

Schrödinger- und Dirac- Elektronen in Graphen

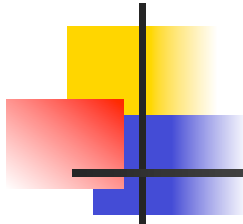


Vortrag im Rahmen des Hauptseminars

SS 08

von Alexander Zado

15.05.08



Inhalt

- Motivation
- Graphen
- Elektronische Struktur von Graphen
- Schrödinger- und Dirac- Elektronen
- Experimentelle Ergebnisse
- Zusammenfassung
- Ausblick



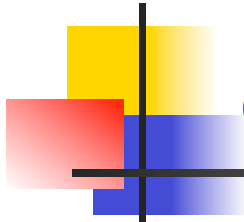
- Besonderheit der Bandstruktur von Graphen
- Elektronen verhalten sich wie masselose, relativistische Teilchen
- Interessante physikalische Effekte lassen sich beobachten



- Brücke zwischen der Physik der kondensierten Materie und der Quantenelektrodynamik
- Neue Perspektiven für auf C basierende Elektronik
- Graphen ist das am besten theoretisch beschriebene C- Allotrop

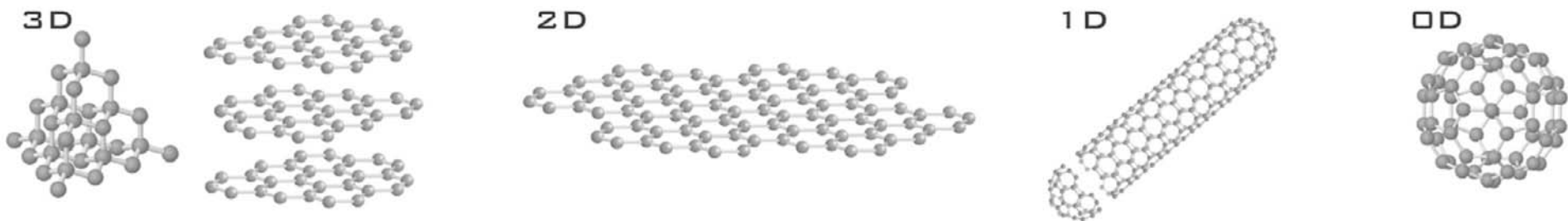


Graphen



Graphen

- Ein Kohlenstoff- Allotrop



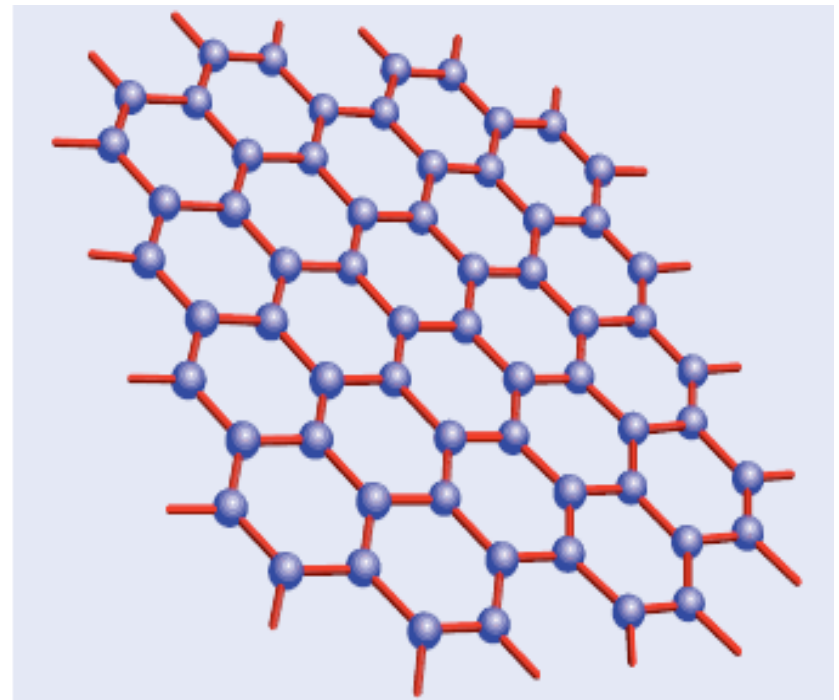
[1] Katsnelson et al. Materials Today 10,20 (2007)

- Erste Herstellung einer 2D- Schicht an der Manchester University von A. Geim und K. Novoselov (2004)
- Hergestellt mit dem sog. „mikromechanisches Spalten“- Verfahren

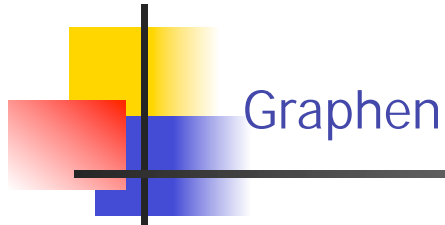


Graphen

- Graphen hat eine zweiatomige Basis
- Daraus resultieren zwei Untergitter A und B
- „Bienenwabenförmige“, hexagonale Struktur der Monolagen



[2] Son et al. Nature 444,347 (2006)



Graphen

- Theoretische Berechnungen sagten lange Zeit die Nichtexistenz einer 2D Kohlenstoff- Struktur voraus (Mermin- Wagner- Theorem)
- Bei endlichen Temperaturen, sollte die langreichweitige Ordnung der Struktur zusammenbrechen (langwellige Phononen)
- Es wurde jedoch letztlich theoretisch gezeigt, dass der destruktive Effekt unterdrückt werden kann



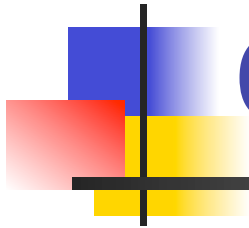
Graphen

- Unterdrückung durch nichtlineare WW zwischen Dehn- und Stauchmoden in Graphen
- Als Resultat wird eine geriffelte Oberfläche vorausgesagt
- Die typische Höhe beträgt $L^{0,6}$



[2] Son et al. Nature 444,347 (2006)

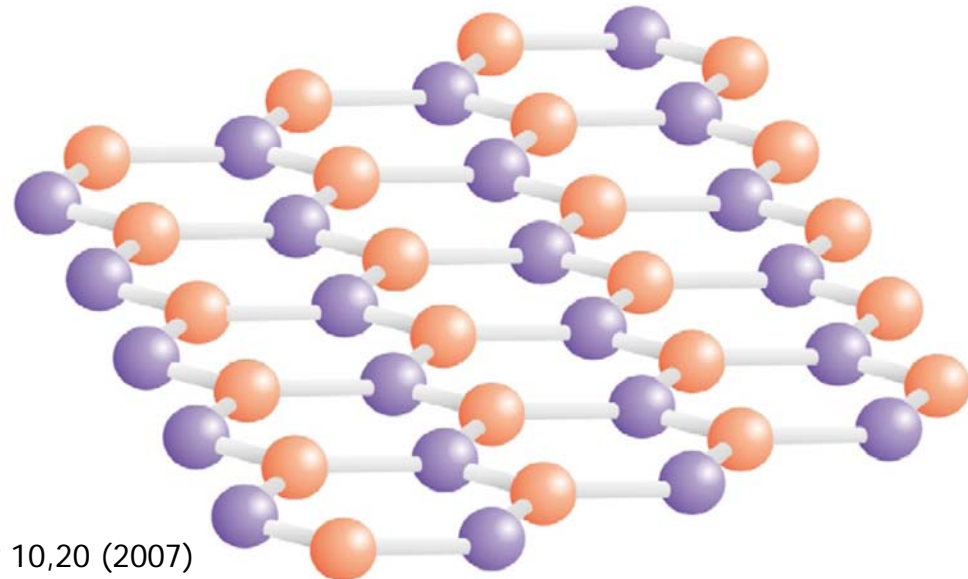
Elektronische Struktur von Graphen





Elektronische Struktur von Graphen

- Die Bandstruktur ist eine Folge der Symmetrie der zweiatomigen Basis
- Quantenmechanische Effekte zwischen den Untergittern A und B führen zur Bildung von zwei Energiebändern

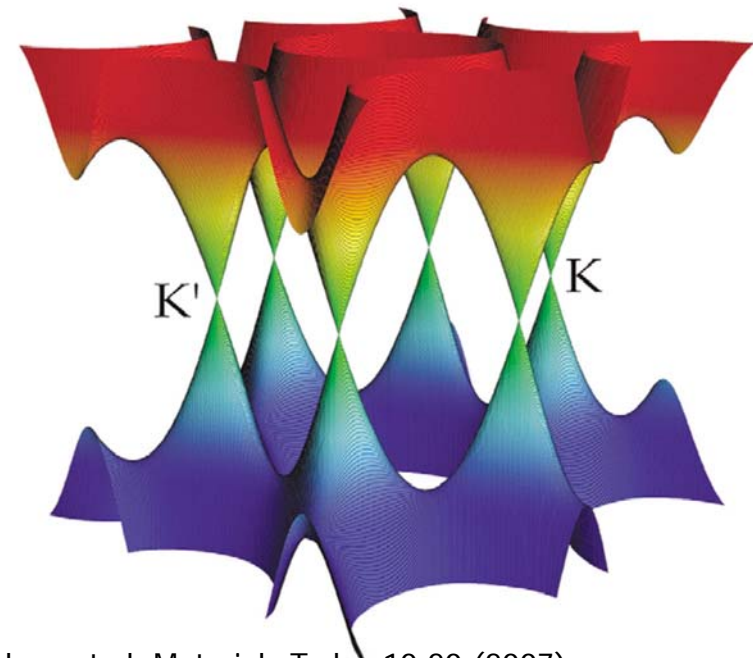


[1] Katsnelson et al. Materials Today 10,20 (2007)



Elektronische Struktur von Graphen

- Struktur kann mit dem „tight-binding“ Modell beschrieben werden
- Der reziproke Raum weist hexagonale Struktur auf
- An den sechs Eckpunkten der ersten BZ berühren sich das Valenz und das Leitungsband



[1] Katsnelson et al. Materials Today 10,20 (2007)



Elektronische Struktur von Graphen

- Graphen ist an diesen Punkten ein Halbleiter mit verschwindender Bandlücke
- Lineare Dispersionsrelation der Elektronen an den K-Punkten (Dirac-Punkte)

$$E = \hbar k v_F \quad \text{mit} \quad v_F \approx \frac{c}{300}$$

- Elektronen verhalten sich wie masselose Teilchen,

$$\text{da} \quad m_{eff} = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}$$

- Beschreibung durch die Schrödinger- Gleichung nicht ausreichend, da sie nur auf nichtrelativistische Quantenobjekte anwendbar ist
- → Übergang zu der Dirac- Gleichung

Schrödinger- und Dirac- Elektronen





Schrödinger Gleichung

- Die SGL lässt sich nicht streng mathematisch herleiten (als Postulat anzusehen)
- Zentrale Gleichung der nichtrelativistischen Quantenmechanik
→ Bewegungsgleichung
- Heuristische Herleitung ausgehend von dem klassischen Fall:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$$



Schrödinger Gleichung

- Nach dem Korrespondenzprinzip werden klassische Größen in QM- Größen (Operatoren) überführt

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \vec{p} \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \nabla$$

- Es folgt die SGL

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{V}(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t)$$



Schrödinger Gleichung

- Die SGL wird durch Wellenfunktionen $\psi(\vec{r}, t)$ (Eigenvektoren) gelöst
- Diese beschreiben die räumliche und zeitliche Entwicklung eines Quantenzustandes
- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist durch gegeben $|\psi(\vec{r}, t)|^2$
- Problem: Relativistische Teilchen



Dirac- Gleichung

- Der relativistische Energiesatz lautet

$$E^2 = (pc)^2 + (m_0c^2)^2$$

- Durch Wurzelziehen findet sich zu jeder positiven Lösung auch eine negative, SGL liefert keinen Ansatz
- Lorentztransformation der SGL führt zur Klein-Gordon- Gleichung



Dirac- Gleichung

- Diese beschreibt allerdings nur relativistische Bosonen (s=0)

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\vec{r}, t) = 0$$

- Ein neuer Ansatz musste her → Dirac- Gleichung
- Dirac leitete sie aus der Existenz von Zuständen mit negativer Energie ab



Dirac- Gleichung

- Dirac- Gleichung beschreibt relativistische Spin $\frac{1}{2}$ Quantenteilchen (z.B. Elektronen)
- Hergeleitet aus der Quantenmechanik und der speziellen Relativitätstheorie (1928 P. Dirac)
- Die Theorie sagt die Existenz von Antiteilchen voraus, bzw. Zustände mit positiver und negativer Energie (Elektron und Positron)



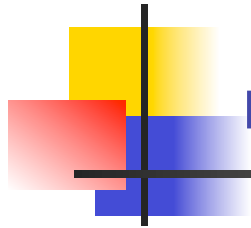
Dirac- Gleichung

- In Schrödinger Form lautet die Dirac- Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 \right) \psi$$

- Durch Quadrieren der Gleichung ergibt sich die relativistische Energie-Impuls-Beziehung
- Mit den 4x4 Matrizen

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad i=1,2,3 \quad \text{und} \quad \beta = \begin{pmatrix} 1_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -1_{2 \times 2} \end{pmatrix}$$



Dirac- Gleichung

- Für Teilchen mit Spin $n/2$ müssen Modifikationen vorgenommen werden
- Teilchen und Antiteilchen werden von einer sog. Spinor- Wellenfunktion Ψ beschrieben
- Diese Wellenfunktion stellt eine Lösung der Dirac-Gleichung dar

- Ψ ist eine vierkomponentige Vektorwellenfunktion

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \\ \psi_3(\vec{r}, t) \\ \psi_4(\vec{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$$

- Ψ_+ beschreibt Zustände positiver Energie,
 Ψ_- Zustände negativer Energie

In Graphen entspricht das dem Leitungs- und dem Valenzband

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



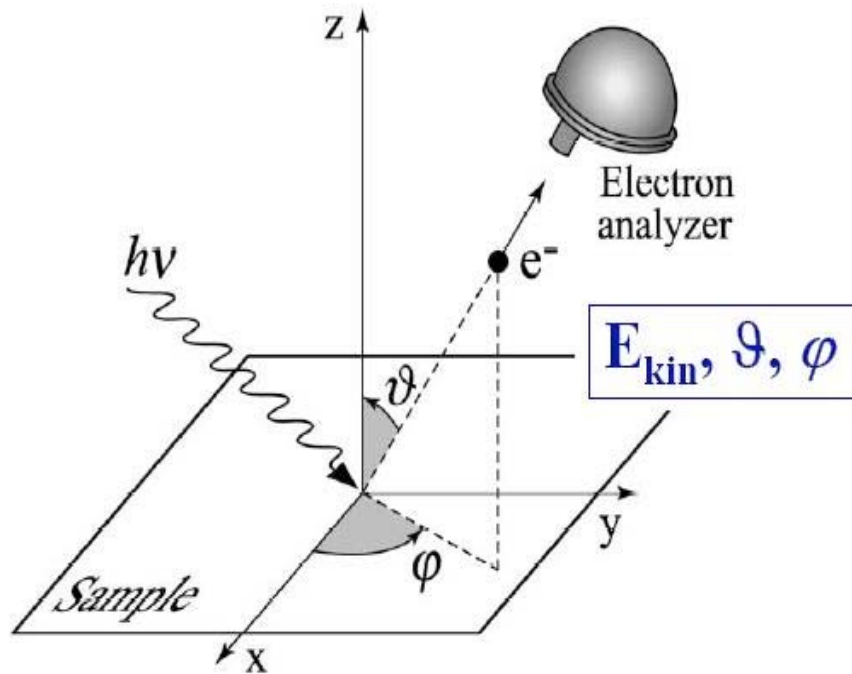
Experimentelle Ergebnisse



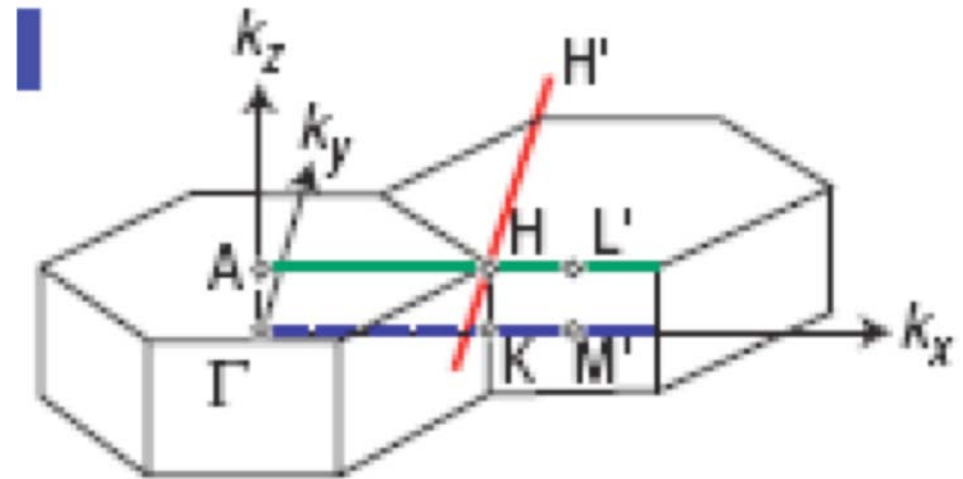
- Mittels ARPES an Graphit wurden Dirac- Elektronen zum ersten mal direkt nachgewiesen
- Messung der kinetischen Energie der Elektronen und des Austrittswinkels
- APRES Untersuchungen werden durchgeführt, um die elektronische Bandstruktur im FK zu ermitteln
- Sie ergaben Λ - förmige Dispersionsrelationen am H-Punkt und einen parabolischen Bandverlauf am K-Punkt der BZ



ARPES

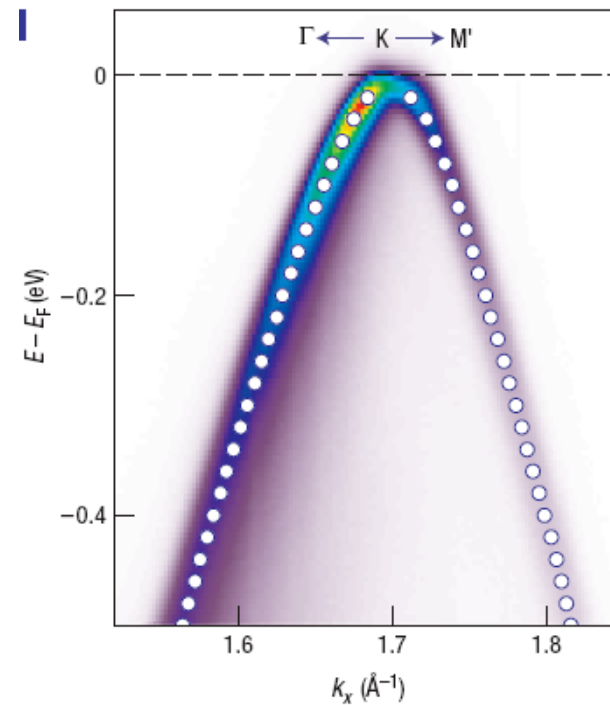
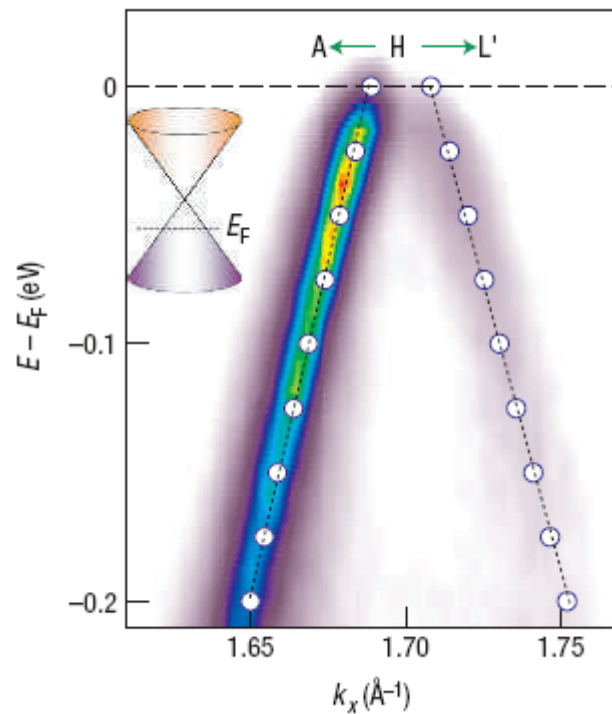


[8]//de.wikipedia.org/ (14.05.08)



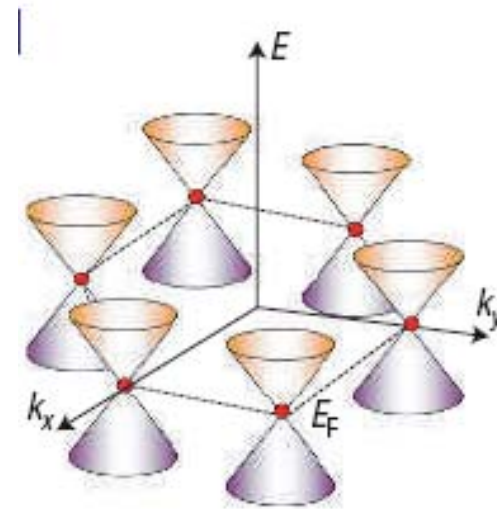
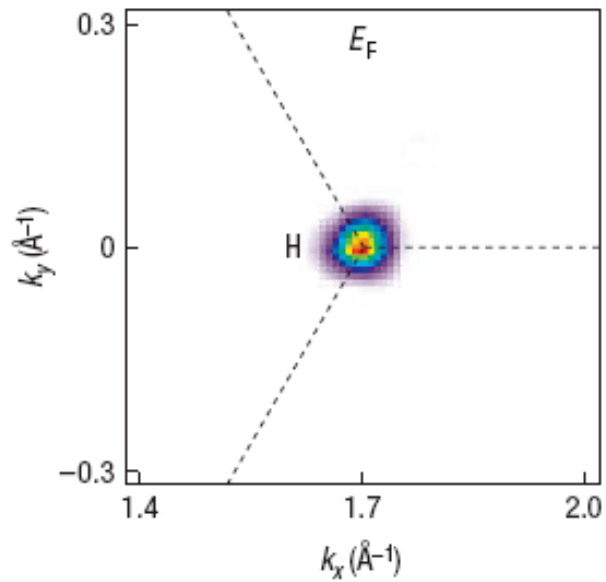
[3] Zhou et al. Nature Physics 2,595 (2006)

- Experimenteller Beweis für die Koexistenz von massiven und masselosen Elektronen in Graphit



[3] Zhou et al. Nature Physics 2,595 (2006)

- Intensitätsmaps zeigen konzentrische Kreise konstanter Energie um den H- Punkt



[3] Zhou et al. Nature Physics 2,595 (2006)



- Größter Beweis von Dirac- Elektronen in Graphen ist der anomale QHE
- Wie entsteht der QHE?
 - hochbewegliche 2D (max. 10nm) Ladungsträgersysteme
 - tiefe Temperaturen ($<4\text{K}$)
 - hohe Magnetfelder ($>10\text{T}$) senkrecht zur Probenoberfläche



- Elektronen verhalten sich wie freie Oszillatoren

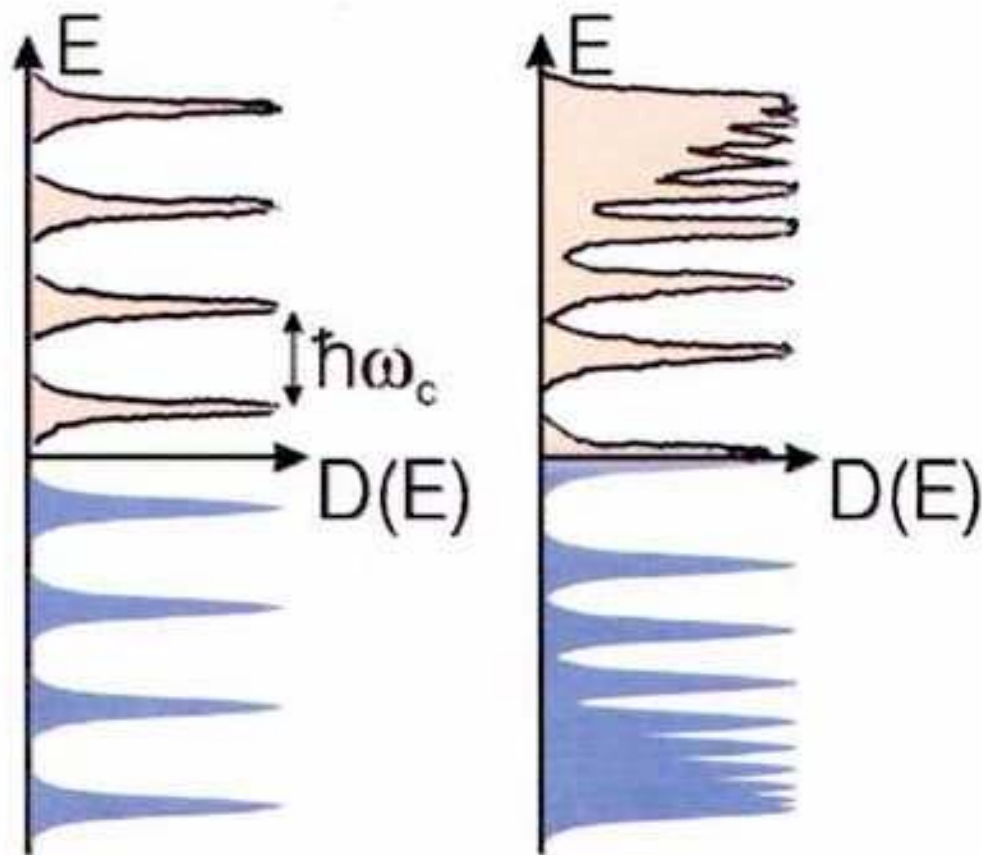
$$\omega_c = \frac{|e|B}{m_{eff}}$$

→ Oszillation des Hall Widerstandes

- Quantisierung der Hall- Leitfähigkeit in $\sigma_{Hall} = n \frac{e^2}{h}$
- Das Energiespektrum der Ladungsträger nimmt diskrete Werte an (Landau- Quantisierung)



QHE



$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_n = \pm v_F \sqrt{2|e|B\hbar n}$$

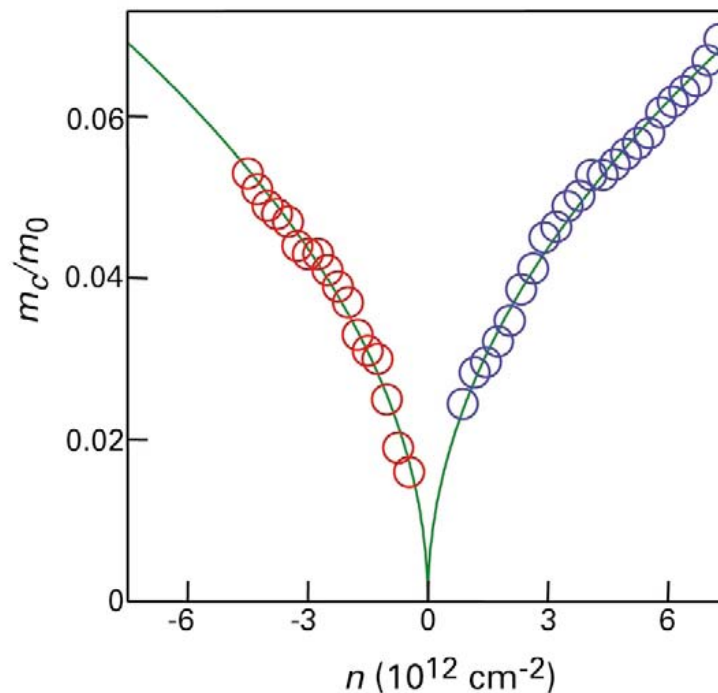
[1] Katsnelson et al. Materials Today 10,20 (2007)



- Durch „tunen“ des Fermilevels kann man eine Übereinstimmung mit einem Landau- Niveau erreichen
→ Oszillationen von $R_H \propto \frac{1}{B}$
- Aus der Periodendauer $\Delta\left(\frac{1}{B}\right)$ lassen sich Informationen über die Fermi- Fläche gewinnen
- Aus den Amplitudenhöhen Informationen über die effektive Masse
- Für eine lineare Dispersionsrelation sollte diese proportional zu \sqrt{n} sein



- Ein experimenteller Beweis der linearen Bandverläufe wurde unabhängig und simultan geliefert (Manchester U., Columbia U.)



[1] Katsnelson et al. Materials Today 10,20 (2007)

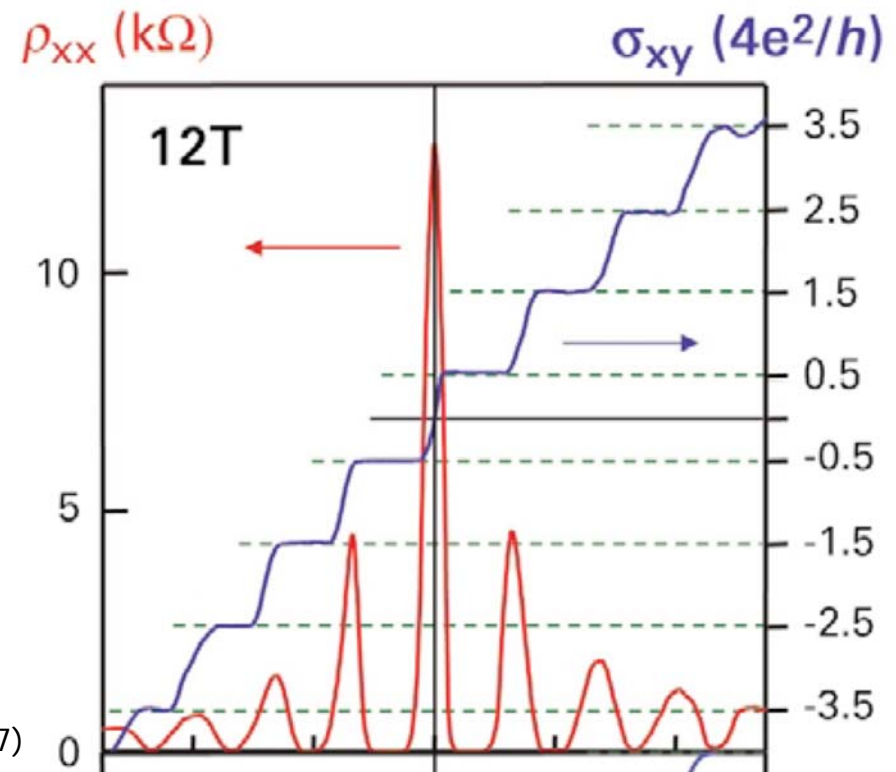


QHE

- Diese Gruppen haben auch gezeigt, dass die Existenz eines 0 Landau- Niveaus zum anomalen QHE führt

$$\sigma_{Hall} = \pm 4 \frac{e^2}{h} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

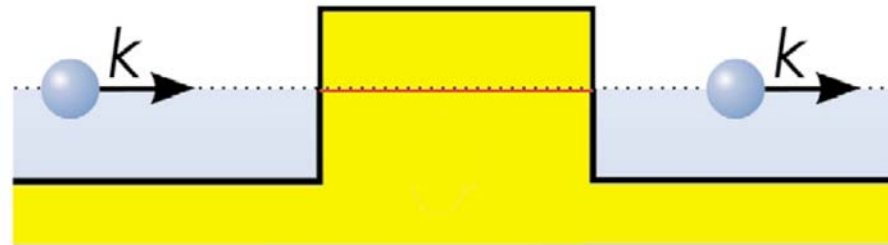
- Vierfache Entartung



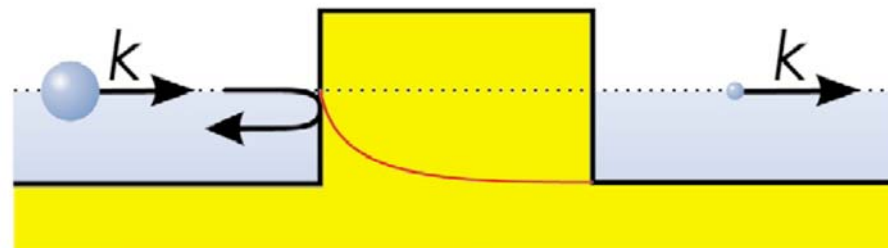
[1] Katsnelson et al. Materials Today 10,20 (2007)

Klein Paradox

- Ein Paradoxon tritt auf beim Tunneln von relativistischen Teilchen durch Potentialbarrieren
- Barriere transparent für Potentialhöhen oberhalb $2m_0c^2$



- Effekt in Graphen beobachtbar (Interbandtunneln)



[1] Katsnelson et al. Materials Today 10,20 (2007)



Klein Paradox

- Zustände innerhalb der Barriere sind repulsiv für Elektronen, aber attraktiv für Positronen
→ Letztere nehmen Zustände in der Barriere ein
- Tunneln durch Interaktion der Wellenfunktionen möglich
- Dieser Effekt stellt deutlich den Unterschied zwischen der relativistischen und der nichtrelativistischen Quantenmechanik dar



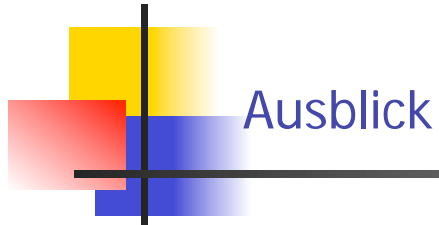
Zusammenfassung

- Graphen ist das erste Beispiel einer wirklichen 2D Struktur
- An den K und K'- Punkten berühren sich Valenz- und Leitungsband
- Lineare Dispersionrelation in der Nähe dieser Dirac-Punkte
- Ladungsträger verhalten sich wie masselose Teilchen (Dirac- Fermionen)
- Besseres Verständnis relativistischer Effekte anhand der 2D- Strukturen



Ausblick

- Hoffnung beruht auf Graphen basierenden elektronischen Bauteilen, einige Beispiele:
- Elektrontransport in Graphen ist unabhängig von der Dislokationsdichte (freie Weglänge einige μm)
→ hochfrequenz Bauteile („ballistischer Transistor“)
- Wegen der sehr schwachen Spin- Orbit Kopplung kommt es zur Spinrichtungserhaltung bis zu einem μm (Spin- Ventil Bauteile, Ansteuerung von Q- Bits)



- In Graphen kann ein Suprastrom induziert werden („proximity Effekt“)
→ supraleitende FET's

- Graphen als Gassensor



Literaturverzeichnis

- [1] Katsnelson et al. Materials Today 10,20 (2007)
- [2] Son et al. Nature 444,347 (2006)
- [3] Zhou et al. Nature Physics 2,595 (2006)
- [4] Charles Kittel, Einführung in die Festkörperphysik, 5.Auflage, Oldenbourg Verlag
- [5] Physik Journal, Juli 2007, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA Pf101161
D-69451 Weinheim
- [6] P. A. Tipler, Physik, Spektrum Akademischer Verlag
- [7]<http://www.ifwdresden.de/institutes/iff/events/lectures/hauptseminar-ws-2006-2007/ARPES.pdf> (14.05.08)
- [8][//de.wikipedia.org/](http://de.wikipedia.org/) (14.05.08)
- [9] K.-H. Hellwege, Einführung in die Festkörperphysik, 3. Auflage, Springer Verlag
- [10] Morozov, S. V., et al., Phys. Rev. Lett. (2006) 97, 016801
- [11] Semenoff, G. W., Phys. Rev. Lett. (1984) 53, 2449
- [12] Haldane, F. D. M., Phys. Rev. Lett. (1988) 61, 2015

Danke für die
Aufmerksamkeit

