, 2007; Yang, Park, Son, και άλλοι, 2007).

Ωστόσο, από την πειραματική άποψη, οι νανοκορδέλες γραφενίου επί του παρόντος έχουν υψηλό βαθμό τραχύτητας (ανωμαλίας) στις άκρες. Μια τέτοια ακραία αναταραχή μπορεί να αλλάξει σημαντικά τις ιδιότητες των ακραίων καταστάσεων (Areshkin και White, 2007; Gunlycke και άλλοι, 2007), οδηγώντας στον εντοπισμό Anderson και σε ανωμαλίες στο κβαντικό φαινόμενο Hall (Castro Neto και άλλοι, 2006b; Martin και Blanter, 2007) καθώς επίσης και οι επιδράσεις των Coulomb αποκλεισμών (Sols και άλλοι, 2007). Τέτοιες επιδράσεις έχουν παρατηρηθεί ήδη στη λιθογραφική μηχανική νανοκορδελών γραφενίου (Han και άλλοι, 2007; Özyilmaz και άλλοι, 2007).



Εικόνα 17. Ηλεκτρονική διασπορά για τις νανοκορδέλες γραφενίου.

Αριστερά: ενεργειακό φάσμα, που υπολογίζεται από τις εξισώσεις στενής-σύνδεσης, για μια νανοκορδέλα με άκρες πολυθρόνας (πάνω) και ζικ-ζακ (κάτω). Το πλάτος της νανοκορδέλας είναι $N=200$ ανά μοναδιαίο κύτταρο. Απεικονίζονται μόνο 14 ιδιοκαταστάσεις.

Δεξιά: μεγέθυνση των καταστάσεων χαμηλής ενέργειας που παρουσιάζονται στο δεξιό μέρος.

Επιπλέον, το πρόβλημα της αδρανοποίησης των ακρών με υδρογόνο ή άλλα στοιχεία που δεν είναι κατανοητά πειραματικά αυτήν την περίοδο. Η αδρανοποίηση μπορεί να διαμορφωθεί, στην προσέγγιση στενής-σύνδεσης, με τροποποιήσεις των ενεργειών αναπήδησης (Novikov, 2007) ή μέσω των πρόσθετων φάσεων στις συνοριακές συνθήκες (Kane και Mele, 1997). Η θεωρητική διαμόρφωση της αδρανοποίησης των άκρων υποδεικνύει ότι αυτά έχουν μια ισχυρή επίδραση στις ηλεκτρονικές ιδιότητες στην άκρη των νανοκορδελών γραφενίου (Barone και άλλοι, 2006; Hod και άλλοι, 2007).

Σε ότι ακολουθεί, το φάσμα για τις ζικ-ζακ άκρες και για τις άκρες πολυθρόνας, το παίρνουμε αμέσως από την εξίσωση Dirac. Αυτό αρχικά έγινε τόσο με αλλά και χωρίς μαγνητικό πεδίο (Nakada και άλλοι, 1996; Brey και Fertig, 2006a, 2006b).

1. Νανοκορδέλες μορφής ζικ-ζακ

Στη γεωμετρία της εικόνας 16, τα διανύσματα των μοναδιαίων-κυττάρων είναι $\mathbf{a}_1=\alpha_0(1,0)$ και $\mathbf{a}_2=\alpha_0(1/2,\sqrt{3}/2)$, τα οποία παράγουν τα μοναδιαία διανύσματα του BZ που δίνονται από $\mathbf{b}_1=4\pi/(\alpha_0\sqrt{3})(\sqrt{3}/2,-1/2)$ και $\mathbf{b}_2=4\pi/(\alpha_0\sqrt{3})(0,1)$. Από τα δύο αυτά διανύσματα, βρίσκουμε δύο μη-ισότιμα σημεία Dirac που δίνονται από $\mathbf{K}=(4\pi/3\alpha_0,0)=(K,0)$ και $\mathbf{K}'=(-4\pi/3\alpha_0,0)=(-K,0)$, με $\alpha_0=\sqrt{3}\alpha$. Η Dirac Χαμιλτονιανή γύρω από το \mathbf{K} σημείο Dirac στον χώρο ορμής έχει ως εξής

$$H_{\mathbf{K}} = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (61)$$

και γύρω από το \mathbf{K}' ως

$$H_{\mathbf{K}'} = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x + ip_y \\ p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (62)$$

Η κυματοσυνάρτηση, στον πραγματικό χώρο, για το υπόστρωμα A δίνεται από

$$\Psi_A(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{r}} \psi_A(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{r}} \psi'_A(\mathbf{r}), \quad (63)$$

και για το υπόστρωμα B δίνεται από

$$\Psi_B(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{r}} \psi_B(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{r}} \psi'_B(\mathbf{r}), \quad (64)$$

όπου ψ_A και ψ_B είναι τα συστατικά της σπινόριας (spinor) κυματοσυνάρτησης της Χαμιλτονιανής (61) και τα ψ'_A και ψ'_B έχουν την ίδια έννοια αλλά σχετικά με την εξίσωση (62). Υποθέτουμε ότι οι άκρες των νανοκορδελών είναι παράλληλες με τον άξονα x . Σε αυτήν την περίπτωση, η μεταφραστική συμμετρία εγγυάται ότι η σπινόρια λειτουργία των κυμάτων μπορεί να γραφτεί ως

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \phi_A(y) \\ \phi_B(y) \end{pmatrix}, \quad (65)$$

και μια παρόμοια εξίσωση για τα σπινόρια της Χαμιλτονιανής (62). Για τις ζικ-ζακ άκρες, οι συνοριακές συνθήκες στην άκρη της κορδέλας (που βρίσκεται στο $y=0$ και $y=L$, όπου το L είναι το πλάτος της κορδέλας) είναι

$$\Psi_A(y=L) = 0, \quad \Psi_B(y=0) = 0, \quad (66)$$

που οδηγούν σε

$$0 = e^{iKx} e^{ik_x x} \phi_A(L) + e^{-iKx} e^{ik_x x} \phi'_A(L), \quad (67)$$

$$0 = e^{iKx} e^{ik_x x} \phi_B(0) + e^{-iKx} e^{ik_x x} \phi'_B(0). \quad (68)$$

Οι συνοριακές συνθήκες (67) και (68) πληρούνται για κάθε x από την

$$\phi_A(L) = \phi'_A(L) = \phi_B(0) = \phi'_B(0) = 0. \quad (69)$$

Εμείς τώρα πρέπει να ανακαλύψουμε τη μορφή των λειτουργιών του περιβλήματος. Η ιδιοσυνάρτηση γύρω από το σημείο \mathbf{K} έχει τη μορφή

$$\begin{pmatrix} 0 & k_x - \partial_y \\ k_x + \partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A(y) \\ \phi_B(y) \end{pmatrix} = \tilde{\epsilon} \begin{pmatrix} \phi_A(y) \\ \phi_B(y) \end{pmatrix}, \quad (70)$$

με το $\tilde{\epsilon} = \epsilon / v_F$ και ϵ την ενεργειακή ιδιοτιμή. Το ιδιο-πρόβλημα μπορεί να γραφτεί ως δύο διαφορικές γραμμικές εξισώσεις της μορφής

$$\begin{aligned}(k_x - \partial_y)\phi_B &= \tilde{\epsilon}\phi_A, \\ (k_x + \partial_y)\phi_A &= \tilde{\epsilon}\phi_B.\end{aligned}\tag{71}$$

Η εφαρμογή του τελεστή $k_x + \partial_y$ στην πρώτη εξίσωση (71) οδηγεί σε

$$(-\partial_y^2 + k_x^2)\phi_B = \tilde{\epsilon}^2\phi_B,\tag{72}$$

με το ϕ_A που δίνεται από

$$\phi_A = \frac{1}{\tilde{\epsilon}}(k_x - \partial_y)\phi_B.\tag{73}$$

Η λύση της εξίσωσης (72) έχει τη μορφή

$$\phi_B = Ae^{zy} + Be^{-zy},\tag{74}$$

οδηγεί σε μια ιδιο-ενέργεια $\tilde{\epsilon} = k_x^2 - z^2$. Οι συνοριακές συνθήκες για μια ζικ-ζακ άκρη απαιτούν το $\phi_A(y=L) = 0$ και $\phi_B(y=0) = 0$, που οδηγούν σε

$$\phi_B(y=0) = 0 \Leftrightarrow A + B = 0,\tag{75}$$

$$\phi_A(y=L) = 0 \Leftrightarrow (k_x - z)Ae^{zL} + (k_x + z)Be^{-zL} = 0,$$

το οποίο οδηγεί σε μια εξίσωση ιδιοτιμής της μορφής

$$e^{-2zL} = \frac{k_x - z}{k_x + z}.\tag{76}$$

Η εξίσωση (76) έχει πραγματικές λύσεις για το z , όποτε το k_x είναι θετικό. Αυτές οι λύσεις αντιστοιχούν στα επιφανειακά κύματα (στην άκρη των καταστάσεων) που υπάρχουν κοντά στην άκρη της κορδέλας γραφενίου. Στην ενότητα II.ΣΤ, αναφέραμε αυτές τις καταστάσεις από την πλευρά του προτύπου στενής-σύνδεσης. Εκτός από τις πραγματικές λύσεις για το z , η εξίσωση (76) επίσης υποστηρίζει την πολυπλοκότητα αυτή, της μορφής $z=ik_n$, που οδηγεί σε

$$k_x = \frac{k_n}{\tan(k_n L)}.\tag{77}$$

Οι λύσεις της εξίσωσης (77) αντιστοιχούν σε περιορισμένες λειτουργίες στην κορδέλα γραφενίου.

Εάν εφαρμόσουμε την ίδια διαδικασία στην εξίσωση Dirac γύρω από το σημείο Dirac K' , λαμβάνουμε μια διαφορετική εξίσωση ιδιοτιμής που δίνεται από

$$e^{-2zL} = \frac{k_x + z}{k_x - z}. \quad (78)$$

Αυτή η εξίσωση διατηρεί τις πραγματικές λύσεις για το z εάν το k_x είναι αρνητικό. Επομένως, έχουμε ακραίες καταστάσεις για αρνητικές τιμές του k_x , με ορμή γύρω από το K' . Όπως στην περίπτωση του K , το σύστημα επίσης υποστηρίζει τις περιορισμένες λειτουργίες, που δίνονται από

$$k_x = -\frac{k_n}{\tan(k_n L)}. \quad (79)$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι οι εξισώσεις ιδιοτιμής για το K' προέρχονται από εκείνες για το K από την αντιστροφή, $k_x \rightarrow -k_x$. Τελικά σημειώνουμε ότι οι ακραίες καταστάσεις για τις νανοκορδέλες μορφής ζικ-ζακ δεν παράγουν διασπορά (εντοπισμένες στον πραγματικό χώρο) όταν $t'=0$. Όταν η συμμετρία ηλεκτρονίου και οπής σπάει ($t' \neq 0$), αυτές οι καταστάσεις διασκορπίζονται με μια ταχύτητα Fermi $v_e \approx t'a$ (Castro Neto και άλλοι, 2006b).

2. Νανοκορδέλες μορφής πολυθρόνας

Εξετάζουμε τώρα μια πολυθρονοειδή νανοκορδέλα με άκρες πολυθρόνας κατά μήκος της κατεύθυνσης y . Οι συνοριακές συνθήκες στις άκρες της κορδέλας (που βρίσκονται στο $x=0$ και στο $x=L$, όπου L είναι το πλάτος της κορδέλας),

$$\Psi_A(x=0) = \Psi_B(x=0) = \Psi_A(x=L) = \Psi_B(x=L) = 0. \quad (80)$$

Η μεταφραστική συμμετρία εγγυάται ότι η σπινιορική (spinor) κυματική λειτουργία της Χαμιλτονιανής (61) μπορεί να γραφτεί ως

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_y y} \begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix}, \quad (81)$$

και μια παρόμοια εξίσωση για τα σπινόρια της Χαμιλτονιανής (62). Οι συνοριακές συνθήκες έχουν τη μορφή

$$0 = e^{ik_y y} \phi_A(0) + e^{ik_y y} \phi'_A(0), \quad (82)$$

$$0 = e^{ik_y y} \phi_B(0) + e^{ik_y y} \phi'_B(0), \quad (83)$$

$$0 = e^{iKL} e^{ik_y y} \phi_A(L) + e^{-iKL} e^{ik_y y} \phi'_A(L), \quad (84)$$

$$0 = e^{iKL} e^{ik_y y} \phi_B(L) + e^{-iKL} e^{ik_y y} \phi'_B(L), \quad (85)$$

και πληρούνται για κάθε y εάν

$$\phi_{\mu}(0) + \phi'_{\mu}(0) = 0 \quad (86)$$

και

$$e^{iKL} \phi_{\mu}(L) + e^{-iKL} \phi'_{\mu}(L) = 0, \quad (87)$$

με $\mu=A,B$. Είναι προφανές ότι αυτές οι συνοριακές συνθήκες αναμιγνύουν/ανακατεύουν τις καταστάσεις από τα δύο σημεία Dirac. Τώρα πρέπει να βρούμε τη μορφή των λειτουργιών περιβλήματος υπακούοντας στις συνοριακές συνθήκες (86) και (87). Όπως πριν, οι συναρτήσεις ϕ_B και ϕ'_B υπακούνε στη δευτέρου-βαθμού διαφορική εξίσωση (72) (όπου το y αντικαθίσταται από το x), και οι συναρτήσεις ϕ_A και ϕ'_A καθορίζονται από την εξίσωση (73). Οι λύσεις της εξίσωσης (72) έχουν τη μορφή

$$\phi_B = Ae^{ik_n x} + Be^{-ik_n x}, \quad (88)$$

$$\phi'_B = Ce^{ik_n x} + De^{-ik_n x}. \quad (89)$$

Εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες (86) και (87), λαμβάνουμε

$$0 = A + B + C + D, \quad (90)$$

$$0 = Ae^{i(k_n+K)L} + De^{-i(k_n+K)L} + Be^{-i(k_n-K)L} + Ce^{i(k_n-K)L}. \quad (91)$$

Οι συνοριακές συνθήκες πληρούνται με την επιλογή

$$A = -D, \quad B = C = 0, \quad (92)$$

γεγονός που οδηγεί στο $\sin[(k_n+K)L] = 0$. Επομένως, οι επιτρεπόμενες τιμές του k_n δίνονται από

$$k_n = \frac{n\pi}{L} - \frac{4\pi}{3a_0}, \quad (93)$$

και οι ιδιο-ενέργειες δίνονται από

$$\tilde{\epsilon}^2 = k_y^2 + k_n^2. \quad (94)$$

Δεν υπάρχουν άλλες επιφανειακές καταστάσεις σε αυτήν την περίπτωση.

Θ. Τα φερμιόνια Dirac σε ένα μαγνητικό πεδίο

Εξετάζουμε τώρα το πρόβλημα ενός ενιαίου μαγνητικού πεδίου B που είναι εφαρμοσμένο κάθετα στο επίπεδο του γραφενίου.² Χρησιμοποιούμε το μετρητή Landau: $\mathbf{A}=B(-y,0)$. Σημειώστε ότι το μαγνητικό πεδίο εισάγει μια νέα κλίμακα μήκους στο πρόβλημα,

$$\ell_B = \sqrt{\frac{c}{eB}}, \quad (95)$$

το οποίο είναι το μαγνητικό μήκος. Η μόνη άλλη κλίμακα στο πρόβλημα είναι η ταχύτητα Fermi-Dirac. Η διαστατική ανάλυση δείχνει ότι η μόνη ποσότητα με τις διαστάσεις της ενέργειας που μπορούμε να κάνουμε είναι v_F/ℓ_B . Στην πραγματικότητα, αυτό καθορίζει τη συχνότητα κυκλοτρονίου των φερμιονίων Dirac,

$$\omega_c = \sqrt{2} \frac{v_F}{\ell_B} \quad (96)$$

(ο $\sqrt{2}$ παράγοντας προέρχεται από την κβαντοποίηση του προβλήματος, βλέπε κατωτέρω).

Οι εξισώσεις (95) και (96) δείχνουν ότι οι ενεργειακές κλίμακες κυκλοτρονίου είναι περίπου \sqrt{B} , σε αντίθεση με το μη-σχετικιστικό πρόβλημα όπου η ενέργεια κυκλοτρονίου είναι γραμμική στο B . Αυτό συνεπάγεται ότι η ενεργειακή κλίμακα που σχετίζεται με τα φερμιόνια Dirac είναι μάλλον διαφορετική από εκείνη που βρέθηκε μέσα στο σύνηθες δισδιάστατο (2D) αέριο ηλεκτρονίου. Για παράδειγμα, για τα πεδία της τάξεως του $B \approx 10$ T, η ενέργεια κυκλοτρονίου στο δισδιάστατο αέριο ηλεκτρονίου είναι της τάξεως των 10 K. Εν αντιθέσει, για το πρόβλημα του φερμιονίου Dirac και τα ίδια πεδία, η ενέργεια κυκλοτρονίου είναι της τάξεως των 1000 K, δηλαδή, δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη. Αυτό έχει ισχυρές επιπτώσεις στην παρατήρηση του κβαντικού φαινομένου Hall σε θερμοκρασία δωματίου (Novoselov και άλλοι, 2007). Επιπλέον, για $B=10$ το T η ενέργεια Zeeman είναι σχετικά μικρή, $g\mu_B B \approx 5$ K, και μπορεί να μην ληφθεί υπόψη.

² Το πρόβλημα των εγκάρσιων μαγνητικών και ηλεκτρικών πεδίων μπορεί επίσης να λυθεί με ακρίβεια. Δείτε Lukose και άλλοι (2007) και Peres και Castro (2007).

Εξετάζουμε τώρα την εξίσωση Dirac με περισσότερη λεπτομέρεια. Χρησιμοποιώντας την ελάχιστη ζεύξη στην εξίσωση (19) (δηλαδή, αντικαθιστώντας το $-i\nabla$ με $-i\nabla + e\mathbf{A}/c$), βρίσκουμε

$$v_F [\vec{\sigma} \cdot (-i\nabla + e\mathbf{A}/c)] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (97)$$

στο μετρητή Landau η γενική λύση για την κυματοσυνάρτηση έχει τη μορφή $\psi(x,y) = e^{ikx}\phi(y)$, και η εξίσωση Dirac έχει ως εξής

$$v_F \begin{bmatrix} 0 & \partial_y - k + Bey/c \\ -\partial_y - k + Bey/c & 0 \end{bmatrix} \phi(y) = E\phi(y), \quad (98)$$

η οποία μπορεί να ξαναγραφεί ως

$$\omega_c \begin{bmatrix} 0 & O \\ O^\dagger & 0 \end{bmatrix} \phi(\xi) = E\phi(\xi), \quad (99)$$

ή ισοδύναμα

$$(O\sigma^+ + O^\dagger\sigma^-)\phi = (2E/\omega_c)\phi, \quad (100)$$

όπου $\sigma^\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y$, και έχουμε καθορίσει την άνευ-διαστάσεων κλίμακα μήκους

$$\xi = \frac{y}{\ell_B} - \ell_B k \quad (101)$$

και μονοδιάστατους (1D) φορείς αρμονικού-ταλαντωτή

$$O = \frac{1}{\sqrt{2}}(\partial_\xi + \xi),$$

$$O^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\partial_\xi + \xi), \quad (102)$$

οι οποίοι τηρούν την κανονική μετατροπή των σχέσεων $[O, O^\dagger]=1$.

Ο αριθμός διαχειριστή είναι απλά $N=O^\dagger O$.

Κατ' αρχάς, σημειώνουμε ότι η εξίσωση (100) υπολογίζει μια λύση με μηδενική ενέργεια,

$$(O\sigma^+ + O^\dagger\sigma^-)\phi_0 = 0, \quad (103)$$

και δεδομένου ότι ο χώρος Hilbert που παράγεται από το $\vec{\sigma}$ είναι δεύτερης διάστασης, και το φάσμα που παράγεται από το O^\dagger οριοθετείται από κάτω, εμείς απλά πρέπει να διασφαλίσουμε ότι

$$O\phi_0 = 0,$$

$$\sigma^-\phi_0 = 0, \quad (104)$$

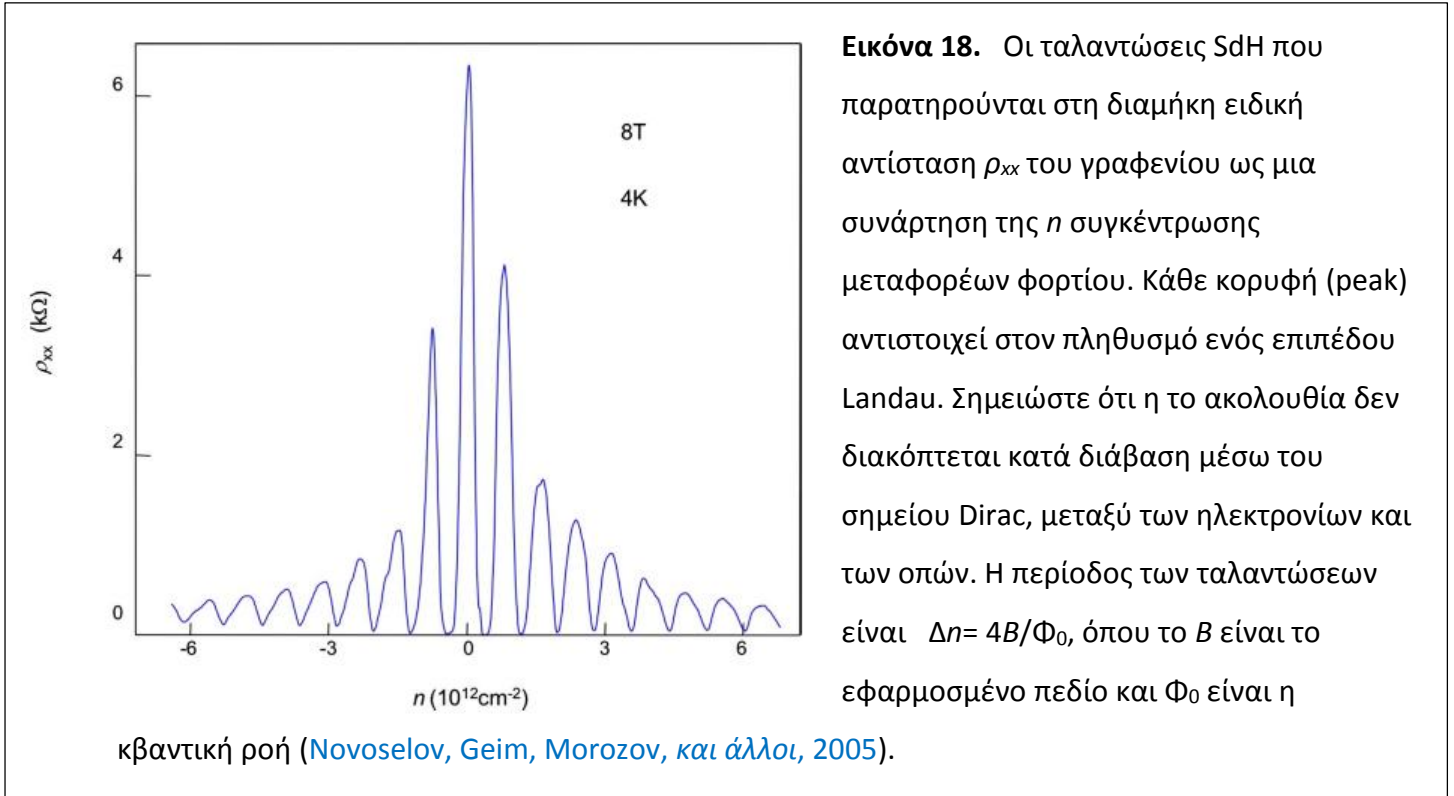
έτσι ώστε η εξίσωση (103) να πραγματοποιηθεί στο ακέραιο. Η προφανής μηδενικής-λειτουργίας λύση είναι

$$\phi_0(\xi) = \psi_0(\xi) \otimes |\Downarrow\rangle, \quad (105)$$

όπου το $|\Downarrow\rangle$ υποδεικνύει την κατάσταση που εντοπίζεται στο υπόπλεγμα A , και το $|\Uparrow\rangle$ υποδεικνύει την κατάσταση που εντοπίζεται στο υπόπλεγμα B . Επιπλέον,

$$O\psi_0(\xi) = 0 \quad (106)$$

είναι οι επίγειες καταστάσεις του μονοδιάστατου (1D) αρμονικού ταλαντωτή.



Όλες οι λύσεις μπορούν πλέον να δομηθούν από τη μηδενική κατάσταση,

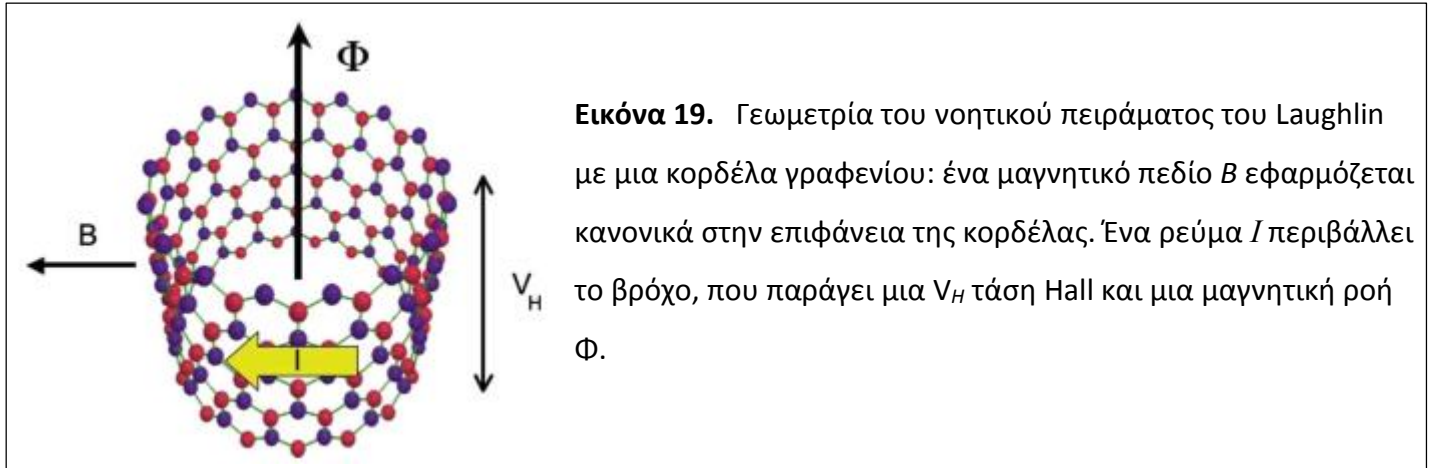
$$\phi_{N,\pm}(\xi) = \psi_{N-1}(\xi) \otimes |\Uparrow\rangle \pm \psi_N(\xi) \otimes |\Downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{N-1}(\xi) \\ \pm \psi_N(\xi) \end{pmatrix}, \quad (107)$$

και η ενέργειά τους δίνεται από (McClure, 1956)

$$E_{\pm}(N) = \pm \omega_c \sqrt{N}, \quad (108)$$

όπου $N=0,1,2,\dots$ είναι ένας θετικός ακέραιος αριθμός και $\psi_N(\xi)$ είναι η λύση του μονοδιάστατου (1D) αρμονικού ταλαντωτή [λεπτομερώς, $\psi_N(\xi) = 2^{-N/2} (N!)^{-1/2} \exp\{-\xi^2/2\} H_N(\xi)$, όπου $H_N(\xi)$ είναι ένα Hermite πολυώνυμο]. Τα επίπεδα Landau στο αντίθετο σημείο Dirac K' έχουν ακριβώς το ίδιο φάσμα και γι' αυτό και κάθε επίπεδο Landau είναι διπλά εκφυλισμένο (υποβαθμισμένο). Για το πρόβλημα Dirac που συζητήθηκε εδώ, έχει ιδιαίτερη σημασία η ύπαρξη μιας κατάστασης μηδενικής-ενέργειας $N=0$, η οποία είναι υπεύθυνη για τις ανωμαλίες που παρατηρήθηκαν στο κβαντικό φαινόμενο Hall. Αυτή η ιδιαίτερη δομή του επιπέδου Landau έχει παρατηρηθεί από πολλές διαφορετικές πειραματικές δοκιμές, από τις

ταλαντώσεις Shubnikov-de Haas στο μονό στρώμα γραφενίου (δείτε εικόνα 18) (Novoselov, Geim, Morozov, και άλλοι, 2005; Zhang και άλλοι, 2005), στην υπέρυθρη φασματοσκοπία (Jiang, Henriksen, Tung, και άλλοι, 2007), και στη σάρωση ανίχνευσης της φασματοσκοπίας (Li και Andrei, 2007) (STS) σε μια επιφάνεια από γραφίτη.



Εικόνα 19. Γεωμετρία του νοητικού πειράματος του Laughlin με μια κορδέλα γραφενίου: ένα μαγνητικό πεδίο B εφαρμόζεται κανονικά στην επιφάνεια της κορδέλας. Ένα ρεύμα I περιβάλλει το βρόχο, που παράγει μια V_H τάση Hall και μια μαγνητική ροή Φ .

I. Το ανώμαλο ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall

Σε περίπτωση αναταραχής, τα επίπεδα Landau διευρύνονται και εμφανίζονται οι άκρες κινητικότητας (Laughlin, 1981). Σημειώστε ότι θα υπάρξει ένα επίπεδο Landau με μηδενική ενέργεια που χωρίζει τις καταστάσεις με χαρακτήρα σπής ($\mu < 0$) από τις καταστάσεις με χαρακτήρα ηλεκτρονίου ($\mu > 0$). Τα συστατικά της ειδικής αντίστασης και της αγωγιμότητας των τανυστών (tensors) δίνονται από

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad \rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad (109)$$

όπου σ_{xx} (ρ_{xx}) είναι η διαμήκης συνιστώσα και σ_{xy} (ρ_{xy}) είναι η Hall συνιστώσα της αγωγιμότητας (ειδική αντίσταση). Όταν το χημικό δυναμικό είναι μέσα σε μια περιοχή τοπικών καταστάσεων, η διαμήκης αγωγιμότητα εξαφανίζεται, $\sigma_{xx} = 0$, και επομένως $\rho_{xx} = 0$, $\rho_{xy} = 1/\sigma_{xy}$. Αφ' ετέρου, όταν το χημικό δυναμικό είναι μέσα σε μια περιοχή μη-τοπικών καταστάσεων, όταν το χημικό δυναμικό διασχίσει ένα επίπεδο Landau, έχουμε $\sigma_{xx} \neq 0$ και σ_{xy} όπου μεταβάλλονται συνεχώς (Sheng και άλλοι, 2006, 2007).

Η τιμή του σ_{xy} στην περιοχή των τοπικών καταστάσεων μπορεί να ληφθεί από τη σταθερότητα του μετρητή Laughlin (Laughlin, 1981): κατασκευάζοντας μια κορδέλα γραφενίου όπως παρουσιάζεται στην εικόνα 19, είναι αναμενόμενο ένα μαγνητικό πεδίο B να διαπερνά κανονικά την επιφάνειά της και ένα τρέχον ρεύμα I να περιβάλλει το βρόχο της. Λόγω της δύναμης Lorentz, το μαγνητικό πεδίο παράγει μια

V_H τάση Hall που είναι κάθετη προς το πεδίο και το ρεύμα. Το ρεύμα που κυκλοφορεί παράγει μια μαγνητική ροή Φ που διαπερνά το βρόχο. Το ρεύμα δίνεται από

$$I = c \frac{\delta E}{\delta \Phi}, \quad (110)$$

όπου E είναι η συνολική ενέργεια του συστήματος. Οι τοπικές καταστάσεις δεν ανταποκρίνονται στις αλλαγές της ροής Φ , μονάχα οι μη-εντοπισμένες. Όταν η ροή μεταβάλλεται από μια κβαντική ροή $\delta\Phi = \Phi_0 = hc/e$, οι εκτεταμένες καταστάσεις παραμένουν οι ίδιες από τη σταθερότητα του μετρητή. Εάν το χημικό δυναμικό είναι στην περιοχή των τοπικών καταστάσεων, όλες οι εκτεταμένες καταστάσεις κάτω από το χημικό δυναμικό θα είναι συμπληρωμένες και οι δύο πριν και μετά την αλλαγή της ροής με Φ_0 . Πάντως, κατά τη διάρκεια της αλλαγής της ροής, ένας ακέραιος αριθμός των καταστάσεων εισέρχεται στη μια άκρη του κυλίνδρου και εξέρχεται από την αντίθετη άκρη.

Η ερώτηση είναι: Πόσες “απασχολημένες” καταστάσεις διαβιβάζονται μεταξύ των ακρών; Θεωρούμε έναν απλοϊκό και, όπως φαίνεται επίσης, λανθασμένο υπολογισμό προκειμένου να παρουσιαστεί η σημασία της μηδενικής λειτουργίας σε αυτό το πρόβλημα. Κάθε επίπεδο Landau συνεισφέρει με τους χρόνους μιας κατάστασης στον εκφυλισμό του g . Στην περίπτωση του γραφενίου, έχουμε $g=4$ δεδομένου ότι υπάρχουν δύο καταστάσεις περιστροφής και δύο κώνοι Dirac. Ως εκ τούτου, περιμένουμε πως όταν θα έχουμε αλλαγές στη ροή από μια κβαντική ροή, η αλλαγή στην ενέργεια θα είναι $\delta E_{inc} = \pm 4NeV_H$, όπου το N είναι ένας ακέραιος αριθμός. Το θετικό πρόσημο (+) εφαρμόζεται στις καταστάσεις ηλεκτρονίων (φορτίο $+e$) και το αρνητικό πρόσημο (-) στις καταστάσεις οπών (φορτίο $-e$). Επομένως, καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι $I_{inc} = \pm 4(e^2/h)V_H$ και συνεπώς $\sigma_{xy,inc} = I/V_H = \pm 4Ne^2/h$, που είναι η απλοϊκή προσδοκία. Το πρόβλημα με αυτό το αποτέλεσμα είναι πως όταν το χημικό δυναμικό είναι ακριβώς στη μέση του γεμίματος, δηλαδή, στο σημείο Dirac, θα αναμένει ένα σταθερό επίπεδο Hall στο $N=0$ με $\sigma_{xy,inc}=0$, το οποίο δεν είναι δυνατό εφόσον υπάρχει ένα $N=0$ επίπεδο Landau, με εκτεταμένες καταστάσεις σε αυτήν την ενέργεια. Η λύση για αυτό το παράδοξο είναι αρκετά απλή: εξαιτίας της ύπαρξης της μηδενικής λειτουργίας που μοιράζονται τα δύο σημεία Dirac, υπάρχουν ακριβώς $2 \times (2N+1)$ απασχολημένες καταστάσεις που μεταφέρονται από τη μια άκρη στην άλλη. Επομένως, η μεταβολή της ενέργειας είναι $\delta E = \pm 2(2N+1)eV_H$ για μια μεταβολή της ροής $\delta\Phi = hc/e$. Συνεπώς, η Hall αγωγιμότητα είναι (Schakel, 1991; Gusynin και Sharapov, 2005; Herbut, 2007; Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a, 2006b)

$$\sigma_{xy} = \frac{I}{V_H} = \frac{c}{V_H} \frac{\delta E}{\delta \Phi} = \pm 2(2N+1) \frac{e^2}{h}, \quad (111)$$

χωρίς κανένα σταθερό επίπεδο Hall στο $N=0$. Αυτό το αποτέλεσμα έχει παρατηρηθεί πειραματικά (Novoselov, Geim, Morozov, και άλλοι, 2005; Zhang και άλλοι, 2005) όπως φαίνεται στην εικόνα 20.

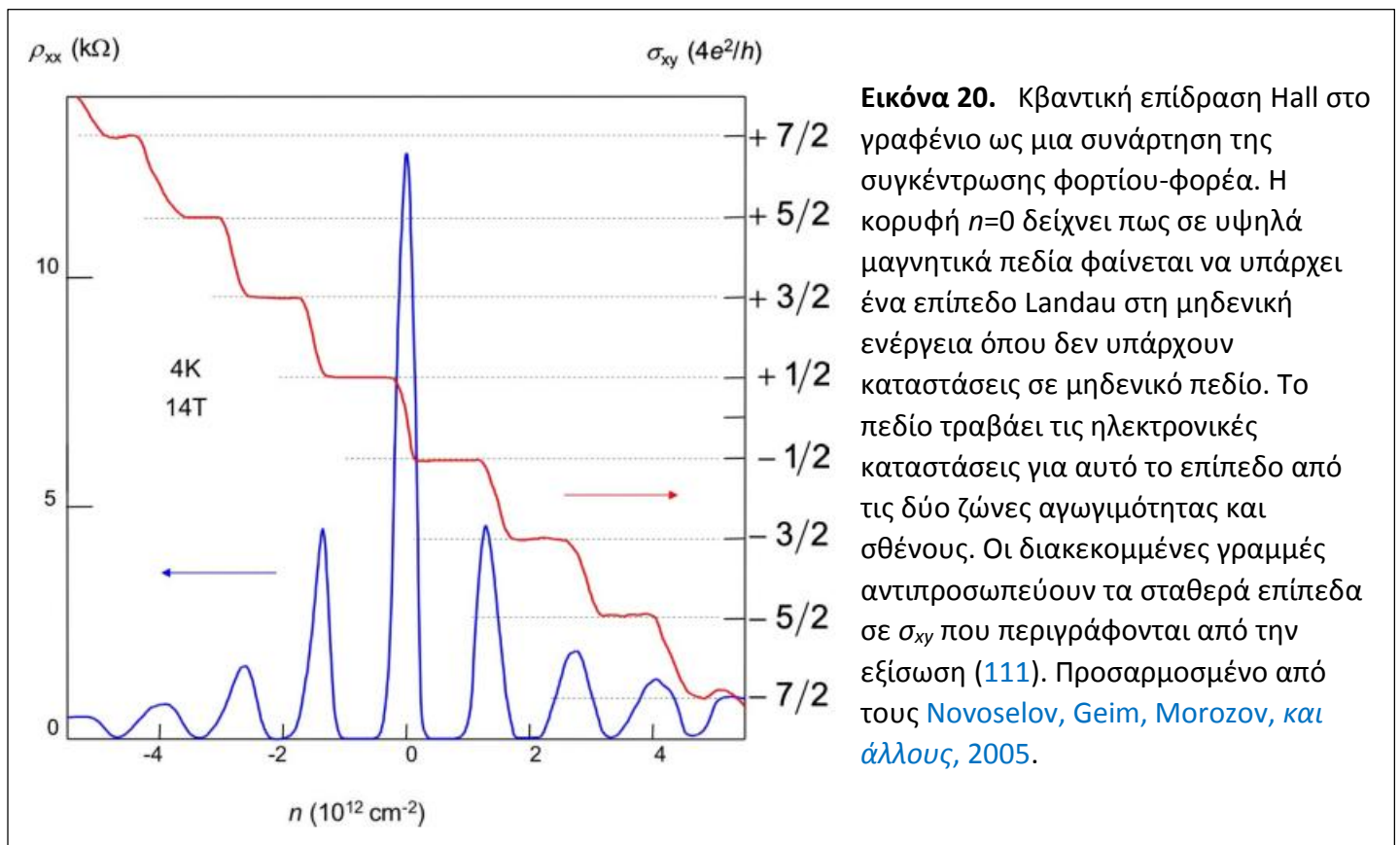
ΙΑ. Πρότυπο στενής-σύνδεσης σε ένα μαγνητικό πεδίο

Στην προσέγγιση στενής-σύνδεσης, τα ολοκληρώματα αναπήδησης αντικαθίστανται από μια υποκατάσταση Peierls,

$$e^{ie\int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{R}'} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}} t_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = e^{i(2\pi/\Phi_0)\int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{R}'} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}} t_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}, \quad (112)$$

όπου το $t_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ αντιπροσωπεύει το ολοκλήρωμα αναπήδησης μεταξύ των περιοχών \mathbf{R} και \mathbf{R}' , χωρίς να είναι παρόν κάποιο πεδίο. Η Χαμιλτονιανή στενής σύνδεσης για ένα μονό στρώμα γραφενίου, σε ένα σταθερό μαγνητικό πεδίο κατακόρυφο προς το επίπεδο, ιδανικά γράφεται ως

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{m,n,\sigma} [e^{i\pi(\Phi/\Phi_0)n[(1+z)/2]} a_{\sigma}^{\dagger}(m,n) b_{\sigma}(m,n) \\ & + e^{-i\pi(\Phi/\Phi_0)n} a_{\sigma}^{\dagger}(m,n) b_{\sigma}(m-1, n - (1-z)/2) \\ & + e^{i\pi(\Phi/\Phi_0)n[(z-1)/2]} a_{\sigma}^{\dagger}(m,n) b_{\sigma}(m, n - z) + \text{H.c.}], \end{aligned} \quad (113)$$



έκταση για μια λωρίδα γραφενίου με άκρες ζικ-ζακ ($z=1$) και πολυθρόνας ($z=-1$) προσανατολισμένες κατά μήκος της κατεύθυνσης x . Ο μετασχηματισμός Fourier κατά μήκος της κατεύθυνσης x δίνει

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{k,n,\sigma} [e^{i\pi(\Phi/\Phi_0)n[(1+z)/2]} a_{\sigma}^{\dagger}(k,n) b_{\sigma}(k,n) \\ & + e^{-i\pi(\Phi/\Phi_0)n} e^{ika} a_{\sigma}^{\dagger}(k,n) b_{\sigma}(k, n - (1-z)/2) \\ & + e^{i\pi(\Phi/\Phi_0)n[(z-1)/2]} a_{\sigma}^{\dagger}(k,n) b_{\sigma}(k, n - z) + \text{H.c.}]. \end{aligned}$$

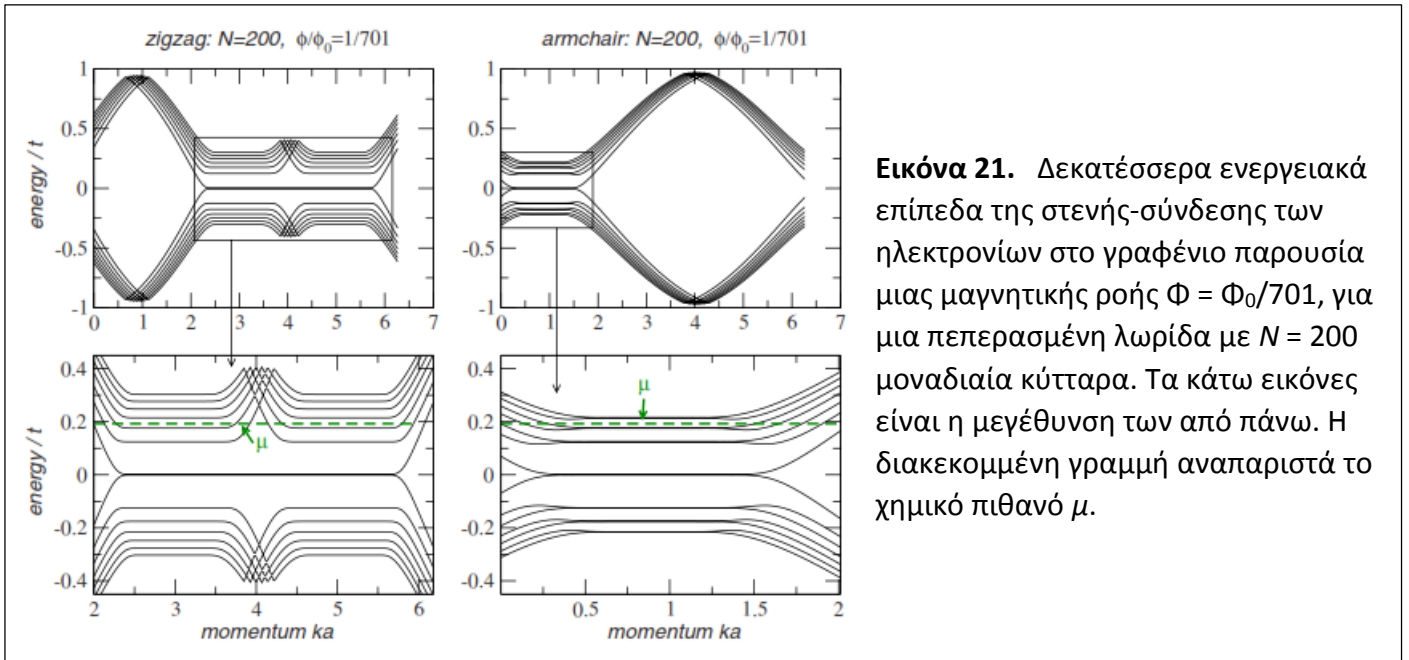
Εξετάζουμε τώρα την περίπτωση των ζικ-ζακ ακρών. Το ιδιοπρόβλημα μπορεί να ξαναγραφεί σε όρους των εξισώσεων του Harper ([Harper, 1955](#)), και για τις άκρες ζικ-ζακ παίρνουμε ([Rammal, 1985](#))

$$E_{\mu,k}\alpha(k,n) = -t \left[e^{ika/2} 2 \cos\left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} n - \frac{ka}{2}\right) \beta(k,n) + \beta(k,n-1) \right], \quad (114)$$

$$E_{\mu,k}\beta(k,n) = -t \left[e^{-ika/2} 2 \cos\left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} n - \frac{ka}{2}\right) \alpha(k,n) + \alpha(k,n+1) \right], \quad (115)$$

όπου οι συντελεστές $\alpha(k,n)$ και $\beta(k,n)$ εμφανίζονται στην $|\psi(k)\rangle$ ιδιοσυνάρτηση του Χάμιλτον και είναι γραμμένοι από την άποψη του πλέγματος-θέσης-κατάστασης ως

$$|\psi(k)\rangle = \sum_{n,\sigma} [\alpha(k,n)|a;k,n,\sigma\rangle + \beta(k,n)|b;k,n,\sigma\rangle]. \quad (116)$$



Εικόνα 21. Δεκατέσσερα ενεργειακά επίπεδα της στενής-σύνδεσης των ηλεκτρονίων στο γραφένιο παρουσία μιας μαγνητικής ροής $\Phi = \Phi_0/701$, για μια πεπερασμένη λωρίδα με $N = 200$ μοναδιαία κύτταρα. Τα κάτω εικόνες είναι η μεγέθυνση των από πάνω. Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά το χημικό πιθανό μ .

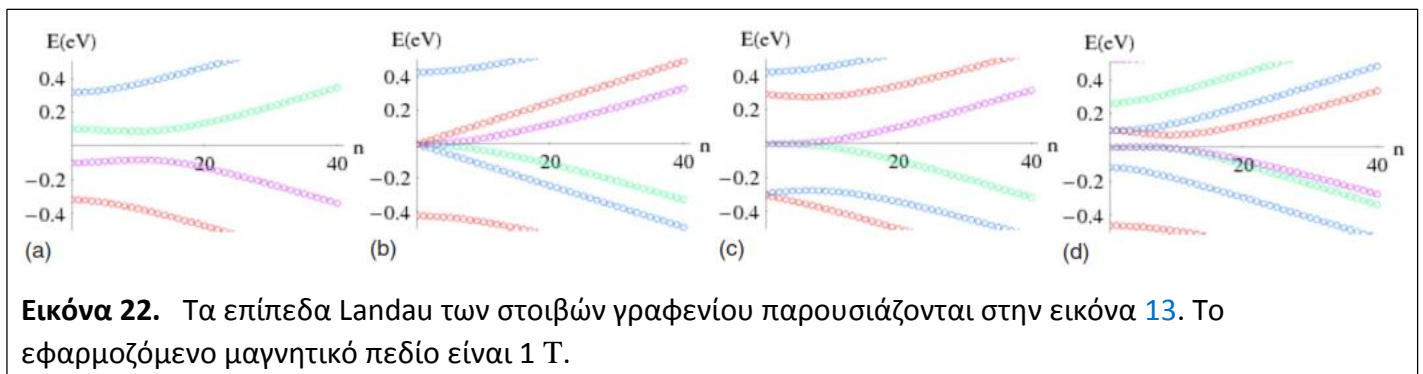
Οι εξισώσεις (114) και (115) κατέχουν το μεγαλύτερος μέρος. Θεωρώντας ότι η ζικ-ζακ κορδέλα έχει τα N μοναδιαία κύτταρα κατά μήκος του πλάτους της, από $n=0$ σε $n=N-1$, οι συνοριακές συνθήκες στις άκρες λαμβάνονται από τις εξισώσεις (114) και (115), και διαβάζονται

$$E_{\mu,k}\alpha(k,0) = -te^{ika/2} 2 \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \beta(k,0), \quad (117)$$

$$E_{\mu,k}\beta(k,N-1) = -2te^{-ika/2} \cos\left[\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} (N-1) - \frac{ka}{2}\right] \times \alpha(k,N-1). \quad (118)$$

Παρόμοιες εξισώσεις ισχύουν για μια κορδέλα γραφενίου με άκρες πολυθρόνας.

Στην εικόνα 21, παρουσιάζουμε 14 ενεργειακά επίπεδα, γύρω από μηδενική ενέργεια και για τις δυο περιπτώσεις ζικ-ζακ και πολυθρόνας. Ο σχηματισμός των επιπέδων Landau σηματοδοτείται από την παρουσία επιπέδων ενεργειακών ζωνών, ακολουθούμενων από το μεγαλύτερο μέρος του ενεργειακού φάσματος. Από την εικόνα 21, είναι απλό να υπολογιστεί η τιμή της αγωγιμότητας Hall στο κβαντικό σύστημα του φαινομένου Hall. Υποθέτουμε ότι το χημικό δυναμικό είναι μεταξύ των δύο επιπέδων Landau στις θετικές ενέργειες, και παρουσιάζεται από την διακεκομμένη γραμμή στην εικόνα 21. Η δομή του επιπέδου Landau παρουσιάζει δύο μηδενικές-ενεργειακές λειτουργίες. Μια απ' αυτές τις λειτουργίες είναι παρόμοια με το ηλεκτρόνιο (παρόμοια με την σπή), δεδομένου ότι κοντά στην άκρη του δείγματος η ενέργειά του μετατοπίζεται προς τα πάνω (προς τα κάτω). Τα υπόλοιπα επίπεδα Landau είναι διπλά εκφυλισμένα. Ο προσδιορισμός των τιμών για την αγωγιμότητα Hall γίνεται με την καταμέτρηση για το πόσα ενεργειακά επίπεδα είναι κάτω από το χημικό δυναμικό. Αυτή η καταμέτρηση δημιουργεί την τιμή $2N+1$, με $N=0,1,2,\dots$ (στην περίπτωση της εικόνας 21 έχουμε $N=2$).



Εικόνα 22. Τα επίπεδα Landau των στοιβών γραφενίου παρουσιάζονται στην εικόνα 13. Το εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο είναι 1 T.

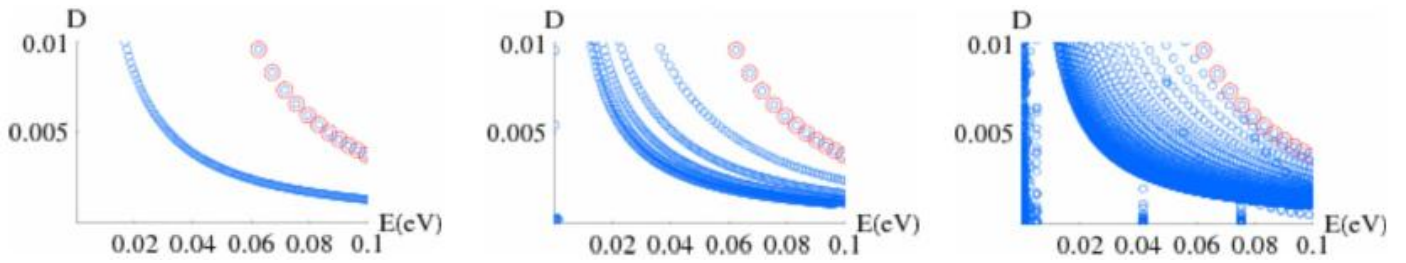
Από αυτήν την καταμέτρηση, η αγωγιμότητα Hall δίνεται, συμπεριλαμβανομένου ενός πρόσθετου παράγοντα των δύο, λαμβάνοντας υπόψη το βαθμό περιστροφής ελευθερίας, από

$$\sigma_{xy} = \pm 2 \frac{e^2}{h} (2N + 1) = \pm 4 \frac{e^2}{h} \left(N + \frac{1}{2} \right). \quad (119)$$

Η εξίσωση (119) οδηγεί στο ανώμαλο ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall που συζητήθηκε προηγουμένως, το οποίο είναι το σήμα κατατεθέν της μονής-στρώσης γραφενίου.

IB. Τα επίπεδα Landau στις στοίβες γραφενίου

Η εξάρτηση των ενεργειακών επιπέδων Landau στο δείκτη Landau N ακολουθεί κατά προσέγγιση τη σχέση διασποράς των ζωνών, όπως φαίνεται στην εικόνα 22. Να σημειωθεί ότι, σε μια συσσώρευση Bernal τριών στρωμάτων, δύο σειρές επιπέδων έχουν μια \sqrt{N} εξάρτηση, ενώ οι ενέργειες των άλλων δύο εξαρτώνται γραμμικά από το N . Σε μια άπειρη ρομβοεδρική στοίβα, τα επίπεδα Landau παραμένουν διακριτά και σχεδόν-δισδιάστατα(2D) (Guinea και άλλοι, 2006). Να σημειωθεί ότι, ακόμη και σε μια άπειρη στοίβα με δομή Bernal, το πιο κοντινό επίπεδο Landau στο $E=0$ σχηματίζει μια ζώνη που δεν συμπίπτει με τα άλλα επίπεδα Landau, οδηγώντας στη δυνατότητα ενός τρισδιάστατου (3D) ακέραιου κβαντικού φαινομένου Hall (Luk'yanchuk και Kopelevich, 2004; Kopelevich και άλλοι, 2006; Bernevig και άλλοι, 2007).



Εικόνα 23. Σχετική φασματική δύναμη των χαμηλών ενεργειακών οπτικών μεταβάσεων μεταξύ των επιπέδων Landau στις στοίβες γραφενίου με διάταξη Bernal και έναν περιττό αριθμό στρωμάτων. Το εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο είναι 1 T. Οι μεγάλοι κύκλοι είναι οι μεταβάσεις σε ένα μόνο στρώμα. Στο αριστερό σχήμα έχουμε: 3 στρώματα. Στο μεσαίο: 11 στρώματα. Στο δεξί: 51 στρώματα.

Οι οπτικές μεταβάσεις μεταξύ των επιπέδων Landau μπορούν επίσης να υπολογιστούν. Οι κανόνες επιλογής είναι οι ίδιοι όπως και για ένα μονό στρώμα γραφενίου, και επιτρέπονται μεταβάσεις μονάχα μεταξύ των υποζωνών με επίπεδο Landau στους δείκτες M και N έτσι ώστε $|N| = |M \pm 1|$. Οι προκύπτουσες μεταβάσεις, με τις αντίστοιχες φασματικές δυνάμεις τους, παρουσιάζονται στην εικόνα 23. Οι μεταβάσεις ομαδοποιούνται σε υποζώνες, κάτι το οποίο προκαλεί ένα συνεχές όταν ο αριθμός των στρωμάτων τείνει στο άπειρο. Στις στοίβες Bernal με έναν περιττό αριθμό στρωμάτων, οι μεταβάσεις που σχετίζονται με τις υποζώνες Dirac με γραμμική διασπορά έχουν τη μεγαλύτερη φασματική δύναμη, και παρέχουν μια αξιόλογη συμβολή στη συνολική απορρόφηση ακόμα κι αν ο αριθμός των στρωμάτων είναι μεγάλος, $N_L \leq 30-40$ (Sadowski και άλλοι, 2006).

ΙΓ. Διαμαγνητισμός

Πίσω στο 1952, ο Mrozowski (Mrozowski, 1952) μελέτησε το διαμαγνητισμό του πολυκρυσταλλικού γραφίτη και άλλων συστημάτων συμπυκνωμένης-ύλης μοριακού-δαχτυλιδιού. Βγήκε το συμπέρασμα ότι σε τέτοια συστήματα δαχτυλιδιού ο διαμαγνητισμός έχει δύο συνεισφορές: (i) διαμαγνητισμό από τις πλήρεις ζώνες των ηλεκτρονίων, και (ii) διαμαγνητισμό Landau των ελεύθερων ηλεκτρονίων και των οπών. Για το γραφίτη η δεύτερη πηγή διαμαγνητισμού είναι με διαφορά η μεγαλύτερη από τις δύο.

Ο McClure (1956) υπολόγισε το διαμαγνητισμό ενός δισδιάστατου (2D) κυψελοειδούς πλέγματος χρησιμοποιώντας τη θεωρία που θεσπίστηκε από τον Wallace (1947), ένας υπολογισμός που γενικεύτηκε αργότερα στον τρισδιάστατο (3D) γραφίτη (McClure, 1960). Για το κυψελοειδές επίπεδο, η μαγνητική ευπάθεια (στις μονάδες emu/g) είναι

$$\chi = -\frac{0.0014}{T} \gamma_0^2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\mu}{2k_B T}\right), \quad (120)$$

όπου μ είναι η ενέργεια Fermi, όπου T είναι η θερμοκρασία, και k_B είναι η σταθερά Boltzmann. Για το γραφίτη, η μαγνητική ευπάθεια είναι ανισοτροπική και η διαφορά μεταξύ της ευπάθειας που είναι παράλληλη προς τον κύριο άξονα και αυτής που είναι κάθετη προς τον κύριο άξονα είναι -21.5×10^{-6} emu/g. Η κάθετη ευπάθεια στον κύριο άξονα είναι ίση με περίπου την ευπάθεια ελεύθερου-ατόμου, -0.5×10^{-6} emu/g. Στο δισδιάστατο (2D) πρότυπο, η ευπάθεια αποδεικνύεται ότι είναι μεγάλη εξαιτίας της παρουσίας γρήγορα κινουμένων ηλεκτρονίων, με μια ταχύτητα της τάξης των $v_F \approx 10^6$ m/s, η οποία είναι με τη σειρά της είναι αποτέλεσμα της μεγάλης τιμής της παραμέτρου αναπήδησης γ_0 . Στην πραγματικότητα, η ευπάθεια αποδεικνύεται ότι είναι ανάλογη με το τετράγωνο της γ_0 . Μετέπειτα ο

Sharma και άλλοι διεύρυναν τον υπολογισμό του McClure για το γραφίτη συμπεριλαμβάνοντας την επίδραση της τρίγωνης στρέβλωσης και έδειξαν ότι ο χαμηλής-θερμοκρασίας διαμαγνητισμός αυξάνεται (Sharma και άλλοι, 1974).

Οι Safran και DiSalvo (1979), ενδιαφέρθηκαν για την ευπάθεια της παρεμβολής των ενώσεων γραφίτη, και υπολόγισαν εκ νέου, σε ένα στενής-σύνδεσης πρότυπο, την κάθετη ευπάθεια προς ένα επίπεδο γραφίτη χρησιμοποιώντας τη θεωρία του Fukuyama (Fukuyama, 1971), η οποία περιλαμβάνει τις μεταβάσεις των ενδιάμεσων ζωνών. Τα αποτελέσματα συμφωνούν με εκείνα του McClure (1956). Αργότερα, ο Safran υπολόγισε την ευπάθεια μιας διπλοστιβάδας γραφενίου δείχνοντας ότι αυτό το σύστημα είναι διαμαγνητικό στις μικρές τιμές της ενέργειας Fermi, αλλά εμφανίζεται μια παραμαγνητική κορυφή όταν η ενέργεια Fermi είναι της τάξεως της σύνδεσης των ενδιάμεσων στρωμάτων (Safran, 1984).

Η μαγνητική ευπάθεια άλλων υλικών που βασίζονται στον άνθρακα (όπως οι νανοσωλήνες άνθρακα και τα C₆₀ μοριακά στερεά) μετρήθηκε (Heremans και άλλοι, 1994) και εμφανίζει μια διαμαγνητική απόκριση στα πεπερασμένα μαγνητικά πεδία που είναι διαφορετικά από αυτά του γραφίτη. Η μελέτη της μαγνητικής απόκρισης των κορδελών νανογραφίτη και για τις δύο άκρες (ζικ-ζακ και πολυθρόνας) έγινε από τον Wakabayashi κ.α. χρησιμοποιώντας μια αριθμητική παραγωγή της ελεύθερης ενέργειας (Wakabayashi και άλλοι, 1999). Από αυτά τα δύο συστήματα, η κατάσταση της ζικ-ζακ άκρης είναι ιδιαίτερου ενδιαφέροντος δεδομένου ότι το σύστημα υποστηρίζει ακραίες καταστάσεις ακόμη και παρουσία ενός μαγνητικού πεδίου, που οδηγεί σε πολύ υψηλή πυκνότητα των καταστάσεων κοντά στην άκρη της κορδέλας. Η υψηλής-θερμοκρασίας απόκριση αυτών των νανοκορδελών βρέθηκε να είναι διαμαγνητική, ενώ η χαμηλής-θερμοκρασίας ευπάθεια είναι παραμαγνητική.

Η φύση των ομοειδών Dirac ηλεκτρονικών ημισωματιδίων στο γραφένιο οδήγησε στο να εξετάσει ο Ghosal και άλλοι (2007) το πρόβλημα του διαμαγνητισμού γενικότερα των κομβικών φερμιονίων, και στο να μελετήσει ο Nakamura τον τροχιακό (κυκλικό) μαγνητισμό των φερμιονίων Dirac στα ασθενή μαγνητικά πεδία (Nakamura, 2007). Οι Koshino και Ando εξέτασαν το διαμαγνητισμό του “ακατάστατου” γραφείου με την αξιόπιστη προσέγγιση του Born, με μια πιθανή αναταραχή του μορφής $U(\mathbf{r}) = 1u_i\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ (Koshino και Ando, 2007). Στο σημείο ουδετερότητας και μηδενικής θερμοκρασίας, η ευπάθεια του “ακατάστατου” γραφενίου δίνεται από

$$\chi(0) = -\frac{g_v g_s}{3\pi^2} e^2 \gamma_0^2 \frac{2W}{\Gamma_0}, \quad (121)$$

όπου $g_s = g_v = 2$ είναι η περιστροφή και η κοιλάδα εκφυλισμού, το W είναι μια αδιάστατη παράμετρος για τη δύναμη αναταραχής, που ορίζεται ως $W = n_i u_i^2 / 4\pi\gamma_0^2$, το n_i είναι η συγκέντρωση προσμείξεων, και $\Gamma_0 = \epsilon_c \exp[-1/(2W)]$, με το ϵ_c να είναι μια παράμετρος που καθορίζει μια λειτουργία αποκοπής που χρησιμοποιείται στη θεωρία. Σε πεπερασμένη Fermi ενέργεια ϵ_F και μηδενική θερμοκρασία, η μαγνητική ευπάθεια δίνεται από

$$\chi(\epsilon_F) = -\frac{g_v g_s}{3\pi} e^2 \gamma_0^2 \frac{W}{|\epsilon_F|}. \quad (122)$$

Στο καθαρό όριο, η ευπάθεια δίνεται από (McClure, 1956; Safran και DiSalvo, 1979; Koshino και Ando, 2007)

$$\chi(\epsilon_F) = -\frac{g_v g_s}{6\pi} e^2 \gamma_0^2 \delta(\epsilon_F). \quad (123)$$

ΙΔ. Ζεύξη περιστροφής-τροχιάς

Η ζεύξη περιστροφής-τροχιάς περιγράφει μια διαδικασία στην οποία ένα ηλεκτρόνιο αλλάζει ταυτόχρονα την περιστροφή και τη στροφορμή του, ή γενικά, κινείται από μια τροχιακή κυματοσυνάρτηση σε μια άλλη. Η ανάμιξη της περιστροφής και της τροχιακής κίνησης είναι ένα σχετικιστικό φαινόμενο, το οποίο μπορεί να προέλθει από το πρότυπο του Dirac για το ηλεκτρόνιο. Η ανάμιξη είναι μεγάλη στα βαριά ιόντα, όπου η μέση ταχύτητα των ηλεκτρονίων είναι υψηλότερη. Ο άνθρακας είναι ένα ελαφρύ άτομο, και η αλληλεπίδραση της περιστροφής-τροχιάς αναμένεται να είναι ασθενής.

Οι συμμετρίες της αλληλεπίδρασης της περιστροφής-τροχιάς, παρ' όλα αυτά, επιτρέπουν το σχηματισμό ενός κενού στα σημεία Dirac στο καθαρό γραφένιο. Η αλληλεπίδραση της περιστροφής-τροχιάς οδηγεί σε μια περιστροφή εξαρτώμενη από τη μετατόπιση των τροχιακών, η οποία αποτελεί μια διαφορετική ένδειξη για τα δύο υποπλέγματα, ενεργώντας ως μια δραστική μάζα μέσα σε κάθε σημείο Dirac (Dresselhaus και Dresselhaus, 1965; Kane και Mele, 2005; Wang και Chakraborty, 2007a). Η εμφάνιση αυτού του κενού οδηγεί σε μια μη-ασήμαντη Hall αγωγιμότητα περιστροφής, παρόμοια με άλλα πρότυπα που μελετούν την ανωμαλία ισότητας στη σχετικιστική θεωρία πεδίου σε 2+1 διαστάσεις (Haldane, 1988). Όταν η αντίστροφη συμμετρία του κυψελοειδούς πλέγματος είναι κατεστραμμένη, είτε επειδή το στρώμα γραφενίου είναι κυρτό ή επειδή ένα εφαρμόζεται ένα εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο (αλληλεπίδραση Rashba), οι πρόσθετοι όροι, οι οποίοι διαμορφώνουν την αναπήδηση στενής-σύνδεσης, διεγείρονται (Ando, 2000). Οι ενδογενείς και εξωγενείς αλληλεπιδράσεις περιστροφής-τροχιάς μπορούν να γραφτούν ως (Dresselhaus και Dresselhaus, 1965 Kane και Mele, 2005)

$$\mathcal{H}_{\text{SO:int}} \equiv \Delta_{\text{so}} \int d^2\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{s}_z \hat{\sigma}_z \hat{\tau}_z \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad \mathcal{H}_{\text{SO:ext}} \equiv \lambda_R \int d^2\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) (-\hat{s}_x \hat{\sigma}_y + \hat{s}_y \hat{\sigma}_x \hat{\tau}_z) \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (124)$$

όπου $\hat{\sigma}$ και $\hat{\tau}$ είναι οι πίνακες Pauli που περιγράφουν τους βαθμούς ελευθερίας των υποπλεγμάτων και των κοιλάδων και \hat{s} είναι οι πίνακες Pauli που ενεργούν στον πραγματικό χώρο περιστροφής. Το Δ_{so} είναι η ζεύξη περιστροφής-τροχιάς και το λ_R είναι η ζεύξη Rashba.

Το μέγεθος της ζεύξης περιστροφής-τροχιάς στο γραφένιο μπορεί να βρεθεί από τη γνωστή ζεύξη περιστροφής-τροχιάς στο άτομο άνθρακα. Αυτή η ζεύξη επιτρέπει τις μεταβάσεις μεταξύ των p_z , p_x , και p_y τροχιακών. Ένα ηλεκτρικό πεδίο επίσης προκαλεί μεταβάσεις μεταξύ των p_z και s τροχιακών. Αυτές οι ενδο-ατομικές διαδικασίες αναμιγνύουν τις π και σ ζώνες στο γραφένιο. Χρησιμοποιώντας τη (δευτέρας-τάξεως) θεωρία αναταραχής, αποκτά κανείς μια ζεύξη μεταξύ των καταστάσεων χαμηλής ενέργειας στην π ζώνη. Η στενή-σύνδεση (Huertas-Hernando και άλλοι, 2006; Zarea και Sandler, 2007) και οι υπολογισμοί της δομής της ζώνης (Min και άλλοι, 2006; Yao και άλλοι, 2007) δίνουν τις εκτιμήσεις για τις ενδογενείς και εξωγενείς αλληλεπιδράσεις περιστροφής-τροχιάς στο εύρος 0.01– 0.2 K, και επομένως είναι πολύ μικρότερες από τις άλλες ενεργειακές κλίμακες στο πρόβλημα (κινητικό, αλληλεπίδρασης, και αναταραχής).

III. ΛΥΓΙΣΜΕΝΑ ΦΩΝΟΝΙΑ, ΕΛΑΣΤΙΚΟΤΗΤΑ, ΚΑΙ ΤΣΑΛΑΚΩΜΑ

Ο γραφίτης, στη διαμόρφωση της συσσώρευσης Bernal, είναι ένα πολυεπίπεδο κρυσταλλικό στερεό με τέσσερα άτομα ανά μοναδιαίο κύτταρο. Η βασική δομή του είναι ουσιαστικά μια επανάληψη της δομής της διπλοστιβάδας που συζητήθηκε νωρίτερα. Η ζεύξη μεταξύ των στρωμάτων, όπως συζητήθηκε, είναι ασθενής και, επομένως, το γραφένιο ήταν πάντα η αφετηρία για τη συζήτηση των φωνονίων στο γραφίτη (Wirtz και Rubio, 2004). Το γραφένιο έχει δύο άτομα ανά μοναδιαίο κύτταρο, κι αν θεωρήσουμε το γραφένιο αυστηρά ως δισδιάστατο (2D) αυτό θα πρέπει να έχει δύο ακουστικές λειτουργίες [με διασπορά $\omega_{ac}(k) \propto k$ με $k \rightarrow 0$] και δύο οπτικές λειτουργίες [με διασπορά $\omega_{op}(k) \propto \text{const}$, με $k \rightarrow 0$] αποκλειστικά εξαιτίας της μετάφρασης και του τεντώματος εντός του επιπέδου του πλέγματος γραφενίου. Ωστόσο, το γραφένιο υπάρχει στον τρισδιάστατο (3D) χώρο και συνεπώς τα άτομα μπορούν να ταλαντεύονται εκτός του επιπέδου που οδηγεί σε δύο εκτός-επιπέδου φωνόνια (ένα ακουστικό και άλλο οπτικό) που ονομάζονται λειτουργίες κάμψης. Η ακουστική λειτουργία κάμψεως έχει διασπορά $\omega_{flex}(k) \propto k^2$ με $k \rightarrow 0$, η οποία αντιπροσωπεύει τη μετάφραση ολόκληρου του επιπέδου του γραφενίου (ουσιαστικά μια μεμβράνη ενός-πυκνού-ατόμου) στην κάθετη κατεύθυνση (κίνηση ελεύθερου-σωματιδίου). Η οπτική λειτουργία κάμψεως αναπαριστά την εξωτερική-φάση, στην εκτός-επιπέδου ταλάντωση των γειτονικών ατόμων. Στην πρώτη προσέγγιση, εάν αγνοούμε τη ζεύξη μεταξύ των επιπέδων γραφενίου, ο γραφίτης, αν και είναι εκφυλισμένος, έχει ουσιαστικά τις ίδιες λειτουργίες φωνονίου. Η ζεύξη μεταξύ των επιπέδων έχει δύο βασικές συνέπειες: (i) ωθεί σε εκφυλισμό τις λειτουργίες του φωνονίου, και (ii) οδηγεί σε μια ισχυρή καταστολή της ενέργειας των λειτουργιών κάμψης. Θεωρητικά, οι λειτουργίες κάμψης θα πρέπει να γίνουν τυπικές ακουστικές και οπτικές λειτουργίες σε ένα παντελώς ομοιοπολικό τρισδιάστατο (3D) στερεό, αλλά στην πράξη οι λειτουργίες κάμψης διασώζονται εξαιτίας του γεγονότος ότι τα επίπεδα είναι συζευγμένα με ασθενείς δυνάμεις van der Waals. Αυτοί οι λειτουργίες έχουν μετρηθεί πειραματικά στο γραφίτη (Wirtz και Rubio, 2004). Το γραφένιο μπορεί επίσης να ληφθεί ως μια κρεμασμένη μεμβράνη, δηλαδή, χωρίς υπόστρωμα, υποβασταζόμενο μόνο από μια σκαλωσιά ή ένα γεφύρωμα κλίμακας ενός μικρομέτρου (Bunch και άλλοι, 2007; Meyer, Geim, Katsnelson, Novoselov, Booth, και άλλοι, 2007; Meyer, Geim, Katsnelson, Novoselov, Obergfell, και άλλοι, 2007). Η εικόνα 24 δείχνει ένα κρεμασμένο φύλλο γραφενίου και μια ατομική ανάλυση εικόνας του κρυσταλλικού πλέγματος του.



Επειδή οι λειτουργίες κάμψης διασκορπίζονται όπως το k^2 , υπερिσχύουν τη συμπεριφορά των δομικών διακυμάνσεων στο γραφένιο στις χαμηλές ενέργειες (χαμηλές θερμοκρασίες) και τα μεγάλα μήκη κύματος. Είναι διδακτικό να καταλάβουμε πως αυτές οι λειτουργίες εμφανίζονται από τη σκοπιά της θεωρίας της ελαστικότητας (Chaikin και Lubensky, 1995; Nelson και άλλοι, 2004). Σκεφτείτε, για παράδειγμα, ένα τρισδιάστατο (3D) φύλλο γραφενίου και παραμετροποιήστε τη θέση του φύλλου σε σχέση με ένα σταθερό πλαίσιο συντεταγμένων σε όρους του (εντός του επιπέδου) διανύσματος \mathbf{r} και του μεταβλητού ύψους $h(\mathbf{r})$ έτσι ώστε μια θέση στο γραφένιο να δίνεται από το διάνυσμα $\mathbf{R}=(\mathbf{r},h(\mathbf{r}))$. Το κάθετο μοναδιαίο διάνυσμα προς την επιφάνεια δίνεται από

$$\mathbf{N} = \frac{\mathbf{z} - \nabla h}{\sqrt{1 + (\nabla h)^2}}, \quad (125)$$

όπου $\nabla=(\partial_x, \partial_y)$ είναι ο δισδιάστατος (2D) τελεστής κλίσης και \mathbf{z} είναι το μοναδιαίο διάνυσμα στην τρίτη κατεύθυνση. Σε έναν επίπεδο σχηματισμό γραφενίου, όλα τα κανονικά διανύσματα είναι ευθυγραμμισμένα και συνεπώς $\nabla \cdot \mathbf{N} = 0$. Οι αποκλίσεις από τον επίπεδο σχηματισμό απαιτούν τη λανθασμένη ευθυγράμμιση των κανονικών διανυσμάτων και το κόστος της ελαστικής ενέργειας. Αυτή η ελαστική ενέργεια μπορεί να γραφτεί ως

$$E_0 = \frac{\kappa}{2} \int d^2\mathbf{r} (\nabla \cdot \mathbf{N})^2 \approx \frac{\kappa}{2} \int d^2\mathbf{r} (\nabla^2 h)^2, \quad (126)$$

όπου κ είναι η καμπτική δυσκαμψία του γραφενίου, και η έκφραση από πλευράς του $h(\mathbf{r})$ ισχύει για τις λείες παραμορφώσεις του $[(\nabla h)^2 \ll 1]$ φύλλου γραφενίου. Η ενέργεια (126) ισχύει ελλείψει μιας επιφανειακής έντασης ή ενός υποστρώματος που διασπά την περιστροφική και μεταφραστική συμμετρία του προβλήματος, αντίστοιχα. Παρουσία της έντασης, υπάρχει ένα ενεργειακό κόστος για τις συμπαγείς περιστροφές του $(\nabla h \neq 0)$ φύλλου γραφενίου και γι' αυτό ένας νέος όρος πρέπει να προστεθεί στην ελαστική ενέργεια,

$$E_T = \frac{\gamma}{2} \int d^2\mathbf{r} (\nabla h)^2, \quad (127)$$

όπου γ είναι η διεπιφανειακή ακαμψία. Ένα υπόστρωμα, που περιγράφεται από ένα μεταβλητό ύψος $s(\mathbf{r})$, ακινητοποιεί το φύλλο γραφενίου δια μέσου του van der Waals και άλλων ηλεκτροστατικών δυνατοτήτων έτσι ώστε η διαμόρφωση γραφενίου προσπαθεί να ακολουθήσει το υπόστρωμα $h(\mathbf{r}) \sim s(\mathbf{r})$. Οι αποκλίσεις από αυτήν την διαμόρφωση κοστίζουν επιπλέον ελαστική ενέργεια που μπορεί να προσεγγιστεί από ένα αρμονικό δυναμικό (Swain και Andelman, 1999),

$$E_S = \frac{v}{2} \int d^2\mathbf{r} [s(\mathbf{r}) - h(\mathbf{r})]^2, \quad (128)$$

όπου το v χαρακτηρίζει τη δύναμη της πιθανής αλληλεπίδρασης μεταξύ υποστρώματος και γραφενίου.

Κατ' αρχάς, υπολογίζουμε το πρόβλημα γραφενίου ελεύθερης διακύμανσης (126) ώστε να μπορούμε να το ξαναγράψουμε στο χώρο ορμής ως

$$E_0 = \frac{\kappa}{2} \sum_{\mathbf{k}} k^4 h_{-\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}}. \quad (129)$$

Εμείς τώρα κβαντοποιούμε κανονικά το πρόβλημα με την εισαγωγή ενός $P_{\mathbf{k}}$ τελεστή ορμής που έχει τον ακόλουθο μετατροπέα ηλεκτρικού ρεύματος με $h_{\mathbf{k}}$:

$$[h_{\mathbf{k}}, P_{\mathbf{k}'}] = i \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad (130)$$

και γράφουμε την Χαμιλτονιανή ως

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{P_{-\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}}}{2\sigma} + \frac{\kappa k^4}{2} h_{-\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}} \right\}, \quad (131)$$

όπου σ είναι η δισδιάστατη (2D) πυκνότητα μάζας του γραφενίου. Από τις εξισώσεις Heisenberg της κίνησης για τους φορείς, είναι ασήμαντο να βρεθεί ότι το $h_{\mathbf{k}}$ ταλαντεύεται αρμονικά με μια συχνότητα που δίνεται από

$$\omega_{\text{flex}}(\mathbf{k}) = \left(\frac{\kappa}{\sigma} \right)^{1/2} k^2, \quad (132)$$

η οποία είναι η διασπορά μεγάλου-μήκους κύματος των λειτουργιών κάμψης. Παρουσία της έντασης, είναι εύκολο να καταλάβουμε ότι η διασπορά είναι τροποποιημένη ώστε:

$$\omega(\mathbf{k}) = k \sqrt{\frac{\kappa}{\sigma} k^2 + \frac{\gamma}{\sigma}}, \quad (133)$$

υποδεικνύοντας ότι η διασπορά των λειτουργιών κάμψης γίνεται γραμμική στο k , καθώς $k \rightarrow 0$, κάτω από τάση. Αυτός συμβαίνει στο γραφίτη, όπου η αλληλεπίδραση μεταξύ των στρωμάτων διασπά την περιστροφική συμμετρία των στρωμάτων γραφενίου.

Η εξίσωση (132) μας επιτρέπει επίσης να συσχετίσουμε την ενέργεια κάμψεως του γραφενίου με τον Y συντελεστή ελαστικότητας (Young) του γραφίτη. Η θεμελιώδης συχνότητα συντονισμού ενός μακροσκοπικού δείγματος γραφίτη με πάχους t δίνεται από (Bunch και άλλοι, 2007)

$$\nu(\mathbf{k}) = \left(\frac{Y}{\rho} \right)^{1/2} t k^2, \quad (134)$$

όπου $\rho = \sigma/t$ είναι η τρισδιάστατη (3D) πυκνότητα μάζας. Υποθέτοντας ότι η εξίσωση (134) λειτουργεί κάτω στο ύψος ενός ενιαίου επιπέδου, δηλαδή, όταν το t είναι η απόσταση μεταξύ των επιπέδων, βρίσκουμε

$$\kappa = Y t^3, \quad (135)$$

η οποία αποτελεί μια απλή σχέση μεταξύ της καμπτικής δυσκαμψίας και του Young συντελεστή ελαστικότητας. Δεδομένου ότι $Y \approx 10^{12}$ N/m και $t \approx 3.4$ Å βρίσκουμε ότι $\kappa \approx 1$ eV. Αυτό το αποτέλεσμα έρχεται σε συμφωνία με τους αρχικούς υπολογισμούς της καμπτικής δυσκαμψίας (Lenosky και άλλοι, 1992; Tu και Ou-Yang, 2002) και τα πειράματα με συντονισμό γραφενίου (Bunch και άλλοι, 2007).

Το πρόβλημα της δομικής τάξης ενός φύλλου γραφενίου «ελεύθερης- διακύμανσης», μπορεί να γίνει κατανοητό πλήρως από την ύπαρξη των λειτουργιών κάμψεως. Σκεφτείτε, για παράδειγμα, τον αριθμό των λειτουργιών κάμψεως ανά μονάδα έκτασης σε μια ορισμένη θερμοκρασία T ,

$$N_{\text{ph}} = \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \frac{k}{e^{\beta \sqrt{\kappa/\sigma} k^2} - 1}, \quad (136)$$

όπου $n_{\mathbf{k}}$ είναι ο αριθμός ενασχόλησης Bose-Einstein ($\beta = 1/k_B T$). Για $T \neq 0$, το παραπάνω ολοκλήρωμα αποκλίνει λογαριθμικά στο υπέρυθρο φως ($k \rightarrow 0$) που δείχνει έναν αριθμό φωνονίων που αποκλίνει στο θερμοδυναμικό όριο. Για ένα σύστημα με πεπερασμένο μέγεθος L , το μικρότερο δυνατό διάνυσμα κύματος είναι της τάξης του $k_{\text{min}} \sim 2\pi/L$. Χρησιμοποιώντας το k_{min} ως μια χαμηλότερη αποκοπή στο ολοκλήρωμα (136), βρίσκουμε

$$N_{\text{ph}} = \frac{\pi}{L_T^2} \ln\left(\frac{1}{1 - e^{-L_T^2/L^2}}\right), \quad (137)$$

όπου

$$L_T = \frac{2\pi}{\sqrt{k_B T}} \left(\frac{\kappa}{\sigma}\right)^{1/4} \quad (138)$$

είναι το θερμικό μήκος κύματος των λειτουργιών κάμψεως. Σημειώστε ότι όταν το $L \gg L_T$, ο αριθμός των λυγισμένων φωνονίων στην εξίσωση (137) αποκλίνει λογαριθμικά με το μέγεθος του συστήματος,

$$N_{\text{ph}} \approx \frac{2\pi}{L_T^2} \ln\left(\frac{L}{L_T}\right), \quad (139)$$

δείχνοντας ότι το σύστημα δεν μπορεί να καθοριστεί δομικά σε οποιαδήποτε πεπερασμένη θερμοκρασία. Αυτό δεν είναι κάτι παρά η αστάθεια τσαλακώματος των μαλακών μεμβρανών (Chaikin και Lubensky, 1995; Nelson και άλλοι, 2004). Για $L \gg L_T$, διαπιστώνει κανείς ότι το N_{ph} πηγαίνει στο μηδέν εκθετικά με το μέγεθος του συστήματος που δείχνει ότι τα συστήματα με πεπερασμένο μέγεθος μπορούν να είναι επίπεδα σε αρκετά χαμηλές θερμοκρασίες. Σημειώστε ότι για $\kappa \approx 1$ eV, $\rho \approx 2200$ kg/m³, $t \approx 3.4$ Å ($\sigma \approx 7.5 \times 10^{-7}$ kg/m²), και $T \approx 300$ K, βρίσκουμε ότι: $L_T \approx 1$ Å, δείχνοντας ότι το ελεύθερης-διακύμανσης γραφένιο θα πρέπει πάντα να τσαλακώνεται σε θερμοκρασία δωματίου λόγω των θερμικών διακυμάνσεων που σχετίζονται με τα λυγισμένα φωνόνια. Εντούτοις, η προηγούμενη συζήτηση περιλαμβάνει μόνο το αρμονικό (τετραγωνικό μέρος) του προβλήματος. Μη-γραμμικά φαινόμενα όπως οι μεγάλες παραμορφώσεις κάμψεως (Peliti και Leibler, 1985), η ζεύξη μεταξύ του λυγίσματος και των λειτουργιών εντός του επιπέδου [ή των αλληλεπιδράσεων φωνονίου-φωνονίου (Le Doussal και Radzihovsky, 1992; Bonini και άλλοι, 2007)], και η παρουσία τοπολογικών ελαττωμάτων (Nelson και Peliti, 1987) μπορούν να οδηγήσουν σε μια ισχυρή εκ νέου εξομάλυνση της καμπτικής δυσκαμψίας, οδηγώντας το σύστημα προς ένα επίπεδο στάδιο στις χαμηλές θερμοκρασίες (Chaikin και Lubensky, 1995). Αυτή η κατάσταση έχει επιβεβαιωθεί στις αριθμητικές προσομοιώσεις των κενών φύλλων γραφενίου (Adebpoor και άλλοι, 2007; Fasolino και άλλοι, 2007).

Η κατάσταση είναι αρκετά διαφορετική εάν το σύστημα είναι κάτω από τάση ή παρουσία ενός υποστρώματος ή μιας σκαλωσιάς η οποία μπορεί να κρατήσει το φύλλο γραφενίου. Στην πραγματικότητα, ο στατικός κυματισμός των φλουδών γραφενίου που αναρτώνται στις σκαλωσιές έχει παρατηρηθεί για τη μονή στιβάδα καθώς επίσης και για τις διπλοστιβάδες (Meyer, Geim, Katsnelson, Novoselov, Booth, και άλλοι, 2007; Meyer, Geim, Katsnelson, Novoselov, Obergfell, και άλλοι, 2007). Σε αυτήν την περίπτωση η διασπορά, σύμφωνα με την εξίσωση (133), είναι τουλάχιστον γραμμική στο k , και το ολοκλήρωμα στην εξίσωση (136) συγκλίνει στο υπέρυθρο ($k \rightarrow 0$), δείχνοντας ότι ο αριθμός λυγίσματος των φωνονίων είναι πεπερασμένος και το γραφένιο δεν τσαλακώνεται. Θα πρέπει να επισημάνουμε ότι αυτές οι θερμικές διακυμάνσεις είναι δυναμικές και επομένως συνηθισμένες σε σχεδόν μηδενικό χρόνο, άρα υπό αυτές τις συνθήκες το φύλλο γραφενίου αναμένεται να είναι επίπεδο. Προφανώς, με την παρουσία ενός υποστρώματος ή μιας σκαλωσιάς που περιγράφηκαν από την εξίσωση (128), υπολογίζονται οι στατικές παραμορφώσεις του φύλλου γραφενίου. Επίσης, τα μόρια υδρογονανθράκων που συχνά παρουσιάζονται στην κορυφή των αναρτημένων μεμβρανών γραφενίου θα μπορούσαν να αποσβήσουν τις αυξομειώσεις της κάμψεως, καθιστώντας τις στατικές.

Τέλος, κάποιος θα πρέπει να σημειώσει ότι με την παρουσία μιας μεταλλικής εισόδου οι αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου οδηγούν στη ζεύξη των λειτουργιών φωνονίου για τις ηλεκτρονικές διεγέρσεις στην είσοδο. Αυτή η ζεύξη θα μπορούσε να ευθύνεται εν μέρη για την απόσβεση των λειτουργιών φωνονίου λόγω των φαινομένων σκεδάσεως (Seoanez και άλλοι, 2007) όπως παρατηρήθηκε στους συντονιστές γραφενίου (Bunch και άλλοι, 2007).

IV. ΑΝΑΤΑΡΑΧΗ ΣΤΟ ΓΡΑΦΕΝΙΟ

Το γραφένιο είναι ένα αξιοπρόσεκτο υλικό από ηλεκτρονική άποψη. Εξαιτίας της ανθεκτικότητας και της ιδιαιτερότητας της σύνδεσης σίγμα, είναι πολύ δύσκολο για τα άγνωστα άτομα να αντικαταστήσουν τα άτομα άνθρακα στο κυψελοειδές πλέγμα. Αυτός είναι ένας από τους λόγους για τους οποίους το ηλεκτρόνιο σημαίνει ότι η ελεύθερη τροχιά στο γραφένιο μπορεί να είναι τόσο μακριά, φτάνοντας μέχρι και το 1 μm στα υπάρχοντα δείγματα. Ωστόσο, το γραφένιο δεν είναι άτρωτο στην αναταραχή και οι ηλεκτρονικές του ιδιότητες ελέγχονται από εξωγενή καθώς επίσης και ενδογενή φαινόμενα που είναι μοναδικά σε αυτό το σύστημα. Μεταξύ των ενδογενών πηγών αναταραχής, το καλύτερο σημείο είναι κυματισμοί της επιφάνειας και τα τοπολογικά ελαττώματα. Η εξωγενής αναταραχή μπορεί να προκύψει σε πολλές διαφορετικές μορφές: ξένα άτομα, κενές θέσεις, φορτία στην κορυφή του γραφενίου ή στο υπόστρωμα, και εκτεταμένα ελαττώματα όπως οι σχισμές και οι άκρες.

Είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι από τη σκοπιά της ενιαίας φυσικής ηλεκτρονίων [δηλαδή όρους που μπορούμε να προσθέσουμε στην εξίσωση (5)], υπάρχουν δύο κύριοι όροι για τα όποια ζεύγη αναταραχής. Ο πρώτος όρος αποτελεί μια τοπική μεταβολή στον ενιαίο χώρο ενέργειας,

$$H_{dd} = \sum_i V_i (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i), \quad (140)$$

όπου V_i είναι η αντοχή του δυναμικού αναταραχής στην περιοχή \mathbf{R}_i , η οποία είναι διαγώνια στους δείκτες του υποπλέγματος και συνεπώς, από τη σκοπιά της Χαμιλτονιανής Dirac (18), μπορεί να γραφτεί ως

$$H_{dd} = \int d^2r \sum_{a=1,2} V_a(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_a^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_a(\mathbf{r}), \quad (141)$$

η οποία δρα ως ένα χημικό δυναμικό μετατόπισης για τα φερμιόνια Dirac, μετατοπίζει δηλαδή τοπικά το σημείο Dirac.

Επειδή η πυκνότητα των καταστάσεων χάνεται στο μονό-στρώμα γραφενίου, και κατά συνέπεια η έλλειψη ηλεκτροστατικού ελέγχου, τα δυναμικά φόρτισης μπορεί να είναι αρκετά σημαντικά για τον καθορισμό των ιδιοτήτων φασματοσκοπίας και μεταφοράς (Ando, 2006b Adam και άλλοι, 2007 Nomura και MacDonald, 2007). Ιδιαίτερης σπουδαιότητας είναι το πρόβλημα προσμείξεων Coulomb, όπου

$$V_a(r) = \frac{e^2}{\epsilon_0 r}, \quad (142)$$

με ϵ_0 τη διηλεκτρική σταθερά του μέσου. Η λύση της εξίσωσης Dirac για το δυναμικό Coulomb σε δυο-διαστάσεις (2D) έχει μελετηθεί αναλυτικά (DiVincenzo και Mele, 1984 Biswas και άλλοι, 2007 Novikov, 2007a Pereira, Nilsson, και Castro Neto, 2007 Shytov και άλλοι, 2007). Η επίλυσή της έχει πολλά από τα χαρακτηριστικά του τρισδιάστατου (3D) σχετικιστικού προβλήματος του ατόμου του υδρογόνου (Baym, 1969). Η φύση των ιδιοσυναρτήσεων, όπως και στην περίπτωση του τρισδιάστατου (3D) προβλήματος, εξαρτάται έντονα από τη συνεχή αδιάστατη ζεύξη του γραφενίου,

$$g = \frac{Ze^2}{\epsilon_0 v_F}. \quad (143)$$

Λάβετε υπ' όψη ότι η σταθερά ζεύξεως μπορεί να ποικίλει είτε αλλάζοντας το φορτίο της πρόσμειξης Z είτε τροποποιώντας το διηλεκτρικό περιβάλλον και αλλάζοντας το ϵ_0 . Για $g < g_c = \frac{1}{2}$, οι λύσεις αυτού του προβλήματος δίνονται λαμβάνοντας υπόψη τις κυματοσυναρτήσεις Coulomb με τις λογαριθμικές μετατοπίσεις φάσης. Η τοπική πυκνότητα των καταστάσεων (ΤΠΚ) έχει επηρεαστεί κοντά στην πρόσμειξη λόγω της ασυμμετρίας ηλεκτρονίου και οπής που δημιουργείτε από το δυναμικό Coulomb. Η τοπική

πυκνότητα φορτίου διασπάται περίπου σε $1/r^3$ συν τις γρήγορες ταλαντώσεις της τάξης της απόστασης του πλέγματος [στο συνεχές όριο αυτή η πυκνότητα οδηγεί σε μια συνάρτηση δέλτα για την πυκνότητα (Kolezhuk και άλλοι, 2006)]. Όπως στο τρισδιάστατο QED, το δισδιάστατο (2D) πρόβλημα γίνεται ασταθές για $g > g_c = \frac{1}{2}$ οδηγώντας στην εξαιρετικά κρίσιμη συμπεριφορά και την επονομαζόμενη πτώση του ηλεκτρονίου προς το κέντρο (Landau και Lifshitz, 1981). Σε αυτήν την περίπτωση, η ΤΠΚ είναι έντονα επηρεασμένη από την παρουσία της πρόσμειξης Coulomb, με την εμφάνιση των «δεσμευμένων» καταστάσεων εκτός των συντονισμών ζώνης και σκέδασης μέσα στη ζώνη (Pereira, Nilsson, και Castro Neto, 2007) και η τοπική ηλεκτρονική πυκνότητα διασπάται μονοτονικά κατά $1/r^2$ σε μεγάλες αποστάσεις.

Ο Schedin και άλλοι (2007) υποστήριξαν ότι χωρίς ένα περιβάλλον με υψηλό κενό αέρος, αυτά τα φαινόμενα Coulomb μπορούν -σε μεγάλο βαθμό- να τεθούν υπό έλεγχο από τις ισχύουσες μεγάλες διηλεκτρικές σταθερές εξαιτίας της παρουσίας ενός λεπτού στρώματος (μεγέθους ενός νανομέτρου) του νερού που έχει απορροφηθεί (Sabio και άλλοι, 2007). Στην πραγματικότητα, τα πειράματα με ιδιαίτερα υψηλές συνθήκες κενού αέρος (Chen, Jang, Fuhrer, και άλλοι, 2008) εμφανίζουν χαρακτηριστικά σκέδασης και κατά τη μεταφορά μπορεί να έχουν σχέση με τις προσμειξεις φορτίου. Τα διαγνωστικά φαινόμενα που επηρεάζουν τη δύναμη και το εύρος της αλληλεπίδρασης Coulomb είναι μάλλον μη-ασήμαντα στο γραφένιο (Fogler, Novikov, και Shklovskii, 2007; Shklovskii, 2007) και, επομένως, σημαντικά για την ερμηνεία των στοιχείων/δεδομένων μεταφοράς (Bardarson και άλλοι, 2007; Nomura και άλλοι, 2007; San-Jose και άλλοι, 2007; Lewenkopf και άλλοι, 2008).

Ένας άλλος τύπος αναταραχής είναι αυτός που αλλάζει την απόσταση ή τις γωνίες μεταξύ των p_z τροχιακών. Σε αυτήν την περίπτωση, οι ενέργειες αναπήδησης μεταξύ διαφορετικών περιοχών μεταβάλλονται, οδηγώντας σε μια νέα περίοδο στην αρχική Χαμιλτονιανή (5),

$$H_{\text{od}} = \sum_{ij} \{ \delta t_{ij}^{(ab)} (a_i^\dagger b_j + \text{H.c.}) + \delta t_{ij}^{(aa)} (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j) \}, \quad (144)$$

ή στο χώρο Fourier,

$$H_{\text{od}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \sum_{i, \vec{\delta}_{ab}} \delta t_i^{(ab)} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i - i \vec{\delta}_{ab} \cdot \mathbf{k}'} + \text{H.c.} + (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'}) \sum_{i, \vec{\delta}_{aa}} \delta t_i^{(aa)} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i - i \vec{\delta}_{aa} \cdot \mathbf{k}'}, \quad (145)$$

όπου $\delta t_{ij}^{(ab)}$ ($\delta t_{ij}^{(aa)}$) είναι η μεταβολή της ενέργειας αναπήδησης μεταξύ των τροχιακών στις περιοχές πλέγματος \mathbf{R}_i και \mathbf{R}_j στα ίδια (διάφορα) υποπλέγματα (έχουμε γράψει $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \vec{\delta}$, όπου $\vec{\delta}_{ab}$ είναι το κοντινότερο-γειτονικό διάνυσμα και $\vec{\delta}_{aa}$ είναι το επόμενο-κοντινότερο-γειτονικό διάνυσμα).

Ακολουθώντας τη διαδικασία της ενότητας II.B, προβάλλουμε τις συνιστώσες Fourier των τελεστών κοντά στα σημεία K και K' του BZ χρησιμοποιώντας την εξίσωση (17). Εάν υποθέσουμε ότι το δt_{ij} είναι ομαλό πέρα από την κλίμακα διάταξης πλέγματος, δηλαδή, δεν έχει συνιστώσα Fourier με ορμή $\mathbf{K}-\mathbf{K}'$ (έτσι οι δύο κώνοι Dirac δεν συνδέονται από την αναταραχή), μπορούμε να ξαναγράψουμε την εξίσωση (145) στον πραγματικό χώρο ως

$$H_{\text{od}} = \int d^2r \{ \mathcal{A}(\mathbf{r}) a_1^\dagger(\mathbf{r}) b_1(\mathbf{r}) + \text{H.c.} + \phi(\mathbf{r}) [a_1^\dagger(\mathbf{r}) a_1(\mathbf{r}) + b_1^\dagger(\mathbf{r}) b_1(\mathbf{r})] \}, \quad (146)$$

με μια παρόμοια έκφραση για τον δεύτερο κώνο αλλά με το \mathcal{A} να αντικαθίσταται από το \mathcal{A}^* , όπου

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = \sum_{\vec{\delta}_{ab}} \delta t^{(ab)}(\mathbf{r}) e^{-i \vec{\delta}_{ab} \cdot \mathbf{K}}, \quad (147)$$

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{\vec{\delta}_{aa}} \delta t^{(aa)}(\mathbf{r}) e^{-i \vec{\delta}_{aa} \cdot \mathbf{K}}. \quad (148)$$

Να σημειωθεί ότι ενώ $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi^*(\mathbf{r})$, λόγω της ανάστροφης συμμετρίας των δύο τριγωνικών υποπλεγμάτων που αποτελούν το κυψελοειδές πλέγμα, το \mathcal{A} είναι σύνθετο εξαιτίας της έλλειψης ανάστροφης συμμετρίας για μια κοντινότερη-γειτονική αναπήδηση. Συνεπώς,

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = \mathcal{A}_x(\mathbf{r}) + i\mathcal{A}_y(\mathbf{r}). \quad (149)$$

Από πλευράς της Χαμιλτονιανής Dirac (18), μπορούμε να ξαναγράψουμε την εξίσωση (146) ως

$$H_{\text{od}} = \int d^2r [\hat{\Psi}_1^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{\mathcal{A}}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_1(\mathbf{r}) + \phi(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_1^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_1(\mathbf{r})], \quad (150)$$

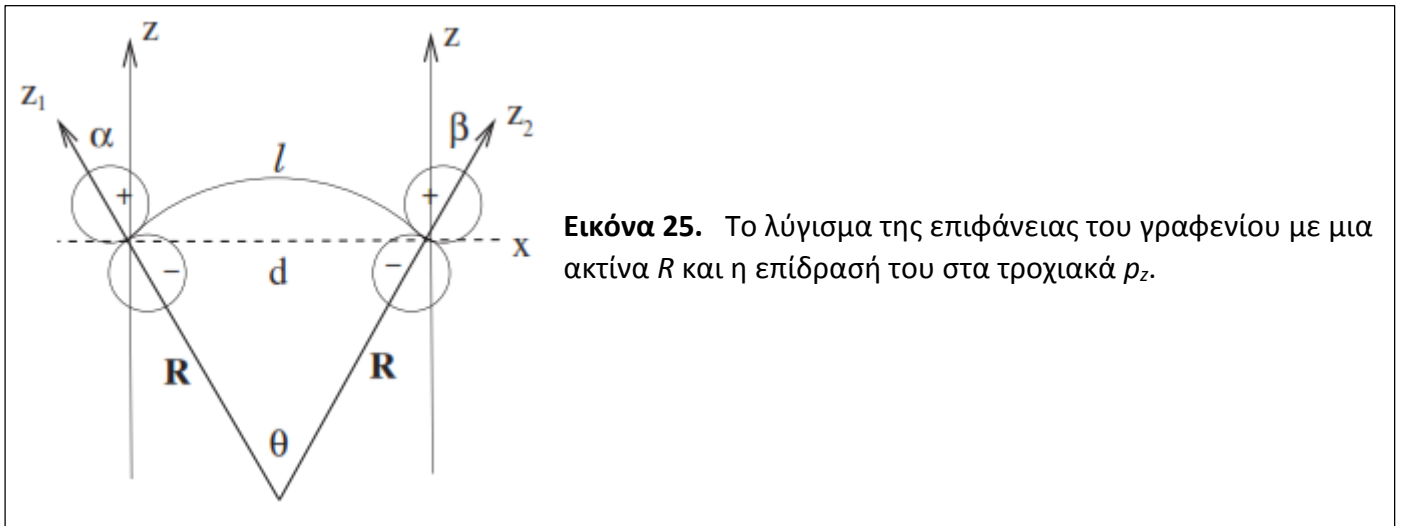
όπου $\vec{\mathcal{A}} = (A_x, A_y)$. Αυτό το αποτέλεσμα δείχνει ότι οι αλλαγές στο εύρος αναπήδησης οδηγούν στην εμφάνιση των δυναμικών του διανύσματος $\vec{\mathcal{A}}$ και του βαθμωτού ανύσματος Φ στη Χαμιλτονιανή Dirac. Η παρουσία ενός δυναμικού διανύσματος στο πρόβλημα δείχνει ότι ένα δραστικό μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = (c/eu_F) \nabla \times \vec{\mathcal{A}}$ θα πρέπει επίσης να είναι παρόν, κάτι που σημαίνει πως είναι κατεστραμμένη η συμμετρία ανάστροφου-χρόνου, αν και το αρχικό πρόβλημα ανάστροφου-χρόνου ήταν αμετάβλητο. Αυτή η κατεστραμμένη συμμετρία ανάστροφου-χρόνου δεν είναι πραγματική αφού η εξίσωση (150) είναι Χαμιλτονιανή τριγύρω μόνο από έναν από τους κώνους Dirac. Ο δεύτερος κώνος Dirac σχετίζεται με τον πρώτο από τη συμμετρία ανάστροφου-χρόνου, δείχνοντας ότι το δραστικό μαγνητικό πεδίο είναι αντεστραμμένο στο δεύτερο κώνο. Επομένως, δεν υπάρχει καθολική κατεστραμμένη συμμετρία αλλά μια αντιστάθμιση μεταξύ των δύο κώνων.

A. Κυματισμοί

Το γραφένιο είναι ένα σύστημα ενός-πυκνού-ατόμου, η ακραία περίπτωση μιας μαλακής μεμβράνης. Επομένως, όπως οι μαλακές μεμβράνες, υποβάλλεται σε διαστρεβλώσεις (παραμορφώσεις) της δομής του είτε λόγω των θερμικών διακυμάνσεων (όπως συζητήσαμε στην ενότητα III) είτε λόγω της αλληλεπίδρασης με ένα υπόστρωμα, μια σκαλωσιά, και μετράται η απορρόφησή του (Swain και Andelman, 1999). Στην πρώτη περίπτωση, οι διακυμάνσεις είναι χρονικά εξαρτημένες (μολονότι τα χρονοδιαγράμματα είναι πολύ μεγαλύτερα από τα ηλεκτρονικά), ενώ στη δεύτερη περίπτωση οι διαστρεβλώσεις δρουν ως αποσβησμένη αναταραχή. Και στις δύο περιπτώσεις, η αναταραχή εμφανίζεται λόγω της μεταβολής της απόστασης και της σχετικής γωνίας μεταξύ των ατόμων άνθρακα λόγω της κάμψης του φύλλου γραφενίου. Αυτός ο τύπος της εκτός-διαγωνίου αναταραχής δεν υφίσταται στα συνηθισμένα τρισδιάστατα (3D) στερεά, ή ακόμη και στα σχεδόν-μονοδιάστατα (1D) ή σχεδόν-δισδιάστατα (2D) συστήματα, όπου οι ατομικές αλυσίδες και τα ατομικά επίπεδα, αντίστοιχα, είναι ενσωματωμένα σε μια τρισδιάστατη (3D) κρυσταλλική δομή. Στην πραγματικότητα, το γραφένιο είναι επίσης διαφορετικό από τις άλλες μαλακές μεμβράνες διότι είναι (ημι)μεταλλικό, ενώ οι μεμβράνες που μελετήθηκαν προηγουμένως ήταν μονωτές.

Το πρόβλημα των λυγισμένων γραφιτικών συστημάτων και η επίδρασή του στην υβριδοποίηση των π τροχιακών έχει μελετηθεί στο πλαίσιο των κλασικών απειροελάχιστων επιφανειών (Lenosky και άλλοι, 1992) και έχει εφαρμοστεί στα φουλερένια και στους νανοσωλήνες άνθρακα (Tersoff, 1992; Kane και Mele, 1997; Zhong-can και άλλοι, 1997; Xin και άλλοι, 2000; Tu και Ou-Yang, 2002). Προκειμένου να γίνει κατανοητό το φαινόμενο της κάμψης στο γραφένιο, θεωρήστε την κατάσταση που παρουσιάζεται στην εικόνα 25. Το λύγισμα του φύλλου γραφενίου έχει τρία κύρια αποτελέσματα: μείωση της απόστασης μεταξύ των ατόμων άνθρακα, περιστροφή των p_z τροχιακών [η συμπίεση ή η διαστολή του πλέγματος είναι ενεργειακά δαπανηρή εξαιτίας της μεγάλης σταθεράς ελαστικότητας του γραφενίου $\approx 57 \text{ eV}/\text{\AA}^2$ (Xin και άλλοι, 2000)], και επανυβριδοποίηση μεταξύ των τροχιακών π και σ (Eun-Ah Kim και Castro Neto, 2008). Το λύγισμα με μια ακτίνα R μειώνει την απόσταση μεταξύ των τροχιακών από το λ έως το $d = 2R \sin[\lambda/(2R)] \approx \lambda - \lambda^3/24R^2$ για $R \gg \lambda$. Η μείωση στην απόσταση μεταξύ των τροχιακών αυξάνει την

αλληλοεπικάλυψη μεταξύ των δύο λοβών του τροχιακού p_z (Harrison, 1980): $V_{pp\sigma} \approx V_{pp\sigma}^0 [1 + \lambda^2 / (12R^2)]$, όπου $\sigma = \pi, \sigma$, και $V_{pp\sigma}^0$ είναι η επικάλυψη για ένα επίπεδο φύλλο γραφενίου. Η περιστροφή των p_z τροχιακών μπορεί να γίνει κατανοητή εντός του Slater-Koster φορμαλισμού, ειδικότερα, η περιστροφή μπορεί να διασπαστεί σε έναν $p_z - p_z$ (σύνδεση π) συν έναν $p_x - p_x$ (σύνδεση σ) υβριδισμό με ενέργειες $V_{pp\pi}$ και $V_{pp\sigma}$, αντίστοιχα (Harrison, 1980): $V(\vartheta) = V_{pp\pi} \cos^2(\vartheta) - V_{pp\sigma} \sin^2(\vartheta) \approx V_{pp\pi} - (V_{pp\pi} + V_{pp\sigma}) [\lambda / (2R)]^2$, οδηγώντας σε μείωση της αλληλοεπικάλυψης. Επιπλέον, η περιστροφή οδηγεί σε επανυβριδοποίηση μεταξύ των τροχιακών π και σ που οδηγούν σε μια περαιτέρω μετατόπιση της ενέργειας της τάξης του (Eun-Ah Kim και Castro Neto, 2008) $\delta\epsilon_{\pi} \approx (V_{pp\sigma}^2 + V_{pp\pi}^2) / (\epsilon_{\pi} - \epsilon_{\sigma})$.



Εικόνα 25. Το λύγισμα της επιφάνειας του γραφενίου με μια ακτίνα R και η επίδρασή του στα τροχιακά p_z .

Η θεωρία της ελαστικότητας - παρουσία ενός υποστρώματος, όπως εξετάσαμε στην ενότητα III - προβλέπει ότι το γραφένιο όπως ήταν αναμενόμενο θα ακολουθήσει το υπόστρωμα με ομαλό τρόπο. Μάλιστα, με την ελαχιστοποίηση της ελαστικής ενέργειας (126)-(128) όσον αφορά το ύψος h , παίρνουμε (Swain και Andelman, 1999)

$$\kappa \nabla^4 h(\mathbf{r}) - \gamma \nabla^2 h(\mathbf{r}) + v h(\mathbf{r}) = v s(\mathbf{r}), \quad (151)$$

το οποίο μπορεί να επιλυθεί με μετασχηματισμό Fourier,

$$h(\mathbf{k}) = \frac{s(\mathbf{k})}{1 + (\ell_t k)^2 + (\ell_c k)^4}, \quad (152)$$

όπου

$$\ell_t = \left(\frac{\gamma}{v} \right)^{1/2}, \quad \ell_c = \left(\frac{\kappa}{v} \right)^{1/4}. \quad (153)$$

Η εξίσωση (152) δίνει τη διαμόρφωση του ύψους με βάση τα χαρακτηριστικά του υποστρώματος, και τα ℓ_t και ℓ_c παρέχουν τις κλίμακες μήκους για την ελαστική διαστρέβλωση (παραμόρφωση) του γραφενίου σε ένα υπόστρωμα. Γι' αυτό και, η αναταραχή στο υπόστρωμα αντιστοιχεί σε αναταραχή στο φύλλο γραφενίου (αν και περιορίζεται από τους ελαστικούς περιορισμούς). Αυτή η εικόνα έχει επιβεβαιωθεί από τις STM μετρήσεις στο γραφένιο (Ishigami και άλλοι, 2007; Stoljarova και άλλοι, 2007) για το οποίο βρέθηκαν ισχυροί συσχετισμοί μεταξύ της τραχύτητας του υποστρώματος και της τοπογραφίας γραφενίου. Οι εξαρχής υπολογισμοί της δομής της ζώνης υποστηρίζουν επίσης αυτό το σενάριο (Dharma-Wardana, 2007).

Η σύνδεση μεταξύ των κυματισμών και του ηλεκτρονικού προβλήματος προέρχεται από τη σχέση μεταξύ του πεδίου του ύψους $h(\mathbf{r})$ και της τοπικής κυρτότητας του φύλλου R του γραφενίου,

$$\frac{2}{R(\mathbf{r})} \approx \nabla^2 h(\mathbf{r}), \quad (154)$$

επομένως βλέπουμε ότι εξαιτίας του λυγίσματος, τα ηλεκτρόνια εξαρτώνται από ένα δυναμικό που βασίζεται στη δομή ενός φύλλου γραφενίου (Eun-Ah Kim και Castro Neto, 2008),

$$V(\mathbf{r}) \approx V^0 - \alpha[\nabla^2 h(\mathbf{r})]^2, \quad (155)$$

πού α ($\alpha \approx 10$ το eV \AA^2) είναι η σταθερά που εξαρτάται από μικροσκοπικές λεπτομέρειες. Το συμπέρασμα από την εξίσωση (155) είναι ότι τα φερμιόνια Dirac διασκορπίζονται από τους κυματισμούς του φύλλου γραφενίου μέσα από ένα δυναμικό που είναι ανάλογο προς το τετράγωνο της τοπικής κυρτότητας. Η ζεύξη μεταξύ γεωμετρίας και διάδοσης ηλεκτρονίου είναι μοναδική στο γραφένιο, και καταλήγει σε επιπρόσθετο διασκορπισμό και ειδική αντίσταση λόγω των κυματισμών (Katsnelson και Geim, 2008).

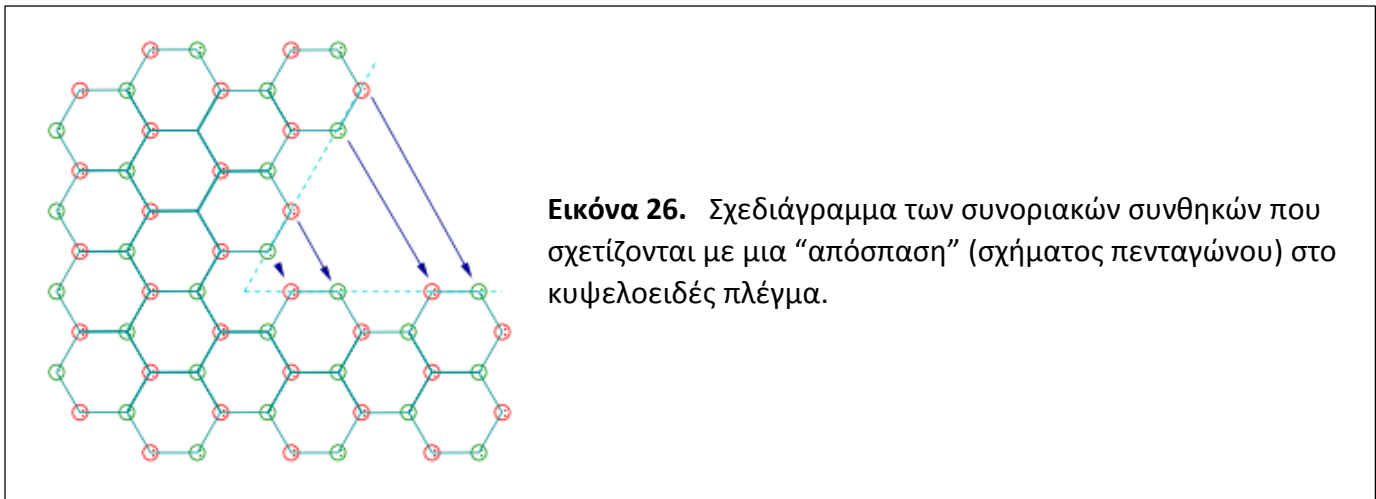
B. Τοπολογικά ελαττώματα πλέγματος

Δομικά ελαττώματα του κυψελοειδούς πλέγματος όπως τα πεντάγωνα, τα επτάγωνα, και οι συνδυασμοί τους όπως είναι για παράδειγμα το “Stone-Wales” ελάττωμα (ένας συνδυασμός από δύο ζεύγη πεντάγωνου-επτάγωνου) είναι επίσης δυνατή η ύπαρξή τους στο γραφένιο και μπορούν να οδηγήσουν σε διασκορπισμό (Cortijo και Vozmediano, 2007a, 2007b). Αυτά τα ελαττώματα προκαλούν μεγάλου-εύρους παραμορφώσεις, οι οποίες μεταβάλλουν τις τροχιές των ηλεκτρονίων.

Θεωρούμε πρώτα μια “απόσπαση”. Αυτό το ελάττωμα είναι ισοδύναμο με την εκκαθάριση ή την ενσωμάτωση μιας σφήνας (ενός κομματιού) στο πλέγμα. Το πιο απλό στο κυψελοειδές πλέγμα είναι η απουσία μιας σφήνας 60° . Οι προκύπτουσες άκρες μπορούν να είναι κολλημένες κατά τέτοιο τρόπο έτσι ώστε όλοι οι χώροι να παραμένουν τριπλά-συγκροτημένοι. Το κυψελοειδές πλέγμα ανακτάται παντού, εκτός από την κορυφή της σφήνας, όπου διαμορφώνεται ένα πενταπλάσιο δαχτυλίδι, ένα πεντάγωνο. Μπορεί να φανταστεί κανείς μια κατάσταση στην οποία οι κοντινότερες-γειτονικές αναπηδήσεις είναι αμετάβλητες. Εντούτοις, η ύπαρξη ενός πενταγώνου συνεπάγεται ότι τα δύο υποπλέγματα της κυψελοειδούς δομής δεν μπορούν πλέον να καθοριστούν. Μια τροχιά γύρω από το πεντάγωνο μετά από ένα κλειστό κύκλωμα θα πρέπει να αλλάξει το δείκτη υποπλέγματος.

Οι συνοριακές συνθήκες που επιβλήθηκαν στις άκρες μιας απόσπασης παρουσιάζονται στην εικόνα 26, προσδιορίζοντας τις περιοχές από τα διαφορετικά υποπλέγματα. Επιπλέον, οι κυματοσυναρτήσεις στα σημεία K και K' αλλάζουν όταν κινούνται γύρω από το πεντάγωνο.

Μια αργή περιστροφή των συνιστωσών της σπιντορικής κυματοσυναρτήσεως μακριά από το ελάττωμα, μπορεί να περιγραφεί από το εύρος (πλάτος) ενός πεδίου που ενεργεί στους δείκτες της κοιλιάδας και του υποπλέγματος (González και άλλοι, 1992, 1993b). Αυτό το εύρος πεδίου είναι τεχνικά μη-Αβελιανό, παρόλο που ένας μετασηματισμός μπορεί να καθοριστεί κάτι που καθιστά ισοδύναμη την εξίσωση Dirac που προκύπτει, με μια με ένα δραστικό Αβελιανό εύρος πεδίου (González και άλλοι, 1993b). Η τελική εξίσωση συνέχειας παρέχει μια λογική περιγραφή του ηλεκτρονικού φάσματος των φουλλερενίων σε διάφορα μεγέθη (González και άλλοι, 1992, 1993b), και άλλες δομές που περιέχουν πεντάγωνα (LeClair, 2000; Osipov και άλλοι, 2003; Kolesnikov και Osipov, 2004, 2006; Lammert και Crespi, 2004). Είναι εύκολο να καταλάβουμε ότι ένα επτάγωνο οδηγεί στο αντίθετο δραστικό πεδίο.



Εικόνα 26. Σχεδιάγραμμα των συνοριακών συνθηκών που σχετίζονται με μια “απόσπαση” (σχήματος πενταγώνου) στο κυψελοειδές πλέγμα.

Μια εντός-του-επίπεδου “αποδιάρθρωση”, δηλαδή, η ενσωμάτωση μιας ημι-άπειρης σειράς των περιοχών, μπορεί να θεωρηθεί ότι προκαλείται από κοινού από ένα πεντάγωνο και ένα επτάγωνο. Το μη-Αβελιανό πεδίο που περιγράφηκε παραπάνω ακυρώνεται/εξουδετερώνεται μακριά από τον πυρήνα. Μια κλειστή τροχιά προϋποθέτει μετατόπιση από μια (ή περισσότερες) διατάξεις πλέγματος. Οι κυματοσυναρτήσεις στα σημεία K και K' αποκτούν φάσεις, $e^{\pm 2\pi i/3}$, στο πλαίσιο μιας μετάφρασης από μια μονάδα πλέγματος. Επομένως, η περιγραφή μιας αποδιάρθρωσης στο συνεχές όριο απαιτεί μια (Αβελιανή) δίνη του φορτίου $\pm 2\pi/3$ στον πυρήνα του. Οι αποδιαρθρώσεις διαχωρίζονται σε αποστάσεις της τάξεως του d που οδηγούν σε μια δραστική ροή δια μέσω ενός τομέα με περίμετρο λ της τάξεως του (Morpurgo και Guinea, 2006)

$$\Phi \sim \frac{d}{k_F l^2}, \quad (156)$$

όπου το k_F είναι το διάνυσμα Fermi των ηλεκτρονίων.

Γενικά, μια τοπική περιστροφή των αξόνων του κυψελοειδούς πλέγματος επιφέρει αλλαγές στην αναπήδηση οι οποίες οδηγούν στη μίξη των K και K' κυματοσυναρτήσεων, που οδηγούν σε ένα πλάτος πεδίου όπως αυτό που προκαλείται από ένα πεντάγωνο (González και άλλοι, 2001). Τα δείγματα του γραφενίου με τις “αποσπάσεις” και τις “αποδιαρθρώσεις” είναι εφαρμόσιμα ιδιαίτερα στα υποστρώματα (Coraux και άλλοι, 2008), και στα πλάτη των πεδίων που σχετίζονται με την τοπική κυρτότητα κι έπειτα αναμένεται να διαδραματίσουν καθοριστικό ρόλο σε τέτοιες δομές. Η ηλεκτρονική δομή που προκύπτει μπορεί να αναλυθεί με τη χρήση της κβαντομηχανικής θεωρίας στον κυρτό χώρο (Birrell και Davies, 1982; Cortijo και Vozmediano, 2007a, 2007b; de Juan και άλλοι, 2007).

Γ. Καταστάσεις προσμείξεως

Τα ελαττώματα σημείου, που είναι παρόμοια με τις προσμείξεις και τα κενές θέσεις, μπορούν να σχηματίσουν ένα πυρήνα με ηλεκτρονικές καταστάσεις σε κοντινή απόσταση. Επομένως, μια συγκέντρωση n_i προσμείξεων ανά άτομο άνθρακα οδηγεί σε μια αλλαγή της ηλεκτρονικής πυκνότητας, n_i τάξεως. Η αντίστοιχη μετατόπιση στην ενέργεια Fermi είναι $\epsilon_F \approx U_F \sqrt{n_i}$. Επιπλέον, οι προσμείξεις οδηγούν σε ένα πεπερασμένο ελαστικό μέσο ελεύθερης τροχιάς $\lambda_{elas} \approx a n_i^{-1/2}$ και σε έναν ελαστικό χρόνο διασποράς $\tau_{elas} \approx (U_F n_i)^{-1}$. Συνεπώς, οι περιοχές με λίγες προσμείξεις μπορούν να θεωρηθούν μέταλλα χαμηλής-πυκνότητας στο αυστηρό όριο ως $\tau_{elas}^{-1} \approx \epsilon_F$.

Η εξίσωση Dirac επιτρέπει τις τοπικές λύσεις που ικανοποιούν πολλές πιθανές συνοριακές συνθήκες. Είναι γνωστό ότι τα μικρά κυκλικά ελαττώματα έχουν ως αποτέλεσμα τοπικές και ημιτοπικές καταστάσεις (Dong και άλλοι, 1998), δηλαδή, καταστάσεις των οποίων η κυματοσυνάρτηση φθίνει κατά $1/r$ ανάλογα με την απόσταση από το κέντρο του ελαττώματος. Μια ξεχωριστή έκδοση αυτών των καταστάσεων μπορεί να πραγματοποιηθεί στο κοντινότερο-γειτονικό πρότυπο στενής-σύνδεσης με μοναδιαίους σκεδαστές όπως οι κενές θέσεις (Pereira και άλλοι, 2006). Στη συνέχεια, η εξίσωση Dirac (19) για την κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r})=(\phi_1(\mathbf{r}),\phi_2(\mathbf{r}))$, για $E=0$, μπορεί να γραφτεί ως

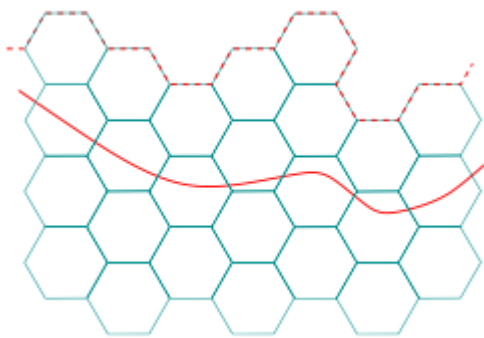
$$\partial_w \phi_1(w, w^*) = 0, \quad \partial_{w^*} \phi_2(w, w^*) = 0, \quad (157)$$

όπου $w=x+iy$ είναι ένας σύνθετος αριθμός. Αυτές οι εξισώσεις δείχνουν ότι σε μηδενική ενέργεια τα συστατικά της κυματοσυνάρτησης μπορούν να είναι μόνο είτε ολομορφικά είτε αντιολομορφικά σε σχέση με τη μεταβλητή w [δηλαδή, $\phi_1(w, w^*)=\phi_1(w^*)$ και $\phi_2(w, w^*)=\phi_2(w)$]. Δεδομένου ότι οι συνοριακές συνθήκες απαιτούν την κυματοσυνάρτηση να εξαφανίζεται στο άπειρο, οι μόνες πιθανές λύσεις θα έχουν τη μορφή $\Psi_K(\vec{r}) \propto (1/(x+iy)^n, 0)$ ή $\Psi_{K'}(\vec{r}) \propto (0, 1/(x-iy)^n)$. Οι κυματοσυναρτήσεις στο ξεχωριστό πλέγμα πρέπει να είναι πραγματικές. Σε μεγάλες αποστάσεις βρέθηκε ότι η πραγματική λύση κοντά σε μια κενή θέση τείνει σε μια υπέρθεση των δύο λύσεων, οι οποίες διαμορφώνονται από τις κυματοσυναρτήσεις των δύο κοιλιάδων με τον ίδιο συντελεστή βαρύτητας, με έναν τρόπο που είναι παρόμοιος με την ανάμιξη στις άκρες πολυθρόνας (Brey και Fertig, 2006b).

Η κατασκευή της ημιτοπικής καταστάσεως γύρω από μια κενή θέση στο κυψελωτό πλέγμα μπορεί να επεκταθεί και σε άλλα ξεχωριστά πρότυπα, τα οποία οδηγούν στην εξίσωση Dirac στο συνεχές όριο. Μια συγκεκριμένη περίπτωση είναι το κοντινότερο-γειτονικό τετραγωνικό πλέγμα με τη μισή ροή ανά πλακέτα, ή το κοντινότερο-γειτονικό τετραγωνικό πλέγμα με δύο γεύσεις ανά περιοχή. Το τελευταίο έχει μελετηθεί διεξοδικά σε σχέση με τις επιδράσεις των προσμείξεων στην ηλεκτρονική δομή των υπεραγωγών d -κύματος (Balatsky και άλλοι, 2006), και τα αριθμητικά αποτελέσματα έρχονται σε συμφωνία με την ύπαρξη αυτής της λύσης. Δεδομένου ότι η κατάσταση είναι εντοπισμένη σε ένα μόνο υπόπλεγμα, η λύση μπορεί να γενικευτεί για την περίπτωση των δύο κενών θέσεων.

Δ. Τοπικές καταστάσεις κοντά στις άκρες, τις σχισμές, και τα κενά

Οι τοπικές καταστάσεις μπορούν να καθοριστούν στις άκρες, όπου ο αριθμός των ατόμων στα δύο υποπλέγματα δεν αντισταθμίζεται. Ο αριθμός τους εξαρτάται από τις λεπτομέρειες της άκρης. Οι άκρες γραφενίου μπορούν να παραμορφωθούν έντονα, λόγω της σύνδεσης άλλων ατόμων προς τα άτομα άνθρακα στις άκρες. Αυτά τα άτομα δεν θα πρέπει να προκαλέσουν τις καταστάσεις στην π ζώνη του γραφενίου. Σε γενικές γραμμές, θα υπάρχει ένα όριο μέσα στο υλικό του γραφενίου, όπως φαίνεται στην εικόνα 27, πέρα από το οποίο η sp^2 υβριδοποίηση είναι καλά καθορισμένη. Εάν αυτό συμβαίνει, ο αριθμός των (μεσαίου-χάσματος) καταστάσεων κοντά στην άκρη είναι κατά προσέγγιση ανάλογος με τη διαφορά στις περιοχές μεταξύ των δύο υποπλεγμάτων κοντά σε αυτό το όριο.



Εικόνα 27. Σχεδιάγραμμα μιας ανώμαλης/τραχιάς επιφάνειας γραφενίου. Η πλήρης γραμμή δίνει το όριο πέρα από το οποίο το πλέγμα μπορεί να θεωρηθεί μη-διαστρεβλωμένο. Ο αριθμός των καταστάσεων μεσαίου-χάσματος αλλάζει ανάλογα με τη διαφορά στον αριθμό των απομακρυσμένων περιοχών για δύο υποπλέγματα.

Κατά μήκος μιας ζικ-ζακ άκρης υπάρχει μια τοπική κατάσταση ανά τρεις μονάδες πλέγματος. Αυτό συνεπάγεται ότι για τις τοπικές καταστάσεις στην ενέργεια Dirac, μια δομή-προάγγελος μπορεί να βρεθεί στις κορδέλες ή τις στενώσεις των μικρών μηκών (Muñoz-Rojas και άλλοι, 2006), η οποία τροποποιεί τις ηλεκτρονικές ιδιότητες της δομής και της μεταφοράς.

Οι τοπικές λύσεις μπορούν επίσης να βρεθούν κοντά σε άλλα ελαττώματα που περιέχουν τους σπασμένους δεσμούς ή κενές θέσεις. Αυτές οι καταστάσεις δεν επιτρέπουν μια αναλυτική λύση, αν και, όπως αναλύθηκε παραπάνω, η εξίσωση συνέχειας του Dirac είναι συμβατή με πολλές συνοριακές συνθήκες, και θα πρέπει να περιγράψει καλά τις τοπικές καταστάσεις που μεταβάλλονται αργά μέσα σε αποστάσεις που είναι συγκρίσιμες με τη διάταξη του πλέγματος. Η ύπαρξη αυτών των καταστάσεων μπορεί να εξεταστεί με την ανάλυση της κλιμάκωσης του φάσματος κοντά σε ένα ελάττωμα ως συνάρτηση του μεγέθους του συστήματος L (Vozmediano και άλλοι, 2005). Μια σειρά από μικρά κενά και σχισμές που έχουν επιμηκυνθεί, παρουσιάζουν καταστάσεις ενεργειακών κλιμάκων ως L^{-2} , ενώ η ενέργεια των εκτεταμένων κλιμάκων των καταστάσεων είναι ως L^{-1} . Μια κατάσταση με ενεργειακή κλιμάκωση L^{-2} είναι συμβατή με τις συνεχείς καταστάσεις για τις οποίες ο συντελεστής της κυματοσυνάρτησης διασπάται ως r^{-2} συναρτήσει της απόστασης από το ελάττωμα.

Ε. Αυτο-ντόπινγκ

Οι υπολογισμοί για τη δομή της ζώνης (που συζητήθηκαν στις προηγούμενες ενότητες) δείχνουν ότι η ηλεκτρονική δομή ενός ενιαίου επιπέδου γραφενίου δεν είναι αυστηρά συμμετρική στην ενέργεια (Reich και άλλοι, 2002). Η έλλειψη συμμετρίας ηλεκτρονίου και οπής μετατοπίζει την ενέργεια των καταστάσεων που εντοπίζεται κοντά στις προσμείξεις πάνω ή κάτω από το επίπεδο Fermi, και που οδηγεί σε μια μεταφορά φορτίου από ή προς τις καθαρές περιοχές. Επομένως, ο συνδυασμός των τοπικών ελαττωμάτων και της έλλειψης τέλει συμμετρίας μεταξύ ηλεκτρονίου και οπής γύρω από τα σημεία Dirac οδηγεί στο ενδεχόμενο του αυτο-ντοπαρίσματος, εκτός από τις συνηθισμένες διεργασίες σκέδασης.

Τα εκτενή ελαττώματα του πλέγματος, όπως οι άκρες, τα όρια των κόκκων, ή οι μικρο-σχισμές, είναι πιθανό να προκαλέσουν μια σειρά από ηλεκτρονικές καταστάσεις ανάλογες προς το μήκος τους L/a , όπου το a είναι της τάξης της σταθεράς του πλέγματος. Επομένως, μια κατανομή των εκτεταμένων ελαττωμάτων μήκους L σε μια απόσταση ίση με το ίδιο το L , προκαλεί μια συγκέντρωση των L/a φορέων ανά άνθρακα, σε περιοχές του μεγέθους της τάξης του $(L/a)^2$. Το σύστημα που προκύπτει μπορεί να θεωρηθεί ως ένα μέταλλο με μια χαμηλή πυκνότητα των φορέων, $n_{\text{carrier}} \propto a/L$ ανά μοναδιαίο κύτταρο, και ως ένα ελαστικό μέσο ελεύθερο μονοπάτι $\lambda_{\text{elas}} \approx L$. Κατόπιν, λαμβάνουμε ότι:

$$\epsilon_F \approx \frac{v_F}{\sqrt{aL}}, \quad \frac{1}{\tau_{\text{elas}}} \approx \frac{v_F}{L}, \quad (158)$$

και, επομένως, $(\tau_{elas})^{-1} \ll \epsilon_F$ όταν $a/L \ll 1$. Συνεπώς, η ύπαρξη των εκτεταμένων ελαττωμάτων οδηγεί στο ενδεχόμενο του αυτό-ντοπαρίσματος αλλά διατηρώντας το μεγαλύτερο μέρος του δείγματος στο καθαρό όριο. Σε αυτό το σύστημα, αναμένονται οι φυσικές ταλαντώσεις των ιδιοτήτων μεταφοράς, αν και οι παρατηρηθείσες ηλεκτρονικές ιδιότητες μπορούν να αντιστοιχούν σε μια μετατοπισμένη ενέργεια Fermi όσον αφορά το ουδέτερο ονομαστικά σύστημα που είναι χωρίς ελαττώματα.

Κάποιος μπορεί να περιγράψει τα φαινόμενα που διασπούν τη συμμετρία ηλεκτρονίου και οπής κοντά στα σημεία Dirac με την έννοια μιας πεπερασμένης επόμενης-κοντινότερης-γειτονικής αναπήδησης μεταξύ των π τροχιακών t' στην εξίσωση (5). Θεωρείστε, για παράδειγμα, την ηλεκτρονική δομή μιας κορδέλας πλάτους L που καταλήγει σε ζικ-ζακ άκρες, οι οποίες, όπως συζητήθηκε, μπορούν να οδηγήσουν σε επιφανειακές καταστάσεις για $t'=0$. Η μεταφραστική συμμετρία κατά μήκος του άξονα της κορδέλας μας επιτρέπει για να καθορίσουμε τις ζώνες όσον αφορά ένα διάνυσμα κύματος που είναι παράλληλο προς αυτόν τον άξονα. Αφ' ετέρου, οι τοπικές επιφανειακές ζώνες, που εκτείνονται από $k_{||} = (2\pi)/3$ σε $k_{||} = -(2\pi)/3$, αποκτούν μια διασπορά της τάξης του t' . Επομένως, εάν η ενέργεια Fermi παραμείνει αμετάβλητη στη θέση των σημείων Dirac ($\epsilon_{Dirac} = -3t'$), αυτή η ζώνη θα καλυφθεί, και η κορδέλα δεν θα είναι πλέον ουδέτερα φορτισμένη. Προκειμένου να αποκατασταθεί η ουδετερότητα του φορτίου, το επίπεδο Fermi πρέπει να μετατοπιστεί κατά ένα ποσό της τάξης t' . Κατά συνέπεια, ορισμένες εκτεταμένες καταστάσεις κοντά στα σημεία Dirac είναι συμπληρωμένες, κάτι που οδηγεί στο φαινόμενο του αυτό-ντόπινγκ. Το τοπικό φορτίο είναι μια συνάρτηση της απόστασης προς τα άκρα, θέτοντας την ενέργεια Fermi έτσι ώστε η κορδέλα να είναι γενικά ουδέτερη. Να σημειωθεί ότι το φορτίο που μεταφέρεται στις επιφανειακές καταστάσεις είναι εντοπισμένο κατά κύριο λόγο κοντά στα άκρα του συστήματος.

Η διαβίβαση φορτίου καταστέλλεται από τα ηλεκτροστατικά φαινόμενα, δεδομένου ότι οι μεγάλες αποκλίσεις από την ουδετερότητα φορτίου έχουν ένα σχετικό ενεργειακό κόστος (Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a). Προκειμένου να μελετηθούν αυτά τα φαινόμενα φόρτισης, προσθέτουμε στο ελεύθερο Χαμιλτονιανό ηλεκτρόνιο (5) την ενέργεια Coulomb της αλληλεπίδρασης μεταξύ των ηλεκτρονίων,

$$H_I = \sum_{ij} U_{ij} n_i n_j, \quad (159)$$

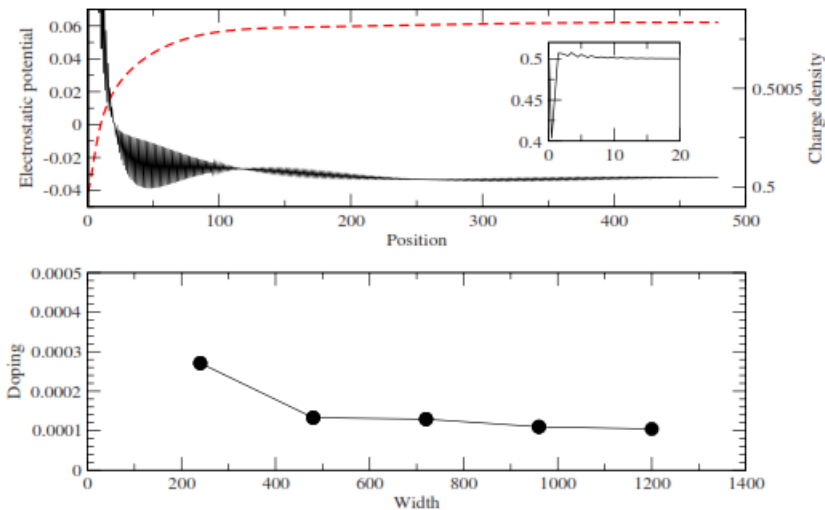
όπου $n_i = \sum_{\sigma} (a_{i,\sigma}^{\dagger} a_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^{\dagger} b_{i,\sigma})$ είναι ο αριθμητικός τελεστής στην περιοχή \mathbf{R}_i , και

$$U_{ij} = \frac{e^2}{\epsilon_0 |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \quad (160)$$

είναι η αλληλεπίδραση Coulomb μεταξύ των ηλεκτρονίων. Αναμένουμε, βάσει της φυσικής, ότι ένα ηλεκτροστατικό δυναμικό συσσωρεύεται στα άκρα, μετατοπίζοντας τη θέση των επιφανειακών καταστάσεων, και μειώνοντας το φορτίο που μεταφέρεται από ή προς αυτά. Το δυναμικό στην άκρη που προκαλείται με ένα σταθερό ντοπαρίσμα δ ανά άτομο άνθρακα είναι $\sim (\delta e^2/a)W/a$ ($\delta e^2/a$ είναι η ενέργεια Coulomb ανά άνθρακα, και W το πλάτος της κορδέλας (W/a είναι ο αριθμός των ατόμων που εμπλέκονται). Η μεταφορά φορτίου σταματά όταν το δυναμικό μετατοπίζει τις τοπικές καταστάσεις στην ενέργεια Fermi, δηλαδή, όταν $t' \approx (e^2/a)(W/a)\delta$. Επομένως, το προκύπτον αυτό-ντόπινγκ είναι:

$$\delta \sim \frac{t' a^2}{e^2 W}, \quad (161)$$

όποιος εξαφανίζεται όταν το W τείνει στο άπειρο ($W \rightarrow \infty$).



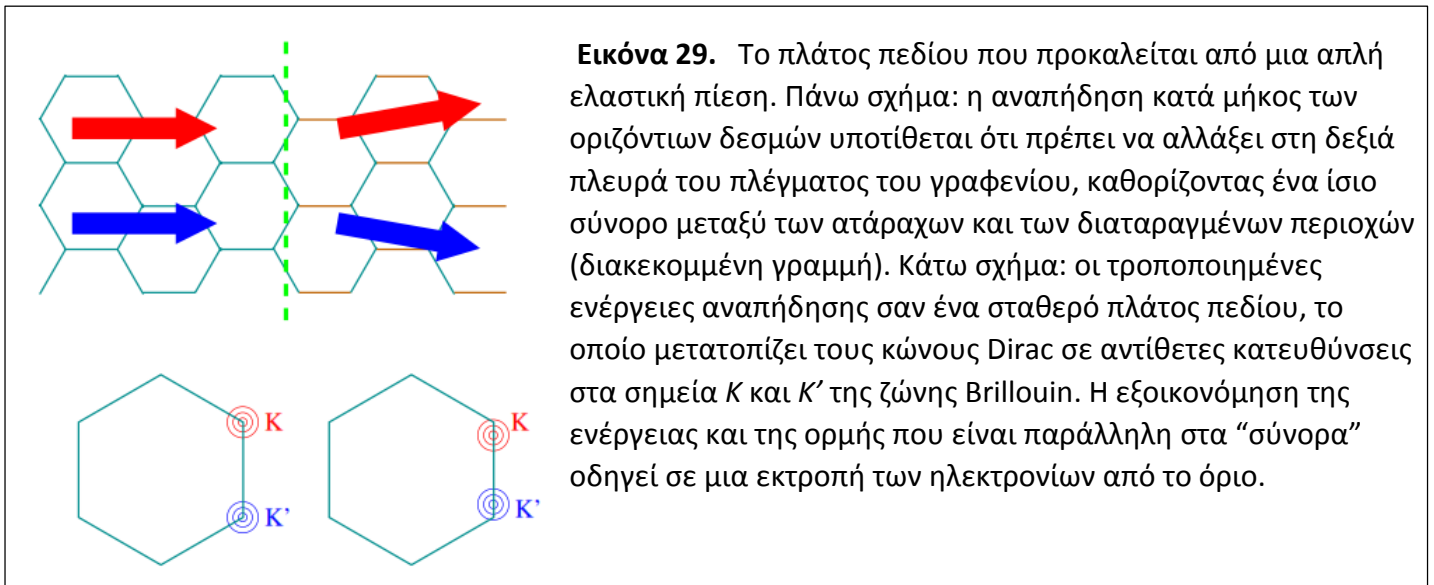
Εικόνα 28. Μετατοπισμένο ηλεκτρονικό φορτίο κοντά σε μια ζικ-ζακ άκρη γραφενίου. Επάνω μέρος: ανάλυση που συνάδει με τη μετατοπισμένη πυκνότητα του φορτίου (σε μονάδες του αριθμού των ηλεκτρονίων ανά άνθρακα) όπου παρουσιάζεται με μια συνεχή γραμμή, και το αντίστοιχο ηλεκτροστατικό δυναμικό (σε μονάδες του t) όπου παρουσιάζεται με διακεκομμένη γραμμή, για μια κορδέλα γραφενίου με περιοδικές συνοριακές συνθήκες κατά μήκος της ζικ-ζακ άκρης (με ένα μήκος $L=$

$960a$) και με μια περίμετρο μεγέθους $W=80\sqrt{3}a$. Ένθετο: Η πυκνότητα του φορτίου κοντά στην άκρη. Εξαιτίας της παρουσίας της άκρης, υπάρχει ένα μετατοπισμένο φορτίο στον όγκο (κάτω πίνακας) που παρουσιάζεται ως μια συνάρτηση του πλάτους W . Σημειώστε ότι το μετατοπισμένο φορτίο εξαφανίζεται στο αυξημένο όριο ($W \rightarrow \infty$), σύμφωνα με την εξίσωση (161). Προσαρμοσμένο από τους [Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a](#).

Αντιμετωπίζουμε τη Χαμιλτονιανή (159) κατά τη προσέγγιση Hartree (δηλαδή αντικαθιστούμε H_i από $H_{M.F.} = \sum_i V_i n_i$, όπου $V_i = \sum_j U_{ij} \langle n_j \rangle$, και λύνουμε το πρόβλημα μόνιμα για $\langle n_j \rangle$). Τα αριθμητικά αποτελέσματα για τις κορδέλες γραφενίου μήκους $L=80\sqrt{3}a$ και διαφορετικών πλατών παρουσιάζονται στην εικόνα 28 ($t'/t=0.2$ και $e^2/a=0.5t$). Το μεγαλύτερο πλάτος που μελετάται είναι $\sim 0.1 \mu\text{m}$, και ο συνολικός αριθμός των ατόμων άνθρακα στην κορδέλα είναι $\approx 10^5$. Σημειώστε ότι όσο το W αυξάνεται, το αυτο-ντόπινγκ μειώνεται κάτι που δείχνει ότι, για ένα τέλειο επίπεδο γραφενίου ($W \rightarrow \infty$), το φαινόμενο του αυτο-ντόπινγκ εξαφανίζεται. Για τις ρεαλιστικές παραμέτρους, διαπιστώνουμε ότι η ποσότητα του αυτο-ντόπινγκ είναι $10^{-4} - 10^{-5}$ ηλεκτρόνια ανά μοναδιαίο κύτταρο για τα μεγέθη $0.1 - 1 \mu\text{m}$.

ΣΤ. Διανυσματικό δυναμικό και εύρος (πλάτος) πεδίου αναταραχής

Όπως συζητήθηκε στην ενότητα IV, οι παραμορφώσεις του πλέγματος τροποποιούν την εξίσωση Dirac που περιγράφει τη χαμηλής ενέργειας δομή των ζωνών του γραφενίου. Εξετάζουμε εδώ τις παραμορφώσεις οι οποίες αλλάζουν σιγά-σιγά στην κλίμακα του πλέγματος, έτσι ώστε να μην αναμινγούνται οι δύο μη-ισοδύναμες κοιλάδες. Όπως φάνηκε νωρίτερα, οι διαταραχές που υβριδιοποιούν τα δύο υποπλέγματα οδηγούν σε όρους που αλλάζουν τη Χαμιλτονιανή Dirac από $v_F \sigma \cdot \mathbf{k}$ σε $v_F \sigma \cdot \mathbf{k} + \sigma \cdot \mathbf{A}$. Συνεπώς, το διάνυσμα \mathbf{A} μπορεί να υπάρχει εάν διεγείρεται από ένα δραστικό πλάτος πεδίου \mathbf{A} . Προκειμένου να συντηρηθεί η ανάστροφη-χρονική συμμετρία, αυτός το πλάτος πεδίου πρέπει να έχει αντίθετα πρόσημα στους δύο κώνους Dirac $\mathbf{A}_K = -\mathbf{A}_{K'}$.



Εικόνα 29. Το πλάτος πεδίου που προκαλείται από μια απλή ελαστική πίεση. Πάνω σχήμα: η αναπήδηση κατά μήκος των οριζόντιων δεσμών υποτίθεται ότι πρέπει να αλλάξει στη δεξιά πλευρά του πλέγματος του γραφενίου, καθορίζοντας ένα ίσιο σύνορο μεταξύ των ατάραχων και των διαταραγμένων περιοχών (διακεκομμένη γραμμή). Κάτω σχήμα: οι τροποποιημένες ενέργειες αναπήδησης σαν ένα σταθερό πλάτος πεδίου, το οποίο μετατοπίζει τους κώνους Dirac σε αντίθετες κατευθύνσεις στα σημεία K και K' της ζώνης Brillouin. Η εξοικονόμηση της ενέργειας και της ορμής που είναι παράλληλη στα “σύνορα” οδηγεί σε μια εκτροπή των ηλεκτρονίων από το όριο.

Ένα απλό παράδειγμα είναι μια παραμόρφωση που αλλάζει την αναπήδηση μεταξύ όλων των δεσμών κατά μήκος ενός καθορισμένου άξονα του πλέγματος. Υποθέτουμε ότι οι περιοχές στα άκρα εκείνων των δεσμών καθορίζουν το μοναδιαίο κύτταρο, όπως φαίνεται στην εικόνα 29. Εάν η παραμόρφωση είναι σταθερή, η μόνη επίδρασή της θα είναι να μετατοπίσει τα σημεία Dirac μακριά από τις γωνίες του ΒΖ. Τα δύο μη-ισότιμα σημεία μετατοπίζονται σε αντίθετες κατευθύνσεις. Αυτή η ομοιόμορφη παραμόρφωση είναι το ισοδύναμο ενός σταθερού πλάτους πεδίου, ο οποίος δεν αλλάζει το ηλεκτρονικό φάσμα. Η κατάσταση αλλάζει εάν το ένα εξετάζει ένα όριο που χωρίζει δύο περιοχές όπου το μέγεθος της παραμόρφωσής τους είναι διαφορετικό. Η μετατόπιση των σημείων Dirac οδηγεί σε μια απόκλιση των ηλεκτρονικών τροχιών που διασχίζουν το όριο, που παρουσιάζεται επίσης στην εικόνα 29. Η διαμόρφωση του πλάτους του πεδίου οδηγεί σε ένα δραστικό μαγνητικό πεδίο, το οποίο έχει αντίθετα πρόσημα στις δύο κοιλάδες.

Έχουμε παρουσιάσει στην ενότητα IV.B πώς τα τοπολογικά ελαττώματα του πλέγματος, όπως οι αποσπάσεις και οι αποδιαιθρώσεις, μπορούν να περιγραφούν από ένα δραστικό εύρος πεδίου. Εκείνα τα ελαττώματα μπορούν να υπάρξουν μόνο στα φύλλα γραφενίου που είναι έμφυτα καμπυλωτά, και το πλάτος πεδίου εξαρτάται μόνο από την τοπολογία του πλέγματος. Οι αλλαγές στην κοντινότερη-γειτονική αναπήδηση οδηγούν επίσης στα δραστικά πλάτη των πεδίων: (i) τις αλλαγές στην αναπήδηση που προκαλούνται από την υβριδοποίηση μεταξύ των ζωνών π και σ , οι οποίες προκύπτουν στα καμπυλωτά φύλλα, και ΠΙΝΑΚΑΣ II. Υπολογισμοί της δραστικής μαγνητικής έκτασης, και των δραστικών μαγνητικών πεδίων που παράγονται από τις παραμορφώσεις. Η ενδογενής είσοδος καμπυλότητας αναφέρεται επίσης στη συμβολή από τοπολογικά ελαττώματα.

	l_B	B (T) $h=1 \text{ nm}, l=10 \text{ nm}, a=0.1 \text{ nm}$
Ενδογενής καμπυλότητα	$l\left(\frac{l}{h}\right)$	0.06
Εξωγενής καμπυλότητα	$l\sqrt{\frac{t}{E} \frac{f^3}{ah^2}}$	0.006
Ελαστικές πιέσεις	$l\sqrt{\frac{1}{\beta} \frac{al}{h^2}}$	6

(ii) οι αλλαγές στην αναπήδηση οφείλονται στην εναρμόνιση του μήκους των δεσμών, το οποίο συνδέεται με την ελαστική πίεση. Η ισχύς αυτών των πεδίων εξαρτάται από τις παραμέτρους που περιγράφουν την τιμή της υβριδοποίησης π - σ , και την εξάρτηση της αναπήδησης στο μήκος του δεσμού.

Μια σύγκριση των σχετικών δυνάμεων στο πλάτος των πεδίων που προκαλούνται από την ενδογενή καμπυλότητα, την υβριδοποίηση π - σ (εξωγενής καμπυλότητα), και τις ελαστικές πιέσεις, που προκύπτουν από μια κυμάτωση τυπικού ύψους και μεγέθους, δίνεται στον Πίνακα II.

1. Πλάτος πεδίου που προκαλείται από την καμπυλότητα

Όπως συζητήθηκε στην ενότητα IV.A, όταν τα π τροχιακά δεν είναι παράλληλα, ο υβριδισμός μεταξύ τους εξαρτάται από το σχετικό προσανατολισμό τους. Η γωνία ϑ_i καθορίζει το σχετικό προσανατολισμό των γειτονικών τροχιακών σε κάποια θέση \mathbf{r}_i στο φύλλο γραφενίου. Η τιμή του ϑ_i εξαρτάται από την τοπική καμπυλότητα του στρώματος. Η σχετική γωνία της περιστροφής δύο τροχιακών p_z στη θέση \mathbf{r}_i και \mathbf{r}_j μπορεί να γραφτεί ως $\cos(\vartheta_i - \vartheta_j) = \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j$, όπου το \mathbf{N}_i είναι το μοναδιαίο διάνυσμα που είναι κάθετο στην επιφάνεια, και ορίζεται στην εξίσωση (125). Εάν $\mathbf{r}_j = \mathbf{r}_i + \mathbf{u}_{ij}$, μπορούμε να γράψουμε

$$\mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j \approx 1 + \mathbf{N}_i \cdot [(\mathbf{u}_{ij} \cdot \nabla) \mathbf{N}_i] + \frac{1}{2} \mathbf{N}_i \cdot [(\mathbf{u}_{ij} \cdot \nabla)^2 \mathbf{N}_i], \quad (162)$$

όπου θεωρούμε το $\mathbf{N}(\mathbf{r})$ ως ομαλά μεταβαλλόμενο. Χρησιμοποιούμε την εξίσωση (125) με βάση το ύψος του πεδίου $h(\mathbf{r})$ [$\mathbf{N}(\mathbf{r}) \approx \mathbf{z} - \nabla h(\mathbf{r}) - (\nabla h)^2 \mathbf{z} / 2$] για να ξαναγράψουμε την εξίσωση (162) ως

$$\mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j \approx 1 - \frac{1}{2} [(\mathbf{u}_{ij} \cdot \nabla) \nabla h(\mathbf{r}_i)]^2. \quad (163)$$

Επομένως, η κάμψη του φύλλου του γραφενίου οδηγεί σε μια αλλαγή του πλάτους αναπήδησης μεταξύ των διαφορετικών περιοχών της μορφής

$$\delta t_{ij}^0 \approx - \frac{t_{ij}^0}{2} [(\mathbf{u}_{ij} \cdot \nabla) \nabla h(\mathbf{r}_i)]^2, \quad (164)$$

όπου t_{ij}^0 είναι η "άδεια" ενέργεια αναπήδησης. Μια παρόμοια επίδραση οδηγεί σε αλλαγές στις ηλεκτρονικές καταστάσεις των νανοσωλήνων άνθρακα (Kane και Mele, 1997). Χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα της ενότητας IV, και συγκεκριμένα, της εξίσωσης (147), μπορούμε τώρα να δείξουμε ότι ένα διανυσματικό δυναμικό παράγεται για την κοντινότερη-γειτονική αναπήδηση ($\mathbf{u} = \vec{\delta}_{ab}$) (Eun-Ah Kim και Castro Neto, 2008),

$$\mathcal{A}_x^{(h)} = - \frac{3E_{ab}a^2}{8} [(\partial_x^2 h)^2 - (\partial_y^2 h)^2], \quad \mathcal{A}_y^{(h)} = \frac{3E_{ab}a^2}{4} (\partial_x^2 h + \partial_y^2 h) \partial_x h \partial_y h, \quad (165)$$

όπου η σταθερά ζεύξης E_{ab} εξαρτάται από τις μικροσκοπικές λεπτομέρειες (Eun-Ah Kim και Castro Neto, 2008). Η ροή του δραστικού μαγνητικού πεδίου μέσω ενός κυματισμού της πλευρικής διάστασης l και του ύψους h δίνεται από

$$\Phi \approx \frac{E_{ab}a^2h^2}{v_F l^3}, \quad (166)$$

όπου η ακτίνα καμπυλότητας είναι $R^{-1} \approx hl^{-2}$. Για έναν κυματισμό με $l \approx 20$ nm, $h \approx 1$ nm, και παίρνοντας $E_{ab}/v_F \approx 10 \text{ \AA}^{-1}$, βρίσκουμε ότι $\Phi \approx 10^{-3} \Phi_0$.

2. Ελαστική πίεση

Η ελαστική ελεύθερη ενέργεια για το γραφένιο μπορεί να γραφτεί σε σχέση με τη μετατόπιση εντός του επίπεδου $\mathbf{u}(\mathbf{r})=(u_x, u_y)$ ως

$$F[\mathbf{u}] = \frac{1}{2} \int d^2r \left[(\mathcal{B} - \mathcal{G}) \left(\sum_{i=1,2} u_{ii} \right)^2 + 2\mathcal{G} \sum_{ij=1,2} u_{ij}^2 \right], \quad (167)$$

όπου το \mathcal{B} είναι ο συντελεστής του όγκου, το \mathcal{G} είναι ο συντελεστής απόσχισης, και

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (168)$$

είναι τανυστής πίεσης ($x_1=x$ και $x_2=y$).

Υπάρχουν πολλοί τύποι στατικών παραμορφώσεων του κυψελωτού πλέγματος που μπορούν να επηρεάσουν στη διάδοση των φερμιονίων Dirac. Ο απλούστερος ένας οφείλεται στις αλλαγές στην περιοχή του μοναδιαίου κυττάρου είτε λόγω της διαστολής είτε λόγω της συστολής. Οι μεταβολές στην περιοχή του μοναδιαίου κυττάρου οδηγούν σε τοπικές αλλαγές στην πυκνότητα των ηλεκτρονίων και, επομένως, σε τοπικές αλλαγές στο χημικό δυναμικό του συστήματος. Σε αυτήν την περίπτωση, η επίδρασή τους είναι παρόμοια με αυτήν που διαπιστώθηκε στην εξίσωση (148), και έχουμε

$$\phi_{dp}(\mathbf{r}) = g(u_{xx} + u_{yy}), \quad (169)$$

και η επίδρασή τους είναι διαγώνια στο δείκτη του υποπλέγματος.

Η κοντινότερη-γειτονική αναπήδηση εξαρτάται από το μήκος του δεσμού του άνθρακα. Επομένως, οι ελαστικές πιέσεις που τροποποιούν το σχετικό προσανατολισμό των ατόμων οδηγούν επίσης σε ένα δραστικό εύρος πεδίου, που ενεργεί σε κάθε σημείο K μεμονωμένα, όπως πρωτοσυζητήθηκε σε σχέση με τον νανοσωλήνα άνθρακα (Suzuura και Ando, 2002b Mañes, 2007). Εξετάστε το ενδεχόμενο δύο άτομα άνθρακα που βρίσκονται σε δύο διαφορετικά υποπλέγματα στο μοναδιαίο κύτταρο \mathbf{R}_i . Η αλλαγή στο τοπικό μήκος του δεσμού μπορεί να γραφτεί ως

$$\delta u_i = \frac{\vec{\delta}_{ab}}{a} \cdot [\mathbf{u}_A(\mathbf{R}_i) - \mathbf{u}_B(\mathbf{R}_i + \vec{\delta}_{ab})]. \quad (170)$$

Οι τοπικές μετατοπίσεις των ατόμων στο μοναδιαίο κύτταρο μπορούν να σχετίζονται με το $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ από (Ando, 2006a)

$$(\vec{\delta}_{ab} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \kappa^{-1} (\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B), \quad (171)$$

όπου κ είναι μια αδιάστατη ποσότητα η οποία εξαρτάται από τις μικροσκοπικές λεπτομέρειες. Οι μεταβολές στο μήκος δεσμών οδηγούν σε αλλαγές στο εύρος αναπήδησης,

$$t_{ij} \approx t_{ij}^0 + \frac{\partial t_{ij}}{\partial a} \delta u_i, \quad (172)$$

και μπορούμε να γράψουμε ότι

$$\delta t^{(ab)}(\mathbf{r}) \approx \beta \frac{\delta u(\mathbf{r})}{a}, \quad (173)$$

όπου

$$\beta = \frac{\partial t^{(ab)}}{\partial \ln(a)}. \quad (174)$$

Αντικαθιστώντας την εξίσωση (170) με την εξίσωση (173) και το τελικό αποτέλεσμα που θα πάρουμε με την εξίσωση (147), βρίσκουμε ότι (Ando, 2006a)

$$A_x^{(s)} = \frac{3}{4}\beta\kappa(u_{xx} - u_{yy}), \quad A_y^{(s)} = \frac{3}{2}\beta\kappa u_{xy}. \quad (175)$$

Υποθέτουμε ότι οι πιέσεις που προκαλούνται από έναν κυματισμό με διάσταση l και κλίμακα ύψους h ως $u_{ij} \sim (h/l)^2$. Κατόπιν, χρησιμοποιώντας $\beta/v_F \approx a^{-1} \sim 1 \text{ \AA}^{-1}$, διαπιστώνουμε ότι η συνολική ροή μέσω ενός κυματισμού είναι

$$\Phi \approx \frac{h^2}{al}. \quad (176)$$

Για κυματισμούς τέτοιους ώστε $h \sim 1 \text{ nm}$ και $l \sim 20 \text{ nm}$, αυτή η εκτίμηση δίνει $\Phi \sim 10^{-1}\Phi_0$, σε λογική συμφωνία με τις εκτιμήσεις του Morozov και άλλων (2006).

Ο τανυστής πίεσης πρέπει να ικανοποιήσει ορισμένους πρόσθετους περιορισμούς, καθώς προέρχεται από ένα διανυσματικό πεδίο μετατόπισης. Αυτοί οι περιορισμοί καλούνται καταστάσεις συμβατότητας Saint-Venant (Landau και Lifshitz, 1959),

$$W_{ijkl} = \frac{\partial u_{ij}}{\partial x_k \partial x_l} + \frac{\partial u_{kl}}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{\partial u_{il}}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial u_{jk}}{\partial x_i \partial x_l} = 0. \quad (177)$$

Μια ελαστική παραμόρφωση αλλάζει τις αποστάσεις στο κρυσταλλικό πλέγμα και μπορεί να θεωρηθεί ως μια αλλαγή στη μέτρηση,

$$g_{ij} = \delta_{ij} + u_{ij}. \quad (178)$$

Οι εξισώσεις συμβατότητας (177) είναι ισοδύναμες με τον προϋπόθεση ότι ο τανυστής καμπυλότητας που προέρχεται από την εξίσωση (178) είναι μηδέν. Επομένως, μια καθαρά ελαστική παραμόρφωση δεν μπορεί να προκαλέσει ενδογενή καμπυλότητα στο φύλλο, το οποίο προκύπτει μόνο από τα τοπολογικά ελαττώματα. Τα δραστικά πεδία που συνδέονται με τις ελαστικές πιέσεις μπορούν να είναι μεγάλα (Morozov και άλλοι, 2006), οδηγώντας σε σημαντικές αλλαγές στις ηλεκτρονικές κυματοσυναρτήσεις. Μια ανάλυση της προκύπτουσας κατάστασης, και των πιθανών ασταθειών που μπορούν να προκύψουν, μπορεί να βρεθεί από τον Guinea και άλλους (2008).

3. Τυχαία διαμετρήματα πεδίων

Η προηγούμενη συζήτηση υποδηλώνει ότι τα δραστικά πεδία που συνδέονται με τα ελαττώματα του πλέγματος μπορούν να τροποποιήσουν σημαντικά τις ηλεκτρονικές ιδιότητες. Αυτό συμβαίνει όταν δεν αλλάζουν αισθητά τα πεδία σε κλίμακες που είναι συγκρίσιμες με το (δραστικό) μαγνητικό μήκος. Το γενικό πρόβλημα των τυχαίων διαμετρημάτων των πεδίων για τα φερμιόνια Dirac έχει αναλυθεί εκτενώς πριν από το τρέχον ενδιαφέρον για το γραφένιο, δεδομένου ότι το θέμα είναι επίσης σχετικό για το IQHE (Ludwig και άλλοι, 1994) και την υπεραγωγιμότητα των d -κυμάτων (Nersesyan και άλλοι, 1994). Η φύση ενός ηλεκτρονίου αυτού του δισδιάστατου προβλήματος το καθιστά πιθανό, στην ενέργεια Dirac, να χαρτογραφηθεί επάνω σε πρότυπα αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων σε μια διάσταση, όπου πολλά ακριβή αποτελέσματα μπορούν να ληφθούν (Castillo και άλλοι, 1997). Η χαμηλής-ενέργειας πυκνότητα των καταστάσεων $\rho(\omega)$ αποκτά έναν ανώμαλο εκθέτη $\rho(\omega) \propto |\omega|^{1-\Delta}$, όπου $\Delta > 0$. Η πυκνότητα των καταστάσεων ενισχύεται κοντά στην ενέργεια Dirac, που αντικατοπτρίζει την τάση της αναταραχής για να κλείσει τα κενά. Για τις αρκούντως μεγάλες τιμές του τυχαίου πλάτους πεδίου, μια μετάπτωση φάσης είναι επίσης

πιθανή (Chamon και άλλοι, 1996; Horovitz και Doussal, 2002).

Η θεωρία αναταραχής δείχνει ότι τα τυχαία πλάτη του πεδίου είναι μια οριακή αναταραχή στο σημείο Dirac, που οδηγεί σε λογαριθμικές αποκλίσεις. Αυτές οι αποκλίσεις τείνουν να έχουν το αντίθετο πρόσημο σε σχέση με εκείνες που προκαλούνται από την αλληλεπίδραση Coulomb (δείτε την ενότητα V.B). Κατά συνέπεια, η ανάλυση των αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων, μιας ομάδας επανακανονικοποίησης (RG), σε έναν τυχαίο πλάτος πεδίου, υποδεικνύει τη δυνατότητα μη-ασήμαντων φάσεων (Stauber και άλλοι, 2005; Aleiner και Efetov, 2006; Altland, 2006; Dell'Anna, 2006; Foster και Ludwig, 2006a, 2006b; Nomura και άλλοι, 2007; Khveshchenko, 2008), όπου οι αλληλεπιδράσεις και η αναταραχή ακυρώνουν η μια την άλλη.

Z. Ζεύξη με μαγνητικές προσμείξεις

Οι μαγνητικές προσμείξεις στο γραφένιο μπορούν να εισαχθούν χημικά μέσω εναποθέσεως και την παρεμβολής (Calandra και Mauri, 2007; Uchoa και άλλοι, 2008), ή αυτο-παραγόμενες από την εισαγωγή των ελαττωμάτων (Kumazaki και Hirashima, 2006, 2007). Η ενεργειακή εξάρτηση της πυκνότητας των καταστάσεων στο γραφένιο οδηγεί σε αλλαγές στο σχηματισμό ενός συντονισμού Kondo μεταξύ μιας μαγνητικής πρόσμειξης και των ηλεκτρονίων του γραφενίου. Η εξαφάνιση της πυκνότητας των καταστάσεων στην ενέργεια Dirac συνεπάγεται ότι στην κατάσταση εδάφους δεν διαμορφώνεται μια φανέλα Kondo εκτός αν η ζεύξη ανταλλαγής υπερβαίνει μια κρίσιμη τιμή, της τάξεως του εύρους ζώνης των ηλεκτρονίων, ένα πρόβλημα που έχει ήδη μελετηθεί σχετικά με τις μαγνητικές προσμείξεις στους υπεραγωγούς d-κύματος (Cassanello και Fradkin, 1996, 1997; Polkovnikov και άλλοι, 2001; Polkovnikov, 2002; Fritz και άλλοι, 2006). Για τις ασθενείς ζεύξεις ανταλλαγής, η μαγνητική πρόσμειξη παραμένει μη-προστατευμένη. Μια εξωτερική πύλη αλλάζει το χημικό δυναμικό, επιτρέποντας τη ρύθμιση του συντονισμού Kondo (Sengupta και Baskaran, 2008). Η κατάσταση αλλάζει σημαντικά εάν λαμβάνεται υπόψη το κλιμακωτό δυναμικό που προκαλείται από τη μαγνητική πρόσμειξη. Αυτό το δυναμικό που μπορεί να είναι συγκρίσιμο με το εύρος ζώνης επιτρέπει το σχηματισμό μεσαίου-χάσματος καταστάσεων και αλλάζει τη μετατόπιση φάσης που συνδέεται με τη διασπορά περιστροφής (Hentschel και Guinea, 2007). Αυτές οι μετατοπίσεις φάσης έχουν μια αδύναμη λογαριθμική εξάρτηση από το χημικό δυναμικό, και μπορεί να υπάρξει ένας συντονισμός Kondo, ακόμη και κοντά στην ενέργεια Dirac.

Η αλληλεπίδραση RKKY μεταξύ των μαγνητικών προσμείξεων είναι επίσης τροποποιημένη στο γραφένιο. Στα πεπερασμένα γεμίσματα, η έλλειψη σκέδασης μιας εσω-κοιλιάδας προς τα πίσω οδηγεί σε μείωση των ταλαντώσεων Friedel, οι οποίες φθίνουν ως $\sin(2kr)/|r|^3$ (Ando, 2006b; Cheianov και Fal'ko, 2006; Wunsch και άλλοι, 2006). Αυτό το φαινόμενο οδηγεί σε μια αλληλεπίδραση RKKY με πεπερασμένα γεμίσματα, τα οποία ταλαντεύονται και φθίνουν ως $|r|^{-3}$. Όταν η διασπορά της ενδο-κοιλιάδας συμπεριλαμβάνεται, η αλληλεπίδραση επανέρχεται στη συνήθη εξάρτηση από την απόσταση σε δύο διαστάσεις $|r|^{-2}$ (Cheianov και Fal'ko, 2006). Τα μισο-γεμισμένα εκτεταμένα ελαττώματα οδηγούν σε μια αλληλεπίδραση RKKY με μια εξάρτηση $|r|^{-3}$ (Vozmediano και άλλοι, 2005; Dugaev και άλλοι, 2006). Αυτή η συμπεριφορά αλλάζει όταν εντοπίζεται η πρόσμειξη δυναμικού σε ατομικές κλίμακες (Brey και άλλοι, 2007; Saremi, 2007), ή για τις άκρως συμμετρικές ζεύξεις (Saremi, 2007).

Η. Ασθενής και ισχυρός εντοπισμός

Σε επαρκή συστήματα καθαρισμού, όπου το μήκος κύματος Fermi είναι πολύ μικρότερο από το μέσο ελεύθερο μονοπάτι $k\ell \gg 1$, η ηλεκτρονική μεταφορά μπορεί να περιγραφεί με τους κλασικούς όρους, υποθέτοντας ότι τα ηλεκτρόνια ακολουθούν τις καθορισμένες με σαφήνεια τροχιές. Στις χαμηλές θερμοκρασίες, όταν τα ηλεκτρόνια παραμένουν αναλλοίωτα στις μεγάλες αποστάσεις, τα κβαντικά φαινόμενα οδηγούν σε διορθώσεις της παρεμβολής στις κλασικές εκφράσεις για την αγωγιμότητα, και την αποκατάσταση ενός ασθενούς-εντοπισμού (Bergman, 1984; Chakravarty και Schmid, 1986). Αυτές οι διορθώσεις οφείλονται συνήθως στη θετική παρεμβολή μεταξύ δύο μονοπατιών κατά μήκος των κλειστών βρόγχων, που διαβαίνουν αντίθετες κατευθύνσεις. Κατά συνέπεια, ενισχύεται η πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να πηγαίνει πίσω στην προέλευσή του, έτσι ώστε οι κβαντικές διορθώσεις να μειώνουν την αγωγιμότητά του. Αυτές οι παρεμβολές καταστέλλονται για μακρύτερα μονοπάτια από το μήκος αλλαγής της φάσης (l_ϕ) που καθορίζεται από τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ του ηλεκτρονίου και του περιβάλλοντος. Τα φαινόμενα παρεμβολής μπορούν επίσης να κατασταλούν από τα μαγνητικά πεδία που διασπούν τη χρονική ανάστροφη συμμετρία και προσθέτουν μια τυχαία σχετική φάση στη διαδικασία που συζητήθηκε παραπάνω. Συνεπώς, στα περισσότερα μέταλλα, όταν εφαρμόζεται ένα μικρό μαγνητικό πεδίο (αρνητική μαγνητοαντίσταση) η αγωγιμότητα αυξάνεται.

Το γραφένιο είναι ειδικό από αυτή την άποψη, λόγω της στροφικότητας των ηλεκτρονίων του. Η κίνηση κατά μήκος μιας κλειστής διαδρομής προκαλεί μια αλλαγή στο σχετικό βάρος των δύο συστατικών της κυματοσυνάρτησης, που οδηγεί σε μια νέα φάση, η οποία συμβάλλει στις διαδικασίες παρεμβολής. Εάν το ηλεκτρόνιο διασχίζει ένα μονοπάτι χωρίς να διαχέεται από μια κοιλάδα σε άλλη, αυτή η φάση (Berry) αλλάζει το πρόσημο του εύρους ενός μονοπατιού σε σχέση με το χρονικά-ανεστραμμένο μονοπάτι. Κατά συνέπεια, τα δύο μονοπάτια παρεμβαίνουν καταστροφικά, οδηγώντας σε μια καταστολή της σκέδασης προς τα πίσω (Suzuura και Ando, 2002a). Παρόμοιες διαδικασίες πραγματοποιούνται σε υλικά με ισχυρή ζεύξη περιστροφής-τροχιάς, καθώς η κατεύθυνση περιστροφής αλλάζει κατά μήκος της πορείας του ηλεκτρονίου (Bergman, 1984; Chakravarty και Schmid, 1986). Επομένως, εάν η σκέδαση μεταξύ των κοιλάδων στο γραφένιο μπορεί να παραλειφθεί, περιμένει κανείς μια θετική μαγνητοαντίσταση, δηλαδή, έναν ασθενή αντι-εντοπισμό. Γενικά, η ελαστική διασπορά της εσω-κοιλάδας και της ενδο-κοιλάδας μπορεί να περιγραφεί με όρους δύο διαφορετικών χρόνων σκέδασης τ_{intra} και τ_{inter} , έτσι ώστε εάν $\tau_{intra} \ll \tau_{inter}$, αναμένει κανείς τις ασθενείς διαδικασίες αντι-εντοπισμού, ενώ εάν $\tau_{inter} \ll \tau_{intra}$, θα πραγματοποιηθεί ο συνηθισμένος ασθενής εντοπισμός. Πειραματικά, τα φαινόμενα εντοπισμού είναι πάντα ισχυρώς καταστέλλόμενα κοντά στο σημείο Dirac αλλά μπορούν μερικώς ή, σε σπάνιες περιπτώσεις, να ανακτηθούν πλήρως στις υψηλές συγκεντρώσεις φορέα, ανάλογα με ένα συγκεκριμένο δείγμα μονού στρώματος (Morozov και άλλοι, 2006; Tikhonenko και άλλοι, 2008). Τα πολυστρωματικά δείγματα εμφανίζουν θετική μαγνητοαντίσταση στα υψηλότερα μαγνητικά πεδία, η οποία μπορεί να αποδίδεται στις κλασικές αλλαγές στην κατανομή του ρεύματος εξαιτίας μιας κάθετης βαθμίδας συγκέντρωσης (Morozov και άλλοι, 2006) και των φαινομένων αντι-εντοπισμού (Wu και άλλοι, 2007).

Η διάδοση ενός ηλεκτρονίου ελλείψει της διασποράς της ενδο-κοιλάδας μπορεί να επηρεαστεί από τα δραστικά πλάτη του πεδίου που προκαλούνται από τα ελαττώματα του πλέγματος και την καμπυλότητα. Αυτοί τα πεδία μπορούν να καταστείλουν τις διορθώσεις παρεμβολής στην αγωγιμότητα (Morozov και άλλοι, 2006; Morpurgo και Guinea, 2006). Επιπλέον, η περιγραφή των ελεύθερων ηλεκτρονίων Dirac, είναι έγκυρη, μονάχα κοντά στο σημείο ουδετερότητας. Η ενέργεια Fermi αποκτά μια τρίγωνη παραμόρφωση μακριά από το σημείο Dirac, και διασκορπίζεται προς τα πίσω μέσα σε κάθε κοιλάδα που πλέον δεν καταστέλλεται εντελώς (McCann και άλλοι, 2006), οδηγώντας σε περαιτέρω καταστολή των φαινομένων αντι-εντοπισμού σε υψηλά ντοπαρίσματα. Τέλος, η κλίση των εξωτερικών δυναμικών προκαλεί μια μικρή ασυμμετρία μεταξύ των δύο υποπλεγμάτων (Morpurgo και Guinea, 2006). Αυτή η επίδραση θα συμβάλει επίσης στη μείωση του αντι-εντοπισμού, χωρίς να δώσει αφορμή για φαινόμενα εντοπισμού.

Η παραπάνω ανάλυση πρέπει να τροποποιηθεί για μια διπλοστιβάδα γραφενίου. Παρόλο που η

περιγραφή των ηλεκτρονικών καταστάσεων απαιτεί ένα σπινόριο δύο-συνιστωσών, η συνολική φάση γύρω από έναν κλειστό βρόχο είναι 2π , και η σκέδαση προς τα πίσω δεν καταστέλλεται (Kchedzhi και άλλοι, 2007). Αυτό το αποτέλεσμα είναι σύμφωνο με τις πειραματικές παρατηρήσεις, οι οποίες παρουσιάζουν την ύπαρξη ασθενών φαινομένων εντοπισμού σε μια διπλοστιβάδα (Gorbachev και άλλοι, 2007).

Όταν η ενέργεια Fermi είναι στο σημείο Dirac, μια αντίστοιχη ανάλυση δείχνει ότι η αγωγιμότητα πλησιάζει μια καθολική τιμή της τάξεως e^2/h (Fradkin, 1986a, 1986b). Αυτό το αποτέλεσμα είναι έγκυρο όταν η διασπορά της ενδο-κουλάδας παραμελείται (Ostrovsky και άλλοι, 2006, 2007; Ryu και άλλοι, 2007). Ο εντοπισμός προκαλείται όταν περιλαμβάνονται αυτοί οι όροι (Aleiner και Efetov, 2006; Altland, 2006), όπως επιβεβαιώνεται και από τους αριθμητικούς υπολογισμούς (Louis και άλλοι, 2007). Τα φαινόμενα αλληλεπίδρασης τείνουν να καταστείλουν τα φαινόμενα αναταραχής. Το ίδιο αποτέλεσμα, δηλαδή, μια αγωγιμότητα της τάξεως e^2/h , επιτυγχάνεται για τις διαταραγμένες διπλοστιβάδες γραφενίου όπου ένας υπολογισμός οδηγεί σε καθολική αγωγιμότητα στο σημείο ουδετερότητας (Nilsson, Castro Neto, Guinea, και άλλοι, 2006; Katsnelson, 2007c; Nilsson και άλλοι, 2008). Σε μια προκατειλημμένη διπλοστιβάδα γραφενίου, η παρουσία προσμείξεων οδηγεί στην εμφάνιση ουρών προσμείξεων στην πυκνότητα των καταστάσεων λόγω της δημιουργίας του μεσοδιαστήματος καταστάσεων, που είναι ευαίσθητο στο εφαρμοζόμενο ηλεκτρικό πεδίο που ανοίγει το χάσμα μεταξύ των ζωνών αγωγιμότητας και σθένους (Nilsson και Castro Neto, 2007).

Επισημαίνουμε ότι οι περισσότεροι υπολογισμοί των ιδιοτήτων μεταφοράς υποθέτουν τον αυτο-υπολογισμό του μέσου όρου, δηλαδή, μπορεί κανείς να ανταλλάξει ένα πρόβλημα χωρίς μεταφραστική σταθερότητα, με ένα δραστικό μέσο σύστημα με απόσβεση. Αυτή η διαδικασία λειτουργεί μόνο όταν η αναταραχή είναι ασθενής και το σύστημα είναι στη μεταλλική του φάση. Κοντά στην εντοπισμένη φάση που αυτή η διαδικασία αναλύει, το ίδιο το σύστημα διαιρείται σε περιοχές διαφορετικού χημικού δυναμικού και πρέπει κανείς να σκεφτεί τη μεταφορά στον πραγματικό χώρο, που περιγράφεται συνήθως με βάση τη διήθηση (Cheianov, Fal'ko, Altshuler, και άλλοι, 2007; Shklovskii, 2007). Οι μετρήσεις του τρανζίστορ μονού ηλεκτρονίου (SET) για το γραφένιο δείχνουν ότι αυτό φαίνεται να είναι σε μισο-γεμισμένη κατάσταση στο γραφένιο (Martin και άλλοι, 2008).

Τέλος, επισημαίνουμε ότι οι σωροί γραφενίου πάσχουν από μια άλλη πηγή αναταραχής, δηλαδή, αναταραχή του άξονα c , η οποία οφείλεται είτε στις προσμείξεις μεταξύ των στρωμάτων είτε στην περιστροφή των επιπέδων του γραφενίου του ενός σε σχέση με το άλλο. Σε κάθε περίπτωση, και η εντός-επιπέδου αλλά και η εκτός-επιπέδου μεταφορά επηρεάζονται άμεσα. Αυτό το είδος αναταραχής έχει παρατηρηθεί πειραματικά με διάφορες τεχνικές (Bar και άλλοι, 2007; Hass, Varchon, Millán-Otoya, και άλλοι, 2008). Στην περίπτωση της διπλοστιβάδας, η περιστροφή των επιπέδων αλλάζει ουσιαστικά το φάσμα που αποκαθιστά την περιγραφή των φερμιονίων Dirac (Lopes dos Santos και άλλοι, 2007). Οι ιδιότητες μεταφοράς στην εκτός-του-επιπέδου κατεύθυνση καθορίζονται από τον τρέχοντα χειριστή ενδιάμεσων στρωμάτων $\hat{J}_{n,n+1} = it \Sigma (c_{A,n,s}^\dagger c_{A,n+1,s} - c_{A,n+1,s}^\dagger c_{A,n,s})$, όπου το n είναι ο δείκτης στρώματος και όπου A είναι ένας γενικός δείκτης που προσδιορίζει τις περιοχές που συνδέονται με το ενδιάμεσο στρώμα αναπήδησης t . Εάν εξετάσουμε μόνο την αναπήδηση μεταξύ των κοντινότερων-γειτονικών περιοχών στα διαδοχικά στρώματα, αυτές οι περιοχές ανήκουν σε ένα από τα δύο υποπλέγματα σε κάθε στρώμα.

Σε μια πολυστρωματική συσσώρευση Bernal, αυτές οι συνδεδεμένες περιοχές είναι αυτές όπου η πυκνότητα των καταστάσεων εξαφανίζεται σε μηδενική ενέργεια, όπως συζητήθηκε παραπάνω. Επομένως, ακόμη και σε ένα καθαρό σύστημα, ο αριθμός των αγωγίμων καναλιών με κάθετη κατεύθυνση προς τα στρώματα εξαφανίζεται στη μηδενική ενέργεια (Nilsson, Castro Neto, Guinea, και Peres, 2006; Nilsson και άλλοι, 2008). Αυτή η κατάσταση θυμίζει τις εντός-του-επιπέδου ιδιότητες μεταφοράς ενός μονού-στρώματος γραφενίου. Παρόμοια με την τελευταία περίπτωση, η αξιόπιστη προσέγγιση του Born, για μια μικρή συγκέντρωση προσμείξεων οδηγεί σε μια πεπερασμένη αγωγιμότητα, η οποία γίνεται ανεξάρτητη από τον αριθμό των προσμείξεων.

Θ. Μεταφορά κοντά στο σημείο Dirac

Στο καθαρό γραφένιο, ο αριθμός των διαθέσιμων καναλιών για τη μεταφορά ηλεκτρονίων μειώνεται καθώς το χημικό δυναμικό προσεγγίζει την ενέργεια Dirac. Κατά συνέπεια, η αγωγιμότητα μέσω μιας καθαρής κορδέλας γραφενίου είναι το πολύ $4e^2/h$, όπου ο συντελεστής 4 αντιπροσωπεύει την περιστροφή και την κοιλιάδα εκφυλισμού. Επιπλέον, μόνο μια από τις τρεις πιθανές καθαρές κορδέλες γραφενίου έχει ένα κανάλι αγωγιμότητας στην ενέργεια Dirac. Τα άλλα δύο-τρίτα είναι ημιαγώγιμα, με ένα κενό της τάξεως v_F/W , όπου το W είναι το πλάτος. Αυτό το αποτέλεσμα είναι μια συνέπεια της επιπρόσθετης περιοδικότητας που εισήγαγαν οι κυματοσυναρτήσεις στα σημεία K και K' της ζώνης Brillouin, ανεξάρτητα από τις συνοριακές συνθήκες.

Μια ευρεία κορδέλα γραφενίου επιτρέπει πολλά κανάλια, τα οποία μπορούν να ταξινομηθούν περίπου από την κάθετη ορμή προς τον άξονα της κορδέλας, k_y . Στην ενέργεια Dirac, η μεταφορά μέσω αυτών των καναλιών αναστέλλεται λόγω της ύπαρξης ενός κενού $\Delta k_y = v_F k_y$. Η μεταφορά μέσω αυτών των καναλιών καταστέλλεται από έναν παράγοντα της τάξεως του $e^{-k_y L}$, όπου L είναι το μήκος της κορδέλας. Ο αριθμός των εγκάρσιων καναλιών αυξάνεται κατά W/a , όπου W είναι το πλάτος της κορδέλας και a είναι το μήκος της τάξεως του χώρου του πλέγματος. Οι επιτρεπόμενες τιμές του k_y είναι $\alpha n_y/W$, όπου n_y είναι ένας ακέραιος αριθμός. Επομένως, για μια κορδέλα που $W \gg L$, υπάρχουν πολλά κανάλια που ικανοποιούν $k_y L \ll 1$. Η μεταφορά μέσω αυτών των καναλιών δεν είναι έντονα εμποδισμένη, και η συμβολή τους κυριαρχεί όταν η ενέργεια Fermi βρίσκεται κοντά στο σημείο Dirac. Η αγωγιμότητα που προκύπτει από αυτά τα κανάλια δίνεται από (Katsnelson, 2006b; Tworzydło και άλλοι, 2006)

$$G \sim \frac{e^2 W}{h 2\pi} \int dk_y e^{-k_y L} \sim \frac{e^2 W}{h L}. \quad (179)$$

Η μετάδοση για $k_y=0$ είναι 1, λόγω της απουσίας σκέδασης προς τα πίσω στο γραφένιο, για κάθε εμπόδιο που δεν προκαλεί διασπορά ενδο-κοιλιάδας (Katsnelson και άλλοι, 2006). Η μετάδοση μιας δοσμένης κλίμακας καναλιών είναι: $T(k_y) = 1/\cosh^2(k_y L/2)$.

Η εξίσωση (179) δείχνει ότι η συμβολή από όλα τα εγκάρσια κανάλια οδηγεί σε μια αγωγιμότητα που κλιμακώνεται, παρόμοια με μια συνάρτηση του μήκους και του πλάτους του συστήματος, ως αγωγιμότητα ενός διάχυτου μετάλλου. Επιπλέον, η τιμή της δραστηρικής αγωγιμότητας είναι της τάξεως του e^2/h . Μπορεί επίσης να αποδειχθεί ότι ο θόρυβος της βολής εξαρτάται από το ρεύμα με τον ίδιο τρόπο όπως σε ένα διάχυτο μέταλλο. Μια λεπτομερής ανάλυση των πιθανών συνοριακών συνθηκών στις επαφές και την επιρροή τους για τα παροδικά κύματα μπορούμε να βρούμε στους Robinson και Schomerus (2007) και Schomerus (2007). Οι υπολογισμοί που οδηγούν στην εξίσωση (179) μπορεί να επεκταθούν σε μια διπλοστιβάδα γραφενίου. Η αγωγιμότητα είναι, πάλι, ένα άθροισμα των όρων που προκύπτουν από τα παροδικά κύματα μεταξύ των δύο επαφών, και είναι εξαρτημένη από τις διαστάσεις του δείγματος μιας δισδιάστατης (2D) αγωγιμότητας της τάξεως του e^2/h (Snyman και Beenakker, 2007), αν και υπάρχει ένα προ-συντελεστής που είναι δύο φορές μεγαλύτερος από εκείνον στο μονό στρώμα γραφενίου.

Ο υπολογισμός της αγωγιμότητας του καθαρού γραφενίου σε όρους των συντελεστών μετάδοσης, που χρησιμοποιεί τη μέθοδο Landauer, οδηγεί σε μια δραστηρική αγωγιμότητα που είναι ίση με την τιμή που λαμβάνεται για το χύμα γραφένιο χρησιμοποιώντας τις διαγραμματικές μεθόδους, ο τύπος Kubo (Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006b), στο όριο της μηδενικής συγκέντρωσης προσμείξεων και μηδενικού ντόπινγκ. Επιπλέον, αυτή η βιβλιογραφία παραμένει έγκυρη για την περίπτωση μιας διπλοστιβάδας χωρίς και με τριγωνικές επιδράσεις παραμόρφωσης (Koshino και Ando, 2006; Cserti, Csordés, και Dévid, 2007).

Η αναταραχή στην ενέργεια Dirac αλλάζει την αγωγιμότητα των κορδελών γραφενίου σε δύο αντίθετες κατευθύνσεις (Louis και άλλοι, 2007): (i) μια αρκετά ισχυρή αναταραχή, με τις περιορισμένους φάσματος συνεισφορές (ενδοκοιλιάδα), οδηγεί σε ένα εντοπισμένο σύστημα, όπου η αγωγιμότητα εξαρτάται εκθετικά από το μήκος των κορδελών, και (ii) στην ενέργεια Dirac, η αναταραχή επιτρέπει τα

μεσοδιαστήματα των καταστάσεων που μπορούν να ενισχύσουν την αγωγιμότητα που προκαλείται από τα παροδικά κύματα που συζητήθηκαν παραπάνω. Ένα κυμαινόμενο ηλεκτροστατικό δυναμικό μειώνει επίσης το δραστικό κενό για τα εγκάρσια κανάλια, ενισχύοντας περαιτέρω την αγωγιμότητα. Το πρόγραμμα αντήρησης διάνοιξης που μεσολάβησε από τα μεσοδιαστήματα των καταστάσεων προτάθηκε από τους αναλυτικούς υπολογισμούς (Titov, 2007). Η ενίσχυση της αγωγιμότητας από τις πιθανές διακυμάνσεις μπορεί επίσης να μελετηθεί ημιαναλυτικά. Ελλείψει του διασκορπισμού της ενδο-κοιλιάδας, αυτό οδηγεί σε μια δραστική αγωγιμότητα η οποία αυξάνεται με το μήκος κορδελών (San-Jose και άλλοι, 2007). Στην πραγματικότητα, αναλυτικές και αριθμητικές μελέτες (Bardarson και άλλοι, 2007; Nomura και άλλοι, 2007; San-Jose και άλλοι, 2007; Lewenkopf και άλλοι, 2008), δείχνουν ότι η αγωγιμότητα υπακούει σε μια καθολική κλιμάκωση με το μέγεθος L του πλέγματος,

$$\sigma(L) = \frac{2e^2}{h} [A \ln(L/\xi) + B], \quad (180)$$

όπου ξ είναι μια κλίμακα μήκους που σχετίζεται με μια σειρά αλληλεπιδράσεων και A και B είναι αριθμοί της τάξεως της μονάδας [$A \approx 0.17$ και $B \approx 0.23$ για ένα πλέγμα γραφενίου σε σχήμα ενός τετραγώνου L μεγέθους (Lewenkopf και άλλοι, 2008)]. Σημειώστε, επομένως, ότι η αγωγιμότητα είναι πάντα της τάξεως e^2/h και έχει μια ασθενή εξάρτηση από το μέγεθος.

I. Περιγραφή της εξίσωσης Boltzmann της συνεχούς (dc) μεταφοράς ενισχυμένου γραφενίου

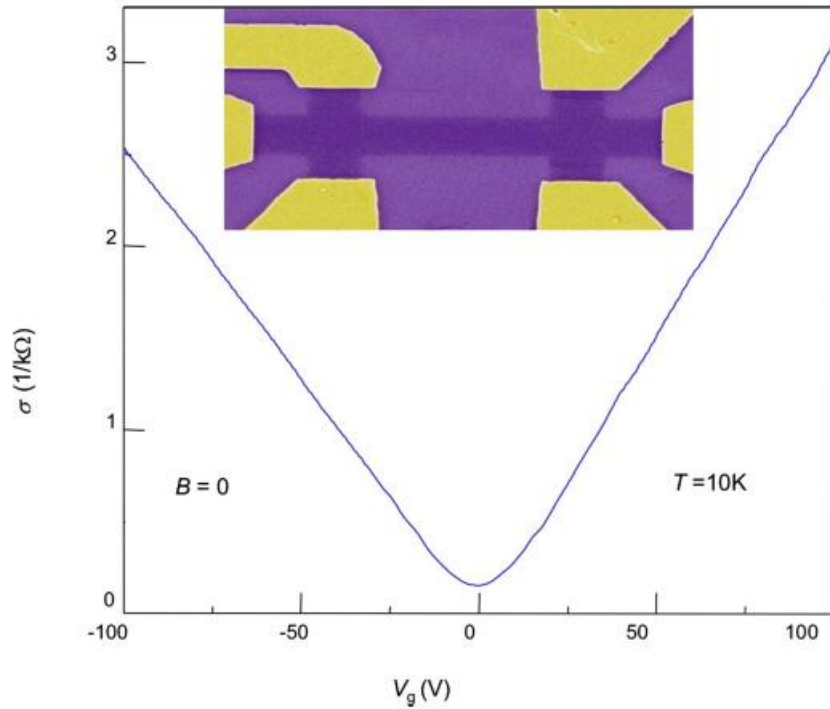
Έχει αποδειχθεί πειραματικά ότι η συνεχής αγωγιμότητα του γραφενίου εξαρτάται γραμμικά από το δυναμικό της εισόδου (Novoselov και άλλοι, 2004; Novoselov, Geim, Morozov, και άλλοι, 2005; Novoselov, Jiang, Schedin, και άλλοι, 2005), εκτός από πολύ κοντά στο σημείο ουδετερότητας (δείτε την εικόνα 30). Δεδομένου ότι το δυναμικό της εισόδου εξαρτάται γραμμικά από την ηλεκτρονική πυκνότητα n , κάποιο έχει μια αγωγιμότητα $\sigma \propto n$. Όπως φαίνεται από τους Shon και Ando (1998), εάν οι διασκορπιστές κυμαίνονται απότομα, η συνεχής αγωγιμότητα θα πρέπει να είναι ανεξάρτητη από την ηλεκτρονική πυκνότητα, σε αντίθεση με το πειραματικό αποτέλεσμα. Έχει αποδειχθεί (Ando, 2006b; Nomura και MacDonald, 2006, 2007) ότι, με την εξέταση ενός μηχανισμού σκέδασης, ο οποίος είναι βασισμένος στις καλυμμένες φορτισμένες προσμείξεις, είναι δυνατό να ληφθεί από μια προσέγγιση της εξίσωσης του Boltzmann μια αγωγιμότητα που ποικίλλει γραμμικά με την πυκνότητα σύμφωνα με το πειραματικό αποτέλεσμα (Ando, 2006b; Novikov, 2007b; Peres, Lopes dos Santos, και Stauber, 2007; Trushin και Schliemann, 2007; Katsnelson και Geim, 2008).

Η εξίσωση του Boltzmann έχει τη μορφή (Ziman, 1972)

$$-\mathbf{v}_k \cdot \nabla_r f(\epsilon_k) - e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_k \times \mathbf{H}) \cdot \nabla_k f(\epsilon_k) = - \left. \frac{\partial f_k}{\partial t} \right|_{\text{scatt}}. \quad (181)$$

Η λύση της εξίσωσης Boltzmann στη γενική μορφή της είναι δύσκολη κι επομένως πρέπει κανείς να στηριχθεί επάνω σε κάποια προσέγγιση. Το πρώτο βήμα προσέγγισης είναι να γραφτεί ως $f(\epsilon_k) = f^0(\epsilon_k) + g(\epsilon_k)$, όπου $f^0(\epsilon_k)$ είναι η συνάρτηση σταθερής-κατάστασης διανομής και το $g(\epsilon_k)$ θεωρείται μικρό. Εισάγοντας αυτήν την αρχική προσέγγιση μέσα στην εξίσωση (181) και διατηρώντας μόνο τους όρους που είναι γραμμικοί στα εξωτερικά πεδία, λαμβάνει κανείς τη γραμμικοποιημένη εξίσωση του Boltzmann (Ziman, 1972), η οποία είναι

$$-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \mathbf{v}_k \cdot \left[\left(-\frac{\epsilon_k - \zeta}{T} \right) \nabla_r T + e \left(\mathbf{E} - \frac{1}{e} \nabla_r \zeta \right) \right] = - \left. \frac{\partial f_k}{\partial t} \right|_{\text{scatt}} + \mathbf{v}_k \cdot \nabla_r g_k + e(\mathbf{v}_k \times \mathbf{H}) \cdot \nabla_k g_k. \quad (182)$$



Εικόνα 30. Αλλαγές στην αγωγιμότητα σ του γραφενίου με την μεταβαλλόμενη τάση εισόδου (V_g) και τη συγκέντρωση φορέων n . Εδώ το σ είναι ανάλογο προς το n . Σημειώστε ότι τα δείγματα με την υψηλότερη κινητικότητα ($>1 \text{ m}^2/\text{V s}$) κανονικά παρουσιάζουν μια υπογραμμική εξάρτηση, δείχνοντας πιθανώς την παρουσία διαφόρων τύπων διασκορπιστών. Ένθετο: Μικρογραφία σάρωσης ενός ηλεκτρονίου σε μια από τις πειραματικές συσκευές (τα “ψεύτικα” χρώματα ταιριάζουν με εκείνα που παρατηρήθηκαν στην ορατή οπτική). Η κλίμακα του μικρογραφίας δίνεται από το πλάτος της ράβδου του Hall,

όπου είναι $1 \mu\text{m}$. Προσαρμοσμένο από τους [Novoselov, Geim, Morozov, και άλλους, 2005](#).

Η δεύτερη προσέγγιση έχει να κάνει με τη μορφή του όρου σκέδασης. Η απλούστερη προσέγγιση είναι να εισαχθεί μια προσέγγιση χρονικής-χαλάρωσης,

$$-\left. \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_{\text{scatt}} \rightarrow \frac{\mathbf{g}_{\mathbf{k}}}{\tau_{\mathbf{k}}}, \quad (183)$$

όπου $\tau_{\mathbf{k}}$ είναι ο χρόνος χαλάρωσης, υποτιθέμενος για να είναι εξαρτώμενος της ορμής. Αυτή η εξάρτηση ορμής καθορίζεται φαινομενολογικά με τέτοιο τρόπο έτσι ώστε η εξάρτηση της αγωγιμότητας από την ηλεκτρονική πυκνότητα να συμφωνεί με τα πειραματικά στοιχεία. Η εξίσωση Boltzmann είναι βεβαίως άκυρη στο σημείο Dirac, αλλά δεδομένου ότι πολλά πειράματα εκτελούνται σε πεπερασμένη πυκνότητα φορέα, που ελέγχεται από μια εξωτερική τάση στην είσοδο, αναμένουμε την εξίσωση Boltzmann να δώσει αξιόπιστα αποτελέσματα εάν χρησιμοποιείται μια κατάλληλη μορφή για $\tau_{\mathbf{k}}$ ([Adam και άλλοι, 2007](#)).

Υπολογίζουμε το χρόνο χαλάρωσης Boltzmann $\tau_{\mathbf{k}}$ για δύο διαφορετικά δυναμικά σκέδασης:

- (i) μια Dirac δέλτα συνάρτηση δυναμικού και
- (ii) ένα δυναμικό Coulomb που δεν έχει υποστεί έλεγχο. Ο χρόνος χαλάρωσης $\tau_{\mathbf{k}}$ ορίζεται ως

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = n_i \int d\theta \int \frac{k' dk'}{(2\pi)^2} S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \theta), \quad (184)$$

όπου το n_i είναι συγκέντρωση προσμίξεων ανά μονάδα περιοχής, και το ποσοστό μετάβασης $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ δίνεται, από την προσέγγιση του Born:

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 2\pi |H_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}|^2 \frac{1}{v_F} \delta(k' - k), \quad (185)$$

όπου v_F είναι η διασπορά των φερμιονίων Dirac στο γραφένιο και το $H_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}$ ορίζεται ως

$$H_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) U_S(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (186)$$

με το $U_S(r)$ να είναι το δυναμικό σκέδασης και το $\psi_k(r)$ να είναι η ηλεκτρονική σπινωριακή κυματοσυνάρτηση ενός καθαρού φύλλου γραφενίου. Εάν το δυναμικό κυμαίνεται απότομα (Shon και Ando, 1998) του τύπου $U_S=U_0\delta(r)$, ο χρόνος χαλάρωσης Boltzmann δίνεται από

$$\tau_k = \frac{4v_F}{n_i v_0^2} \frac{1}{k}. \quad (187)$$

Αφ' ετέρου, εάν το δυναμικό είναι το δυναμικό Coulomb, δίνεται από $U_S(r)=eQ/4\pi\epsilon_0\epsilon r$ για τις φορτισμένες προσμείξεις του φορτίου Q , ο χρόνος χαλάρωσης δίνεται από

$$\tau_k = \frac{v_F}{u_0^2} k, \quad (188)$$

όπου $u_0^2=n_i Q^2 e^2/16\epsilon_0^2 \epsilon^2$. Όπως υποστηρίζεται παρακάτω, η φαινομενολογία των φερμιονίων Dirac συνεπάγεται ότι η σκέδαση στο γραφένιο πρέπει να είναι της μορφής της εξίσωσης (188).

Εντός της χρονικής προσέγγισης χαλάρωσης, η λύση της γραμμικής εξίσωσης Boltzmann όταν εφαρμόζεται ένα ηλεκτρικό πεδίο στο δείγμα είναι

$$g_k = - \frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} e \tau_k \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{E}, \quad (189)$$

και το ηλεκτρικό ρεύμα διαβάζει (συμπεριλαμβανομένων των δεικτών περιστροφής και κοιλάδας)

$$\mathbf{J} = \frac{4}{A} \sum_k e \mathbf{v}_k g_k. \quad (190)$$

Δεδομένου ότι στις χαμηλές θερμοκρασίες ισχύει η ακόλουθη σχέση $-\partial f^0(\epsilon_k)/\partial \epsilon_k \rightarrow \delta(\mu - u_F k)$, μπορεί κάποιος να υποθέσει την εξίσωση (188) όπου το k μετριέται σε σχέση με στο σημείο Dirac, η ηλεκτρονική αγωγιμότητα αποδεικνύεται ότι είναι

$$\sigma_{xx} = 2 \frac{e^2}{h} \frac{\mu^2}{u_0^2} = 2 \frac{e^2}{h} \frac{\pi v_F^2}{u_0^2} n, \quad (191)$$

όπου u_0 είναι η ισχύς του δυναμικού σκέδασης (με διαστάσεις ενέργειας). Η ηλεκτρονική αγωγιμότητα εξαρτάται γραμμικά από την πυκνότητα των ηλεκτρονίων, σύμφωνα με τα πειραματικά δεδομένα. Τονίζουμε ότι το δυναμικό Coulomb είναι ένας πιθανός μηχανισμός που παράγει ένα ποσοστό σκέδασης της μορφής (188), αλλά δεν αποκλείουμε ότι μπορούν να υπάρξουν κι άλλοι μηχανισμοί [δείτε, για παράδειγμα, Katsnelson και Geim (2008)].

ΙΑ. Μαγνητομεταφορά και καθολική αγωγιμότητα

Η περιγραφή των ιδιοτήτων μαγνητομεταφοράς των ηλεκτρονίων σε ένα διαταραγμένο κυψελωτό πλέγμα είναι σύνθετη λόγω των φαινομένων παρεμβολής που συνδέονται με το πρόβλημα Hofstadter (Gumbs και Fekete, 1997). Απλοποιούμε το πρόβλημά μας με την περιγραφή των ηλεκτρονίων στο κυψελωτό δικτυωτό πλέγμα ως φερμιόνια Dirac στην προσέγγιση συνέχειας, που είδαμε στην ενότητα II.B. Επιπλέον, εστιάζουμε μόνο στο πρόβλημα του περιορισμένου φάσματος σκέδασης στο ενιαίο όριο δεδομένου ότι σε αυτό το σύστημα λαμβάνονται πολλά αναλυτικά αποτελέσματα (Kumazaki και Hirashima, 2006; Pereira και άλλοι, 2006; Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a; Skrypnik και Loktev, 2006, 2007; Mariani και άλλοι, 2007; Pereira, Lopes dos Santos, και Castro Neto, 2008). Το πρόβλημα της μαγνητομεταφοράς παρουσία των προσμείξεων Coulomb, όπως συζητήθηκε, εξακολουθεί να είναι ακόμη ένα ανοικτό ερευνητικό πρόβλημα. Μια παρόμοια προσέγγιση εξετάστηκε από τον Abrikosov στην μελέτη

του για την κβαντική μαγνητοαντίσταση των μη στοιχειομετρικών χαλκογονιδίων (Abrikosov, 1998). Στην περίπτωση του γραφενίου, η δραστική Χαμιλτονιανή περιγραφή των φερμιονίων Dirac σε ένα μαγνητικό πεδίο (συμπεριλαμβανομένης της αναταραχής) μπορεί να γραφτεί ως $H=H_0+H_i$, όπου το H_0 δίνεται από την εξίσωση (5) και H_i είναι το δυναμικό προσμείξεως που δίνεται από (Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a)

$$H_i = V \sum_{j=1}^{N_i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \mathbf{I}. \quad (192)$$

Η διατύπωση του προβλήματος στη δεύτερη κβαντοποίηση απαιτεί τη λύση H_0 , η οποία έγινε στην ενότητα II.1. Οι χειριστές πεδίου, κοντά στο σημείο K , ορίζονται ως (ο δείκτης περιστροφής παραλείπεται για λόγους απλότητας)

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_k \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}} \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_0(y) \end{pmatrix} c_{k,-1} + \sum_{n,k,\alpha} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2L}} \begin{pmatrix} \phi_n(y - kl_B^2) \\ \phi_{n+1}(y - kl_B^2) \end{pmatrix} c_{k,n,\alpha}, \quad (193)$$

όπου το $c_{k,n,\alpha}$ καταστρέφει ένα ηλεκτρόνιο στη ζώνη $\alpha=\pm 1$, με το ενεργειακό επίπεδο n και καθοδηγώντας κεντρικά το kl_B^2 , το $c_{k,-1}$ καταστρέφει ένα ηλεκτρόνιο στο μηδενικό επίπεδο Landau. Η συχνότητα κυκλοτρονίου δίνεται από την εξίσωση (96). Το άθροισμα πάνω από $n=0,1,2,\dots$ κόβεται στο n_0 που δίνεται από το $E(1,n_0)=W$, όπου το W είναι της τάξης του ηλεκτρονικού εύρους ζώνης. Σε αυτήν την αναπαράσταση, το H_0 γίνεται διαγώνιο, οδηγώντας στις συναρτήσεις του Green που είναι της μορφής

$$G_0(k,n,\alpha;i\omega) = \frac{1}{i\omega - E(\alpha,n)}, \quad (194)$$

όπου

$$E(\alpha,n) = \alpha\omega_c \sqrt{n} \quad (195)$$

είναι τα επίπεδα Landau για αυτό το πρόβλημα ($\alpha=\pm 1$ οι δύο ζώνες). Σημειώστε ότι το $G_0(k,n,\alpha;i\omega)$ είναι ουσιαστικά ανεξάρτητο του k , και το $E(\alpha,-1)=0$ είναι το μηδενικό-ενεργειακό επίπεδο Landau. Η Χαμιλτονιανή σκέδαση (192) όταν εκφράζεται στη βάση Landau, συνδέει τα επίπεδα Landau αρνητικής και θετικής ενέργειας.

1. Η πλήρης αξιοπιστία της προσέγγισης Born (FSBA)

Προκειμένου να περιγραφεί το φαινόμενο του διασκορπισμού των προσμείξεων για την μαγνητοαντίσταση του γραφενίου, πρέπει να υπολογιστεί η συνάρτηση του Green για τα επίπεδα Landau υπό την παρουσία αναταραχής. Στα πλαίσια του δισδιάστατου (2D) αερίου ηλεκτρονίου, διεξήχθη μια ισοδύναμη μελέτη από τους Ohta και Ando (Ohta, 1971a, 1971b; Ando, 1974a, 1974b, 1974c, 1975; Ando και Uemura, 1974) με τη χρήση της διαδικασίας υπολογισμού κατά μέσο όρο πέρα από τις θέσεις των προσμείξεων του Duke (1968). Παρακάτω, η διαδικασία υπολογισμού κατά μέσο όρο πέρα από τις θέσεις προσμείξεων εκτελείται με τον συνηθισμένο τρόπο, δηλαδή, όταν έχει καθοριστεί η συνάρτηση του Green για μια δεδομένη διαμόρφωση προσμείξεων $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_i})$, η κατά μέσο όρο θέση καθορίζεται από τη συνάρτηση του Green

$$\langle G(p,n,\alpha;i\omega; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_i}) \rangle \equiv G(p,n,\alpha;i\omega) = L^{-2N_i} \left[\prod_{j=1}^{N_i} \int d\mathbf{r}_j \right] \times G(p,n,\alpha;i\omega; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_i}). \quad (196)$$

Παρουσία των επιπέδων Landau, ο μέσος όρος πέρα από τις θέσεις προσμείξεων περιλαμβάνει τις κυματοσυναρτήσεις του μονοδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή. Μετά από πολλούς υπολογισμούς, η συνάρτηση του Green παρουσία των κενών θέσεων, στην FSBA, μπορεί να γραφτεί ως

$$G(p, n, \alpha; \omega + 0^+) = [\omega - E(n, \alpha) - \Sigma_1(\omega)]^{-1}, \quad (197)$$

$$G(p, -1; \omega + 0^+) = [\omega - \Sigma_2(\omega)]^{-1}, \quad (198)$$

όπου

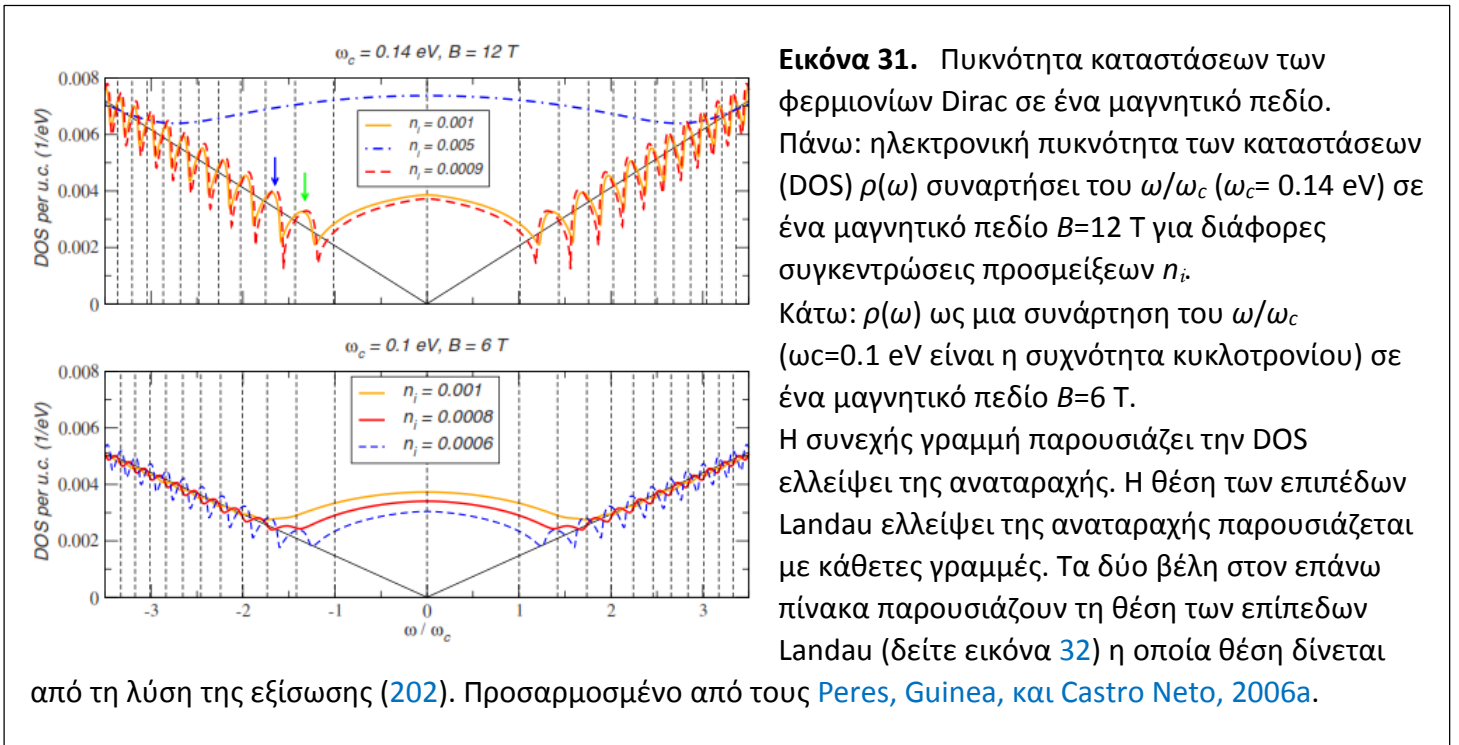
$$\Sigma_1(\omega) = -n_i[Z(\omega)]^{-1}, \quad (199)$$

$$\Sigma_2(\omega) = -n_i[g_c G(p, -1; \omega + 0^+)/2 + Z(\omega)]^{-1}, \quad (200)$$

$$Z(\omega) = g_c G(p, -1; \omega + 0^+)/2 + g_c \sum_{n, \alpha} G(p, n, \alpha; \omega + 0^+)/2, \quad (201)$$

και $g_c = A_c/2\pi l_B^2$ είναι ο εκφυλισμός ενός επιπέδου Landau ανά μοναδιαίο κύτταρο. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι οι συναρτήσεις του Green δεν εξαρτώνται από το p . Η αξιόπιστη λύση των εξισώσεων (197)–(201) δίνει την πυκνότητα των καταστάσεων, την αυτο-ενέργεια του ηλεκτρονίου, και της αλλαγής της ενεργειακής θέσης των επιπέδων Landau λόγω της αναταραχής.

Η επίδραση της αναταραχής στην πυκνότητα των καταστάσεων των φερμιονίων Dirac σε ένα μαγνητικό πεδίο παρουσιάζεται στην εικόνα 31. Για την αναφορά, σημειώνουμε ότι το $E(1.1) = 0.14$ eV για $B = 14$ T, και το $E(1.1) = 0.1$ eV για $B = 6$ T.



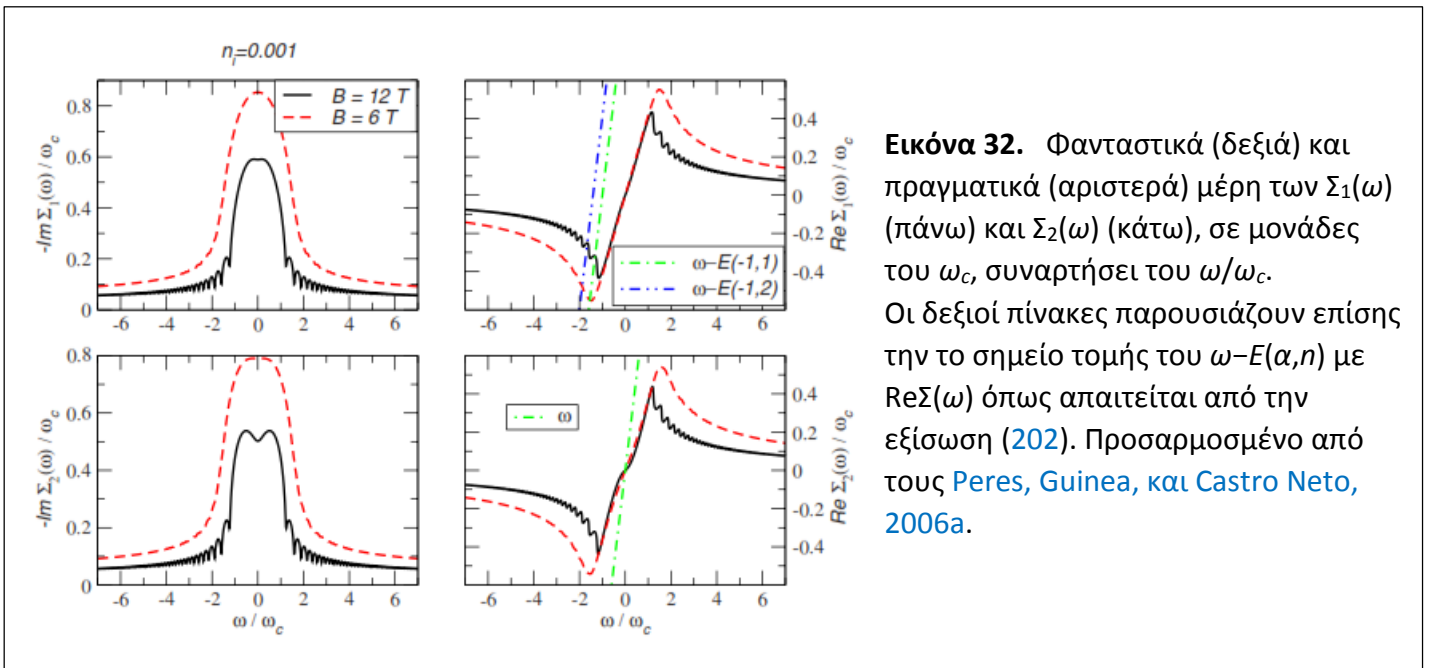
Από την εικόνα 31 βλέπουμε ότι, για ένα δεδομένο n_i , η επίδραση της διεύρυνσης λόγω των προσμείξεων είναι λιγότερο αποτελεσματική καθώς το μαγνητικό πεδίο αυξάνεται. Επανακανονικοποίηση της θέσης των επιπέδων Landau μπορεί να καθοριστεί από τους πόλους των εξισώσεων (197) και (198),

$$\omega - E(\alpha, n) - \text{Re} \Sigma(\omega) = 0. \quad (202)$$

Εξαιτίας της σημασίας του διασκορπισμού στις χαμηλές ενέργειες, η λύση της εξίσωσης (202) δεν αντιπροσωπεύει τις ακριβείς ιδιοκαταστάσεις του συστήματος δεδομένου ότι το φανταστικό μέρος του

ιδιοενέργειας είναι μη εξαφανίσιμο. Εντούτοις, αυτές οι ενέργειες καθορίζουν τη μορφή της πυκνότητας των καταστάσεων, όπως συζητείται παρακάτω.

Στην εικόνα 32, η γραφική λύση της εξίσωσης (202) δίνεται για δύο διαφορετικές ενέργειες $[E(-1,n)$, με $n=1,2]$. Είναι σαφές ότι η επανακανονικοποίηση είναι σημαντική για το πρώτο επίπεδο Landau. Αυτό το αποτέλεσμα οφείλεται στην αύξηση της σκέδασης στις χαμηλές ενέργειες, η οποία είναι ήδη παρούσα στην περίπτωση του μηδενικού μαγνητικού πεδίου. Οι τιμές του ω που ικανοποιούν την εξίσωση (202) παρουσιάζονται στην πυκνότητα των καταστάσεων ως ενεργειακές τιμές όπου οι ταλαντώσεις λόγω της κβαντοποίησης των επιπέδων Landau έχουν ένα μέγιστο. Στην εικόνα 31, η θέση των επιπέδων Landau παρουσιάζεται στον επάνω πίνακα (που σημειώνεται από δύο βέλη, που αντιστοιχούν στις “άδειες” ενέργειες $E(-1,n)$, με $n=1,2$). Η σημασία αυτής της επανακανονικοποίησης μειώνεται με τη μείωση του αριθμού των προσμείξεων. Αυτό είναι σαφές στην εικόνα 31, όπου μια ορατή μετατόπιση προς τις χαμηλές ενέργειες είναι εμφανής όταν το n_i έχει μια μικρή αλλαγή 10%, από $n_i = 10^{-3}$ σε $n_i = 9 \times 10^{-4}$.



Εικόνα 32. Φανταστικά (δεξιά) και πραγματικά (αριστερά) μέρη των $\Sigma_1(\omega)$ (πάνω) και $\Sigma_2(\omega)$ (κάτω), σε μονάδες του ω_c , συναρτήσει του ω/ω_c . Οι δεξιοί πίνακες παρουσιάζουν επίσης την το σημείο τομής του $\omega-E(\alpha,n)$ με $\text{Re}\Sigma(\omega)$ όπως απαιτείται από την εξίσωση (202). Προσαρμοσμένο από τους [Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a](#).

Για τη μελέτη των ιδιοτήτων της μαγνητοαντίστασης, το σύστημα απαιτεί τον υπολογισμό του τανυστή αγωγιμότητας. Υπολογίζουμε την τρέχουσα συνάρτηση συσχέτισης ρεύματος, και από αυτήν προέρχεται η αγωγιμότητα του τανυστή. Οι λεπτομέρειες των υπολογισμών παρουσιάζονται από τους [Peres, Guinea, και Castro Neto \(2006a\)](#). Εάν, όμως, παραμελούμε το πραγματικό μέρος της ιδιοενέργειας, υποθέτουμε ότι για $\text{Im} \Sigma_i(\omega) = \Gamma$ ($i=1,2$) έχουμε μια σταθερή τιμή, και θεωρούμε ότι το $E(1,1) \gg \Gamma$, αυτά τα αποτελέσματα μειώνουν εκείνα του [Gorbar και άλλων \(2002\)](#).

Είναι διδακτικό να εξεταστεί πρώτα η περίπτωση του ω , με $T \rightarrow 0$, το οποίο οδηγεί σε $[\sigma_{xx}(0,0) = \sigma_0]$

$$\sigma_0 = \frac{e^2}{h} \frac{4}{\pi} \left[\frac{\text{Im} \Sigma_1(0)/\text{Im} \Sigma_2(0) - 1}{1 + [\text{Im} \Sigma_1(0)/\omega_c]^2} + \frac{n_0 + 1}{n_0 + 1 + [\text{Im} \Sigma_1(0)/\omega_c]^2} \right], \quad (203)$$

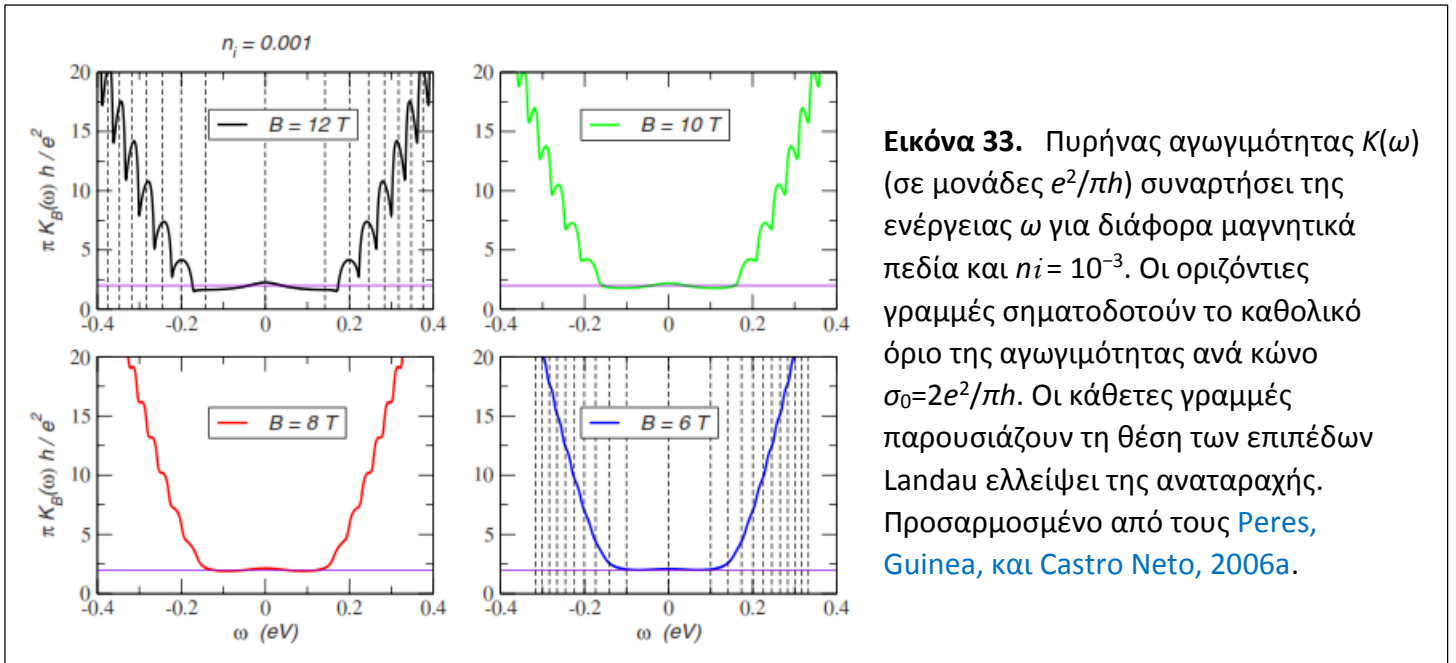
όπου συμπεριλαμβάνουμε έναν συντελεστή 2 λόγω του εκφυλισμού των κοιλάδων. Ελλείψει ενός μαγνητικού πεδίου ($\omega_c \rightarrow 0$), η παραπάνω σχέση μειώνεται σε

$$\sigma_0 = \frac{e^2}{h} \frac{4}{\pi} \left[1 - \frac{[\text{Im} \Sigma_1(0)]^2}{(v_F \Lambda)^2 + [\text{Im} \Sigma_1(0)]^2} \right], \quad (204)$$

όπου έχουμε εισαγάγει την ενέργεια αποκοπής $u_F \Lambda$. Είτε όταν $\text{Im } \Sigma_1(0) \simeq \text{Im } \Sigma_2(0)$ και $\omega_c \gg \text{Im } \Sigma_1(0)$ [ή $n_0 \gg \text{Im } \Sigma_1(0)/\omega_c$, $\omega_c = E(0.1) = \sqrt{2} u_F / l_B^2$] ή όταν $\Lambda u_F \gg \text{Im } \Sigma_1(0)$, ελλείψει ενός εφαρμοσμένου πεδίου, οι εξισώσεις (203) και (204) μειώνονται σε

$$\sigma_0 = \frac{4 e^2}{\pi h}, \quad (205)$$

η οποία είναι η αποκαλούμενη καθολική αγωγιμότητα του γραφενίου (Fradkin, 1986a, 1986b; Lee, 1993; Ludwig και άλλοι, 1994; Nersisyan και άλλοι, 1994; Ziegler, 1998; Yang και Nayak, 2002; Katsnelson, 2006b; Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a; Tworzydło και άλλοι, 2006). Αυτό το αποτέλεσμα επιτεύχθηκε προηγουμένως από Ando και τους συνεργάτες του χρησιμοποιώντας τη δευτέρας-τάξεως αξιόπιστη προσέγγιση του Born (Shon και Ando, 1998; Ando και άλλοι, 2002).



Εικόνα 33. Πυρήνας αγωγιμότητας $K(\omega)$ (σε μονάδες $e^2/\pi h$) συναρτήσει της ενέργειας ω για διάφορα μαγνητικά πεδία και $\nu_i = 10^{-3}$. Οι οριζόντιες γραμμές σηματοδοτούν το καθολικό όριο της αγωγιμότητας ανά κώνο $\sigma_0 = 2e^2/\pi h$. Οι κάθετες γραμμές παρουσιάζουν τη θέση των επιπέδων Landau ελλείψει της αναταραχής. Προσαρμοσμένο από τους Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a.

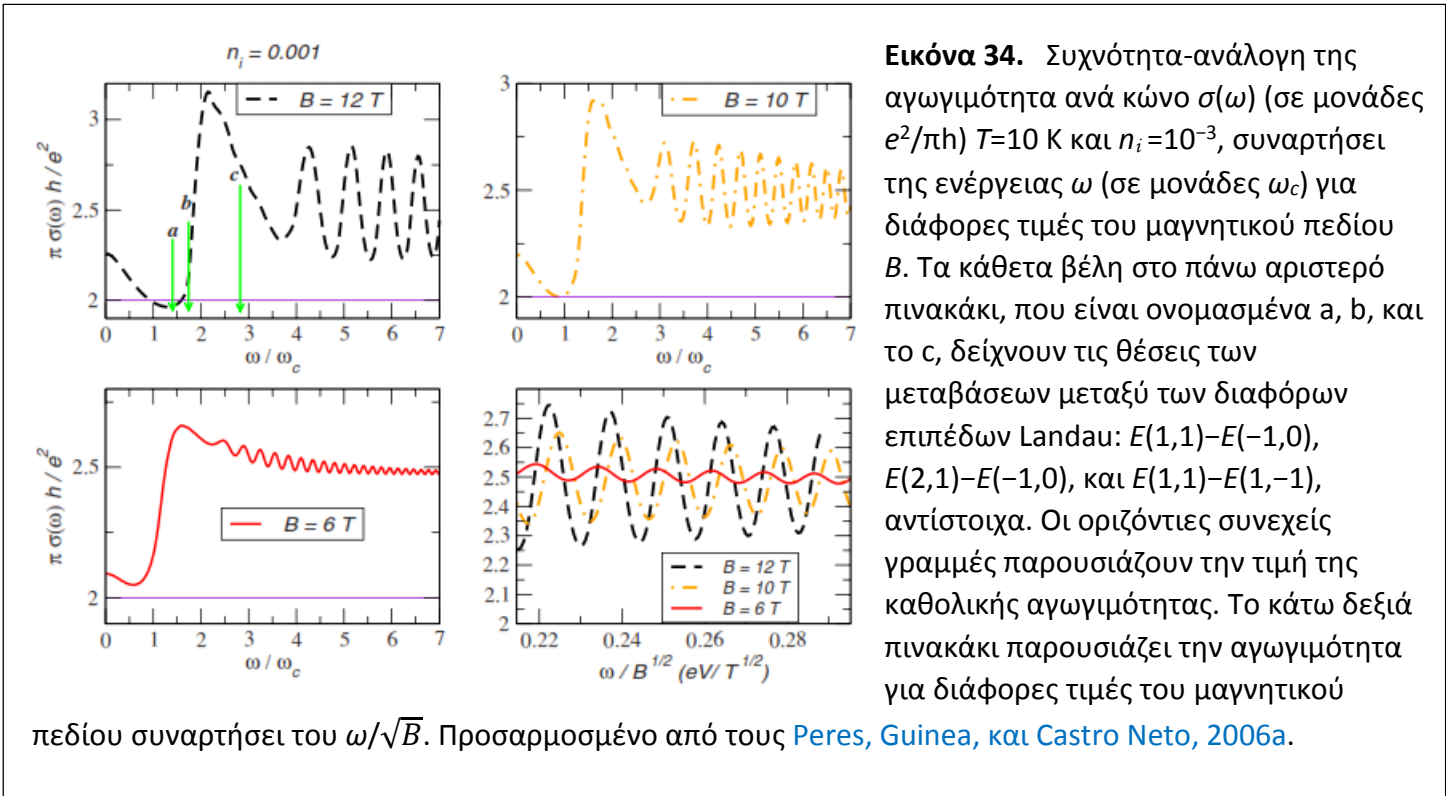
Επειδή οι συνεχείς (dc) ιδιότητες μαγνητομεταφοράς του γραφενίου μετριοούνται κανονικά με τη δυνατότητα της ηλεκτρονικής της πυκνότητας από ένα δυναμικό εισόδου (Novoselov και άλλοι, 2004), είναι σημαντικό να υπολογιστεί ο πυρήνας αγωγιμότητας, δεδομένου ότι έχει την άμεση πειραματική σχετικότητα. Στην περίπτωση που το $\omega \rightarrow 0$, γράφουμε την αγωγιμότητα $\sigma_{xx}(0, T)$ ως

$$\sigma_{xx}(0, T) = \frac{e^2}{\pi h} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} K_B(\epsilon), \quad (206)$$

όπου η αγωγιμότητα του πυρήνα $K_B(\epsilon)$ δίνεται στο παράρτημα των Peres, Guinea, και Castro Neto (2006a). Η εξάρτηση των μαγνητικών πεδίων του πυρήνα $K_B(\epsilon)$ παρουσιάζεται στην εικόνα 33. Μπορεί κανείς να παρατηρήσει ότι η επίδραση της αναταραχής είναι η δημιουργία μιας περιοχής όπου το $K_B(\epsilon)$ παραμένει σταθερό προτού να αρχίσει να αυξάνει σε ενέργεια με τις ταλαντώσεις που προέρχονται από τα επίπεδα Landau. Η ίδια επίδραση, αλλά με την απουσία των ταλαντώσεων, προσδιορίστηκε στο επίπεδο της που συνάδει με την πυκνότητα των καταστάσεων που σχεδιάστηκαν στην εικόνα 31. Μαζί με το $\sigma_{xx}(0, T)$, η αγωγιμότητα Hall του $\sigma_{xy}(0, T)$ επιτρέπει τον υπολογισμό της ειδικής αντίστασης του τανυστή (109).

Εστιάζουμε τώρα στην οπτική αγωγιμότητα $\sigma_{xx}(\omega)$ (Peres, Guinea, και Castro Neto, 2006a; Gusynin και άλλοι, 2007). Αυτή η ποσότητα μπορεί να ανιχνευθεί από τα πειράματα ανακλαστικότητας στο φάσμα της συχνότητας (Bliokh, 2005). Αυτή η ποσότητα παρουσιάζεται στην εικόνα 34 για διάφορα μαγνητικά πεδία. Είναι σαφές ότι η πρώτη κορυφή ελέγχεται από $E(1,1) - E(1,-1)$, και έχουμε ελέγξει ότι δεν υπακούει σε οποιαδήποτε ιδιαίτερη μορφή κλιμάκωσης συναρτήσει του ω/B . Αφ' ετέρου, καθώς η επίδραση του

διασκορπισμού γίνεται όλο και λιγότερο σημαντική, ξεκινούν υψηλής-ενέργειας ταλαντώσεις αγωγιμότητας, υπακούοντας στην κλιμάκωση ω/\sqrt{B} , όπως φαίνεται στο κάτω-δεξιά πινακάκι της εικόνας 34.



V. ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ/ΕΠΙΠΤΩΣΕΙΣ ΠΟΛΥ-ΣΩΜΑΤΩΝ

A. Αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-φωνονίου

Στις ενότητες [IV.ΣΤ.1](#) και [IV.ΣΤ.2](#), συζητήσαμε για το πως οι στατικές παραμορφώσεις του φύλλου γραφενίου οφείλονται στο ζεύγος κάμψεως και πίεσεως των φερμιονίων Dirac μέσω του διανυσματικού δυναμικού. Ακριβώς όπως το λύγισμα έχει να κάνει με τις λειτουργίες κάμψεως του φύλλου γραφενίου (όπως συζητήθηκε στην ενότητα [III](#)), έτσι και τα πεδία πίεσεως συσχετίζονται με τις οπτικές και ακουστικές λειτουργίες ([Wirtz και Rubio, 2004](#)). Λαμβάνοντας υπόψη τις τοπικές μετατοπίσεις των ατόμων σε κάθε υπόπλεγμα \mathbf{u}_A και \mathbf{u}_B , η ζεύξη ηλεκτρονίου-φωνονίου έχει ουσιαστικά τη μορφή που συζητήθηκε προηγουμένως για τα στατικά πεδία.

Η ζεύξη με τις ακουστικές λειτουργίες είναι η απλούστερη, δεδομένου ότι εμφανίζεται ήδη στην ελαστική θεωρία. Εάν \mathbf{u}_{ac} είναι η ακουστική μετατόπιση φωνονίου, τότε η σχέση μεταξύ αυτής της μετατόπισης και της μετατόπισης του ατόμου δίνεται από την εξίσωση [\(171\)](#), και η ζεύξη της με τα ηλεκτρόνια δίνεται από το διανυσματικό δυναμικό [\(175\)](#) στην εξίσωση Dirac [\(150\)](#).

Για τις οπτικές λειτουργίες, η κατάσταση είναι ελαφρώς διαφορετική δεδομένου ότι η οπτική λειτουργία μετατόπισης είναι (Ando, 2006a, 2007b)

$$\mathbf{u}_{\text{op}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B), \quad (207)$$

δηλαδή το διάνυσμα παραμόρφωσης του μήκους του δεσμού. Για να υπολογίσουμε τη ζεύξη στα ηλεκτρόνια, μπορούμε να προχωρήσουμε όπως προηγουμένως και να υπολογίσουμε την αλλαγή στην αναπήδηση της κοντινότερης-γειτονικής ενέργειας, εξαιτίας της παραμόρφωσης του πλέγματος, μέσω των εξισώσεων (172), (173), (170), και (207). Για άλλη μια φορά η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-φωνονίου γίνεται ένα πρόβλημα ζεύξης των ηλεκτρονίων με ένα διανυσματικό δυναμικό όπως στην εξίσωση (150), όπου τα συστατικά του διανυσματικού δυναμικού είναι

$$\mathcal{A}_x^{(\text{op})} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\frac{\beta}{a^2}u_y^{\text{op}}, \quad \mathcal{A}_y^{(\text{op})} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\frac{\beta}{a^2}u_x^{\text{op}}, \quad (208)$$

όπου το $\beta = \partial \ln(\alpha)$ καθορίστηκε στην εξίσωση (174). Σημειώστε ότι μπορούμε να γράψουμε το $\vec{A}^{\text{op}} = -\sqrt{3/2}(\beta/\alpha^2)\vec{\sigma} \times \mathbf{u}_{\text{op}}$. Μια παρόμοια σχέση ισχύει κοντά στο σημείο K' με το \vec{A} να αντικαθίσταται από το $-\vec{A}$.

Τα οπτικά φωνόνια είναι σημαντικά στην έρευνα για το γραφένιο εξαιτίας της φασματοσκοπίας Raman. Η τελευταία έχει διαδραματίσει σημαντικό ρόλο στη μελέτη των νανοσωλήνων άνθρακα (Saito και άλλοι, 1998) λόγω του μονοδιάστατου (1D) χαρακτήρα αυτών των συστημάτων, δηλαδή, η παρουσία των van Hove ιδιομορφιών/μοναδικοτήτων στο μονοδιάστατο (1D) φάσμα οδηγεί σε κολοσσιαίες αυξήσεις του σήματος Raman που μπορεί να ανιχνευθεί εύκολα, ακόμη και για έναν ενιαίο απομονωμένο νανοσωλήνα άνθρακα. Στο γραφένιο, η κατάσταση είναι διαφορετική δεδομένου ότι ο δισδιάστατος (2D) χαρακτήρας του οδηγεί σε μια αρκετά ομαλότερη πυκνότητα των καταστάσεων (εκτός από τη μοναδικότητα van Hove στις υψηλές ενέργειες της τάξεως της αναπήδησης ενέργειας $t \approx 2.8$ eV). Εντούτοις, το γραφένιο είναι μια ανοικτή επιφάνεια και επομένως είναι εύκολα προσβάσιμο από τη φασματοσκοπία Raman. Στην πραγματικότητα, έχει διαδραματίσει σημαντικό ρόλο επειδή επιτρέπει τον προσδιορισμό του αριθμού επιπέδων (Ferrari και άλλοι, 2006; Gupta και άλλοι, 2006; Graf και άλλοι, 2007; Malard και άλλοι, 2007; Pisana και άλλοι, 2007; Yan και άλλοι, 2007) και η μελέτη των οπτικών λειτουργιών του φωνονίου στο γραφένιο, ιδιαίτερα αυτών στο κέντρο του BZ με ορμή $q \approx 0$. Παρόμοιες μελέτες έχουν διεξαχθεί για τις κορδέλες γραφίτη (Cancado και άλλοι, 2004).

Εξετάζουμε την επίδραση των φερμιονίων Dirac στις οπτικές λειτουργίες. Εάν κάποιος μεταχειρίζεται το διανυσματικό δυναμικό, τη ζεύξη ηλεκτρονίου-φωτονίου, τις εξισώσεις (150) και (208) μέχρι τη (δευτέρας τάξεως) θεωρία αναταραχής, τότε η κύρια επίδρασή της είναι η πόλωση του συστήματος ηλεκτρονίου με τη δημιουργία ζευγαριών ηλεκτρονίου και οπής. Στη γλώσσα QED, η δημιουργία των ζευγαριών ηλεκτρονίου-οπής ονομάζεται παραγωγή ζευγαριού (ηλεκτρονίου-αντιηλεκτρονίου) (Castro Neto, 2007). Η παραγωγή ζευγαριού είναι ισοδύναμη με μια επανακανονικοποίηση της διάδοσης του φωνονίου από μια ιδιοενέργεια που είναι ανάλογη με τη συνάρτηση πόλωσης των φερμιονίων Dirac.

Η επανακανονικοποιημένη συχνότητα φωνονίου δίνεται από (Ando, 2006a, 2007b; Lazzeri και Mauri, 2006; Castro Neto και Guinea, 2007; Saha και άλλοι, 2007)

$$\Omega_0(\mathbf{q}) \approx \omega_0 - \frac{2\beta^2}{a^2\omega_0}\chi(\mathbf{q}, \omega_0), \quad (209)$$

όπου ω_0 είναι η “άδεια” συχνότητα φωνονίου, και η συνάρτηση πόλωσης ηλεκτρονίου-φωνονίου δίνεται από

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{s,s'=\pm 1} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{f[E_s(\mathbf{k} + \mathbf{q})] - f[E_{s'}(\mathbf{k})]}{\omega_0 - E_s(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + E_{s'}(\mathbf{k}) + i\eta}, \quad (210)$$

όπου $E_s(\mathbf{q})$ είναι η διασπορά του φερμιονίου Dirac ($s=+1$ για την ανώτερη ζώνη και $s=-1$ για τη χαμηλότερη ζώνη, και $f[E]$ είναι η συνάρτηση κατανομής Fermi-Dirac. Για τη φασματοσκοπία Raman, η απόκριση ενδιαφέροντος είναι στο $q=0$, όπου μόνο οι διαδικασίες ενδο-ζώνης είναι τέτοιες έτσι ώστε $ss'=-1$ (δηλαδή, οι διαδικασίες μεταξύ των χαμηλότερων και ανώτερων κώνων) συμβάλλουν. Η συνάρτηση πόλωσης ηλεκτρονίου-φωνονίου μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας τη γραμμικοποιημένη διασπορά του φερμιονίου Dirac (7) και τη χαμηλής ενέργειας πυκνότητα των καταστάσεων (15),

$$\chi(0, \omega_0) = \frac{6\sqrt{3}}{\pi v_F^2} \int_0^{v_F \Lambda} dE E (f[-E] - f[E]) \times \left(\frac{1}{\omega_0 + 2E + i\eta} - \frac{1}{\omega_0 - 2E + i\eta} \right), \quad (211)$$

όπου έχουμε εισαγάγει την ορμή αποκοπής $\Lambda (\approx 1/a)$ έτσι ώστε το ολοκλήρωμα να συγκλίνει στο υπεριώδες. Σε μηδενική θερμοκρασία $T=0$ έχουμε $f[E]=\theta(\mu-E)$ και υποθέτουμε το ντόπινγκ ηλεκτρονίου $\mu > 0$, έτσι ώστε $f[-E]=1$ (για την περίπτωση του ντόπινγκ της οπής, $\mu < 0$). Η ολοκλήρωση στην εξίσωση (211) δίνει

$$\chi(0, \omega_0) = \frac{6\sqrt{3}}{\pi v_F^2} \left[v_F \Lambda - \mu + \frac{\omega_0}{4} \left(\ln \left| \frac{\omega_0/2 + \mu}{\omega_0/2 - \mu} \right| + i\pi\theta(\omega_0/2 - \mu) \right) \right], \quad (212)$$

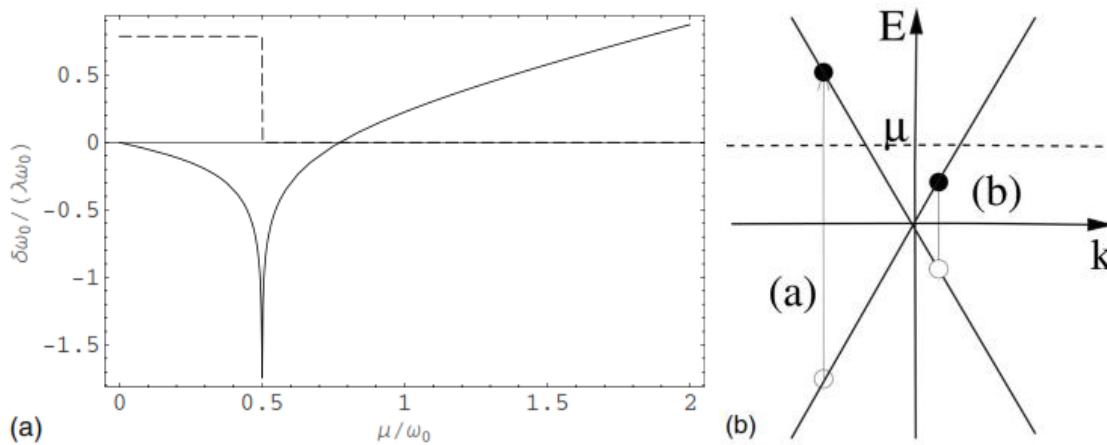
όπου ο εξαρτώμενος όρος αποκοπής είναι μια συμβολή που προέρχεται από τις κατειλημμένες καταστάσεις στη χαμηλότερη π ζώνη και επομένως είναι ανεξάρτητος από την τιμή του χημικού δυναμικού. Αυτή η συμβολή μπορεί να ενσωματωθεί πλήρως στη “άδεια” τιμή ω_0 στην εξίσωση (209). Συνεπώς η σχετική μετατόπιση στη συχνότητα φωνονίου μπορεί να γραφτεί ως

$$\frac{\delta\omega_0}{\omega_0} \approx -\frac{\lambda}{4} \left(-\frac{\mu}{\omega_0} + \ln \left| \frac{\omega_0/2 + \mu}{\omega_0/2 - \mu} \right| + i\pi\theta(\omega_0/2 - \mu) \right), \quad (213)$$

όπου

$$\lambda = \frac{36\sqrt{3}}{\pi} \frac{\beta^2}{8Ma^2\omega_0} \quad (214)$$

είναι η αδιάστατη ζεύξη ηλεκτρονίου-φωνονίου. Σημειώστε ότι η εξίσωση (213) έχει ένα πραγματικό και φανταστικό μέρος. Το πραγματικό μέρος αντιπροσωπεύει την πραγματική μετατόπιση στη συχνότητα, ενώ το φανταστικό μέρος δίνει την απόσβεση της λειτουργία του φωνονίου εξαιτίας της παραγωγής ζευγαριού (δείτε την εικόνα 35). Υπάρχει μια σαφής αλλαγή στη συμπεριφορά ανάλογα με το εάν το μ είναι μεγαλύτερο ή μικρότερο από το $\omega_0/2$.



Εικόνα 35. Η ανωμαλία Kohn στο γραφένιο. Αριστερά: η συνεχής γραμμή είναι η σχετική μετατόπιση της συχνότητας του φωνονίου συναρτήσει του μ/ω_0 , και η διακεκομμένη γραμμή είναι η απόσβεση του φωνονίου λόγω της δημιουργίας ζευγαριού ηλεκτρονίου και οπής. Δεξιά: (a) η διαδικασία ηλεκτρονίου και οπής που οδηγεί στο φωνόνιο που μαλακώνει ($\omega_0 > 2\mu$), και (b) η διαδικασία ηλεκτρονίου και οπής που οδηγεί στο φωνόνιο που σκληραίνει ($\omega_0 < 2\mu$).

Για $\mu < \omega_0/2$, υπάρχει μια μείωση στη συχνότητα φωνονίου κάτι που υπονοεί ότι το πλέγμα μαλακώνει, ενώ για $\mu > \omega_0/2$, το πλέγμα σκληραίνει. Η ερμηνεία για αυτήν την επίδραση δίνεται επίσης στην εικόνα 35. Αφ' ενός, εάν η συχνότητα του φωνονίου είναι διπλάσια από το χημικό δυναμικό, παράγονται πραγματικά ζευγάρια ηλεκτρονίου και οπής, οδηγώντας σε μια ισχυρότερη αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ιόντος, και επομένως σε μια πιο ήπια λειτουργία φωνονίου. Συγχρόνως, τα φωνόνια αποσβένουν και φθείρονται. Αφ' ετέρου, εάν η συχνότητα του φωνονίου είναι υπο-διπλάσια από το χημικό δυναμικό, η παραγωγή των ζευγαριών ηλεκτρονίου και οπής διακόπτεται από την αρχή του Pauli και μόνο οι εικονικές διεγέρσεις μπορούν να παραχθούν, οδηγώντας σε πόλωση και σκλήρυνση το πλέγμα. Σε αυτήν την περίπτωση, δεν υπάρχει καμία απόσβεση και το φωνόνιο “επιβιώνει” αρκετά. Αυτό το αποτέλεσμα έχει παρατηρηθεί πειραματικά από τη φασματοσκοπία Raman (Pisana και άλλοι, 2007; Yan και άλλοι, 2007). Η ζεύξη ηλεκτρονίου-φωνονίου έχει ερευνηθεί επίσης θεωρητικά για ένα πεπερασμένο μαγνητικό πεδίο (Ando, 2007a; Goerbig και άλλοι, 2007). Σε αυτήν την περίπτωση, η ζεύξη συντονισμού εμφανίζεται λόγω του μεγάλου εκφυλισμού των επιπέδων Landau, και αναμένονται οι διάφορες μεταβάσεις Raman σε σύγκριση με την περίπτωση μηδενικού πεδίου. Η ζεύξη των ηλεκτρονίων στις λειτουργίες κάμψεως για ένα επιδαπέδιο φύλλο γραφενίου συζητήθηκε από τους Mariani και von Oppen (2008).

B. Αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου

Από όλους τους κλάδους της συμπυκνωμένης ύλης της φυσικής, η μελέτη των αλληλεπιδράσεων ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου είναι πιθανώς η πιο σύνθετη δεδομένου ότι προϋποθέτει την κατανόηση της συμπεριφοράς ενός μακροσκοπικού αριθμού μεταβλητών. Επομένως, το πρόβλημα των συστημάτων που αλληλεπιδρούν είναι ένας τομέας με συνεχή κίνηση και δεν θα προσπαθήσουμε να δώσουμε εδώ μια ολοκληρωμένη μελέτη του προβλήματος για το γραφένιο. Αντ' αυτού, εστιάζουμε σε έναν μικρό αριθμό θεμάτων που είναι τρέχουσας συζήτησης στη βιβλιογραφία.

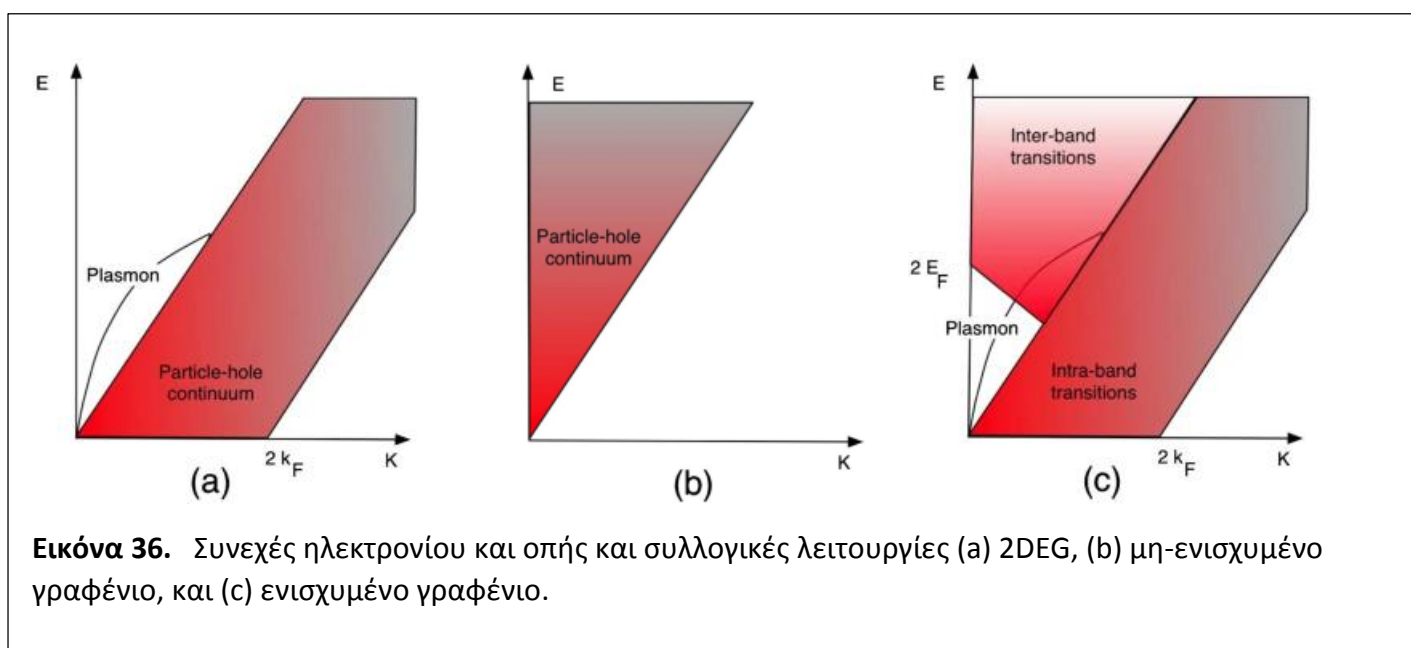
Δεδομένου ότι το γραφένιο είναι ένα αληθινά δισδιάστατο (2D) σύστημα, είναι πληροφοριακό για να το συγκριθεί με πιο τυποποιημένο 2DEG που έχει μελετηθεί εκτενώς στα προηγούμενα 25 χρόνια από την ανάπτυξη των ετεροδομών και την ανακάλυψη του κβαντικού φαινομένου Hall [για μια επισκόπηση, δείτε Stone (1992)]. Στο απλούστερο επίπεδο, τα μεταλλικά συστήματα έχουν δύο κύρια είδη διεγέρσεων: ζεύγη ηλεκτρονίου και οπής και συλλογικές λειτουργίες ως πλασμόνια.

Τα ζεύγη ηλεκτρονίου και οπής είναι ασυνάρτητες διεγέρσεις του κύματος Fermi και ένα άμεσο

αποτέλεσμα της αρχής του Pauli: ένα ηλεκτρόνιο μέσα στο κύμα Fermi με ορμή \mathbf{k} είναι διεγερμένο έξω από το κύμα Fermi σε μια νέα κατάσταση με την ορμή $\mathbf{k}+\mathbf{q}$, που αφήνει πίσω μια οπή. Η ενέργεια που συνδέεται με μια τέτοια διέγερση είναι $\omega=\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{k}}$, και για τις καταστάσεις κοντά στην επιφάνεια Fermi ($\mathbf{k}\approx\mathbf{k}_F$) οι ενέργειές τους κλιμακώνονται γραμμικά με την ορμή διέγερσης $\omega_q\approx v_F q$. Σε ένα σύστημα με μη-σχετικιστική διασπορά όπως των κανονικών μετάλλων και ημιαγωγών, το συνεχές ηλεκτρονίου και οπής γίνεται μόνο από τις εσωζωνικές μεταβάσεις και υπάρχει ακόμη και σε μηδενική ενέργεια δεδομένου ότι είναι πάντα δυνατό να παραχθούν ζεύγη ηλεκτρονίου και οπής με αυθαίρετα χαμηλή ενέργεια κοντά στην επιφάνεια Fermi, όπως φαίνεται στην εικόνα 36(a). Εκτός από αυτό, η 2DEG μπορεί επίσης να στηρίξει τις συλλογικές διεγέρσεις όπως τα πλασμόνια που έχουν διασπορά $\omega_{\text{plasmon}}(q) \propto \sqrt{q}$, και υπάρχει έξω το συνεχές ηλεκτρονίου και οπής σε αρκετά μεγάλα μήκη κύματος (Shung, 1986a).

Σε συστήματα με σχετικιστική διασπορά, όπως το γραφένιο, αυτές οι διεγέρσεις μεταβάλλονται σημαντικά, ειδικά όταν η ενέργεια Fermi είναι στο σημείο Dirac. Σε αυτήν την περίπτωση, η επιφάνεια Fermi συρρικνώνεται σε ένα σημείο και επομένως οι διεγέρσεις της εσω-ζώνης εξαφανίζονται και μόνο οι μεταβάσεις της ενδο-ζώνης μεταξύ των χαμηλότερων και υψηλότερων κώνων μπορούν να υπάρξουν [δείτε την εικόνα 36(b)]. Επομένως, το ουδέτερο γραφένιο δεν έχει καμία διέγερση ηλεκτρονίου και οπής σε χαμηλή ενέργεια, αντ' αυτού κάθε ζεύγος ηλεκτρονίου και οπής κοστίζει ενέργεια και συνεπώς η οπή του ηλεκτρονίου καταλαμβάνει το ανώτερο μέρος της ενέργειας ενάντια στο διάγραμμα της ορμής. Σε αυτήν την περίπτωση, τα πλασμόνια καταστέλλονται και δεν μπορεί να υπάρξει καμία συλλογική διέγερση. Εάν το χημικό δυναμικό απομακρύνεται από το σημείο Dirac, τότε οι εσωζωνικές διεγέρσεις αποκαθίστανται και το συνεχές ηλεκτρονίου και οπής του γραφενίου μοιράζεται τα χαρακτηριστικά γνωρίσματα της 2DEG και του μη-ενισχυμένου γραφενίου. Το πλήρες συνεχές ηλεκτρονίου και οπής του ενισχυμένου γραφενίου παρουσιάζεται στην εικόνα 36(c), και σε αυτήν την περίπτωση επιτρέπονται οι λειτουργίες των πλασμονίων. Καθώς το χημικό δυναμικό απομακρύνεται από το σημείο Dirac, το γραφένιο μοιάζει όλο και περισσότερο με την 2DEG.

Αυτά τα χαρακτηριστικά γνωρίσματα στις στοιχειώδεις διεγέρσεις του γραφενίου αντανακλούν τις ιδιότητες ελέγχου του τόσο καλά. Στην πραγματικότητα, η πόλωση και οι διηλεκτρικές λειτουργίες του μη-ενισχυμένου γραφενίου είναι διαφορετικές από εκείνες του 2DEG (συνάρτηση Lindhard).



Εικόνα 36. Συνεχές ηλεκτρονίου και οπής και συλλογικές λειτουργίες (a) 2DEG, (b) μη-ενισχυμένο γραφένιο, και (c) ενισχυμένο γραφένιο.

Στην προσέγγιση τυχαίας-φάσης (RPA), η συνάρτηση πόλωσης μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά από (Shung, 1986a; González και άλλοι, 1993a, 1994),

$$\Pi(q, \omega) = \frac{q^2}{4\sqrt{v_F^2 q^2 - \omega^2}}, \quad (215)$$

και επομένως, για $\omega > v_F q$, η συνάρτηση πόλωσης είναι φανταστική, δείχνοντας την απόσβεση των ζευγών ηλεκτρονίου και οπής. Σημειώστε ότι η στατική συνάρτηση πόλωσης ($\omega=0$) εξαφανίζεται γραμμικά με το q , δείχνοντας την έλλειψη ελέγχου στο σύστημα. Αυτή η συνάρτηση πόλωσης έχει υπολογιστεί επίσης με την παρουσία ενός πεπερασμένου χημικού δυναμικού (Shung, 1986a, 1986b; Ando, 2006b; Wunsch και άλλοι, 2006; Hwang και Das Sarma, 2007).

Το μη-ενισχυμένο, καθαρό γραφένιο είναι ένα ημι-μέταλλο, με μια πυκνότητα εξαφάνισης των καταστάσεων στο επίπεδο Fermi. Κατά συνέπεια, το γραμμικό μήκος ελέγχου Thomas-Fermi αποκλίνει, και η μεγάλης ακτίνας αλληλεπίδραση Coulomb δεν ελέγχεται. Στην πεπερασμένη πυκνότητα ηλεκτρονίων n , το μήκος ελέγχου Thomas-Fermi είναι

$$\lambda_{\text{TF}} \approx \frac{1}{4\alpha} \frac{1}{k_F} = \frac{1}{4\alpha} \frac{1}{\sqrt{\pi n}}, \quad (216)$$

όπου

$$\alpha = \frac{e^2}{\epsilon_0 v_F} \quad (217)$$

είναι η αδιάστατη σταθερή ζεύξη στο πρόβλημα [ανάλογη της εξίσωσης (143) στο πρόβλημα των προσμείξεων Coulomb]. Υπερβαίνοντας το γραμμικό σύστημα Thomas-Fermi, έχει αποδειχθεί ότι ο νόμος Coulomb τροποποιείται (Katsnelson, 2006a; Fogler, Novikov, και Shklovskii, 2007; Zhang και Fogler, 2008).

Η Dirac Χαμιλτονιανή παρουσία των αλληλεπιδράσεων μπορεί να γραφτεί ως

$$\mathcal{H} \equiv -i v_F \int d^2 \mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2\epsilon_0} \int d^2 \mathbf{r} d^2 \mathbf{r}' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \hat{\rho}(\mathbf{r}) \hat{\rho}(\mathbf{r}'), \quad (218)$$

όπου

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \quad (219)$$

είναι η ηλεκτρονική πυκνότητα. Μπορεί κανείς να παρατηρήσει ότι η αλληλεπίδραση Coulomb, αντίθετα με την QED, υποτίθεται ότι είναι στιγμιαία από $v_F/c \approx 1/300$ και επομένως το φαινόμενο της καθυστέρησης είναι πολύ μικρό. Επιπλέον, τα φωτόνια διαδίδονται στον τρισδιάστατο (3D) χώρο ενώ τα ηλεκτρόνια είναι περιορισμένα στο δισδιάστατο (2D) φύλλο γραφενίου. Συνεπώς, η αλληλεπίδραση Coulomb “σπάει” τη σταθερότητα Lorentz του προβλήματος και καθιστά την κατάσταση πολλών-σωμάτων διαφορετική από αυτήν στην QED (Baym και Chin, 1976). Επιπλέον, το πρόβλημα εξαρτάται από δύο παραμέτρους: v_F και e^2/ϵ_0 . Κάτω από μια δισδιάστατη κλιμάκωση, $\mathbf{r} \rightarrow \lambda \mathbf{r}$, $t \rightarrow \lambda t$, $\Psi \rightarrow \lambda^{-1} \Psi$, και οι δύο παράμετροι παραμένουν αμετάβλητοι. Στη γλώσσα RG, η αλληλεπίδραση Coulomb είναι μια οριακή μεταβλητή, της οποίας η δύναμη σχετικά με την κινητική ενέργεια δεν αλλάζει πάνω σε μια αλλαγή στην κλίμακα. Εάν οι μονάδες επιλέγονται έτσι ώστε το v_F να είναι αδιάστατο, η τιμή e^2/ϵ_0 θα καταστεί επίσης αδιάστατη. Αυτό συμβαίνει στις θεωρίες που θεωρούνται επανακανονικοποιημένες στην κβαντική θεωρία πεδίου.

Η ταχύτητα Fermi στο γραφένιο είναι συγκρίσιμη με αυτήν στα μισό-γεμισμένα μέταλλα. Στα στερεά με σταθερά πλέγματος a , η συνολική κινητική ενέργεια ανά περιοχή είναι $1/m a^2$, όπου m είναι η “άδεια” μάζα του ηλεκτρονίου, που είναι του ίδιου μεγέθους με την ηλεκτροστατική ενέργεια $e^2/\epsilon_0 a$. Η ταχύτητα Fermi για τις γεμίσεις της τάξεως της μονάδας είναι $v_F \sim 1/m a$. Επομένως, $e^2/\epsilon_0 v_F \sim 1$. Αυτή η εκτίμηση ισχύει επίσης στο γραφένιο. Συνεπώς, αντίθετα από το QED, όπου $\alpha_{\text{QED}} = 1/137$, η σταθερή ζεύξη στο γραφένιο είναι $\alpha \sim 1$.

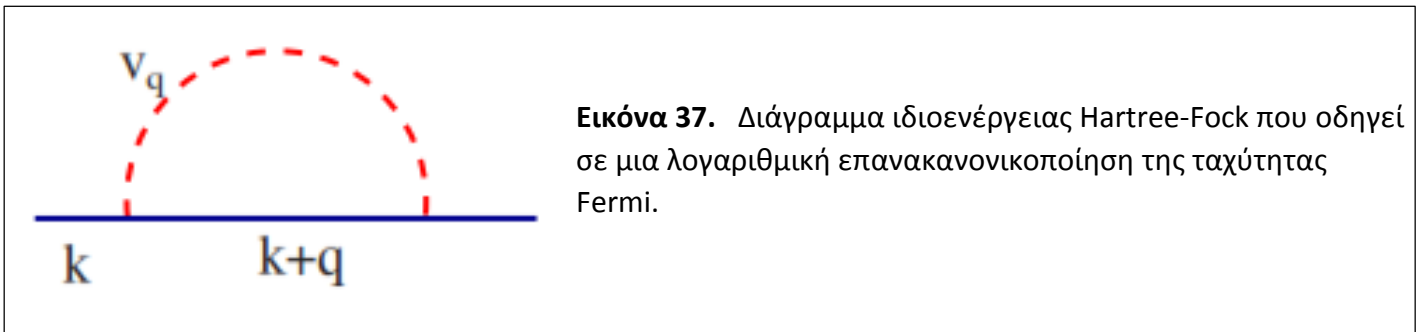
Παρά το γεγονός ότι η σταθερά ζεύξεων είναι της τάξεως της μονάδας, μια ανάλυση αναταραχής RG

μπορεί να εφαρμοστεί. Οι τεχνικές RG μας επιτρέπουν για να προσδιορίσουμε τα σταθερά σημεία του προτύπου, το οποίο μπορεί να είναι τραβηχτικό πέρα από ένα ευρύτερο φάσμα από εκείνο στο οποίο η επεξεργασία της αναταραχής μπορεί να είναι απολύτως δικαιολογημένη. Εναλλακτικά, ένα σύστημα RG μπορεί να αναδιατυπωθεί ως η διαδικασία τμηματικά της ολοκλήρωσης των υψηλής ενέργειας διεγέρσεων (Shankar, 1994). Αυτή η διαδικασία οδηγεί σε αλλαγές στις δραστικές ζεύξεις χαμηλής ενέργειας. Το σύστημα ισχύει εάν η ενέργεια των λειτουργιών επανακανονικοποίησης είναι πολύ μεγαλύτερη από τις κλίμακες ενδιαφέροντος.

Η διόρθωση Hartree-Fock λόγω των αλληλεπιδράσεων Coulomb μεταξύ των ηλεκτρονίων (δίνεται από την εικόνα 37) δίνει μια λογαριθμική διόρθωση στο ηλεκτρόνιο ιδιοενέργειας (González και άλλοι, 1994),

$$\Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = \frac{\alpha}{4} k \ln\left(\frac{\Lambda}{k}\right), \quad (220)$$

όπου Λ είναι η αποκοπή της ορμής που καθορίζει το εύρος ισχύος της εξίσωσης Dirac.



Εικόνα 37. Διάγραμμα ιδιοενέργειας Hartree-Fock που οδηγεί σε μια λογαριθμική επανακανονικοποίηση της ταχύτητας Fermi.

Αυτό το αποτέλεσμα εξακολουθεί να ισχύει ακόμη και στην υψηλότερης τάξεως θεωρία αναταραχής (Mishchenko, 2007) και λαμβάνεται επίσης σε μεγάλες επεκτάσεις N (Rosenstein και άλλοι, 1989, 1991; Son, 2007) (όπου το N είναι ο αριθμός των γεύσεων των φερμιονίων Dirac), με μόνη τροποποίηση τον προσυντελεστή στην εξίσωση (220). Αυτό το αποτέλεσμα υποδηλώνει ότι η ταχύτητα Fermi είναι επανακανονικοποιημένη προς τις υψηλότερες τιμές. Κατά συνέπεια, η πυκνότητα των καταστάσεων κοντά στην ενέργεια Dirac μειώνεται, συμφωνία με τη γενική τάση των αποκρουστικών αλληλεπιδράσεων για να προκαλέσει κενά ή να τα αυξήσει.

Αυτό το αποτέλεσμα μπορεί να γίνει κατανοητό από το σημείο RG από την άποψη της μελέτης της επίδρασης της μείωσης της αποκοπής από Λ σε $\Lambda - d\Lambda$ και της επίδρασής του στη δραστική ζεύξη. Μπορεί να αποδειχθεί ότι το α υπακούει (González και άλλοι, 1994)

$$\Lambda \frac{\partial \alpha}{\partial \Lambda} = -\frac{\alpha^2}{4}. \quad (221)$$

Επομένως, η αλληλεπίδραση Coulomb γίνεται οριακά άσχετη. Αυτά τα χαρακτηριστικά γνωρίσματα επιβεβαιώνονται από έναν πλήρη σχετικιστικό υπολογισμό, αν και η ταχύτητα Fermi δεν μπορεί να ξεπεράσει την ταχύτητα του φωτός (González και άλλοι, 1994). Αυτό το αποτέλεσμα δείχνει ότι οι έντονα συσχετισμένες ηλεκτρονικές φάσεις, όπως ο σιδηρομαγνητισμός (Peres και άλλοι, 2005) και οι κρύσταλλοι Wigner (Dahal και άλλοι, 2006), καταστέλλονται στο καθαρό γραφένιο.

Ένας υπολογισμός υψηλής-τάξεως των ιδιοενεργειακών όρων οδηγεί σε μια κυματοσυνάρτηση επανακανονικοποίησης και σε μια πεπερασμένη διάρκεια ζωής του ημισωματιδίου, η οποία αυξάνεται γραμμικά με την ενέργεια του ημισωματιδίου (González και άλλοι, 1994, 1996). Από αυτήν την κυματοσυνάρτηση επανακανονικοποίησης συνεπάγεται ότι το βάρος του ημισωματιδίου τείνει στο μηδέν

καθώς η ενέργειά του μειώνεται. Μια επέκταση ισχυρής-ζεύξεως είναι επίσης δυνατή, υποθέτοντας ότι ο αριθμός ηλεκτρονικών γεύσεων δικαιολογεί μια RPA επέκταση, κρατώντας μόνο τα διαγράμματα φυσαλίδων ηλεκτρονίων και οπών (González και άλλοι, 1994). Αυτή η ανάλυση επιβεβαιώνει ότι η αλληλεπίδραση Coulomb είναι επανακανονικοποιημένη προς τις χαμηλότερες τιμές.

Η ενίσχυση στις ταχύτητες Fermi οδηγεί σε μια διεύρυνση του ηλεκτρονικού φάσματος. Αυτό είναι σύμφωνο με τις μετρήσεις των κενών στους στενούς νανοσωλήνες, οι οποίοι παρουσιάζουν αποκλίσεις από την κλιμάκωση με R^{-1} , όπου το R είναι η ακτίνα, που αναμένεται από την εξίσωση Dirac (Kane και Mele, 2004). Η γραμμική εξάρτηση της αντίστροφης διάρκειας ζωής του ημισωματιδίου με την ενέργεια είναι σύμφωνη με τα πειράματα φωτοεκπομπής στον γραφίτη, για ενέργειες που είναι μεγαλύτερες όσον αφορά τις αλληλεπιδράσεις ενδιάμεσων στρωμάτων (Xu και άλλοι, 1996; Zhou, Gweon, και Lanzara, 2006; Zhou, Gweon, και άλλοι, 2006; Bostwick, Ohta, Seyller, και άλλοι, 2007; Sugawara και άλλοι, 2007). Σημειώστε ότι στο γραφίτη, οι επιδράσεις της δομής ζώνης τροποποιούν τη διάρκεια ζωής στις χαμηλές ενέργειες (Spataru και άλλοι, 2001). Η εξαφάνιση της κορυφής του ημισωματιδίου στις χαμηλές ενέργειες μπορεί να οδηγήσει σε μια ενεργειακά εξαρτώμενη επανακανονικοποιημένη αναπήδηση ενδιάμεσων στρωμάτων (Vozmediano και άλλοι, 2002, 2003). Άλλες θερμοδυναμικές ιδιότητες μη-ενισχυμένου και ενισχυμένου γραφενίου μπορούν επίσης να υπολογιστούν (Barlas και άλλοι, 2007 Vafek, 2007).

Οι υπολογισμοί μη-αναταραγμένων φαινομένων μεγάλης ακτίνας αλληλεπίδρασης στο μη-ενισχυμένο γραφένιο δείχνουν ότι μια μετάβαση σε μια φάση κενού είναι επίσης δυνατή, όταν ο αριθμός ηλεκτρονικών γεύσεων είναι μεγάλος (Khveshchenko, 2001; Luk'yanchuk και Kopelevich, 2004; Khveshchenko και Shively, 2006). Η σπασμένη φάση συμμετρίας είναι παρόμοια με τη εξιτονική (excitonic) μετάβαση που βρίσκεται στα υλικά κ γίνεται ευνοϊκή για να δημιουργήσει τα ζεύγη των ηλεκτρονίων και των οπών όπου διαμορφώνουν έπειτα συνδεδεμένα εξιτόνια (εξιτονική μετάβαση).

Το μη-ενισχυμένο γραφένιο δεν μπορεί να καθορίσει με σαφήνεια τα πλασμόνια, καθώς οι ενέργειές τους εμπίπτουν στο συνεχές ηλεκτρονίου και οπής, και επομένως έχουν μια σημαντική απόσβεση Landau. Σε πεπερασμένες θερμοκρασίες, ωστόσο, μπορούν να υπάρξουν θερμικά διεγερμένα ημισωματίδια απεικόνισης της αλληλεπίδρασης Coulomb, και μια ακουστική συλλογική διέγερση φορτίου (Vafek, 2006).

Το ενισχυμένο γραφένιο παρουσιάζει πεπερασμένη πυκνότητα των καταστάσεων στο επίπεδο Fermi, και η μεγάλης ακτίνας αλληλεπίδραση Coulomb είναι καλυμμένη. Συνεπώς, υπάρχουν συλλογικές αλληλεπιδράσεις πλάσματος όταν το $\mathbf{q} \rightarrow 0$, το οποίο διασκορπίζεται ως $\omega_p \sim \sqrt{|\mathbf{q}|}$, δεδομένου ότι το σύστημα είναι δισδιάστατο (2D) (Shung, 1986a, 1986b; Campagnoli και Tosatti, 1989). Το γεγονός ότι οι ηλεκτρονικές καταστάσεις περιγράφονται από την άμαζη εξίσωση Dirac συνεπάγεται ότι το $\omega_p \propto n^{1/4}$, όπου το n είναι η πυκνότητα φορέα. Η στατική διηλεκτρική σταθερά έχει ένα συνεχές παράγωγο $2k_F$, σε αντίθεση με το δισδιάστατο (2D) αέριο ηλεκτρονίου (Ando, 2006b; Wunsch και άλλοι, 2006; Sarma και άλλοι, 2007). Αυτό το γεγονός συνδέεται με την κατεσταλμένη προς τα πίσω σκέδαση στο γραφένιο. Η απλότητα της δομής της ζώνης του γραφενίου επιτρέπει τον αναλυτικό υπολογισμό της εξάρτησης της ενέργειας και της ορμής της διηλεκτρικής συνάρτησης (Wunsch και άλλοι, 2006; Sarma και άλλοι, 2007). Η προβολή της μεγάλης ακτίνας αλληλεπίδρασης Coulomb συνεπάγεται ότι τα χαμηλής ενέργειας ημισωματίδια παρουσιάζουν μια τετραγωνική εξάρτηση στην ενέργεια σε σχέση με την ενέργεια Fermi (Hwang και άλλοι, 2007).

Ένας τρόπος να εξεταστεί η δύναμη των αλληλεπιδράσεων ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου είναι μέσω της ηλεκτρονικής συμπίεσης. Οι μετρήσεις της συμπίεσης χρησιμοποιώντας ένα τρανζίστορ μονού ηλεκτρονίου (SET) παρουσιάζουν ένα μικρό σημάδι των αλληλεπιδράσεων στο σύστημα, που είναι καλά εξοπλισμένο από το χωρίς αλληλεπίδραση αποτέλεσμα ότι, αντίθετα προς το δισδιάστατο (2D) αέριο ηλεκτρονίου (2DEG) (Eisenstein και άλλοι, το 1994; Giuliani και Vignale, 2005), είναι θετικά διάφορο (Polini και άλλοι, 2007; Martin και άλλοι, 2008). Από την άλλη πλευρά, η διπλοστιβάδα γραφενίου έχει τα χαρακτηριστικά του ενιαίου στρώματος και του 2DEG με μια μη μονοτονική εξάρτηση της συμπίεσης στην πυκνότητα του φορέα (Kusminskiy και άλλοι, 2008). Στην πραγματικότητα, η “μισογεμισμένη” διπλοστιβάδα γραφενίου έχει προβλεφθεί ότι θα είναι ασταθής προς την κρυστάλλωση Wigner (Dahal και

άλλοι, 2007), ακριβώς όπως και το 2DEG. Επιπλέον, σύμφωνα με τους Hartree-Fock υπολογισμούς, η καθαρή διπλοστιβάδα γραφενίου είναι ασταθής προς το σιδηρομαγνητισμό (Nilsson και άλλοι, 2006a).

1. Έλεγχος στις στοίβες γραφενίου

Η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου οδηγεί στην εξέταση των εξωτερικών δυναμικών. Σε μια ενισχυμένη στοίβα, το φορτίο τείνει να συσσωρεύεται κοντά στις επιφάνειες, και η κατανομή του καθορίζεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση της στοίβας στην εκτός-του-επιπέδου κατεύθυνση. Η ίδια πόλωση περιγράφει τον έλεγχο ενός εξωτερικού καθέτου πεδίου στα στρώματα, παρόμοιο με αυτό που προκαλείται από μια είσοδο στα ηλεκτρικά ενισχυμένα συστήματα (Novoselov και άλλοι, 2004). Η κατανομή του φορτίου συνάδει με την διπλοστιβάδα του γραφενίου που έχει μελετηθεί από τον McCann (2006). Από την παρατηρούμενη κατανομή φορτίου και τους αυτοσυνεπείς υπολογισμούς, μια εκτίμηση των παραμέτρων της δομής της ζώνης και της σχέσης τους με το προκληθέν κενό μπορεί να ληφθεί (Castro, Novoselov, Morozov, και άλλοι, 2007).

Ελλείψει των ενδιάμεσων στρωμάτων αναπήδησης, η δυνατότητα πόλωσης ενός συνόλου στοιβών των δισδιάστατων (2D) αερίων του ηλεκτρονίου μπορεί να γραφτεί ως άθροισμα της εξέτασης από τα επιμέρους στρώματα. Χρησιμοποιώντας τις αποδεκτές τιμές για τις επιδραστικές μάζες και τις πυκνότητες φορέα του γραφενίου, αυτό το σύστημα δίνει μια πρώτη προσέγγιση στην απεικόνιση του γραφίτη (Visscher και Falicov, 1971). Το μήκος απεικόνισης στην εκτός-του-επιπέδου κατεύθυνση είναι περίπου δύο στρωμάτων γραφενίου (Morozov και άλλοι, 2005). Αυτό το μοντέλο/πρότυπο είναι εύκολα γενικεύσιμο σε έναν στοίβα ημι-μετάλλων που περιγράφονται από τη δισδιάστατη (2D) εξίσωση Dirac (González και άλλοι, 2001). Στο μισό γέμισμα, το μήκος απεικόνισης αποκλίνει προς όλες τις κατευθύνσεις, και τα αποτελέσματα απεικόνισης είναι αδύναμα.

Η αναπήδηση των ενδιάμεσων στρωμάτων τροποποιεί αυτήν την εικόνα σημαντικά. Η αναπήδηση οδηγεί σε συνοχή (Guinea, 2007). Η εκτός-του-επιπέδου ηλεκτρονική διασπορά είναι παρόμοια με αυτήν ενός μονοδιάστατου (1D) αγωγού. Η εκτός-του-επιπέδου δυνατότητα πόλωσης ενός πολυστρώματος περιέχει συνεισφορές εσω-ζώνης και ενδο-ζώνης. Οι υποζώνες σε ένα σύστημα με συσσώρευση Bernal έχουν μια παραβολική διασπορά, όταν περιλαμβάνονται μόνο οι κοντινότεροι-γειτονικοί όροι αναπήδησης. Αυτή η δομή ζώνης οδηγεί σε μια ευαισθησία της ενδο-ζώνης που περιγράφεται από ένα άθροισμα των όρων όπως εκείνων στην εξίσωση (228), όπου αποκλίνουν στο μισό. Σε ένα άπειρο σύστημα, αυτή η απόκλιση είναι πιο έντονη στο $k_{\perp} = \pi/c$, δηλαδή, για ένα διάλυμα κύματος διπλάσιο από την απόσταση μεταξύ των στρωμάτων. Αυτή η επίδραση ενισχύει τις ταλαντώσεις Friedel στην κατανομή φορτίου στην εκτός-του-επιπέδου κατεύθυνση, η οποία μπορεί να οδηγήσει σε αλλαγές στο πρόσημο του φορτίου στα γειτονικά στρώματα (Guinea, 2007). Μακριά από το μισό γέμισμα, μια διπλοστιβάδα γραφενίου συμπεριφέρεται, με την έννοια του ελέγχου, με τρόπο πολύ παρόμοιο με το 2DEG (Wang και Chakraborty, 2007b).

Γ. Αλληλεπιδράσεις περιορισμένου φάσματος (μικρής εμβέλειας)

Σε αυτή την ενότητα, συζητάμε την επίδραση των περιορισμένου φάσματος αλληλεπιδράσεων Coulomb στη φυσική του γραφενίου. Το απλούστερο σύστημα άνθρακα με μια εξαγωγική μορφή είναι το μόριο του βενζολίου. Η τιμή της αλληλεπίδρασης Hubbard μεταξύ των ηλεκτρονίων π ήταν, για αυτό το σύστημα, υπολογισμένη καιρό πριν από τον Parr και άλλους (1950), αποδίδοντας $U=16.93$ eV. Για λόγους σύγκρισης, στο πολυακετυλένιο η τιμή για την αλληλεπίδραση Hubbard είναι $U \approx 10$ eV και η ενέργεια αναπήδησης είναι $t \approx 2.5$ eV (Baeriswyl και άλλοι, 1986). Αυτά τα δύο παραδείγματα δείχνουν ότι η τιμή της επιτόπιας αλληλεπίδρασης Coulomb είναι αρκετά μεγάλη για τα π ηλεκτρόνια. Ως πρώτη εικασία για το γραφένιο, μπορεί κανείς να πάρει το U για να είναι της ίδιας τάξης όπως και το πολυακετυλένιο, με μια

ακέραια αναπήδηση $t \approx 2.8$ eV. Φυσικά στο καθαρό γραφένιο η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου δεν προβλήθηκε, δεδομένου ότι η πυκνότητα των καταστάσεων είναι μηδενική στο σημείο Dirac, και κάποιος πρέπει να επιλύσει την φαινόμενο των αλληλεπιδράσεων Coulomb με την εξέταση του “άδειου” δυναμικού Coulomb. Αφ' ετέρου, όπως φάνηκε πριν, τα ελαττώματα προκαλούν μια πεπερασμένη πυκνότητα των καταστάσεων στο σημείο Dirac, το οποίο θα μπορούσε να οδηγήσει σε έναν επιδραστικό έλεγχο της μεγάλης εμβέλειας αλληλεπιδράσεως Coulomb. Υποθέτουμε ότι η “άδεια” αλληλεπίδραση Coulomb είναι απεικονισμένη στο γραφένιο και ότι οι αλληλεπιδράσεις Coulomb αντιπροσωπεύονται από την αλληλεπίδραση Hubbard. Αυτό σημαίνει ότι πρέπει να προσθέσουμε τη Χαμιλτονιανή (5) με έναν όρο της μορφής

$$H_U = U \sum_{\mathbf{R}_i} [a_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{R}_i)a_{\uparrow}(\mathbf{R}_i)a_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{R}_i)a_{\downarrow}(\mathbf{R}_i) + b_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{R}_i)b_{\uparrow}(\mathbf{R}_i)b_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{R}_i)b_{\downarrow}(\mathbf{R}_i)]. \quad (222)$$

Η απλούστερη ερώτηση που μπορεί κάποιος να κάνει είναι εάν αυτό το σύστημα παρουσιάζει μια τάση προς κάποιο είδος μαγνητικής τάξεως που οδηγείται από την αλληλεπίδραση U . Μέσα στην απλούστερη προσέγγιση Hartree-Fock (Peres και άλλοι, 2004), η γραμμή αστάθειας του σιδηρομαγνητισμού δίνεται από

$$U_F(\mu) = \frac{2}{\rho(\mu)}, \quad (223)$$

το οποίο είναι απλώς το κριτήριο Stoner. Παρόμοια αποτελέσματα λαμβάνονται σε περιπλοκότερους υπολογισμούς (Herbut, 2006). Στο μισό γέμισμα η τιμή για την πυκνότητα των καταστάσεων είναι $\rho(0)=0$ και η κρίσιμη τιμή για το U_F είναι μεγάλη. Επομένως, δεν αναμένουμε μια σιδηρομαγνητική κατάσταση στο σημείο ουδετερότητας ενός ηλεκτρονίου ανά άτομο άνθρακα. Για άλλες ηλεκτρονικές πυκνότητες, το $\rho(\mu)$ γίνεται ένας πεπερασμένος παράγοντας για μια πεπερασμένη τιμή του U_F . Σημειώνουμε ότι ο συνυπολογισμός του t' δεν αλλάζει αυτά τα συμπεράσματα, δεδομένου ότι η πυκνότητα των καταστάσεων παραμένει μηδενική στο σημείο ουδετερότητας.

Η κρίσιμη δύναμη αλληλεπίδρασης προς μια αντισιδηρομαγνητική κατάσταση δίνεται από (Peres και άλλοι, 2004)

$$U_{AF}(\mu) = \frac{2}{(1/N) \sum_{\mathbf{k}, \mu > 0} 1/|E_{+}(\mathbf{k})|}, \quad (224)$$

όπου το $E_{+}(\mathbf{k})$ δίνεται από την εξίσωση (6). Αυτό το αποτέλεσμα δίνει ένα πεπερασμένο U_{AF} στο σημείο ουδετερότητας (Sorella και Tosatti, 1992; Martelo και άλλοι, 1997),

$$U_{AF}(0) = 2.23t. \quad (225)$$

Οι κβαντικοί υπολογισμοί του Monte Carlo (Sorella και Tosatti, 1992; Paiva και άλλοι, 2005), παρόλα αυτά, αυξάνουν την τιμή του

$$U_{AF}(0) \approx 5t. \quad (226)$$

Παίρνοντας για το γραφένιο την ίδια τιμή για U όπως στο πολυακετυλένιο και $t=2.8$ eV, λαμβάνει κανείς $U/t \approx 3.6$, τα οποία θέτουν το σύστημα μακριά από τη μετάβαση προς μια επίγεια κατάσταση αντισιδηρομαγνητισμού. Ακόμα μια δυνατότητα είναι ότι το σύστημα μπορεί να είναι σε κάποιο κβαντικό υγρό περιστροφής (Lee και Lee, 2005) [όπως αρχικά προτάθηκε από τον Pauling (1972) το 1956] δεδομένου ότι οι υπολογισμοί μέσου-πεδίου δίνουν μια κρίσιμη τιμή για το U για να είναι της τάξεως του $U/t \approx 1.7$. Τέλος, δεν είναι γνωστό, εάν αυτός ο τύπος επίγειας καταστάσεως υπάρχει πραγματικά και εάν οι κβαντικές διακυμάνσεις ωθούν αυτήν την τιμή του U προς μεγαλύτερες τιμές.

1. Διπλοστιβάδα γραφενίου: Ανταλλαγή

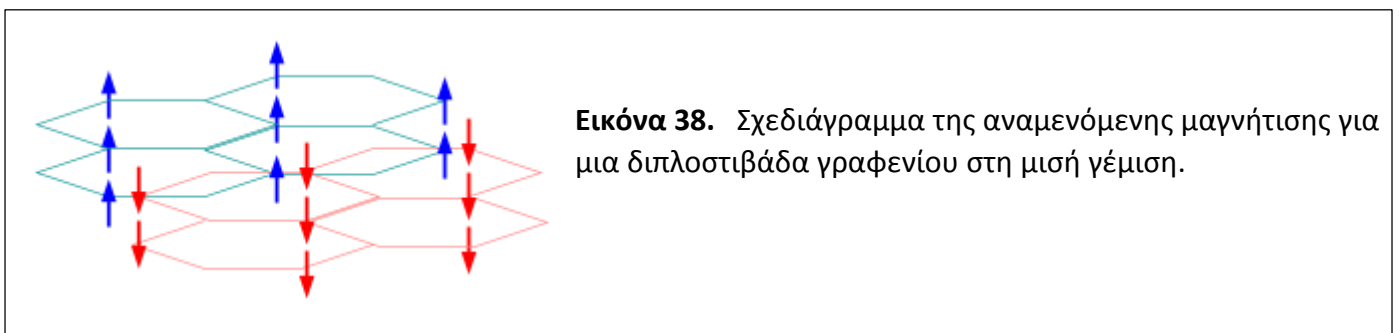
Η αλληλεπίδραση ανταλλαγής μπορεί να είναι μεγάλη σε μια αμερόληπτη διπλοστιβάδα γραφενίου: με μια μικρή συγκέντρωση των φορέων. Αποδείχθηκε ότι η συμβολή ανταλλαγής στην ηλεκτρονική ενέργεια ενός ενιαίου στρώματος γραφενίου δεν οδηγεί σε μια σιδηρομαγνητική αστάθεια (Peres και άλλοι, 2005). Ο λόγος για αυτό είναι μια σημαντική συμβολή από την ανταλλαγή ενδο-ζώνης, η οποία είναι ένας όρος που συνήθως παραμελείται στους ενισχυμένους ημιαγωγούς. Αυτή η συμβολή εξαρτάται από την επικάλυψη των κυματοσυναρτήσεων μετάδοσης και σθένους, και τροποποιείται σε μια διπλοστιβάδα. Η ενέργεια ανταλλαγής της ενδο-ζώνης μειώνεται σε μια διπλοστιβάδα (Nilsson και άλλοι, 2006b), και η θετική συμβολή που εξαρτάται λογαριθμικά από το εύρος ζώνης στο γραφένιο είναι απύσχα στη διπλοστιβάδα της. Κατά συνέπεια, η ενέργεια ανταλλαγής γίνεται αρνητική, και κλίμακες $n^{3/2}$, όπου το n είναι η πυκνότητα φορέα, παρόμοια με την 2DEG. Η τετραγωνική διασπορά στις χαμηλές ενέργειες συνεπάγεται ότι οι κλίμακες κινητικής ενέργειας είναι n^2 , πάλι όπως την 2DEG. Αυτή η επέκταση οδηγεί σε

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{exc}} \approx \frac{\pi v_F^2 n^2}{8t_{\perp}} - \frac{e^2 n^{3/2}}{27\sqrt{\pi\epsilon_0}}. \quad (227)$$

Γράφοντας $n_{\uparrow}=(n+s)/2$, $n_{\downarrow}=(n-s)/2$, όπου s είναι ο μαγνητισμός, η εξίσωση (227) προβλέπει μια μετάβαση δευτέρας-τάξεως σε μια σιδηρομαγνητική κατάσταση για $n=4e^4 t^2/81\pi^3 v_F^4 \epsilon_0$. Υψηλότερης-τάξεως διορθώσεις στην εξίσωση (227) οδηγούν σε μια πρώτης-τάξεως μετάβαση σε ελαφρώς υψηλότερες πυκνότητες (Nilsson και άλλοι, 2006b). Για μια αναλογία $\gamma_1/\gamma_0 \approx 0.1$, αυτή η ανάλυση συνεπάγεται ότι μια διπλοστιβάδα γραφενίου πρέπει να είναι σιδηρομαγνητική για τις πυκνότητες φορέων έτσι ώστε $|n| \leq 4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$.

Μια διπλοστιβάδα είναι επίσης το μοναδιαίο κύτταρο του Bernal γραφίτη, και η αστάθεια ανταλλαγής μπορεί επίσης να μελετηθεί σε ένα άπειρο σύστημα. Λαμβάνοντας υπόψη μόνο την αναπήδηση των κοντινότερων-γειτονικών ενδιάμεσων στρωμάτων, ο χύμα γραφίτης θα πρέπει επίσης να παρουσιάζει αστάθεια ανταλλαγής στο χαμηλό ντόπινγκ. Στην πραγματικότητα, υπάρχουν πειραματικά στοιχεία για μια σιδηρομαγνητική αστάθεια στον έντονα διαταραγμένο γραφίτη (Esquinazi και άλλοι, 2002, 2003; Kopelevich και Esquinazi, 2007).

Η ανάλυση που περιγράφηκε παραπάνω μπορεί να επεκταθεί σε μια διπλοστιβάδα, όπου ένα κενό χωρίζει τις ζώνες αγωγιμότητας και σθένους (Stauber και άλλοι, 2007). Η ανάλυση αυτής της περίπτωσης είναι κάπως διαφορετική, δεδομένου ότι η επιφάνεια Fermi στο χαμηλό ντόπινγκ είναι ένα δαχτυλίδι, και η αλληλεπίδραση ανταλλαγής μπορεί να αλλάξει τα όριά της. Η παρουσία ενός κενού μειώνει περαιτέρω τη μίξη των ζωνών σθένους και αγωγιμότητας, που οδηγούν σε μια αύξηση της αστάθειας ανταλλαγής. Σε όλα τα επίπεδα ντόπινγκ, όπου η επιφάνεια Fermi είναι ένα δαχτυλίδι που διαμορφώνεται, από την προκατειλημμένη διπλοστιβάδα και είναι ασταθές προς το σιδηρομαγνητισμό.



Εικόνα 38. Σχεδιάγραμμα της αναμενόμενης μαγνήτισης για μια διπλοστιβάδα γραφενίου στη μισή γέμιση.

2. Διπλοστιβάδα γραφενίου: Αλληλεπιδράσεις περιορισμένου φάσματος

Η δομή ζώνης μιας διπλοστιβάδας γραφενίου, στη μισή γέμιση, οδηγεί σε λογαριθμικές αποκλίσεις στις διαφορετικές συναρτήσεις απάντησης που είναι $\mathbf{q}=\mathbf{0}$. Οι δύο παραβολικές ζώνες που είναι εφαιπτόμενες στο $\mathbf{k}=\mathbf{0}$ οδηγούν σε μια ευαισθησία που δίνεται από τη σχέση

$$\chi(\vec{q}, \omega) \propto \int_{|\vec{q}| < \Lambda} d^2\mathbf{k} \frac{1}{\omega - (v_F^2/t)|\mathbf{k}|^2} \propto \ln\left(\frac{\Lambda}{\sqrt{\omega t/v_F^2}}\right), \quad (228)$$

όπου $\Lambda \sim \sqrt{t^2/v_F^2}$ είναι μια υψηλή ορμή αποκοπής. Αυτές οι λογαριθμικές αποκλίσεις είναι παρόμοιες με αυτές που παρουσιάζονται όταν η επιφάνεια Fermi ενός δισδιάστατου (2D) μετάλλου είναι κοντά σε ένα σημείο φόρτωσης της σχέσεως διασποράς (González και άλλοι, 1996). Μια πλήρης επεξεργασία αυτών των αποκλίσεων απαιτεί μια προσέγγιση RG (Shankar, 1994). Ωστόσο, μέσα σε μια απλούστερη επεξεργασία μέσου πεδίου, είναι εύκολο να σημειωθεί ότι η απόκλιση της ευαισθησίας της διπλοστιβάδας δημιουργεί μια αστάθεια προς μια αντισιδηρομαγνητική φάση, όπου τα άτομα άνθρακα (που δεν συνδέονται με τα γειτονικά στρώματα) αποκτούν μια πεπερασμένη μαγνήτιση, ενώ η μαγνήτιση των ατόμων που είναι συνδεδεμένα με γειτονικά στρώματα παραμένει μηδενική. Ένα σύστημα της αναμενόμενης καταστάσεως αναταραχής παρουσιάζεται στην εικόνα 38.

Δ. Αλληλεπιδράσεις σε υψηλά μαγνητικά πεδία

Ο σχηματισμός των επιπέδων Landau ενισχύει τα φαινόμενα των αλληλεπιδράσεων λόγω της απόσβεσης της κινητικής ενέργειας. Αυτό το φαινόμενο είναι εντονότερο στα χαμηλά γεμίματα, όταν μόνο καταλαμβάνονται τα χαμηλότερα επίπεδα. Νέες φάσεις μπορούν να εμφανιστούν σε χαμηλές θερμοκρασίες. Εξετάζουμε εδώ τις διάφορες φάσεις από το τμηματικό κβαντικό φαινόμενο Hall, οι οποίες φάσεις δεν έχουν παρατηρηθεί μέχρι στιγμής στο γραφένιο. Η ύπαρξη των νέων φάσεων μπορεί να προκύψει από το διαχωρισμό του εκφυλισμού της κοιλάδας ή της περιστροφής των επιπέδων Landau, ο οποίος διαχωρισμός μπορεί να παρατηρηθεί στις μετρήσεις φασματοσκοπίας (Sadowski και άλλοι, 2006; Henriksen, Tung, Jiang, και άλλοι, 2007), ή στην εμφάνιση του νέου κβαντικού σταθερού επιπέδου Hall (Zhang και άλλοι, 2006; Abanin, Novoselov, Zeitler, και άλλοι, 2007; Giesbers και άλλοι, 2007; Goswami και άλλοι, 2007; Jiang, Zhang, Stormer, και άλλοι, 2007).

Οι αλληλεπιδράσεις μπορούν να οδηγήσουν στις νέες φάσεις όταν η επίδρασή τους υπερνικά αυτήν την αναταραχή. Μια ανάλυση του ανταγωνισμού μεταξύ της αναταραχής και των αλληλεπιδράσεων έχει γίνει από τους Nomura και MacDonald (2007). Η ενεργειακή διάσπαση των διαφόρων φάσεων σπασμένης συμμετρίας, σε ένα καθαρό σύστημα, καθορίζεται από τις επιδράσεις του πλέγματος, έτσι ώστε να μειώνεται από συντελεστές της τάξεως του a/l_B , όπου το a είναι ένα μήκος της τάξεως της αποστάσεως του πλέγματος και το l_B είναι το μαγνητικό μήκος (Alicea και Fisher, 2006; Goerbig και άλλοι, 2006, 2007; Wang και άλλοι, 2008). Ο συνδυασμός της αναταραχής και ενός μαγνητικού πεδίου μπορεί επίσης να άρει τον εκφυλισμό μεταξύ των δύο κοιλάδων, ευνοώντας τις πολωμένες φάσεις της κοιλάδας (Abanin, Lee, και Leviton, 2007).

Εκτός από τις φάσεις όπου είναι ενισχυμένος ο σιδηρομαγνητισμός ή είναι σπασμένη η συμμετρία της κοιλάδας, οι αλληλεπιδράσεις στα υψηλά μαγνητικά πεδία μπορούν να οδηγήσουν σε εξιτονικές αστάθειες (Gusynin και άλλοι, 2006) και σε κρυσταλλικές φάσεις Wigner (Zhang και Joglekar, 2007). Όταν μόνο η κατάσταση $n=0$ είναι κατειλημμένη, τότε τα επίπεδα Landau θα έχουν όλο το βάρος τους σε ένα δεδομένο υπόπλεγμα. Κατόπιν, το σπάσιμο του εκφυλισμού της κοιλάδας μπορεί να συνδεθεί με ένα κύμα φόρτισης-πυκνότητας, το οποίο ανοίγει ένα κενό (Fuchs και Lederer, 2007). Να σημειωθεί ότι σε αυτές τις φάσεις είναι πιθανές οι νέες συλλογικές διεγέρσεις (Doretto και Morais Smith, 2007).

Οι αλληλεπιδράσεις τροποποιούν τις καταστάσεις στα άκρα του κβαντικού συστήματος Hall. Μια νέα φάση μπορεί να εμφανιστεί όταν το $n=0$ είναι το τελευταίο γεμάτο επίπεδο. Ο διαχωρισμός Zeeman μετατοπίζει τις παρόμοιες στροφικές καταστάσεις ηλεκτρονίων και οπών, οι οποίες καταστάσεις διασκορπίζονται σε αντίθετες κατευθύνσεις κοντά στο όριο του δείγματος. Το προκύπτον ισόπεδο πέρασμα μεταξύ ενός επιπέδου παρόμοιου με το ηλεκτρόνιο με αντί-παράλληλη περιστροφή στο πεδίο, και ένα επίπεδο παρόμοιο με την οπή με παράλληλη περιστροφή στο πεδίο, μπορούν να οδηγήσουν στα χαρακτηριστικά του υγρού Luttinger των ακραίων καταστάσεων (Fertig και Brey, 2006; Abanin, Novoselov, Zeitler, και άλλοι, 2007).

VI. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Το γραφένιο είναι ένα μοναδικό σύστημα από πολλές απόψεις. Είναι πραγματικά δισδιάστατο (2D), έχει ασυνήθιστες ηλεκτρονικές διεγέρσεις που περιγράφεται από τους όρους των φερμιονίων Dirac που κινούνται σε ένα καμπύλο χώρο, είναι ένα ενδιαφέρον μίγμα ενός ημιαγωγού (μηδενικής πυκνότητας καταστάσεων) και ενός μετάλλου, και έχει τις ιδιότητες μαλακής ύλης. Τα ηλεκτρόνια στο γραφένιο φαίνονται να είναι σχεδόν “ατάραχα” στις αλληλεπιδράσεις αναταραχής και στις αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου και έχουν πολύ μακριά μέσα ελεύθερα μονοπάτια. Επομένως, οι ιδιότητες του γραφενίου είναι διαφορετικές από αυτές που συνήθως έχουν τα μέταλλα και οι ημιαγωγοί. Το γραφένιο έχει επίσης μια γερή αλλά ταυτόχρονα και εύκαμπτη δομή με τις ασυνήθιστες λειτουργίες του φωνονίου που δεν υπάρχουν στα συνηθισμένα τρισδιάστατα (3D) στερεά. Υπό κάποια έννοια, το γραφένιο συγκεντρώνει ζητήματα κβαντικής βαρύτητας και μοριακής φυσικής, και επίσης από το μαλακή και σκληρή συμπυκνωμένη ύλη. Το ενδιαφέρον είναι ότι αυτές οι ιδιότητες μπορούν εύκολα να τροποποιηθούν με την εφαρμογή ηλεκτρικών και μαγνητικών πεδίων, την προσθήκη στρωμάτων, τον έλεγχο της γεωμετρίας του, και το χημικό ντόπινγκ. Επιπλέον, το γραφένιο μπορεί άμεσα και σχετικά εύκολα να εξεταστεί από τις διάφορες τεχνικές ελέγχων ανίχνευσης και από τις μεσοσκοπικές έως τις ατομικές κλίμακες, επειδή δεν είναι κρυμμένο μέσα σε μια τρισδιάστατη (3D) δομή. Αυτό κάνει το γραφένιο ένα από τα πιο ευπροσάρμοστα/εύελικτα συστήματα στον τομέα της έρευνας της συμπυκνωμένης ύλης.

Εκτός από τις ασυνήθιστες βασικές ιδιότητες, το γραφένιο έχει δυνατότητα για έναν μεγάλο αριθμό εφαρμογών (Geim και Novoselov, 2007), από τους χημικούς αισθητήρες (Chen, Lin, Rooks, και άλλοι, 2007; Schedin και άλλοι, 2007) στα τρανζίστορ (Nilsson και άλλοι, 2006b; Oostinga και άλλοι, 2007). Το γραφένιο μπορεί να τροποποιηθεί χημικά ή/και δομικά προκειμένου τροποποιηθεί η λειτουργία του και οι πλέον πιθανές εφαρμογές του. Επιπλέον, το γραφένιο μπορεί να ληφθεί εύκολα από το γραφίτη, ένα υλικό που είναι άφθονο στην επιφάνεια της Γης. Αυτό το ιδιαίτερο χαρακτηριστικό κάνει το γραφένιο ένα από τα ευκολότερα διαθέσιμα υλικά για τη βασική έρευνα δεδομένου ότι εν υπάρχει το οικονομικό “αγκάθι” για τα ερευνητικά ιδρύματα όπου στις αναπτυσσόμενες χώρες τα δείγματα ακριβαίνουν.

Πολλές από τις ιδιότητες του γραφενίου είναι αυτήν την περίοδο αντικείμενο έντονης έρευνας και συζήτησης. Καταλαβαίνοντας τη φύση της αναταραχής και πώς αυτή έχει επιπτώσεις στις ιδιότητες των μεταφοράς (ένα πρόβλημα τεράστιας σημασίας για τις εφαρμογές), η επίδραση των φωνονίων στην ηλεκτρονική μεταφορά, η φύση των αλληλεπιδράσεων ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου, και το πως αυτά τροποποιούν τις σωματικές ιδιότητές του είναι ερευνητικοί τομείς που ακόμα είναι στην αρχή. Σε αυτήν την ανασκόπηση, έχουμε αγγίξει μόνο την επιφάνεια.

Λαμβάνοντας υπόψη ότι πολλά έγγραφα έχουν γραφτεί για τη μονοστιβάδα του γραφενίου τα τελευταία χρόνια, μόνο ένα μικρό μέρος εξετάζει πραγματικά τα πολυστρώματα. Η πλειοψηφία των θεωρητικών και πειραματικών προσπαθειών έχει επικεντρωθεί στο ενιαίο στρώμα (στη μονή στρώση/στιβάδα), ίσως λόγω της απλότητάς της και της φυσικής έλξης που έχει ένα παχύ ατομικό υλικό, που μπορεί να παραχθεί με απλές μεθόδους σχεδόν σε οποιοδήποτε εργαστήριο. Εντούτοις, λίγα-στρώματα γραφενίου είναι εξίσου ενδιαφέροντα και ασυνήθιστα με ένα τεχνολογικό δυναμικό, ίσως και μεγαλύτερο από το ενιαίο στρώμα. Πράγματι, η θεωρητική κατανόηση και η πειραματική εξερεύνηση των πολυστρωμάτων είναι αρκετά πίσω σε σχέση με το ενιαίο στρώμα. Πρόκειται για ένα γόνιμο και ανοιχτό πεδίο της έρευνας για το μέλλον.

Τέλος, έχουμε εστιάσει εξ ολοκλήρου στον καθαρό άνθρακα του γραφενίου όπου η δομή της ζώνης κυριαρχείται από την περιγραφή Dirac. Παρ' όλα αυτά, η χημική τροποποίηση του γραφενίου μπορεί να οδηγήσει στην εξ' ολοκλήρου σε νέα φυσική. Ανάλογα με τη φύση των χημικών υλικών πρόσμειξης και πως αυτές εισάγονται στο πλέγμα γραφενίου (προσρόφηση, αντικατάσταση, ή παρεμβολή), μπορούν να υπάρξουν πολλά αποτελέσματα. Οι μικρές συγκεντρώσεις του προσροφημένου αλκαλικού μετάλλου μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να αλλάξουν το χημικό δυναμικό ενώ τα προσροφημένα στοιχεία μετάβασης μπορούν να οδηγήσουν σε ισχυρές επιδράσεις υβριδοποίησης που έχουν επιπτώσεις στην ηλεκτρονική δομή. Στην πραγματικότητα, το εισαγωγή των *d*- και *f*- ατόμων ηλεκτρονίου στο πλέγμα του γραφενίου μπορούν να βελτιώσουν σημαντικά τις αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου. Συνεπώς, είναι εύκολο να προβλεφθεί ένας μεγάλος αριθμός αποτελεσμάτων για τα πολύ-σώματα που μπορούν να προκληθεί με το ντόπινγκ και πρέπει να μελετηθούν στα πλαίσια των ηλεκτρονίων Dirac: Επίδραση Kondo, σιδηρομαγνητισμός, αντισιδηρομαγνητισμός, και κύματα φορτίου και περιστροφής-πυκνότητας. Η μελέτη των χημικά προκληθέντων επιπτώσεων των πολύ-σωμάτων στο γραφένιο θα πρόσθεσει ένα νέο κεφάλαιο στη σύντομη αλλά συναρπαστική ιστορία αυτού του υλικού. Μόνο ο χρόνος θα δείξει, αλλά η πιθανότητα για περισσότερες εκπλήξεις κρύβεται στον ορίζοντα.

ΠΗΓΕΣ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Abanin, D. A., P. A. Lee, και L. S. Levitov, 2006, Phys. Rev. Lett. **96**, 176803.

Abanin, D. A., P. A. Lee, και L. S. Levitov, 2007, Solid State Commun. **143**, 77.

Abanin, D. A., και L. S. Levitov, 2007, Science **317**, 641.

Abanin, D. A., K. S. Novoselov, U. Zeitler, P. A. Lee, A. K. Geim, και L. S. Levitov, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 196806.

Abergel, D. S. L., A. Russell, και V. I. Fal'ko, 2007, Appl. Phys. Lett. **91**, 063125.

Abrikosov, A. A., 1998, Phys. Rev. B **58**, 2788.

Adam, S., E. H. Hwang, V. M. Galitski, και S. das Sarma, 2007, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **104**, 18392.

Adebpour, N., M. Neek-Amal, R. A. και F. Shahbazi, N. Nafari, και M. Reza Rahimi Tabar, 2007, Phys. Rev. B **76**, 195407.

Affoune, A. M., B. L. V. Prasad, H. Saito, T. Enoki, Y. Kaburagi, και Y. Hishiyama, 2001, Chem. Phys. Lett. **348**, 17.

Akhmerov, A. R., και C. W. J. Beenakker, 2008, Phys. Rev. B **77**, 085423.

Aleiner, I. L., και K. B. Efetov, 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 236801.

Alicea, J., και M. P. A. Fisher, 2006, Phys. Rev. B **74**, 075422.

Alicea, J., και M. P. A. Fisher, 2007, Solid State Commun. **143**, 504.

Altland, A., 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 236802.

Ando, T., 1974a, J. Phys. Soc. Jpn. **36**, 1521.

Ando, T., 1974b, J. Phys. Soc. Jpn. **37**, 622.

Ando, T., 1974c, J. Phys. Soc. Jpn. **37**, 1233.

Ando, T., 1975, J. Phys. Soc. Jpn. **38**, 989.

Ando, T., 2000, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 1757.

Ando, T., 2006a, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 124701.

Ando, T., 2006b, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 074716.

Ando, T., 2007a, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 024712.

Ando, T., 2007b, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 104711.

Ando, T., T. Nakanishi, και R. Saito, 1998, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 2857.

Ando, T., και Y. Uemura, 1974, J. Phys. Soc. Jpn. **36**, 959.

Ando, T., Y. Zheng, και H. Suzuura, 2002, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 1318.

Andreoni, W., 2000, *The Physics of Fullerene-Based και Fullerene-Related Materials* (Springer, Berlin).

Areshkin, D. A., και C. T. White, 2007, Nano Lett. **7**, 204.

Ashcroft, N. W., και N. D. Mermin, 1976, *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia).

Bacon, G. E., 1950, Acta Crystallogr. **4**, 320.

Baeriswyl, D., D. K. Campbell, και S. Mazumdar, 1986, Phys. Rev. Lett. **56**, 1509.

Bak, P., 1982, Rep. Prog. Phys. **45**, 587.

Balatsky, A. V., I. Vekhter, και J.-X. Zhu, 2006, Rev. Mod. Phys. **78**, 373.

Bar, V. W., Y. Zhang, Y. Yayon, A. Bostwick, T. Ohta, J. L. McChesney, K. Horn, E. Rotenberg, και M. F. Crommie, 2007, Appl. Phys. Lett. **91**, 122102.

Bardarson, J. H., J. Tworzydło, P. W. Brouwer, και C. W. J. Beenakker, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 106801.

Barlas, Y., T. Pereg-Barnea, M. Polini, R. Asgari, και A. H. MacDonald, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 236601.

Barone, V., O. Hod, και G. E. Scuseria, 2006, Nano Lett. **6**, 2748.

Baym, G., 1969, *Lectures on Quantum Mechanics* (Benjamin, New York).

Baym, G., και S. A. Chin, 1976, Nucl. Phys. A **262**, 527.

Bena, C., και S. A. Kivelson, 2005, Phys. Rev. B **72**, 125432.

Berger, C., Z. Song, X. Li, X. Wu, N. Brown, C. Naud, D. Mayou, T. Li, J. Hass, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, Phillip N. First, και Walt A. de Heer, 2006, Science **312**, 1191.

Berger, C., Z. M. Song, T. B. Li, X. B. Li, A. Y. Ogbazghi, R. Feng, Z. T. Dai, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, και W. A. de Heer, 2004, *J. Phys. Chem. B* **108**, 19912.

Bergman, G., 1984, *Phys. Rep.* **107**, 1.

Bernevig, B. A., T. L. Hughes, S. Raghu, και D. P. Arovas, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 146804.

Berry, M. V., και R. J. Modragon, 1987, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **412**, 53.

Bhattacharjee, S., και K. Sengupta, 2006, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 217001.

Birrell, N. D., and P. C. W. Davies, 1982, *Quantum Fields in Curved Space* (Cambridge University Press, Cambridge).

Biswas, R. B., S. Sachdev, and D. T. Son, 2007, *Phys. Rev. B* **76**, 205122.

Blake, P., K. S. Novoselov, A. H. Castro Neto, D. Jiang, R. Yang, T. J. Booth, A. K. Geim, και E. W. Hill, 2007, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 063124.

Bliokh, K. Y., 2005, *Phys. Lett. A* **344**, 127.

Bommel, A. J. V., J. E. Crombeen, και A. V. Tooren, 1975, *Surf. Sci.* **48**, 463.

Bonini, N., M. Lazzeri, N. Marzari, και F. Mauri, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 176802.

Booth, T. J., P. Blake, R. R. Nair, D. Jiang, E. W. Hill, U. Bangert, A. Bleloch, M. Gass, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, και A. K. Geim, 2008, *Nano Lett.* **8**, 2442.

Bostwick, A., T. Ohta, J. L. McChesney, K. V. Emtsev, T. Seyller, K. Horn, και E. Rotenberg, 2007, *New J. Phys.* **9**, 385.

Bostwick, A., T. Ohta, T. Seyller, K. Horn, και E. Rotenberg, 2007, *Nat. Phys.* **3**, 36.

Boyle, W. S., και P. Nozières, 1958, *Phys. Rev.* **111**, 782.

Brandt, N. B., S. M. Chudinov, και Y. G. Ponomarev, 1988, in *Modern Problems in Condensed Matter Sciences*, edited by V. M. Agranovich και A. A. Maradudin (North-Holland, Amsterdam), Vol. 20.1.

Brey, L., και H. Fertig, 2006a, *Phys. Rev. B* **73**, 195408.

Brey, L., και H. Fertig, 2006b, *Phys. Rev. B* **73**, 235411.

Brey, L., H. A. Fertig, και S. D. Sarma, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 116802.

Bunch, J. S., A. M. van der Zande, S. S. Verbridge, I. W. Frank, D. M. Tanenbaum, J. M. Parpia, H. G. Craighead, και P. L. McEuen, 2007, *Science* **315**, 490.

Calandra, M., και F. Mauri, 2007, *Phys. Rev. B* **76**, 199901.

Calizo, I., W. Bao, F. Miao, C. N. Lau, και A. A. Balandin, 2007, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 201904.

Calogeracos, A., και N. Dombey, 1999, *Contemp. Phys.* **40**, 313.

Campagnoli, G., and E. Tosatti, 1989, in *Progress on Electron Properties of Metals*, edited by R. Girlanda et al. (Kluwer, Dordrecht), p. 337.

Cancado, L. G., M. A. Pimenta, R. B. R. Neves, G. MedeirosRibeiro, T. Enoki, Y. Kobayashi, K. Takai, K.-I. Fukui, M. S. Dresselhaus, R. Saito, και A. Jorio, 2004, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 047403.

Casiraghi, C., A. Hartschuh, E. Lidorikis, H. Qian, H. Harutyunyan, T. Gokus, K. S. Novoselov, και A. C. Ferrari, 2007, *Nano Lett.* **7**, 2711.

Cassanella, C. R., και E. Fradkin, 1996, Phys. Rev. B **53**, 15079.

Cassanella, C. R., και E. Fradkin, 1997, Phys. Rev. B **56**, 11246.

Castillo, H. E., C. de C. Chamon, E. Fradkin, P. M. Goldbart, και C. Mudry, 1997, Phys. Rev. B **56**, 10668.

Castro, E. V., K. S. Novoselov, S. V. Morozov, N. M. R. Peres, J. Lopes dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A. K. Geim, και A. H. Castro Neto, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 216802.

Castro, E. V., N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, A. H. Castro Neto, και F. Guinea, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 026802.

Castro Neto, A. H., 2007, Nature Mater. **6**, 176.

Castro Neto, A. H., και F. Guinea, 2007, Phys. Rev. B **75**, 045404.

Castro Neto, A. H., F. Guinea, και N. M. R. Peres, 2006a, Phys. World **19**, 33.

Castro Neto, A. H., F. Guinea, και N. M. R. Peres, 2006b, Phys. Rev. B **73**, 205408.

Chaikin, P., και T. C. Lubensky, 1995, *Introduction to Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge).

Chakravarty, S., και A. Schmid, 1986, Phys. Rep. **140**, 193.

Chamon, C. C., C. Mudry, και X.-G. Wen, 1996, Phys. Rev. B **53**, R7638.

Charlier, J.-C., X. Blase, και S. Roche, 2007, Rev. Mod. Phys. **79**, 677.

Charlier, J. C., J. P. Michenaud, X. Gonze, και J. P. Vigneron, 1991, Phys. Rev. B **44**, 13237.

Cheianov, V. V., και V. I. Fal'ko, 2006, Phys. Rev. B **74**, 041403.

Cheianov, V. V., V. Fal'ko, και B. L. Altshuler, 2007, Science **315**, 1252.

Cheianov, V. V., V. I. Fal'ko, B. L. Altshuler, και I. L. Aleiner, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 176801.

Chen, H.-Y., V. Apalkov, και T. Chakraborty, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 186803.

Chen, J. H., C. Jang, M. S. Fuhrer, E. D. Williams, και M. Ishigami, 2008, Nat. Phys. **4**, 377.

Chen, Z., Y.-M. Lin, M. J. Rooks, και P. Avouris, 2007, Physica E (Amsterdam) **40** (2), 228.

Cho, S., Y.-F. Chen, and M. S. Fuhrer, 2007, Appl. Phys. Lett. **91**, 123105.

Coey, J. M. D., M. Venkatesan, C. B. Fitzgerald, A. P. Douvalis, και I. S. Sanders, 2002, Nature **420**, 156.

Coraux, J., A. T. N'Diaye, C. Busse, και T. Michely, 2008, Nano Lett. **8**, 565.

Cortijo, A., και M. A. H. Vozmediano, 2007a, Nucl. Phys. B **763**, 293.

Cortijo, A., και M. A. H. Vozmediano, 2007b, Europhys. Lett. **77**, 47002.

Cserti, J., A. Csordás, και G. Dávid, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 066802.

Cserti, J., A. Palyi, και C. Peterfalvi, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 246801.

Dahal, H., Y. N. Joglekar, K. Bedell, και A. V. Balatsky, 2006, Phys. Rev. B **74**, 233405.

Dahal, H. P., T. O. Wehling, K. S. Bedell, J.-X. Zhu, και A. V. Balatsky, 2007, e-print arXiv:0706.1689.

Das, A., B. Chakraborty, και A. K. Sood, 2008, Bull. Mater. Sci. **31**, 579.

Deacon, R. S., K.-C. Chuang, R. J. Nicholas, K. S. Novoselov, και A. K. Geim, 2007, Phys. Rev. B **76**, 081406(R).

de Gennes, P. G., 1964, Rev. Mod. Phys. **36**, 225.

de Heer, W. A., C. Berger, X. Wu, P. N. First, E. H. Conrad, X. Li, T. Li, M. Sprinkle, J. Hass, M. L. Sadowski, M. Potemski, και G. Martinez, 2007, Solid State Commun. **143**, 92.

de Juan, F., A. Cortijo, και M. A. H. Vozmediano, 2007, Phys. Rev. B **76**, 165409.

Dell'Anna, L., 2006, Nucl. Phys. B **758**, 255.

Dharma-Wardana, M. W. C., 2007, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 386228.

Dienwiebel, M., G. S. Verhoeven, N. Pradeep, J. W. M. Frenken, J. A. Heimberg, και H. W. Zandbergen, 2004, Phys. Rev. Lett. **92**, 126101.

Dillon, R. O., I. L. Spain, και J. W. McClure, 1977, J. Phys. Chem. Solids **38**, 635.

DiVincenzo, D. P., και E. J. Mele, 1984, Phys. Rev. B **29**, 1685.

Dong, S.-H., X.-W. Hou, και Z.-Q. Ma, 1998, Phys. Rev. A **58**, 2160.

Doretto, R. L., και C. Morais Smith, 2007, Phys. Rev. B **76**, 195431.

Dresselhaus, G., και M. S. Dresselhaus, 1965, Phys. Rev. **140**, A401.

Dresselhaus, M. S., και G. Dresselhaus, 2002, Adv. Phys. **51**, 1.

Dresselhaus, M. S., G. Dresselhaus, J. E. Fischer, και M. J. Moran, 1983, *Intercalated Graphite* (North-Holland, New York).

Dresselhaus, M. S., και J. G. Mavroides, 1964, IBM J. Res. Dev. **8**, 262.

Dugaev, V. K., V. I. Litvinov, και J. Barnas, 2006, Phys. Rev. B **74**, 224438.

Duke, C. B., 1968, Phys. Rev. **168**, 816.

Eisenstein, J. P., L. N. Pfeiffer, και K. W. West, 1994, Phys. Rev. B **50**, 1760.

Eizenberg, M., and J. M. Blakely, 1979, Surf. Sci. **82**, 228.

Esquinazi, P., A. Setzer, R. Höhne, C. Semmelhack, Y. Kopelevich, D. Spemann, T. Butz, B. Kohlstrunk, και M. Lösch, 2002, Phys. Rev. B **66**, 024429.

Esquinazi, P., D. Spemann, R. Höhne, A. Setzer, K.-H. Han, and T. Butz, 2003, Phys. Rev. Lett. **91**, 227201.

Eun-Ah Kim, και A. H. Castro Neto, 2008, Europhys. Lett. **84**, 57007.

Fasolino, A., J. H. Los, and M. I. Katsnelson, 2007, Nature Mater. **6**, 858.

Faugeras, C., A. Neri, M. Potemski, A. Mahmood, E. Dujardin, C. Berger, και W. A. de Heer, 2008, Appl. Phys. Lett. **92**, 011914.

Fauser, B., J. Tolksdorf, and E. Zeidler, 2007, *Quantum Gravity* (Birkhäuser, Basel).

Ferrari, A. C., J. C. Meyer, V. Scardaci, C. Casiraghi, M. Lazzeri, F. Mauri, S. Piscanec, D. Jiang, K. S. Novoselov, και A. K. G. S. Roth, 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 187401.

Fertig, H. A., and L. Brey, 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 116805.

Fogler, M. M., L. I. Glazman, D. S. Novikov, και B. I. Shklovskii, 2008, Phys. Rev. B **77**, 075420.

Fogler, M. M., D. S. Novikov, and B. I. Shklovskii, 2007, Phys. Rev. B **76**, 233402.

Forbeaux, I., J.-M. Themlin, and J.-M. Debever, 1998, Phys. Rev. B **58**, 16396.

Foster, M. S., and A. W. W. Ludwig, 2006a, Phys. Rev. B **73**, 155104.

Foster, M. S., and A. W. W. Ludwig, 2006b, Phys. Rev. B **74**, 241102.

Fradkin, E., 1986a, Phys. Rev. B **33**, 3257.

Fradkin, E., 1986b, Phys. Rev. B **33**, 3263.

Fritz, L., S. Florens, και M. Vojta, 2006, Phys. Rev. B **74**, 144410.

Fuchs, J.-N., and P. Lederer, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 016803.

Fujita, M., K. Wakabayashi, K. Nakada, και K. Kusakabe, 1996, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1920.

Fukuyama, H., 1971, Prog. Theor. Phys. **45**, 704.

Gasparoux, H., 1967, Carbon **5**, 441.

Geim, A. K., και A. H. MacDonald, 2007, Phys. Today **60**, 35.

Geim, A. K., και K. S. Novoselov, 2007, Nature Mater. **6**, 183.

Ghosal, A., P. Goswami, και S. Chakravarty, 2007, Phys. Rev. B **75**, 115123.

Giesbers, A. J. M., U. Zeitler, M. I. Katsnelson, L. A. Ponomarenko, T. M. G. Mohiuddin, και J. C. Maan, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 206803.

Giovannetti, G., P. A. Khomyakov, G. Brocks, P. J. Kelly, και J. van der Brink, 2007, Phys. Rev. B **76**, 073103.

Giuliani, G. F., και G. Vignale, 2005, *Quantum Theory of the Electron Liquid* (Cambridge University Press, Cambridge).

Goerbig, M. O., J.-N. Fuchs, K. Kechedzhi, και V. I. Fal'ko, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 087402.

Goerbig, M. O., R. Moessner, και B. Doucot, 2006, Phys. Rev. B **74**, 161407.

González, J., F. Guinea, και M. A. H. Vozmediano, 1992, Phys. Rev. Lett. **69**, 172.

González, J., F. Guinea, και M. A. H. Vozmediano, 1993a, Mod. Phys. Lett. B **7**, 1593.

González, J., F. Guinea, και M. A. H. Vozmediano, 1993b, Nucl. Phys. B: Field Theory Stat. Syst. **406** [FS], 771.

González, J., F. Guinea, και M. A. H. Vozmediano, 1994, Nucl. Phys. B **424**, 596.

González, J., F. Guinea, και M. A. H. Vozmediano, 1996, Phys. Rev. Lett. **77**, 3589.

González, J., F. Guinea, και M. A. H. Vozmediano, 1999, Phys. Rev. B **59**, R2474.

González, J., F. Guinea, και M. A. H. Vozmediano, 2001, Phys. Rev. B **63**, 134421.

Gorbachev, R. V., F. V. Tikhonenko, A. S. Mayorov, D. W. Horsell, και A. K. Savchenko, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 176805.

Gorbar, E. V., V. P. Gusynin, V. A. Miransky, και I. A. Shovkovy, 2002, Phys. Rev. B **66**, 045108.

Goswami, P., X. Jia, και S. Chakravarty, 2007, Phys. Rev. B **76**, 205408.

Graf, D., F. Molitor, K. Ensslin, C. Stampfer, A. Jungen, C. Hierold, και L. Wirtz, 2007, Nano Lett. **7**, 238.

Guinea, F., 2007, Phys. Rev. B **75**, 235433.

Guinea, F., A. H. Castro Neto, και N. M. R. Peres, 2006, Phys. Rev. B **73**, 245426.

Guinea, F., M. I. Katsnelson, και M. A. H. Vozmediano, 2008, Phys. Rev. B **77**, 075422.

Gumbs, G., και P. Fekete, 1997, Phys. Rev. B **56**, 3787.

Gunlycke, D., D. A. Areshkin, και C. T. White, 2007, App Phys. Lett. **90**, 12104.

Gupta, A., G. Chen, P. Joshi, S. Tadigadapa, και P. C. Eklund, 2006, Nano Lett. **6**, 2667.

Gusynin, V. P., V. A. Miransky, S. G. Sharapov, και I. A. Shovkovy, 2006, Phys. Rev. B **74**, 195429.

Gusynin, V. P., και S. G. Sharapov, 2005, Phys. Rev. Lett. **95**, 146801.

Gusynin, V. P., S. G. Sharapov, και J. P. Carbotte, 2007, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 026222.

Haldane, F. D. M., 1988, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015.

Han, M. Y., B. Özyilmaz, Y. Zhang, και P. Kim, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 206805.

Harper, P. G., 1955, Proc. Phys. Soc., London, Sect. A **68**, 874.

Harrison, W. A., 1980, *Solid State Theory* (Dover, New York).

Hass, J., R. Feng, J. E. Millán-Otoya, X. Li, M. Sprinkle, P. N. First, W. A. de Heer, και E. H. Conrad, 2007, Phys. Rev. B **75**, 214109.

Hass, J., F. Varchon, J. E. Millán-Otoya, M. Sprinkle, N. Sharma, W. A. de Heer, C. Berger, P. N. First, L. Magaud, και E. H. Conrad, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 125504.

Heersche, H. B., P. Jarillo-Herrero, J. B. Oostinga, L. M. K. Vandersypen, και A. Morpurgo, 2007, Nature **446**, 56.

Hentschel, M., και F. Guinea, 2007, Phys. Rev. B **76**, 115407.

Herbut, I. F., 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 146401.

Herbut, I. F., 2007, Phys. Rev. B **75**, 165411.

Heremans, J., C. H. Olk, και D. T. Morelli, 1994, Phys. Rev. B **49**, 15122.

Hill, E. W., A. K. Geim, K. Novoselov, F. Schedin, και P. Blake, 2007, IEEE Trans. Magn. **42**, 2694.

Himpsel, F. J., K. Christmann, P. Heimann, D. E. Eastman, και P. J. Feibelman, 1982, Surf. Sci. **115**, L159.

Hobson, J. P., και W. A. Nierenberg, 1953, Phys. Rev. **89**, 662.

Hod, O., V. Barone, J. E. Peralta, και G. E. Scuseria, 2007, Nano Lett. **7**, 2295.

Horovitz, B., και P. L. Doussal, 2002, Phys. Rev. B **65**, 125323. Hou, C.-Y., C. Chamon, και C. Mudry, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 186809.

Huard, B., J. A. Sulpizio, N. Stander, K. Todd, B. Yang, και D. Goldhaber-Gordon, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 236803.

Huertas-Hernando, D., F. Guinea, και A. Brataas, 2006, Phys. Rev. B **74**, 155426.

Hwang, E. H., και S. Das Sarma, 2007, Phys. Rev. B **75**, 205418.

Hwang, E. H., B. Y.-K. Hu, και S. D. Sarma, 2007, Phys. Rev. B **76**, 115434.

Ishigami, M., J. H. Chen, D. W. G. Cullan, M. S. Fuhrer, και E. D. Williams, 2007, Nano Lett. **7**, 1643.

Itzykson, C., και J.-B. Zuber, 2006, *Quantum Field Theory* (Dover, New York).

Jackiw, R., και C. Rebbi, 1976, Phys. Rev. D **13**, 3398.

Jiang, Z., E. A. Henriksen, L. C. Tung, Y.-J. Wang, M. E. Schwartz, M. Y. Han, P. Kim, και H. L. Stormer, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 197403.

Jiang, Z., Y. Zhang, H. L. Stormer, και P. Kim, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 106802.

Kane, C. L., και E. J. Mele, 1997, Phys. Rev. Lett. **78**, 1932.

Kane, C. L., και E. J. Mele, 2004, Phys. Rev. Lett. **93**, 197402.

Kane, C. L., και E. J. Mele, 2005, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801.

Katsnelson, M. I., 2006a, Phys. Rev. B **74**, 201401.

Katsnelson, M. I., 2006b, Eur. Phys. J. B **51**, 157.

Katsnelson, M. I., 2007a, Eur. Phys. J. B **57**, 225.

Katsnelson, M. I., 2007b, Mater. Today **10**, 20.

Katsnelson, M. I., 2007c, Phys. Rev. B **76**, 073411.

Katsnelson, M. I., και A. K. Geim, 2008, Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A **366**, 195.

Katsnelson, M. I., και K. S. Novoselov, 2007, Solid State Commun. **143**, 3.

Katsnelson, M. I., K. S. Novoselov, και A. K. Geim, 2006, Nat. Phys. **2**, 620.

Kechedzhi, K., V. I. Fal'ko, E. McCann, και B. L. Altshuler, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 176806.

Khveshchenko, D. V., 2001, Phys. Rev. Lett. **87**, 246802.

Khveshchenko, D. V., 2008, Europhys. Lett. **82**, 57008.

Khveshchenko, D. V., και W. F. Shively, 2006, Phys. Rev. B **73**, 115104.

Kobayashi, Y., K. Fukui, T. Enoki, K. Kusakabe, και Y. Kaburagi, 2005, Phys. Rev. B **71**, 193406.

Kolesnikov, D. V., και V. A. Osipov, 2004, JETP Lett. **79**, 532.

Kolesnikov, D. V., και V. A. Osipov, 2006, Eur. Phys. J. B **49**, 465.

Kolezhuk, A., S. Sachdev, R. B. Biswas, και P. Chen, 2006, Phys. Rev. B **74**, 165114.

Kopelevich, Y., και P. Esquinazi, 2007, J. Low Temp. Phys. **146**, 629.

Kopelevich, Y., J. C. Medina Pantoja, R. R. da Silva, F. Mrowka, και P. Esquinazi, 2006, Phys. Lett. A **355**, 233.

Kopelevich, Y., J. H. S. Torres, R. R. da Silva, F. Mrowka, H. Kempa, και P. Esquinazi, 2003, Phys. Rev. Lett. **90**, 156402.

Koshino, M., και T. Ando, 2006, Phys. Rev. B **73**, 245403.

Koshino, M., και T. Ando, 2007, Phys. Rev. B **75**, 235333.

Kumazaki, H., και D. S. Hirashima, 2006, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 053707.

Kumazaki, H., και D. S. Hirashima, 2007, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 064713.

Kusminskiy, S. V., J. Nilsson, D. K. Campbell, και A. H. Castro Neto, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 106805.

Lammert, P. E., και V. H. Crespi, 2004, Phys. Rev. B **69**, 035406.

Landau, L. D., και E. M. Lifshitz, 1959, *Theory of Elasticity* (Pergamon, London).

Landau, L. D., και E. M. Lifshitz, 1981, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (Pergamon, London).

Laughlin, R. B., 1981, Phys. Rev. B **23**, 5632.

Lazzeri, M., και F. Mauri, 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 266407.

LeClair, A., 2000, Phys. Rev. Lett. **84**, 1292.

Le Doussal, P., και L. Radzihovsky, 1992, Phys. Rev. Lett. **69**, 1209.

Lee, P. A., 1993, Phys. Rev. Lett. **71**, 1887.

Lee, P. A., και T. V. Ramakrishnan, 1985, Rev. Mod. Phys. **57**, 287.

Lee, S.-S., και P. A. Lee, 2005, Phys. Rev. Lett. **95**, 036403.

Leenaerts, O., B. Partoens, και F. M. Peeters, 2008, Phys. Rev. B **77**, 125416.

Lemme, M. C., T. J. Echtermeyer, M. Baus, και H. Kurz, 2007, IEEE Electron Device Lett. **28**, 282.

Lenosky, T., X. Gonze, M. Teter, και V. Elser, 1992, Nature (London) **355**, 333.

Lewenkopf, C. H., E. R. Mucciolo, και A. H. Castro Neto, 2008, Phys. Rev. B **77**, 081410(R).

Li, G., και E. Y., Andrei, 2007, Nat. Phys. **3**, 623.

Li, Z. Q., S.-W. Tsai, W. J. Padilla, S. V. Dordevic, K. S. Burch, Y. J. Wang, και D. N. Basov, 2006, Phys. Rev. B **74**, 195404.

Lopes dos Santos, J. M. B., N. M. R. Peres, και A. H. Castro Neto, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 256802.

Louis, E., J. A. Vergés, F. Guinea, και G. Chiappe, 2007, Phys. Rev. B **75**, 085440.

Ludwig, A. W. W., M. P. A. Fisher, R. Shankar, και G. Grinstein, 1994, Phys. Rev. B **50**, 7526.

Lukose, V., R. Shankar, και G. Baskaran, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 116802.

Luk'yanchuk, I. A., and Y. Kopelevich, 2004, Phys. Rev. Lett. **93**, 166402.

Maiti, M., και K. Sengupta, 2007, Phys. Rev. B **76**, 054513.

Malard, L. M., J. Nilsson, D. C. Elias, J. C. Brant, F. Plentz, E. S. Alves, A. H. Castro Neto, και M. A. Pimenta, 2007, Phys. Rev. B **76**, 201401.

Mallet, P., F. Varchon, C. Naud, L. Magaud, C. Berger, και J.-Y. Veuillen, 2007, Phys. Rev. B **76**, 041403(R).

Mañes, J. L., 2007, Phys. Rev. B **76**, 045430.

Mañes, J. L., F. Guinea, και M. A. H. Vozmediano, 2007, Phys. Rev. B **75**, 155424.

Maple, M. B., 1998, J. Magn. Magn. Mater. **177**, 18.

Mariani, E., L. Glazman, A. Kamenev, και F. von Oppen, 2007, Phys. Rev. B **76**, 165402.

Mariani, E., και F. von Oppen, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 076801; **100**, 249901(E) (2008).

Martelo, L. M., M. Dzierzawa, L. Siffert, και D. Baeriswyl, 1997, Z. Phys. B: Condens. Matter **103**, 335.

Martin, I., και Y. M. Blanter, 2007, e-print arXiv:0705.0532.

Martin, J., N. Akerman, G. Ulbricht, T. Lohmann, J. H. Smet, K. von Klitzing, και A. Yacoby, 2008, Nat. Phys. **4**, 144

Martins, T. B., R. H. Miwa, A. J. R. da Silva, και A. Fazio, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 196803.

Matsui, T., H. Kambara, Y. Niimi, K. Tagami, M. Tsukada, και H. Fukuyama, 2005, Phys. Rev. Lett. **94**, 226403.

Mattausch, A., και O. Pankratov, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 076802.

McCann, E., 2006, Phys. Rev. B **74**, 161403.

McCann, E., και V. I. Fal'ko, 2006, Phys. Rev. Lett. **96**, 086805.

McCann, E., K. Kechedzhi, V. I. Fal'ko, H. Suzuura, T. Ando, και B. L. Altshuler, 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 146805.

McClure, J. W., 1956, Phys. Rev. **104**, 666.

McClure, J. W., 1957, Phys. Rev. **108**, 612.

McClure, J. W., 1958, Phys. Rev. **112**, 715.

McClure, J. W., 1960, Phys. Rev. **119**, 606.

McClure, J. W., 1964, IBM J. Res. Dev. **8**, 255.

McClure, J. W., 1971, *Physics of Semi-Metals and Narrow-Gap Semiconductors*, edited by D. L. Carter και R. T. Bate (Pergamon, New York).

McEuen, P. L., M. Bockrath, D. H. Cobden, Y.-G. Yoon, και S. G. Louie, 1999, Phys. Rev. Lett. **83**, 5098.

Meyer, J. C., A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, και S. Roth, 2007, Nature **446**, 60.

Meyer, J. C., A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, D. Obergfell, S. Roth, C. Girit, και A. Zettl, 2007, Solid State Commun. **143**, 101.

Miao, F., S. Wijeratne, U. Coskun, Y. Zhang, και C. N. Lau, 2007, Science **317**, 1530.

Milton Pereira, J., Jr., P. Vasilopoulos, και F. M. Peeters, 2007, Nano Lett. **7**, 946.

Min, H., J. Hill, N. Sinitsyn, B. Sahu, L. Kleinman, και A. MacDonald, 2006, Phys. Rev. B **74**, 165310.

Mishchenko, E. G., 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 216801.

Morozov, S., K. Novoselov, M. Katsnelson, F. Schedin, D. Jiang, και A. K. Geim, 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 016801.

Morozov, S. V., K. S. Novoselov, F. Schedin, D. Jiang, A. A. Firsov, και A. K. Geim, 2005, Phys. Rev. B **72**, 201401.

Morpurgo, A. F., και F. Guinea, 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 196804.

Mrozowski, S., 1952, Phys. Rev. **85**, 609.

Muñoz-Rojas, F., D. Jacob, J. Fernández-Rossier, και J. J. Palacios, 2006, Phys. Rev. B **74**, 195417.

Nakada, K., M. Fujita, G. Dresselhaus, και M. S. Dresselhaus, 1996, Phys. Rev. B **54**, 17954.

Nakamura, M., 2007, Phys. Rev. B **76**, 113301.

Nakao, K., 1976, J. Phys. Soc. Jpn. **40**, 761.

Nelson, D., D. R. Piran, και S. Weinberg, 2004, *Statistical Mechanics of Membranes and Surfaces* (World Scientific, Singapore).

Nelson, D. R., και L. Peliti, 1987, *J. Phys. (Paris)* **48**, 1085.

Nersesyan, A. A., A. M. Tsvelik, και F. Wenger, 1994, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2628.

Niimi, Y., H. Kambara, T. Matsui, D. Yoshioka, και H. Fukuyama, 2006, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 236804.

Nilsson, J., και A. H. Castro Neto, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 126801.

Nilsson, J., A. H. Castro Neto, F. Guinea, και N. M. R. Peres, 2006, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 266801.

Nilsson, J., A. H. Castro Neto, F. Guinea, και N. M. R. Peres, 2007, *Phys. Rev. B* **76**, 165416.

Nilsson, J., A. H. Castro Neto, F. Guinea, και N. M. R. Peres, 2008, *Phys. Rev. B* **78**, 045405.

Nilsson, J., A. H. Castro Neto, N. M. R. Peres, και F. Guinea, 2006a, *Phys. Rev. B* **73**, 214418.

Nilsson, J., A. H. Castro Neto, N. M. R. Peres, και F. Guinea, 2006b, *Phys. Rev. B* **73**, 214418.

Nomura, K., M. Koshino, και S. Ryu, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 146806.

Nomura, K., και A. H. MacDonald, 2006, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 256602.

Nomura, K., και A. H. MacDonald, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 076602.

Novikov, D. S., 2007a, *Phys. Rev. B* **76**, 245435.

Novikov, D. S., 2007b, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 102102.

Novikov, D. S., 2007c, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 056802.

Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, και A. A. Firsov, 2005, *Nature* **438**, 197.

Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Gregorieva, και A. A. Firsov, 2004, *Science* **306**, 666.

Novoselov, K. S., D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, και A. K. Geim, 2005, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **102**, 10451.

Novoselov, K. S., Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim, και A. K. Geim, 2007, *Science* **315**, 1379.

Novoselov, K. S., E. McCann, S. V. Mozorov, V. I. Fal'ko, M. I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, και A. K. Geim, 2006, *Nat. Phys.* **2**, 177.

Nozières, P., 1958, *Phys. Rev.* **109**, 1510.

Ohishi, M., M. Shiraishi, R. Nouchi, T. Nozaki, T. Shinjo, και Y. Suzuki, 2007, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2* **46**, L605.

Ohta, K., 1971a, *Jpn. J. Appl. Phys.* **10**, 850.

Ohta, K., 1971b, *J. Phys. Soc. Jpn.* **31**, 1627.

Ohta, T., A. Bostwick, J. L. McChesney, T. Seyller, K. Horn, και E. Rotenberg, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 206802.

Ohta, T., A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, και E. Rotenberg, 2006, *Science* **313**, 951.

Oostinga, J. B., H. B. Heersche, X. Liu, A. Morpurgo, και L. M. K. Vandersypen, 2008, *Nature Mater.* **7**, 151.

Oshima, C., και A. Nagashima, 1997, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 1.

Osipov, V. A., E. A. Kochetov, και M. Pudlak, 2003, *JETP* **96**, 140.

Ossipov, A., M. Titov, και C. W. J. Beenakker, 2007, *Phys. Rev. B* **75**, 241401.

Ostrovsky, P. M., I. V. Gornyi, και A. D. Mirlin, 2006, *Phys. Rev. B* **74**, 235443.

Ostrovsky, P. M., I. V. Gornyi, και A. D. Mirlin, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 256801.

Özyilmaz, B., P. Jarillo-Herrero, D. Efetov, D. A. Abanin, L. S. Levitov, και P. Kim, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 166804.

Paiva, T., R. T. Scalettar, W. Zheng, R. R. P. Singh, και J. Oitmaa, 2005, *Phys. Rev. B* **72**, 085123.

Parr, R. G., D. P. Craig, και I. G. Ross, 1950, *J. Chem. Phys.* **18**, 1561.

Partoens, B., και F. M. Peeters, 2006, *Phys. Rev. B* **74**, 075404.

Pauling, L., 1972, *The Nature of the Chemical Bond* (Cornell University Press, Ithaca, NY).

Peliti, L., και S. Leibler, 1985, *Phys. Rev. B* **54**, 1690.

Pereira, V. M., F. Guinea, J. M. B. L. dos Santos, N. M. R. Peres, και A. H. Castro Neto, 2006, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 036801.

Pereira, V. M., J. M. B. Lopes dos Santos, και A. H. Castro Neto, 2008, *Phys. Rev. B* **77**, 115109.

Pereira, V. M., J. Nilsson, και A. H. Castro Neto, 2007, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 166802.

Peres, N. M. R., M. A. N. Araújo, και D. Bozi, 2004, *Phys. Rev. B* **70**, 195122.

Peres, N. M. R., και E. V. Castro, 2007, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 406231.

Peres, N. M. R., A. H. Castro Neto, και F. Guinea, 2006a, *Phys. Rev. B* **73**, 195411.

Peres, N. M. R., A. H. Castro Neto, και F. Guinea, 2006b, *Phys. Rev. B* **73**, 241403.

Peres, N. M. R., F. Guinea, και A. H. Castro Neto, 2005, *Phys. Rev. B* **72**, 174406.

Peres, N. M. R., F. Guinea, και A. H. Castro Neto, 2006a, *Phys. Rev. B* **73**, 125411.

Peres, N. M. R., F. Guinea, και A. H. Castro Neto, 2006b, *Ann. Phys. (N.Y.)* **321**, 1559.

Peres, N. M. R., F. D. Klironomos, S.-W. Tsai, J. R. Santos, J. M. B. Lopes dos Santos, και A. H. Castro Neto, 2007, *Europhys. Lett.* **80**, 67007.

Peres, N. M. R., J. M. Lopes dos Santos, και T. Stauber, 2007, *Phys. Rev. B* **76**, 073412.

Petroski, H., 1989, *The Pencil: A History of Design and Circumstance* (Knopf, New York).

Phillips, P., 2006, *Ann. Phys. (N.Y.)* **321**, 1634.

Pisana, S., M. Lazzeri, C. Casiraghi, K. S. Novoselov, A. K. Geim, A. C. Ferrari, και F. Mauri, 2007, *Nature Mater.* **6**, 198.

Polini, M., R. Asgari, Y. Barlas, T. Pereg-Barnea, και A. H. MacDonald, 2007, *Solid State Commun.* **143**, 58.

Polkovnikov, A., 2002, *Phys. Rev. B* **65**, 064503.

Polkovnikov, A., S. Sachdev, και M. Vojta, 2001, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 296.

- Rammal, R., 1985, J. Phys. (Paris) **46**, 1345.
- Recher, P., B. Trauzettel, Y. M. Blanter, C. W. J. Beenakker, και A. F. Morpurgo, 2007, Phys. Rev. B **76**, 235404.
- Reich, S., J. Maultzsch, C. Thomsen, και P. Ordejón, 2002, Phys. Rev. B **66**, 035412.
- Robinson, J. P., και H. Schomerus, 2007, Phys. Rev. B **76**, 115430.
- Rollings, E., G.-H. Gweon, S. Y. Zhou, B. S. Mun, J. L. Mc Chesney, B. S. Hussain, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, και A. Lanzara, 2006, J. Phys. Chem. Solids **67**, 2172.
- Rong, Z. Y., και P. Kuiper, 1993, Phys. Rev. B **48**, 17427.
- Rosenstein, B., B. J. Warr, και S. H. Park, 1989, Phys. Rev. Lett. **62**, 1433.
- Rosenstein, B., B. J. Warr, και S. H. Park, 1991, Phys. Rep. **205**, 59.
- Russo, S., J. B. Oostinga, D. Wehenkel, H. B. Heersche, S. S. Sobhani, L. M. K. Vandersypen, και A. F. Morpurgo, 2007, e-print arXiv:0711.1508
- Rutter, G. M., J. N. Crain, N. P. Guisinger, T. Li, P. N. First, και J. A. Stroscio, 2007, Science **317**, 219.
- Rycerz, A., J. Tworzydło, και C. W. J. Beenakker, 2007, Nat. Phys. **3**, 172.
- Rydberg, H., M. Dion, N. Jacobson, E. Schröder, P. Hylgaard, S. I. Simak, D. C. Langreth, και B. I. Lundqvist, 2003, Phys. Rev. Lett. **91**, 126402.
- Ryu, S., C. Mudry, H. Obuse, και A. Furusaki, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 116601.
- Sabio, J., C. Seoanez, S. Fratini, F. Guinea, A. H. Castro Neto, και F. Sols, 2008, Phys. Rev. B **77**, 195409.
- Sadowski, M. L., G. Martinez, M. Potemski, C. Berger, και W. A. de Heer, 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 266405.
- Safran, S. A., 1984, Phys. Rev. B **30**, 421.
- Safran, S. A., και F. J. DiSalvo, 1979, Phys. Rev. B **20**, 4889.
- Saha, S. K., U. V. Waghmare, H. R. Krishnamurth, και A. K. Sood, 2007, e-print arXiv:cond-mat/0702627.
- Saito, R., G. Dresselhaus, και M. S. Dresselhaus, 1998, *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (Imperial College Press, London).
- Saito, R., M. Fujita, G. Dresselhaus, και M. S. Dresselhaus, 1992a, Appl. Phys. Lett. **60**, 2204.
- Saito, R., M. Fujita, G. Dresselhaus, και M. S. Dresselhaus, 1992b, Phys. Rev. B **46**, 1804.
- San-Jose, P., E. Prada, και D. Golubev, 2007, Phys. Rev. B **76**, 195445.
- Saremi, S., 2007, Phys. Rev. B **76**, 184430.
- Sarma, S. D., E. H. Hwang, και W. K. Tse, 2007, Phys. Rev. B **75**, 121406.
- Schakel, A. M. J., 1991, Phys. Rev. D **43**, 1428.
- Schedin, F., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, E. H. Hill, P. Blake, και K. S. Novoselov, 2007, Nature Mater. **6**, 652.
- Schomerus, H., 2007, Phys. Rev. B **76**, 045433.
- Schroeder, P. R., M. S. Dresselhaus, και A. Javan, 1968, Phys. Rev. Lett. **20**, 1292.

Semenoff, G. W., 1984, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449.

Sengupta, K., και G. Baskaran, 2008, Phys. Rev. B **77**, 045417.

Seoanez, C., F. Guinea, και A. H. Castro Neto, 2007, Phys. Rev. B **76**, 125427.

Shankar, R., 1994, Rev. Mod. Phys. **66**, 129.

Sharma, M. P., L. G. Johnson, και J. W. McClure, 1974, Phys. Rev. B **9**, 2467.

Shelton, J. C., H. R. Patil, και J. M. Blakely, 1974, Surf. Sci. **43**, 493.

Sheng, D. N., L. Sheng, και Z. Y. Wen, 2006, Phys. Rev. B **73**, 233406.

Sheng, L., D. N. Sheng, F. D. M. Haldane, και L. Balents, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 196802.

Shklovskii, B. I., 2007, Phys. Rev. B **76**, 233411.

Shon, N. H., και T. Ando, 1998, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 2421.

Shung, K. W. K., 1986a, Phys. Rev. B **34**, 979.

Shung, K. W. K., 1986b, Phys. Rev. B **34**, 1264.

Shytov, A. V., M. I. Katsnelson, και L. S. Levitov, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 236801.

Silvestrov, P. G., και K. B. Efetov, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 016802.

Sinitsyna, O. V., και I. V. Yaminsky, 2006, Russ. Chem. Rev. **75**, 23.

Skrypnyk, Y. V., και V. M. Loktev, 2006, Phys. Rev. B **73**, 241402(R).

Skrypnyk, Y. V., και V. M. Loktev, 2007, Phys. Rev. B **75**, 245401.

Slonczewski, J. C., και P. R. Weiss, 1958, Phys. Rev. **109**, 272.

Snyman, I., και C. W. J. Beenakker, 2007, Phys. Rev. B **75**, 045322.

Sols, F., F. Guinea, και A. H. Castro Neto, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 166803.

Son, D. T., 2007, Phys. Rev. B **75**, 235423.

Son, Y.-W., M. L. Cohen, και S. G. Louie, 2006a, Phys. Rev. Lett. **97**, 216803.

Son, Y.-W., M. L. Cohen, και S. G. Louie, 2006b, Nature (London) **444**, 347.

Sorella, S., και E. Tosatti, 1992, Europhys. Lett. **19**, 699.

Soule, D. E., J. W. McClure, και L. B. Smith, 1964, Phys. Rev. **134**, A453.

Spataru, C. D., M. A. Cazalilla, A. Rubio, L. X. Benedict, P. M. Echenique, και S. G. Louie, 2001, Phys. Rev. Lett. **87**, 246405.

Spry, W. J., και P. M. Scherer, 1960, Phys. Rev. **120**, 826.

Stauber, T., F. Guinea, και M. A. H. Vozmediano, 2005, Phys. Rev. B **71**, 041406.

Stauber, T., N. M. R. Peres, F. Guinea, και A. H. Castro Neto, 2007, Phys. Rev. B **75**, 115425.

Stephan, O., P. M. Ajayan, C. Colliex, P. Redlich, J. M. Lambert, P. Bernier, και P. Lefin, 1994, Science **266**, 1683.

Stolyarova, E., K. T. Rim, S. Ryu, J. Maultzsch, P. Kim, L. E. Brus, T. F. Heinz, M. S. Hybertsen, και G. W. Flynn, 2007, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **104**, 9209.

Stone, M., 1992, *Quantum Hall Effect* (World Scientific, Singapore).

Su, W. P., J. R. Schrieffer, και A. J. Heeger, 1979, Phys. Rev. Lett. **42**, 1698.

Su, W. P., J. R. Schrieffer, και A. J. Heeger, 1980, Phys. Rev. B **22**, 2099.

Sugawara, K., T. Sato, S. Souma, T. Takahashi, και H. Suematsu, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 036801.

Suzuura, H., και T. Ando, 2002a, Phys. Rev. Lett. **89**, 266603.

Suzuura, H., και T. Ando, 2002b, Phys. Rev. B **65**, 235412.

Swain, P. S., και D. Andelman, 1999, Langmuir **15**, 8902.

Tanuma, S., και H. Kamimura, 1985, *Graphite Intercalation Compounds: Progress of Research in Japan* (World Scientific, Singapore).

Tersoff, J., 1992, Phys. Rev. B **46**, 15546.

Tikhonenko, F. V., D. W. Horsell, R. V. Gorbachev, και A. K. Savchenko, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 056802.

Titov, M., 2007, Europhys. Lett. **79**, 17004.

Titov, M., και C. Beenakker, 2006, Phys. Rev. B **74**, 041401.

Tománek, D., S. G. Louie, H. J. Mamin, D. W. Abraham, R. E. Thomson, E. Ganz, και J. Clarke, 1987, Phys. Rev. B **35**, 7790.

Tombros, N., C. Jozsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, και J. van Wees, 2007, Nature **448**, 571.

Trushin, M., και J. Schliemann, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 216602.

Tu, Z.-C., και Z.-C. Ou-Yang, 2002, Phys. Rev. B **65**, 233407.

Tworzydło, J., I. Snyman, A. R. Akhmerov, και C. W. J. Beenakker, 2007, Phys. Rev. B **76**, 035411.

Tworzydło, J., B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, και C. W. J. Beenakker, 2006, Phys. Rev. Lett. **96**, 246802.

Uchoa, B., και A. H. Castro Neto, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 146801.

Uchoa, B., C.-Y. Lin, και A. H. Castro Neto, 2008, Phys. Rev. B **77**, 035420.

Vafek, O., 2006, Phys. Rev. Lett. **97**, 266406.

Vafek, O., 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 216401.

Varchon, F., R. Feng, J. Hass, X. Li, B. N. Nguyen, C. Naud, P. Mallet, J. Y. Veuillen, C. Berger, E. H. Conrad, και L. Magaud, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 126805.

Vázquez de Parga, A. L., F. Calleja, B. Borca, M. C. G. Passeggi, Jr., J. J. Hinarejo, F. Guinea, και R. Miranda, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 056807.

Visscher, P. B., και L. M. Falicov, 1971, Phys. Rev. B **3**, 2541.

Vozmediano, M. A. H., M. P. López-Sancho, και F. Guinea, 2002, Phys. Rev. Lett. **89**, 166401.

Vozmediano, M. A. H., M. P. López-Sancho, και F. Guinea, 2003, Phys. Rev. B **68**, 195122.

Vozmediano, M. A. H., M. P. López-Sancho, T. Stauber, και F. Guinea, 2005, Phys. Rev. B **72**, 155121.

Wakabayashi, K., M. Fujita, H. Ajiki, και M. Sigrist, 1999, Phys. Rev. B **59**, 8271.

Wakabayashi, K., και M. Sigrist, 2000, Phys. Rev. Lett. **84**, 3390.

Wallace, P. R., 1947, Phys. Rev. **71**, 622.

Wang, H., D. N. Sheng, L. Sheng, και F. D. M. Haldane, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 116802.

Wang, X.-F., και T. Chakraborty, 2007a, Phys. Rev. B **75**, 033408.

Wang, X.-F., και T. Chakraborty, 2007b, Phys. Rev. B **75**, 041404(R).

Wehling, T. O., K. S. Novoselov, S. V. Morozov, E. E. Vdovin, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, και A. I. Lichtenstein, 2008, Nano Lett. **8**, 173.

Williams, J. R., L. DiCarlo, και C. M. Marcus, 2007, Science **317**, 638.

Williamson, S. J., S. Foner, και M. S. Dresselhaus, 1965, Phys. Rev. **140**, A1429.

Wirtz, L., και A. Rubio, 2004, Solid State Commun. **131**, 141.

Wu, X., X. Li, Z. Song, C. Berger, και W. A. de Heer, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 136801.

Wunsch, B., T. Stauber, F. Sols, και F. Guinea, 2006, New J. Phys. **8**, 318.

Xin, Z., Z. Jianjun, και O.-Y. Zhong-can, 2000, Phys. Rev. B **62**, 13692.

Xu, S., J. Cao, C. C. Miller, D. A. Mantell, R. J. D. Miller, και Y. Gao, 1996, Phys. Rev. Lett. **76**, 483.

Yan, J., Y. Zhang, P. Kim, και A. Pinczuk, 2007, Phys. Rev. Lett. **98**, 166802.

Yang, L., M. V. Cohen, και S. G. Louie, 2007, Nano Lett. **7**, 3112.

Yang, L., C.-H. Park, Y.-W. Son, M. L. Cohen, και S. G. Louie, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 186801.

Yang, X., και C. Nayak, 2002, Phys. Rev. B **65**, 064523.

Yao, Y., F. Ye, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, και Z. Fang, 2007, Phys. Rev. B **75**, 041401.

Zarea, M., και N. Sandler, 2007, Phys. Rev. Lett. **99**, 256804.

Zhang, C.-H., και Y. N. Joglekar, 2007, Phys. Rev. B **75**, 245414.

Zhang, L. M., και M. M. Fogler, 2008, Phys. Rev. Lett. **100**, 116804.

Zhang, Y., Z. Jiang, J. P. Small, M. S. Purewal, Y.-W. Tan, M. Fazlollahi, J. D. Chudow, J. A. Jaszczak, H. L. Stormer, και P. Kim, 2006, Phys. Rev. Lett. **96**, 136806.

Zhang, Y., Y.-W. Tan, H. L. Stormer, και P. Kim, 2005, Nature **438**, 201.

Zhong-can, O.-Y., Z.-B. Su, και C.-L. Wang, 1997, Phys. Rev. Lett. **78**, 4055.

Zhou, S., G.-H. Gweon, και A. Lanzara, 2006, Ann. Phys. (N.Y.) **321**, 1730.

Zhou, S. Y., G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, και A. Lanzara, 2007, Nature Mater. **6**, 770.

Zhou, S. Y., G.-H. Gweon, J. Graf, A. V. Fedorov, C. D. Spataru, R. D. Diehl, Y. Kopelevich, D.-H. Lee, S. G. Louie, και A. Lanzara, 2006, Nat. Phys. **2**, 595.

Ziegler, K., 1998, Phys. Rev. Lett. **80**, 3113.

Ziman, J. M., 1972, *Principles of the Theory of Solids* (Cambridge University Press, Cambridge).