Magnetisch veld loodrecht op gebogen monolaag grafeen

Jannes Merckx
Departement Fysica
UA

Promotor	Begeleider
François Peeters	Matthias Van der Donck

Universiteit Antwerpen

Inhoudsopgave

1 Abstract

In this thesis, the final goal is to research the properties of a deformed monolayer graphene in a magnetic field. To achieve this I first investigate the effects of a magnetic field on the energy levels and wavefunctions of a two-dimensional free particle with charge $-e$. The solutions are obtained analytically using the stationary Schrödinger equation in two gauges for the magnetic vector potential: the Landau gauge and the symmetric gauge.

Next, the stationary Schrödinger equation is solved for graphene in a magnetic field using the low-energy continuum Hamiltonian. The energy levels are determined by using ladder operators. The spinor wave function is then calculated analytically.

The same Hamiltonian can be used to study a deformed layer, where only the normal component of the magnetic field, which is variable, is included in the Schrödinger equation, through the magnetic vector potential. However, the system of differential equations can not be solved analytically. Numerically, energy levels and wave functions are obtained by means of the finite element method. The effects of the deformation are investegated as a function of the applied magnetic field, the shape of the deformation, and the quantum number k_y.

It is discovered that deforming the layer lowers the energy levels. Also, the energy becomes dependent on the quantum number k_y. In extreme cases, one of the spinor components splits.

2 Inleiding

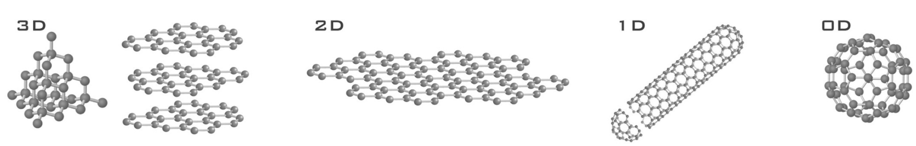
In dit werk wordt het effect van een magneetveld op een monolaag grafeen onderzocht. Eerst wordt uitgezocht wat de energieniveaus en golffuncties van een vrij deeltje in een magnetisch veld zijn. Hierna wordt overgestapt op grafeen.

Grafeen is één enkele, tweedimensionale laag van puur koolstof. Het materiaal komt voor in grafiet, enkel is dit driedimensionaal, meerdere grafeenlagen op elkaar gestapeld, verbonden via zwakke bindingen. De atomen van grafeen vormen een hexagonale structuur. Het materiaal werd vroeger vooral door theoretici bestudeerd, lang voor een enkele laag gescheiden kon worden in 2004. Dit werd gerealiseerd door onderzoekers aan de “Univerity of Manchester” onder leiding van Andre Geim and Kostya Novoselov, die hier in 2010 de Nobelprijs voor kregen. Het werd verwezenlijkt door te vertrekken van driedimensionaal grafiet, een enkele monolaag werd dan afgescheiden via een techniek genaamd “micromechanical cleavage”.

Grafeen kan omgezet worden naar een eendimensionale configuratie door het op te rollen. Dit is hoe cylindrische koolstofnanobuisjes gevormd worden. Ook kan grafeen opgerold worden naar nuldimensionale, bolvormige buckyballs. Deze structuren werden echter al experimenteel gerealiseerd voor grafeen. Zie ook Figuur 1.

Het is opmerkelijk dat grafeen kan bestaan. Immers werd lang geleden al voorspeld door Peierls en Landau dat thermische fluctuaties in een tweedimensionaal kristal de atomen verder dan de interatomaire afstand zouden verplaatsen, zodat het materiaal uit elkaar zou vallen en smelten. Tweedimensionale structuren zouden wel kunnen bestaan als onderdeel van een driedimensionaal kristal (zoals hoe grafeenlagen grafiet vormen). Er werd ook geobserveerd dat naarmate een materiaal bestaande uit tweedimensionale lagen dunner wordt het smeltpunt daalt. Zo wordt het onstabiel vanaf dat het nog een twaalftal lagen dik is. Dat grafeen toch kan bestaan komt doordat de koolstof-koolstof bindingen zo sterk zijn dat ze toch de thermodynamische fluctuaties kunnen compenseren.

Aangezien elk koolstofatoom in grafeen aan drie andere atomen gebonden is, houdt elk atoom een valentie-elektron over. Hierdoor kan grafeen dienst doen als zeer snelle geleider. Bijgevolg kan het in de toekomst misschien gebruikt worden voor geleiders in elektrische apparaten. In dit werk wordt onderzocht of het plooien van grafeen in een magnetisch veld interessante effecten oplevert. [4] [5]



Figuur 1: Verschillende vaste stoffen bestaande uit koolstof: diamant, grafiet, grafeen, koolstofnanobuisjes en buckyballs. [3]

3 Vrij deeltje in magnetisch veld

De tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking voor een vrij deeltje in twee dimensies wordt gegeven door

$$\hat{H}\psi = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m}\psi = E\psi. \tag{1}$$

Een magnetisch veld $\boldsymbol{B}$ kan geschreven worden als $\boldsymbol{B} = rot(\boldsymbol{A})$, met $\boldsymbol{A}$ de vectorpotentiaal. Het effect van een magnetisch veld op een vrij deeltje met lading $-e$ (zoals een elektron) kan beschreven worden door de impuls te vervangen door

$$\hat{p}_B = \hat{p} + e\boldsymbol{A}. \tag{2}$$

Met $\hat{p}_B$ de impulsoperator in een magnetisch veld. Er wordt in deze bachelorproef een magnetisch veld gekozen langs de z-as. $\boldsymbol{B} = B_0\boldsymbol{e_z}$. Twee frequente ijken voor $\boldsymbol{A}$ zijn de Landau ijk en de symmetrische ijk, respectievelijk gegeven door

$$\boldsymbol{A} = (0, B_0x, 0)\,, \tag{3}$$

en

$$\boldsymbol{A} = \left(-\frac{1}{2}B_0y, \frac{1}{2}B_0x, 0\right). \tag{4}$$

Het vrije deeltjesprobleem in twee dimensies wordt met beide ijken opgelost.

3.1 Landau ijk

In deze ijk wordt de Schrödinger vergelijking gegeven door

$$\frac{1}{2m}\left(-\frac{\hbar^2\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} + eB_0x\right)^2\right)\psi = E\psi \tag{5}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{2x}{il_B^2}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{l_B^4}2x^2\right)\psi = E\psi.$$

Met $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB_0}}$ de magnetische lengte. Dit is de karakteristieke lengte van een elektron in een magnetisch veld. De kwadratische term in x insinueert een harmonische oscillator, de mengterm met een afgeleide naar y maakt het probleem echter iets complexer.

Het probleem kan vereenvoudigd worden door een verschuiving in te voeren van de x-coördinaat. De Schrödinger vergelijking is equivalent als deze voor een deeltje met coördinaten

$$\tilde{x} = x + \frac{p_y}{eB_0}, \tag{6}$$

en

$$\tilde{y} = y. \tag{7}$$

Merk op dat $\frac{p_y}{eB_0}$ de dimensie van een lengte heeft. De transformatie kan doorgevoerd worden omdat $p_y = p_{\tilde{y}}$ commuteert met de Hamiltoniaan ($[\hat{H}, \hat{p}_y] = 0$). Dit is duidelijk het geval vermits de Hamiltoniaan geen termen in $y = \tilde{y}$ bevat. Aangezien de Hamiltoniaan commuteert met $\hat{p}_y$ moeten alle eigenfuncties van $\hat{p}_y$ ook eigenfuncties van de Hamiltoniaan zijn,

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\psi = p_y\psi. \tag{8}$$

Met p_y de eigenwaarde corresponderend met de impulsoperator $\hat{p}_y$. Deze differentiaalvergelijking oplossen levert

$$\psi = \psi_0(\tilde{x})e^{\frac{ip_y}{\hbar}y} = \psi_0(\tilde{x})e^{ik_y y}, \tag{9}$$

waar ψ_0 een constante moet zijn in y maar die wel van $\tilde{x}$ kan afhangen. Dit verandert de Schrödinger vergelijking naar

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tilde{x}^2} + k_y^2 + 2\frac{1}{l_B^2}\left(\tilde{x} - l_B^2 k_y\right)k_y + \frac{1}{l_B^4}\left(\tilde{x} - l_B^2 k_y\right)^2\right)\psi_0 = E\psi_0, \tag{10}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tilde{x}^2} + k_y^2 + 2\frac{k_y}{l_B^2}\tilde{x} - 2k_y^2 + \frac{1}{l_B^4}\tilde{x}^2 - 2\frac{1}{l_B^2}\tilde{x}k_y + k_y^2\right)\psi_0 = E\psi_0,$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tilde{x}^2} + \frac{1}{l_B^4}\tilde{x}^2\right)\psi_0 = E\psi_0. \tag{11}$$

Dit is de vergelijking van een harmonische oscillator in één dimensie.
Dit kan geschreven worden als de uitdrukking voor een harmonische oscillator opgelost in de cursus “Inleiding Kwantummechanica” [2],

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\tilde{x}^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\tilde{x}^2\right)\psi_0(\tilde{x})=E\psi_0(\tilde{x}). \tag{12}$$

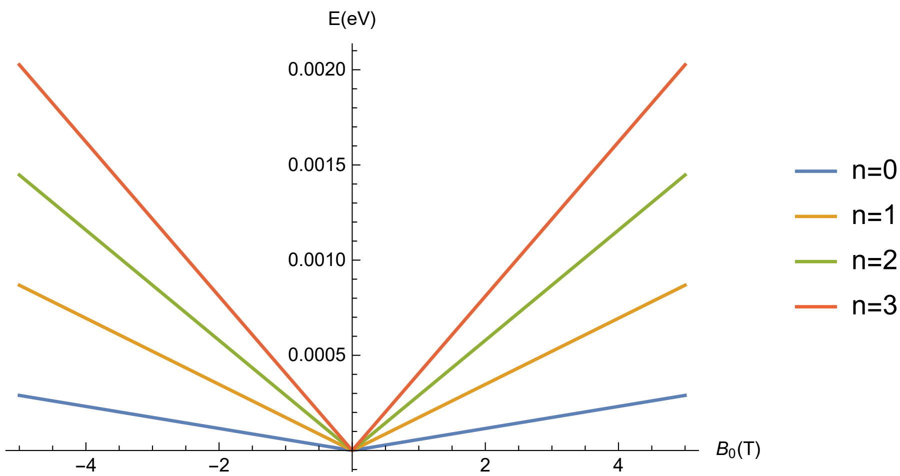
Met in dit geval

$$\omega=\frac{eB_0}{m}=\omega_c \tag{13}$$

de cyclotronfrequentie. Het resultaat is dat het energiespectrum gegeven wordt door

$$E_n=\hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right)=\frac{e\hbar B_0}{m}\left(n+\frac{1}{2}\right). \tag{14}$$

Dit worden de Landau niveaus genoemd. Ze worden weergegeven in Figuur 2.



Figuur 2: Landau niveaus van een vrij deeltje in twee dimensies.

De golffunctie corresponderend met een energieniveau wordt gegeven door

$$\psi_{n,k_y}(\tilde{x},y)=\left(\frac{m\omega_c}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{n!2^n}}H_n\left(\tilde{x}\sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}}\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\tilde{x}^2}e^{ik_y y}, \tag{15}$$

met $H_n(q)$ de Hermiet polynoom gegeven door

$$H_n(q)=(-1)^n e^{q^2}\frac{d^n}{dq^n}e^{-q^2}. \tag{16}$$

Het is nu mogelijk deze golffunctie uit te schrijven in x en y, alsook de waarde van ω_c in te vullen. In (6) kan p_y vervangen kan worden door $\hbar k_y$. De golffunctie wordt dan

$$\psi_{n,k_y}(x,y) = \left(\frac{1}{\pi l_B^2}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n\left(\left(x + l_B^2 k_y\right)\frac{1}{l_B}\right) e^{-\frac{1}{2l_B^2}\left(x+l_B^2 k_y\right)^2} e^{ik_y y}. \tag{17}$$

Deze heeft dus kwantumgetallen k_y en n. n is een positief geheel getal en geeft weer hoeveel keer $\hbar\omega_c$ de energie boven de grondtoestand zit, k_y is het golfgetal in de y-richting en kan elk reëel getal zijn. De energie hangt niet af van k_y, enkel van n. Om normaliseerbaar te zijn moet er nog een term $\frac{1}{\sqrt{L}}$ toegevoegd worden. In de y-richting hebben we immers een vlakke golf, zodat de lengte van een soort denkbeeldige doos waarin het vrije deeltje zit toegevoegd moet worden. Deze lengte kan ook naar oneindig gaan. Zo wordt de golffunctie

$$\psi_{n,k_y}(x,y) = \left(\frac{1}{\pi l_B^2}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n\left(\left(x + l_B^2 k_y\right)\frac{1}{l_B}\right) e^{-\frac{1}{2l_B^2}\left(x+l_B^2 k_y\right)^2} \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L}}. \tag{18}$$

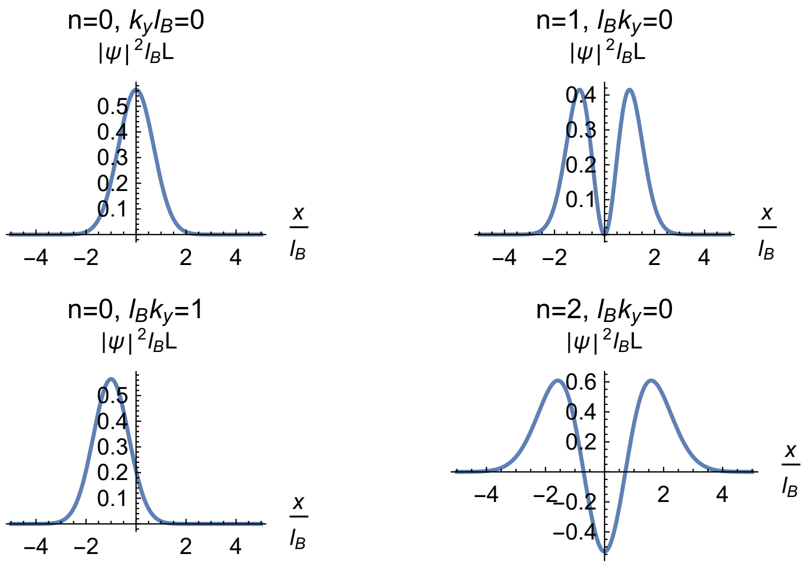
De golffunctie kan dan voor verschillende kwantumgetallen geplot worden in functie van $\frac{x}{l_B}$ en $\frac{y}{l_B}$. k_y wordt dan gesubstitueerd door $l_B k_y$, en de hele vergelijking (18) wordt vermenigvuldigd met $\sqrt{l_B L}$, zodat de golffunctie volledig dimensieloos wordt,

$$\psi_{n,k_y}(x,y) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n\left(\left(x + k_y\right)\right) e^{-\frac{1}{2}(x+k_y)^2} e^{ik_y y}. \tag{19}$$

.

De waarschijnlijkheidsverdeling wordt zo ook dimensieloos geplot. Zie Figuur 3. Voor $k_y = 0$ is dit is de waarschijnlijkheidsverdeling van een harmonische oscillator, uitgebreid met een dimensie y waarin de waarschijnlijkheid constant is. Het effect van de k_y toevoegen is dat de waarschijnlijkheidsverdeling opschuift met een factor $-k_y l_B^2$ (vermits elke x in (18) gevolgd wordt door $+k_y l_B^2$). De golffunctie ondervindt hetzelfde effect plus een periodische modulatie vanwege de term $e^{ik_y y}$. Dit wordt echter niet geplot.

Nu kunnen enkele verwachtingswaarden van deze golffunctie berekend worden, bijvoorbeeld



Figuur 3: Verschillende gevallen van de waarschijnlijkheidsverdeling in functie van x van een tweedimensionaal vrij deeltje in een magnetisch veld met vectorpotentiaal gegeven door de Landau ijk. De waarschijnlijkheidsverdeling in y is homogeen zodat dit de waarschijnlijkheidsverdeling is in functie van x voor alle y.

$$< \hat{x} >_{0,k_y} = \frac{1}{\sqrt{\pi} l_B} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{(x+l_B^2 k_y)^2}{l_B^2}} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi} l_B} \int_{-\infty}^{\infty} l_B (l_B t - k_y l_B^2) e^{-t^2} dt = -l_B^2 k_y. \tag{20}$$

Analoog wordt berekend

$$< \hat{x} >_{1,k_y} = -l_B^2 k_y, \tag{21}$$

en

$$< \hat{x} >_{2,k_y} = -l_B^2 k_y. \tag{22}$$

Voor alle niveaus is de verwachtingswaarde van $< \hat{x} >$ dus, zoals ook reeds zichtbaar was op de plots met de waarschijnlijkheidsverdelingen, gelijk aan $-l_B^2 k_y$.

De verwachtingswaarde van y kan ook berekend worden. Dit geeft

$$< \hat{y} >_{n,k_y}= \frac{1}{L}\frac{1}{\sqrt{\pi}l_B 2^n n!}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} yH_n(\frac{x+l_B^2 k_y}{l_B})^2 e^{-\frac{(x+l_B^2 k_y)^2}{l_B^2}} dxdy$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}l_B L}\int\limits_{-\infty}^{\infty} H_n(\frac{x+l_B^2 k_y}{l_B})^2 e^{-\frac{(x+l_B^2 k_y)^2}{l_B^2}} (\frac{\frac{L^2}{4}-\frac{L^2}{4}}{2})dx = 0. \quad (23)$$

De verwachtingswaarde van y is dus gelijk aan 0 voor alle n en k_y (in het niet-opgesloten geval kan de lengte L van de doos als oneindig gezien worden).

Ook kan de verwachtingswaarde $< \hat{x}^2 >$ berekend worden, in de grondtoestand wordt gevonden

$$< \hat{x}^2 >_{0,k_y}= \frac{1}{\sqrt{\pi}l_B}\int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{(x+l_B^2 k_y^2)^2}{l_B^2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}l_B}\int\limits_{-\infty}^{\infty}(l_B^2 t^2 + l_B^4 k_y^2)e^{-t^2}dt = \frac{l_B^2}{2}+l_B^4 k_y^2. \quad (24)$$

Dezelfde berekening wordt gedaan voor de eerste en tweede aangeslagen toestand, er wordt gevonden dat

$$< \hat{x}^2 >_{1,k_y}= \frac{3}{2}l_B^2 + l_B^4 k_y^2, \quad (25)$$

en

$$< \hat{x}^2 >_{2,k_y}= \frac{5}{2}l_B^2 + l_B^4 k_y^2 \quad (26)$$

Verwachtingswaarden voor hogere toestanden kunnen zo ook berekend worden, zodat algemeen

$$< \hat{x}^2 >_{n,k_y}= \left(n + \frac{1}{2} + l_B^2 k_y^2\right) l_B^2. \quad (27)$$

Uit de verwachte waarden van $\hat{x}$ en $\hat{x}^2$ kan gemakkelijk de breedte van de golffunctie berekend worden, immers is

$$< (\hat{x}- < \hat{x} >)^2 >_{n,k_y} = < \hat{x}^2 >_{n,k_y} - < x >_{n,k_y}^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right) l_B^2, \quad (28)$$

zodat de breedte van de golffunctie langs de x-as gelijk is aan

$$\sqrt{\left(n+\frac{1}{2}\right)} l_B. \tag{29}$$

De verwachte waarde van $\hat{y}^2$ wordt dan weer gegeven (in een doos) door

$$< \hat{y}^2 >_{n,k_y} = \frac{1}{L} \frac{1}{\sqrt{\pi} l_B 2^n n!} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} y^2 H_n(\frac{x + l_B^2 k_y}{l_B})^2 e^{-\frac{(x+l_B^2 k_y)^2}{l_B^2}} dx dy = \frac{L^2}{12}. \tag{30}$$

De breedte van de golffunctie langs de y-as wordt dus gegeven door

$$\sqrt{< (\hat{y} - < \hat{y} >)^2 >_{n,k_y}} = \sqrt{< \hat{y}^2 >_{n,k_y} - < \hat{y} >_{n,k_y}^2} = \frac{\sqrt{3} L}{6}. \tag{31}$$

Vervolgens wordt de verwachtingswaarde van de impulsoperator $\hat{p}_x$ uitgerekend,

$$< \hat{p}_x >_{0,k_y} = \frac{1}{\sqrt{\pi}_B} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar}{i} (-\frac{x + l_B^2 k_y}{l_B^2}) e^{-\frac{(x+l_B^2 k_y)^2}{l_B^2}} dx \tag{32}$$

$$= \frac{\hbar i}{\sqrt{\pi} l_B} \int_{-\infty}^{\infty} t e^{-t^2} dt = 0.$$

Analoog kan voor andere gevallen uitgerekend worden dat algemeen geldt

$$< \hat{p}_x >_{n,k_y} = 0. \tag{33}$$

Ook de verwachtingswaarde van de operator $\hat{p}_y$ kan berekend worden,

$$< \hat{p}_y >_{n,k_y} = \frac{1}{\sqrt{\pi} l_B 2^n n! L} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} H_n(\frac{x + l_B^2 k_y}{l_B})^2 e^{-\frac{(x+l_B^2 k_y)^2}{l_B^2}} \frac{\hbar}{i} i k_y dx dy = \hbar k_y. \tag{34}$$

Dit werd gevonden met Mathematica. Het resultaat is logisch, k_y is immers gedefinieerd in (9) als $\frac{p_y}{\hbar}$. Analoog is ook $< \hat{p}_y^2 >_{n,k_y} = \hbar^2 k_y^2$.

Tenslotte wordt berekend

$$< \hat{p}_x^2 >_{0,k_y} = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi} l_B^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x+l_B^2 k_y)^2}{l_B^2}} (-\frac{1}{l_B^2} + \frac{(x+l_B^2 k_y)^2}{l_B^4}) dx \tag{35}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi} l_B} \int_{-\infty}^{\infty} l_B(-\frac{1}{l_B^2} + \frac{t^2}{l_B^2}) e^{-t^2} dt = \frac{\hbar^2}{2 l_B^2}.$$

Analoog wordt gevonden dat

$$< \hat{p}_x^2 >_{n,k_y} = \frac{\hbar^2}{2 l_B^2}, \tag{36}$$

voor alle n en k_y.

3.2 Symmetrische ijk

Met deze ijk wordt de Schrödinger vergelijking gegeven door

$$\hat{H}\psi = \frac{1}{2m} \left(\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB_0 y}{2} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{eB_0 x}{2} \right)^2 \right) \psi = E\psi, \tag{37}$$

$$\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{e\hbar B_0 y}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e^2 B_0^2 y^2}{4} - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{e\hbar B_0 x}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e^2 B_0^2 x^2}{4} \right) \psi = E\psi. \tag{38}$$

De mengtermen $-\frac{\hbar}{i} y \frac{\partial}{\partial x}$ en $\frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial y}$ zijn de termen van het impulsmoment langs de z-as: $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$. Zo wordt gevonden dat

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi + \frac{eB_0 \hat{L}_z}{2m} \psi + \frac{e^2 B_0^2}{8m} \left(x^2 + y^2 \right) \psi = E\psi. \tag{39}$$

In poolcoördinaten wordt dit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi + \frac{eB_0 \hbar}{2mi} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} + \frac{e^2 B_0^2 r^2}{8m} \psi = E\psi. \tag{40}$$

$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$ commuteert duidelijk met de Hamiltoniaan operator vermits deze geen term in ϕ bevat, $[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0$. Hieruit volgt dat eigenfuncties van $\hat{L}_z$ ook eigenfuncties van $\hat{H}$ zijn,

$$\hat{L}_z\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = l\psi. \tag{41}$$

l, de z-component van het impuls-moment,is dus een goed kwantumgetal. De golffunctie kan geschreven worden als

$$\psi = \psi_0(r)e^{\frac{il}{\hbar}\phi}. \tag{42}$$

Invullen in de Schrödinger vergelijking levert

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_0}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi_0}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{l^2}{\hbar^2}\psi_0\right) + \frac{eB_0 l}{2m}\psi_0 + \frac{e^2B_0^2r^2}{8m}\psi_0 = E\psi_0. \tag{43}$$

In deze uitdrukking wordt de cyclotron frequentie herkend $\omega_c = \frac{eB_0}{m}$, zodat

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_0}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi_0}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{l^2}{\hbar^2}\psi_0\right) + \frac{\omega_c}{2}l\psi_0 + \frac{m}{8}\omega_c^2r^2\psi_0 = E\psi_0. \tag{44}$$

De vergelijking kan vereenvoudigd worden door substitutie van $E' = E - \frac{\omega_c}{2}l$. Merk op dat $\omega_c l$ de dimensie van energie heeft,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_0}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi_0}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{l^2}{\hbar^2}\psi_0\right) + \frac{m}{8}\omega_C^2r^2\psi_0 = E'\psi_0. \tag{45}$$

Deze vergelijking voor ψ_0 in functie van r kan geschreven worden in functie van $\tilde{r} = r\sqrt{\frac{m\omega_c}{2\hbar}} = \frac{r}{\sqrt{2}l_B}$. l wordt vervangen door $\tilde{l} = \frac{l}{\hbar}$. $\psi_0(r)$ wordt hiervoor ook vervangen door $\tilde{\psi_0}(\tilde{r})$. Hieruit volgt

$$-\frac{\hbar\omega_c}{4}\left(\frac{\partial^2\tilde{\psi_0}}{\partial\tilde{r}^2} + \frac{\partial\tilde{\psi_0}}{\tilde{r}\partial\tilde{r}} - \frac{\tilde{l}^2\tilde{\psi_0}}{\tilde{r}^2}\right) + \frac{1}{4}\hbar\omega_c\tilde{r}^2\tilde{\psi_0} = E'\tilde{\psi_0}. \tag{46}$$

E' vervangen door het dimensieloze $\epsilon = -\frac{4E'}{\hbar\omega_c}$ levert

$$\left(\frac{\partial^2\tilde{\psi_0}}{\partial\tilde{r}^2} + \frac{\partial\tilde{\psi_0}}{\tilde{r}\partial\tilde{r}} - \frac{\tilde{l}^2\tilde{\psi_0}}{\tilde{r}^2}\right) - \tilde{r}^2\tilde{\psi_0} = \epsilon\tilde{\psi_0}. \tag{47}$$

De methode van Frobenius kan misschien helpen deze differentiaalvergelijking op te lossen. Er wordt dus $\tilde{\psi} = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\tilde{r}^k$ ingevuld in (47), zodat

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k\tilde{r}^{k-2} + \sum_{k=1}^{\infty} ka_k\tilde{r}^{k-2} - \tilde{l}^2\sum_{k=0}^{\infty} a_k\tilde{r}^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} a_k\tilde{r}^{k+2} = \epsilon\sum_{k=0}^{\infty} a_k\tilde{r}^k. \tag{48}$$

Hieruit volgt

$$-\tilde{l}^2\frac{a_0}{\tilde{r}^2} - \tilde{l}^2\frac{a_1}{\tilde{r}} + \frac{a_1}{\tilde{r}} + 4a_2 - \tilde{l}^2 a_2 - \epsilon a_0 + 9a_3\tilde{r} - \tilde{l}^2 a_3\tilde{r} - \epsilon a_1\tilde{r} \tag{49}$$

$$+\sum_{k=2}^{\infty}(a_{k+2}(k+2)(k+1) + a_{k+2}(k+2) - \tilde{l}^2 a_{k+2} - a_{k-2} - \epsilon a_k)\tilde{r}^k = 0.$$

De som van alle termen in dezelfde macht van $\tilde{r}$ moet 0 zijn. Dit wordt uitgeschreven voor de eerste paar machten.

$$\propto \tilde{r}^{-2} => \tilde{l} = 0 \vee a_0 = 0 \tag{50}$$

$$\propto \tilde{r}^{-1} => \tilde{l} = \pm 1 \vee a_1 = 0 \tag{51}$$

$$\propto \tilde{r}^{0} => \tilde{l} = \pm 2 \vee a_2 = 0 \vee \left(\tilde{l} = 0 \wedge a_2 = \epsilon\frac{a_0}{4}\right) \tag{52}$$

$$\propto \tilde{r} => \tilde{l} = \pm 2 \vee a_3 = 0 \vee \left(\tilde{l} = \pm 1 \wedge a_3 = \epsilon\frac{a_1}{8}\right) \tag{53}$$

Dit gaat zo voort. Het komt er uiteindelijk op neer dat alle coëfficienten a_k gelijk zijn aan 0 behalve als $\tilde{l}$ gelijk is aan een geheel getal. Is dit getal even zijn alle even coëfficienten a_k met k groter dan of gelijk aan de absolute waarde van $\tilde{l}$ niet gelijk aan nul, alle andere coëfficienten zijn wel nul. Is dit getal oneven zijn alle oneven coëfficienten a_k met k groter dan of gelijk aan de absolute waarde van $\tilde{l}$ niet gelijk aan nul en alle andere coëfficienten wel. Er bestaat een algemene recursierelatie tussen de coëfficienten die niet 0 zijn, deze wordt in het algemeen ($k > 1$) gegeven door

$$a_{k+2} = \frac{\epsilon a_k + a_{k-2}}{(k+2)^2 - \tilde{l}^2}. \tag{54}$$

Vermits elke coëfficient afhangt van twee lagere coëfficienten is deze relatie niet makkelijk op te lossen. Wel zijn de mogelijke eigenwaarden van $\hat{L}_z$, de z-component (loodrecht met B) van het impulsmoment van het deeltje, gevonden,

$$l = n\hbar. \tag{55}$$

Met n een geheel getal. Nu kan (45) verder onderzocht worden. Allereerst wordt deze vergelijking benaderd voor kleine r,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_0}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi_0}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{l^2}{\hbar^2}\psi_0\right) = 0. \tag{56}$$

Het is duidelijk dat deze vergelijking wordt opgelost door de functie $r^{\frac{|l|}{\hbar}} = r^{|\tilde{l}|}$ (absolute waarde van l vermits een negatieve l een functie geeft die divergeert in 0. Voor grote r wordt (45) gegeven door

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_0}{\partial r^2} + \frac{m}{8}\omega_c^2 r^2\psi_0 = E'\psi_0. \tag{57}$$

De oplossing hiervan is duidelijk evenredig met $e^{-\frac{r^2}{4l_B^2}}$. Er wordt om de uiteindelijke oplossing te bekomen dan $\psi_0 = e^{-\frac{r^2}{4l_B^2}} r^{|\tilde{l}|} \sum_k a_k r^{k+s}$ ingevuld in (45). Deze tweede Frobenius resulteert uiteindelijk in ($\tilde{l}$ wordt in wat volgt genoteerd als l)

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(-\frac{1}{2l_B^2}\sum_{k=0}^{\infty} a_k r^{k+s+|l|} + \sum_{k=0}^{\infty} a_k\left(k+s+|l|\right)\left(k+s+|l|-1\right) r^{k+s+|l|-2} \\
-\frac{1}{2l_B^2}\sum_{k=0}^{\infty} a_k\left(k+s+|l|\right) r^{k+s+|l|} - \frac{1}{2l_B^2}\sum_{k=0}^{\infty} a_k r^{k+s+|l|} \\
+\sum_{k=0}^{\infty} a_k\left(k+s+|l|\right) r^{k+s+|l|-2} - l^2\sum_{k=0}^{\infty} a_k r^{k+s+|l|-2}\Big) = E'\sum_{k=0}^{\infty} a_k r^{k+s+|l|}.
\end{aligned} \tag{58}$$

Allereerst wordt de indiciële vergelijking opgelost. Zo vallen de termen evenredig met $r^{s+|l|-2}$ en $r^{s+|l|-1}$ weg, en volgt het stelsel

$$\begin{cases} \left(s+|l|\right)\left(s+|l|-1\right)a_0 - l^2 a_0 + \left(s+|l|\right)a_0 = 0, \\ \left(1+s+|l|\right)a_1 + \left(1+s+|l|\right)\left(s+|l|\right)a_1 - l^2 a_1 = 0. \end{cases} \tag{59}$$

Zodat afhankelijk van de waarde van s enkel de even of enkel de oneven coeëfficienten overblijven,

$$
\begin{cases}
(s = -2|l| \vee s = 0) \wedge a_1 = 0, \\
(s = -2|l| - 1 \vee s = -1) \wedge a_0 = 0.
\end{cases}
\tag{60}
$$

Zoals overeenkomt met de theorie achter de machtreeks zijn er twee oplossingen voor s. (58) wordt nu geschreven zonder de termen die wegvallen door de indiciële vergelijking,

$$
\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(-\frac{1}{2l_B^2}\sum_{k=0}^{\infty} a_k r^{k+s+|l|} + \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2}\left(k+s+|l|+2\right)\left(k+s+|l|+1\right) r^{k+s+|l|} \\
-\frac{1}{2l_B^2}\sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(k+s+|l|\right) r^{k+s+|l|} - \frac{1}{2l_B^2}\sum_{k=0}^{\infty} a_k r^{k+s+|l|} \\
+\sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2}\left(k+s+|l|\right) r^{k+s+|l|+2} - l^2 \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2} r^{k+s+|l|}\Big) = E' \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^{k+s+|l|}.
\end{aligned}
\tag{61}
$$

Hieruit volgt de recursierelatie

$$
a_{k+2} = \frac{E' - \frac{\hbar\omega_C}{2}\left(1+k+s+|l|\right)}{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\left(k+s+|l|+2\right)^2 - l^2\right)} a_k. \tag{62}
$$

De noemer wordt 0 als $s = -2|l|$ zodat enkel de oplossing $s = 0$ mogelijk blijft. Bovendien gaat de reeks voor grote k naar

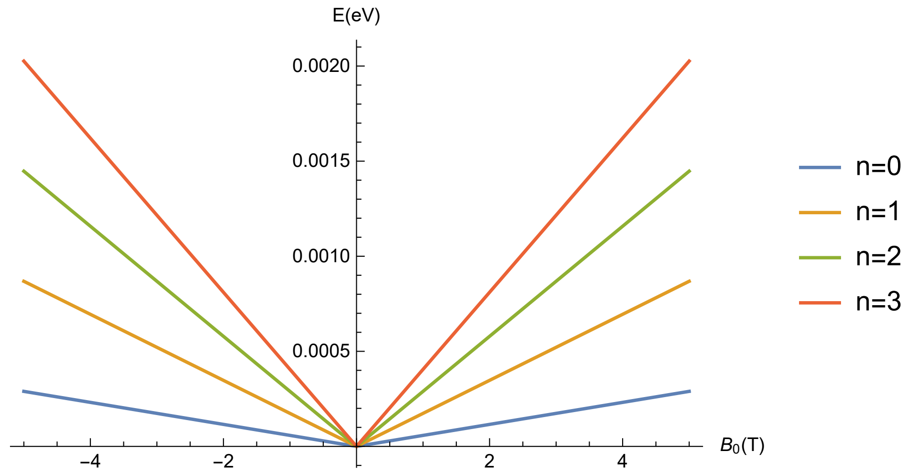
$$
\frac{a_{k+2}}{a_k} \propto \frac{1}{k}, \tag{63}
$$

wat divergeert. Hierdoor moet de reeks afgebroken worden bij een bepaalde E',

$$
E'_n = \frac{\hbar\omega_c}{2}\left(2n+|l|+1\right), \tag{64}
$$

$$
E_n = \frac{\hbar\omega_c}{2}\left(2n+|l|+l+1\right). \tag{65}
$$

De gevonden energieniveaus worden weergegeven in Figuur 4. Uit de niveaus volgt uiteindelijk de relatie



Figuur 4: Energie niveaus vrij deeltje in symmetrische ijk, in functie van magnetisch veld B_0 (als l oneven is).

$$\begin{aligned} a_{2k+2} &= \frac{\frac{\hbar\omega_c}{2}(n-k)}{(2k+2+|l|)-l^2}\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)a_{2k} \\ &= \frac{n-k}{k^2+1+k|l|+2k+|l|}\left(-\frac{1}{2l_B^2}\right)a_{2k} \\ &= \left(-\frac{1}{2l_B^2}\right)^{k+1}\frac{n-k}{k^2+1+(2+|l|)\,k+|l|} \\ &\frac{n-k+1}{(k-1)^2+1+(2+|l|)\,(k-1)+|l|}\cdots\frac{n}{|l|+1}a_0 \end{aligned} \tag{66}$$

Deze relatie komt overeen met de Laguerre polynoom. Voor de oneven termen wordt op dezelfde manier gevonden dat

$$E_n = \frac{\hbar\omega_c}{2}\left(2n+|l|+l+1\right), \tag{67}$$

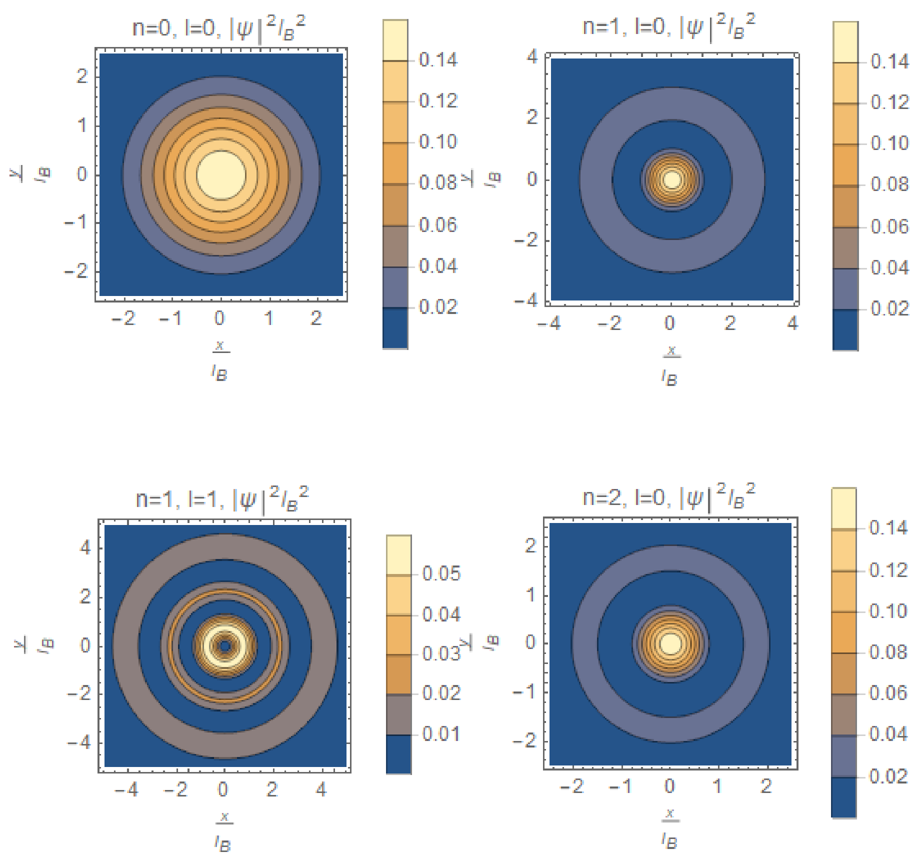
en

$$\begin{aligned} a_{2k+3} = \left(-\frac{1}{2l_B^2}\right)^{k+1} &\frac{n-k}{k^2+1+(2+|l|)\,k+|l|} \\ &\frac{n-k+1}{(k-1)^2+1+(2+|l|)\,(k-1)+|l|}\cdots\frac{n}{|l|+1}a_1. \end{aligned} \tag{68}$$

Uiteindelijk volgt dus dat de enige mogelijke oplossing is dat de golffunctie gegeven wordt door

$$\psi_{n,l}(r,\phi) = Ce^{il\phi} r^{\frac{|l|}{\hbar}} e^{-\frac{r^2}{4l_B^2}} L_{n+|l|}^{|l|}\left(\frac{r^2}{2l_B^2}\right), \tag{69}$$

Met C een normalisatieconstante. De kwantumgetallen zijn hier n en l, met n een positief geheel getal en l een geheel getal groter dan of gelijk aan -n. Enkele waarschijnlijkheidsverdelingen volgend uit de symmetrische ijk worden weergegeven in Figuur 5.



Figuur 5: Waarschijnlijkheidsverdeling van een deeltje in een magnetisch veld met symmetrische ijk voor verschillende kwantumgetallen l en n.

Ook hier kunnen uit de golffunctie enkele verwachtingswaarden berekend worden. De C kan voor elk paar kwantumgetallen apart uitgerekend worden uit normalisatie. Enkele gevonden verwachtte waarden zijn

$$< \hat{x} >_{n,l} = < \hat{y} >_{n,l} = 0, \tag{70}$$

$$< \hat{p}_x >_{n,l} = < \hat{p}_y >_{n,l} = 0. \tag{71}$$

Verder ook

$$< \hat{x}^2 >_{0,0} = < \hat{y}^2 >_{0,0} = l_B^2, \tag{72}$$

$$< \hat{x}^2 >_{1,0} = < \hat{y}^2 >_{1,0} = 3l_B^2, \tag{73}$$

$$< \hat{x}^2 >_{n,0} = < \hat{y}^2 >_{n,0} = (2n+1)\, l_B^2, \tag{74}$$

$$< \hat{x}^2 >_{1,1} = < \hat{y}^2 >_{1,1} = 6l_B^2 = < \hat{x}^2 >_{1,-1} = < \hat{y}^2 >_{1,-1}, \tag{75}$$

$$< \hat{p}_x^2 >_{0,0} = < \hat{p}_y^2 >_{0,0} = \frac{\hbar^2}{4l_B^2}, \tag{76}$$

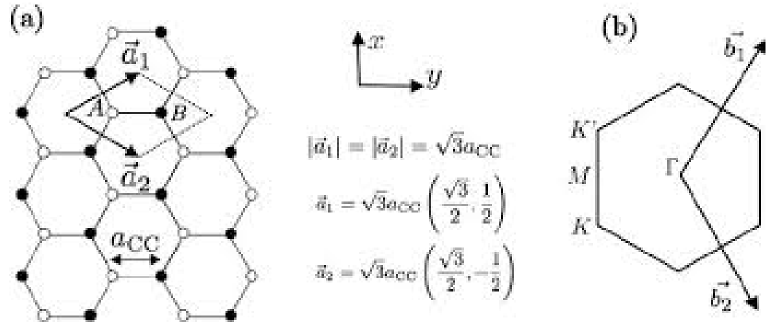
$$< \hat{p}_x^2 >_{1,0} = < \hat{p}_y^2 >_{1,0} = \frac{3\hbar^2}{4l_B^2}, \tag{77}$$

$$< \hat{p}_x^2 >_{n,0} = < \hat{p}_y^2 >_{n,0} = \frac{(2n+1)\hbar^2}{4l_B^2}, \tag{78}$$

en

$$< \hat{p}_x^2 >_{1,1} = < \hat{p}_y^2 >_{1,1} = \frac{5\hbar^2}{4l_B^2} = < \hat{p}_x^2 >_{1,-1} = < \hat{p}_y^2 >_{1,-1}. \tag{79}$$

4 Grafeen



Figuur 6: (a) geeft het grafeenrooster en haar roostervectoren $\boldsymbol{a_1}$ en $\boldsymbol{a_2}$ weer. Deze hebben beiden een lengte $\sqrt{3}a_{CC}$ (met a_{CC} de afstand tussen de atomen, 0.14 nm). De lengte van de basisvectoren is dus gelijk aan 0.246 nm. Deze afstand wordt later a genoemd. In stippellijn wordt de eenheidscel aangeduid. (b) geeft het reciproke rooster weer. Er worden punten met hoge symmetrie aangeduid. De benaderde "tight-binding" Hamiltoniaan is een benadering rond die punten die geldig blijft in een grote straal errond (bijna tot het punt M). [1]

De basisvectoren die de eenheidscel van een grafeenrooster definiëren worden weergegeven in Figuur 6. Elke eenheidscel bevat twee koolstofatomen. Deze twee atomen hebben elke een eigen golffunctie. Een lading wordt beschreven door de superpositie van deze twee golffuncties. Dit verband wordt uitgedrukt door de "tight-binding" Hamiltoniaan, een twee bij twee matrix die de hele Brillouinzone beschrijft. Het energiespectrum van deze matrix wordt gegeven door

$$E(\vec{k}) = \pm t\sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}, \qquad (80)$$

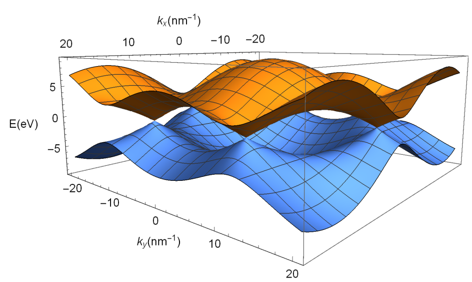
wat ook weergegeven wordt in Figuur 7a. t is hier de "hopping parameter" van grafeen (3.12 eV). k_x en k_y zijn de componenten van het golfgetal. De bovenste functie is de valentieband, de onderste de conductieband. Rond de K-punten in Figuur 6 kan een benaderde "tight-binding" Hamiltoniaan opgesteld worden via een Taylor benadering, die geldig is tot bijna het punt M weergegeven op de figuur. De K en K' punten waarrond de benadering gemaakt wordt, zijn de locaties in de reciproke ruimte van de plekken waar in Figuur 7a de twee vlakken elkaar raken. Vermits in de rest van deze vlakken de energie veel hoger is dan rond deze punten, is dit een lage-energie benadering. Lage-energie punten zijn echter de meest interessante. De "tight-binding' matrix benaderd voor lage energie wordt gegeven door [6]

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}at\left(\hat{k}_x - i\hat{k}_y\right) \\ \frac{\sqrt{3}}{2}at\left(\hat{k}_x + i\hat{k}_y\right) & 0 \end{bmatrix}. \tag{81}$$

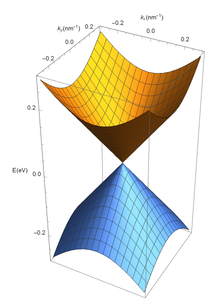
Dit wordt verder gebruikt als Hamiltoniaan. $\hat{k_x}$) en $\hat{k_y}$ zijn goede kwantumgetallen (k_x en k_y). De eigenwaarden van deze Hamiltoniaan worden gegeven door

$$\lambda_\pm = \pm\frac{\sqrt{3}}{2}at\sqrt{k_x^2 + k_y^2} = E_\pm. \tag{82}$$

Dit wordt weergegeven in Figuur 7b. Uit de vorm van de Hamiltoniaan is duidelijk dat de golffuncties ψ_a en ψ_b van de twee onafhankelijke atomen in de eenheidscel niet onafhankelijk zijn.



(a) Energiespectrum van grafeen.



(b) Benaderd energiespectrum van grafeen voor lage energie.

Onderzocht worden nu de effecten die een elektron in grafeen, met lading $-e$, ondervindt in een magneetveld.

4.1 Analytisch oplossen Schrödinger vergelijking in magnetisch veld loodrecht op grafeen

Het effect van het magnetisch veld wordt, net als bij het vrije deeltje, gegeven door de vectorpotentiaal op te tellen bij de impuls. Voor de vectorpotentiaal wordt de Landau ijk gekozen ($\boldsymbol{A} = eB_0x\boldsymbol{e_y}$). Vermits $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ wordt de substitutie gegeven door

$$\hat{H}\Psi = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{at}{\hbar}\left(\hbar\hat{k}_x - i\left(\hbar\hat{k}_y + eB_0x\right)\right) \\ \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{at}{\hbar}\left(\hbar\hat{k}_x + i\left(\hbar\hat{k}_y + eB_0x\right)\right) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{bmatrix}$$

$$= E\Psi. \tag{83}$$

Met Ψ de spinor $\begin{bmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{bmatrix}$.

Aangezien deze Hamiltoniaan commuteert met de operator $\hat{k}_y$ (geen term met y buiten de afgeleide komend van de operator $\hat{k}_y$), kan deze operator als kwantumgetal k_y geschreven worden in de rest van deze sectie. De eigenfuncties van de Hamiltoniaan moeten dus ook eigenfuncties van de operator $\hat{k}_y$ zijn, en kunnen dus geschreven worden als een functie van x maal een exponentiële functie, de eigenfunctie van $\hat{k}_y$, zodat

$$\psi_a(x,y) = \psi_{a,x}(x)e^{ik_y y}, \tag{84}$$

$$\psi_b(x,y) = \psi_{b,x}(x)e^{ik_y y}, \tag{85}$$

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{at}{\hbar}\left(\hbar\hat{k}_x - i\left(\hbar k_y + eB_0x\right)\right) \\ \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{at}{\hbar}\left(\hbar\hat{k}_x + i\left(\hbar k_y + eB_0x\right)\right) & 0 \end{bmatrix}. \tag{86}$$

Dit levert dus een stelsel van twee differentiaalvergelijkingen,

$$E\psi_{a,x} = \frac{\sqrt{3}}{2}at\left(-i\frac{\partial}{\partial x} - ik_y - i\frac{eB_0}{\hbar}x\right)\psi_{b,x}, \tag{87}$$

$$E\psi_{b,x} = \frac{\sqrt{3}}{2}at\left(-i\frac{\partial}{\partial x} + ik_y + i\frac{eB_0}{\hbar}x\right)\psi_{a,x}. \tag{88}$$

Dit stelsel kan opgelost worden door middel van substitutie, zodat

$$\psi_{a,x} = \frac{\sqrt{3}}{2E}at\left(-i\frac{\partial}{\partial x} - ik_y - i\frac{eB_0}{\hbar}x\right)\psi_{b,x}, \tag{89}$$

$$E\psi_{b,x} = \frac{\sqrt{3}}{2}at\left(-i\frac{\partial}{\partial x} + ik_y + i\frac{eB_0}{\hbar}x\right)\left(\frac{\sqrt{3}}{2E}at\left(-i\frac{\partial}{\partial x} - ik_y - i\frac{eB_0}{\hbar}x\right)\psi_{b,x}\right). \tag{90}$$

De tweede vergelijking wordt uitgeschreven,

$$E\psi_{b,x} = \frac{\sqrt{3}}{2}at\Bigg(ik_y\left(-\frac{\sqrt{3}}{2E}ati\frac{\partial\psi_{b,x}}{\partial x} - \frac{\sqrt{3}}{2E}atik_y\psi_{b,x} - \frac{ieB_0}{\hbar E}\frac{\sqrt{3}}{2}atx\psi_{b,x}\right) \tag{91}$$

$$-i\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2E}ati\frac{\partial\psi_{b,x}}{\partial x} - \frac{\sqrt{3}}{2E}atik_y\psi_{b,x} - \frac{ieB_0}{\hbar E}\frac{\sqrt{3}}{2}atx\psi_{b,x}\right) \tag{92}$$

$$+\frac{ieB_0x}{\hbar}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2E}ati\frac{\partial\psi_{b,x}}{\partial x} - \frac{\sqrt{3}}{2E}atik_y\psi_{b,x} - \frac{ieB_0}{\hbar E}\frac{\sqrt{3}}{2}atx\psi_{b,x}\right)\Bigg). \tag{93}$$

Enkele termen vallen weg,

$$\psi_{b,x} = \frac{3}{4E^2}a^2t^2k_y^2\psi_{b,x} + \frac{eB_0}{\hbar E^2}\frac{3}{2}a^2t^2xk_y\psi_{b,x} - \frac{3}{4}\frac{a^2t^2}{E^2}\frac{\partial^2\psi_{b,x}}{\partial x^2} \tag{94}$$

$$-\frac{eB_0}{\hbar E^2}\frac{3}{4}a^2t^2\psi_{b,x} + \frac{e^2B_0^2}{\hbar^2E^2}\frac{3}{4}a^2t^2x^2\psi_{b,x}. \tag{95}$$

Dit is een moeilijke differentiaalvergelijking. Een methode om de energieniveaus op een makkelijke manier te bepalen is door gebruik te maken van ladderoperatoren.

4.2 Oplossen Schrödinger vergelijking in magnetisch veld loodrecht op grafeen met ladderoperatoren

Voor de klassieke harmonische oscillator worden ladderoperatoren gedefinieerd als

$$\hat{a}_{HO} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(i\hat{p} + m\omega\hat{x}\right), \tag{96}$$

$$\hat{a}_{HO}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}\right). \tag{97}$$

Er geldt dat $[a_{HO}, a_{HO}^\dagger] = \hat{1}$. Door de Hamiltoniaan in functie van de ladderoperatoren te schrijven kan aangetoond worden dat voor een harmonische oscillator geldt

$$\hat{a}_{HO}|n>=\sqrt{n}|n-1>, \tag{98}$$

$$\hat{a}^{\dagger}_{HO}|n>=\sqrt{n+1}|n+1>. \tag{99}$$

Met $|n>$ de n-de eigentoestand van de harmonische oscillator. Het effect van de ladderoperatoren op een eigentoestand is deze een trap omhoog of omlaag te brengen. Op deze manier is het gemakkelijk de energieniveaus te bepalen.

Om de energieniveaus voor een elektron in grafeen loodrecht op een magnetisch veld te bepalen kunnen aangepaste ladderoperatoren gebruikt worden. Gezocht wordt dus naar operatoren met commutator $\hat{1}$ waaruit de Hamiltoniaan opgebouwd kan worden. Operatoren die hieraan voldoen zijn

$$\hat{a}=\sqrt{\frac{\hbar}{2eB_0}}\left(\hat{k}_x-i\left(\hat{k}_y+\frac{eB_0\hat{x}}{\hbar}\right)\right), \tag{100}$$

en

$$\hat{a}^{\dagger}=\sqrt{\frac{\hbar}{2eB_0}}\left(\hat{k}_x+i\left(\hat{k}_y+\frac{eB_0\hat{x}}{\hbar}\right)\right). \tag{101}$$

Dat de commutator $\hat{1}$ is, is makkelijk aan te tonen. De Hamiltoniaan wordt dan

$$\hat{H}=\begin{bmatrix} 0 & at\sqrt{\frac{3eB_0}{2\hbar}}\hat{a} \\ at\sqrt{\frac{3eB_0}{2\hbar}}\hat{a}^{\dagger} & 0 \end{bmatrix}. \tag{102}$$

De Schrödinger vergelijking levert dan het volgende stelsel,

$$E\psi_A=at\sqrt{\frac{3eB_0}{2\hbar}}\hat{a}\psi_B, \tag{103}$$

$$E\psi_B=at\sqrt{\frac{3eB_0}{2\hbar}}\hat{a}^{\dagger}\psi_A. \tag{104}$$

Om het effect van de ladderoperatoren te onderzoeken wordt $\hat{a}^{\dagger}$ toegepast op $\hat{H}$ inwerkend op de spinor:

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{H}\begin{bmatrix}\psi_A\\ \psi_B\end{bmatrix}=E\hat{a}^{\dagger}\begin{bmatrix}\psi_A\\ \psi_B\end{bmatrix}. \tag{105}$$

De bovenste rij uit het resulterende stelsel geeft

$$E\hat{a}^\dagger\psi_A = at\sqrt{\frac{3eB_0}{2\hbar}}\hat{a}^\dagger\hat{a}\psi_B. \tag{106}$$

Hierin kan $\hat{a}^\dagger$ vervangen worden door een uitdrukking afgeleid uit de Schrödinger vergelijking (104), zodat

$$\hat{a}^\dagger\psi_A = \sqrt{\frac{2\hbar}{3eB_0}}\frac{E}{at}\psi_B. \tag{107}$$

Dit resulteert in

$$\frac{2\hbar E^2}{3eB_0a^2t^2}\psi_B = \hat{a}^\dagger\hat{a}\psi_B. \tag{108}$$

Met andere woorden, ψ_B is een eigenfunctie van de samengestelde operator $\hat{a}^\dagger\hat{a}$, met eigenwaarde $\frac{2\hbar E^2}{3eB_0a^2t^2}$.

Een ander stelsel zoals (105) kan gemaakt worden door de $\hat{a}$ te laten inwerken op de Hamiltoniaan, inwerkend op de spinor. Dit geeft

$$\hat{a}\hat{H}\begin{bmatrix}\psi_A\\ \psi_B\end{bmatrix} = E\hat{a}\begin{bmatrix}\psi_A\\ \psi_B\end{bmatrix}. \tag{109}$$

Uit de onderste rij van het resulterende stelsel volgt

$$E\hat{a}\psi_B = at\sqrt{\frac{3eB_0}{2\hbar}}\hat{a}\hat{a}^\dagger\psi_A. \tag{110}$$

Door wederom $\hat{a}\psi_B$ te vervangen door een uitdrukking afgeleid uit de Schrödinger (104) vergelijking wordt dit

$$\frac{2\hbar}{3eB_0}\frac{E^2}{a^2t^2}\psi_A = \hat{a}\hat{a}^\dagger\psi_A. \tag{111}$$

Rekening houdende met dat de commutator $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$ gelijk is aan de eenheidsoperator levert dit

$$\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1\right)\psi_A = \frac{2\hbar E^2}{3eB_0a^2t^2}\psi_A \tag{112}$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\psi_A = \left(\frac{2\hbar E^2}{3eB_0a^2t^2} - 1\right)\psi_A. \tag{113}$$

Oftewel, ψ_A is net als ψ_B een eigentoestand van de samengestelde operator $\hat{a}^\dagger\hat{a}$, maar met een eigenwaarde die 1 eenheid lager is.

Uit (104) volgt rechtstreeks dat de operator $\hat{a}$ inwerkend op ψ_B een constante maal ψ_A levert, omgekeerd levert het inwerken van $\hat{a}^\dagger$ op ψ_A een constante maal ψ_B. Net als de ladderoperatoren van de harmonische oscillator zetten de ladderoperatoren $\hat{a}$ en $\hat{a}^\dagger$ inwerkend op een eigentoestand deze eigentoestand om naar een eigentoestand een stap hoger of lager, waarbij de energie dus ook een eenheid omhoog of omlaag gaat. Dus

$$\psi_B = |n >= C\hat{a}^\dagger\psi_A = C\hat{a}^\dagger|n-1>, \tag{114}$$

$$\psi_A = |n-1>= D\hat{a}\psi_B = D\hat{a}|n> . \tag{115}$$

Met C en D constanten.

Tenslotte geldt voor de ladderoperatoren van de harmonische oscillator dat de getaloperator gegeven wordt door $\hat{a}^\dagger\hat{a}$:

$$\hat{a}^\dagger_{HO}\hat{a}_{HO}|n>= n|n> . \tag{116}$$

Aangezien $\hat{a} = -i\hat{a}_{HO}$ en $\hat{a}^\dagger = i\hat{a}^\dagger_{HO}$ gelijk zijn aan de ladderoperatoren van een harmonisch oscillator met coördinaten $\tilde{x} = \sqrt{m\omega}\left(\sqrt{\frac{eB_0}{\hbar}}x + \frac{\hbar}{eB_0}k_y\right)$ en $\tilde{y} = y$, voldoen de ladderoperatoren $\hat{a}$ en $\hat{a}^\dagger$ ook aan deze gelijkheid. Dus is

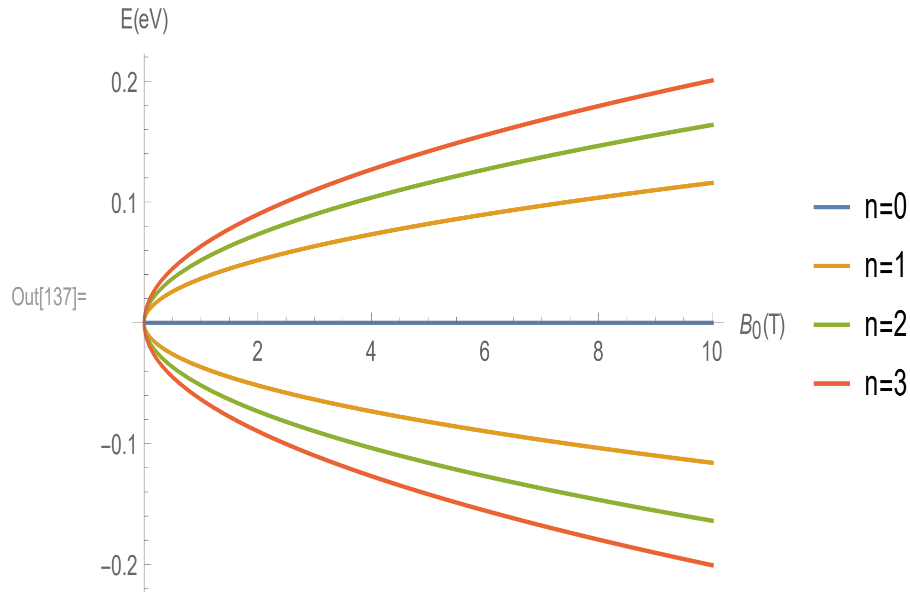
$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n>= n|n> . \tag{117}$$

Het linkerlid is volgens (108) gelijk aan

$$\frac{2\hbar E^2}{3eB_0a^2t^2}|n> . \tag{118}$$

Hier komen uiteindelijk de energieniveaus uit weergegeven in Figuur 8. Met n een natuurlijk getal, de index corresponderend met het energieniveau, worden de niveaus gegeven door

$$E_n = at\sqrt{\frac{3eB_0n}{2\hbar}}. \tag{119}$$



Figuur 8: De energieniveaus van het grafeenrooster in een magnetisch veld

In tegenstelling tot het vrije deeltje kan de energie hier negatief zijn. De Hamiltoniaan bevat hier immers geen term B^2 maar een term B, wat uiteindelijk ervoor zorgt dat zowel de positieve als de negatieve wortel oplossingen zijn. Fysisch kunnen de negatieve oplossingen verklaard worden door de aanwezigheid van de valentieband. De positieve door de conductieband. De valentieband is het onderste niveau in Figuur 7a, de conductieband het bovenste. Beide niveaus blijven bestaan wanneer een magnetisch veld aangelegd wordt. Het $n = 0$ niveau bevindt zich op de plek waar de valentie- en conductieband elkaar raken. De banden blijven elkaar raken als een magnetisch veld aangelegd wordt.

Het n-de energieniveau hoort bij de eigentoestand (de waarde van ψ_A wordt uiteindelijk gevonden door de gevonden ψ_B in te vullen in (87))

$$|\Psi_n >= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -i|n-1> \\ |n> \end{bmatrix}. \tag{120}$$

Nu rest nog de differentiaalvergelijking (95) op te lossen om de spinor $|\Psi_n>$ te bepalen.

4.3 Oplossen differentiaalvergelijking

In de toestand $|\Psi_n>$ is $|\psi_{b,x}>$ in de n-de eigentoestand ψ_n, en $|\psi_{b,x}>$ in de (n-1)-ste eigentoestand ψ_{n-1}. Alle termen met x of afgeleiden naar x uit (95) aan een kant zetten en alle termen met constanten aan de andere kant levert

$$\left(\frac{4E^2}{3a^2t^2} - k_y^2 + \frac{eB_0}{\hbar}\right)\psi_n = 2\frac{eB_0}{\hbar}xk_y\psi_n - \frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2} + \frac{e^2B_0^2}{\hbar^2}x^2\psi_n. \tag{121}$$

Invullen van $E_n = at\sqrt{\frac{3eB_0n}{2\hbar}}$ levert

$$\left(\frac{2eB_0n}{\hbar} - k_y^2 + \frac{eB_0}{\hbar}\right)\psi_n = 2\frac{eB_0}{\hbar}xk_y\psi_n - \frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2} + \frac{e^2B_0^2}{\hbar^2}x^2\psi_n. \tag{122}$$

Een functie waarvan de tweede afgeleide naar x een term x^2 keer de functie, een term x keer de functie en een constante keer de functie geeft, moet evenredig zijn met een exponentiële functie met het kwadraat van x in de exponent. Er wordt dus gesteld dat

$$\psi_n(x) = \phi(x)e^{-a(x-b)^2}. \tag{123}$$

Dit wordt ingevuld in (122), resulterend in

$$\begin{aligned}
&\phi\left(-2ae^{-a(x-b)^2} + 4a^2(x-b)^2e^{-a(x-b)^2}\right) + \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} - 4a\,(x-b)\,\frac{\partial\phi}{\partial x}e^{-a(x-b)^2} \\
&= \left(-2ae^{-a(x-b)^2} + 4a^2x^2e^{-a(x-b)^2} + 4a^2b^2e^{-a(x-b)^2} - 8a^2xbe^{-a(x-b)^2}\right)\phi \\
&\qquad + \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} - 4a\,(x-b)\,\frac{\partial\phi}{\partial x}e^{-a(x-b)^2} \\
&= 2\frac{eB_0xk_y}{\hbar}e^{-a(x-b)^2}\phi + \frac{e^2B_0^2x^2}{\hbar^2}e^{-a(x-b)^2}\phi - \left(\frac{2eB_0n}{\hbar} - k_y^2 + \frac{eB_0}{\hbar}\right)e^{-a(x-b)^2}\phi.
\end{aligned} \tag{124}$$

Hierin kunnen verschillende vergelijkingen gevonden worden voor de constanten a en b. Gekozen wordt om a en b zo te kiezen dat de termen evenredig met $x\phi$ en $x^2\phi$ wegvallen. Hieruit volgt

$$4a^2 = \frac{e^2B_0^2}{\hbar^2} \tag{125}$$

$$a = \frac{eB_0}{2\hbar},$$

$$-8a^2 b = -8\frac{e^2B_0^2}{4\hbar^2} b = 2\frac{eB_0 k_y}{\hbar} \tag{126}$$

$$b = -\frac{\hbar k_y}{eB_0}.$$

Na substituties en schrappen van $e^{-a(x-b)^2}$ blijft over

$$-\frac{eB_0}{\hbar}\phi + k_y^2\phi + \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} - 2\frac{eB_0}{\hbar}\left(x + \frac{\hbar k_y}{eB_0}\right)\frac{\partial\phi}{\partial x} = -\left(\frac{2eB_0 n}{\hbar} - k_y^2 + \frac{eB_0}{\hbar}\right)\phi$$

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} - 2\frac{eB_0}{\hbar}\left(x + \frac{\hbar k_y}{eB_0}\right)\frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{2eB_0 n}{\hbar}\phi = 0. \tag{127}$$

Een verschuiving en herschaling van de x-as, naar een coördinaat gegeven door $\tilde{x} = \sqrt{\frac{eB_0}{\hbar}}\left(x + \frac{\hbar k_y}{eB_0}\right)$ levert dan een differentiaalvergelijking opgelost door de Hermiet polynoom

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial\tilde{x}^2} - 2\tilde{x}\frac{\partial\phi}{\partial\tilde{x}} + 2n\phi = 0. \tag{128}$$

Zodat de oplossing gegeven wordt door

$$\phi_{n,k_y} = CH_n(\tilde{x}) = (-1)^n\, e^{\tilde{x}^2}\frac{d^n}{d\tilde{x}^n}e^{-\tilde{x}^2}. \tag{129}$$

Met C een normalisatieconstante. Deze wordt gegeven door

$$C = \sqrt{\frac{\frac{1}{l_B}}{2^n n!\sqrt{\pi}}}, \tag{130}$$

zodat de golffunctie gelijk is aan [6]

$$\psi_{n,k_y}(x,y) = \sqrt{\frac{1}{2^n n! l_B\sqrt{\pi}}} H_n\left(\sqrt{\frac{eB_0}{\hbar}}\left(x + \frac{\hbar k_y}{eB_0}\right)\right) e^{-\frac{eB_0}{2\hbar}\left(x + \frac{\hbar k_y}{eB_0}\right)^2}. \tag{131}$$

In termen van de magnetische lengte $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB_0}}$ volgt dan uiteindelijk

$$\Psi_{n,k_y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -i\sqrt{\frac{1}{2^{n-1}(n-1)!l_B\sqrt{\pi}}} H_{n-1}\left(\frac{1}{l_B}\left(x + l_B^2 k_y\right)\right) e^{-\frac{1}{2l_B^2}\left(x+l_B^2 k_y\right)^2} e^{ik_y y} \\ \sqrt{\frac{1}{2^n n! l_B\sqrt{\pi}}} H_n\left(\frac{1}{l_B}\left(x + l_B^2 k_y\right)\right) e^{-\frac{1}{2l_B^2}\left(x+l_B^2 k_y\right)^2} e^{ik_y y} \end{bmatrix}. \tag{132}$$

De eigentoestanden ψ_n zijn dus hetzelfde als de golffuncties van het vrije deeltje in een magnetisch veld met Landau ijk. Dat de golffunctie $|\Psi_n>$ hier een spinor is met twee componenten zorgt er echter voor dat de golffunctie een koppeling is tussen twee verschillende eigentoestanden corresponderend met twee verschillende atomen, zodat de waarschijnlijkheidsverdeling ook een half keer de waarschijnlijkheidsverdeling van de toestand n rond het atoom A, plus een half keer de waarschijnlijkheidsverdeling corresponderend met toestand n-1 rond atoom B, is. Voor verwachtingswaarde van positie en impuls geldt hetzelfde: de helft van de som van de verwachte waarden van de twee toestanden. Zo geldt bijvoorbeeld

$$< \hat{x} >_{n,k_y} = -l_B^2 k_y, \tag{133}$$

$$< \hat{y} >_{n,k_y} = 0, \tag{134}$$

$$< \hat{x}^2 >_{1,k_y} = < \Psi_{1,k_y} | \hat{x}^2 | \Psi_{1,k_y} > = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i\psi_{0,k_y} & \psi_{1,k_y} \end{pmatrix} \hat{x}^2 \begin{pmatrix} -i\psi_{0,k_y} \\ \psi_{1,k_y} \end{pmatrix} \tag{135}$$

$$= \frac{1}{2}\left(< \hat{x}^2 >^v_{0,k_y} + < \hat{x}^2 >^v_{1,k_y}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{l_B^2}{2} + l_B^4 k_y^2 + \frac{3l_B^2}{2} + l_B^4 k_y^2\right) = l_B^2 + l_B^4 k_y^2,$$

(waar de index v slaat op de verwachtingswaarde van een vrij elektron in de vrije ruimte in een magnetisch veld),

$$< \hat{p}_x >_{n,k_y} = 0, \tag{136}$$

$$< \hat{p}_x^2 >_{1,k_y} = \frac{\hbar^2}{2l_B^2}. \tag{137}$$

5 Gebogen grafeen

Wanneer de monolaag gebogen wordt, zal een geladen deeltje in het grafeen enkel effect ondervinden van de component loodrecht op de laag. Fysisch is dit logisch, immers ondervindt de lading een kracht loodrecht op haar bewegingsrichting en op het magneetveld. Voor de tangentiële component van het magneetveld zou dit een kracht opleveren die dus loodrecht op de laag moet staan, immers beweegt de lading ook in de laag. Deze kracht kan echter geen effect hebben aangezien de lading geen laag kan opschuiven naar boven, er is maar één grafeenlaag.

Wanneer een grafeenlaag nu wordt geplooid kan een vergelijking $f(x, y)$ opgesteld worden voor de hoogte z van de laag in functie van de coördinaten x en y. Uit geometrie is het duidelijk dat de normaalcomponent van het magnetisch veld aangelegd langs de z-as gegeven wordt door het aangelegde veld vermenigvuldigd met de cosinus van de hoek die $f(x, y)$ maakt met het (x,y)-vlak. De tangens van deze hoek wordt gegeven door de norm van de gradiënt van de functie $f(x, y)$, of, als f maar van één variabele afhangt, de afgeleide naar die variabele. Aldus is

$$B_n = B_0 cos\left(\arctan\left(|\nabla f(x, y)|\right)\right). \tag{138}$$

Allereerst wordt een eendimensionale plooiing, enkel in de x-richting, onderzocht. Er wordt vertrokken vanuit een plooiing waar ergens op de grafeenlaag simpelweg een soort trap naar beneden wordt genomen, op een manier dat er een geleidelijke overgang is, een soort boogtangens functie. Zie ook Figuur 9.

Dit zou overeen moeten komen met een loodrechte component die maximaal is, dan daalt, en dan stijgt tot die terug maximaal is, wat ook weergegeven wordt in Figuur 9.

De plot in Figuur 9 geeft een functie weer die analytisch kan beschreven worden door

$$B_n = B_0 \left(1 - \frac{C_1}{\cosh^2\left(\frac{x}{C_2}\right)}\right), \tag{139}$$

met C_1 en C_2 parameters. C_1 bepaalt welk percentage van de aangelegde B_0 bereikt wordt in het minimum van het dal van B_n, en moet dus in principe tussen 0 en 1 liggen (later wordt hier nog op teruggekomen). C_2 bepaalt hoe breed het dal in B_n is en kan elke reële waarde aannemen behalve 0. Hieruit kan de vectorpotentiaal gehaald worden gebruik makend van de Landau ijk. Immers is A_y de afgeleide van B_n naar x, zodat

$$A_y = B_0 x - B_0 C_1 C_2 \tanh\left(\frac{x}{C_2}\right). \tag{140}$$

Invullen van (139) in (138) levert een differentiaalvergelijking voor z in functie van x. Deze heeft een exacte oplossing die overeenkomt met de uitgedachte kromming. Deze functie is echter zeer lang en complex en levert geen bijdrage aan dit werk. Hij wordt wel weergegeven in de appendix.

Net zoals gedaan werd in 4.1 kan de gevonden vectorpotentiaal ingevuld worden in de benaderde "tight-binding" Hamiltoniaan. Het bekomen stelsel differentiaalvergelijkingen wordt dan

$$\frac{\sqrt{3}}{2}at\left(-i\frac{d\psi_2}{dx} - i\left(k_y + \frac{eB_0}{\hbar}\left(x - C_1C_2\tanh\left(\frac{x}{C_2}\right)\right)\right)\psi_2\right) = E\psi_1, \tag{141}$$

$$\frac{\sqrt{3}}{2}at\left(-i\frac{d\psi_1}{dx} + i\left(k_y + \frac{eB_0}{\hbar}\left(x - C_1C_2\tanh\left(\frac{x}{C_2}\right)\right)\right)\psi_1\right) = E\psi_2. \tag{142}$$

Dit stelsel is enkel numeriek oplosbaar. Hiervoor wordt gebruik gemaakt van de eindige elementen methode. Om de berekening computationeel makkelijker te maken wordt ψ_2 gesubstitueerd door $i\psi_2$.

5.1 Energieniveaus en golffuncties voor verschillende parameters C_1, C_2 en B_0

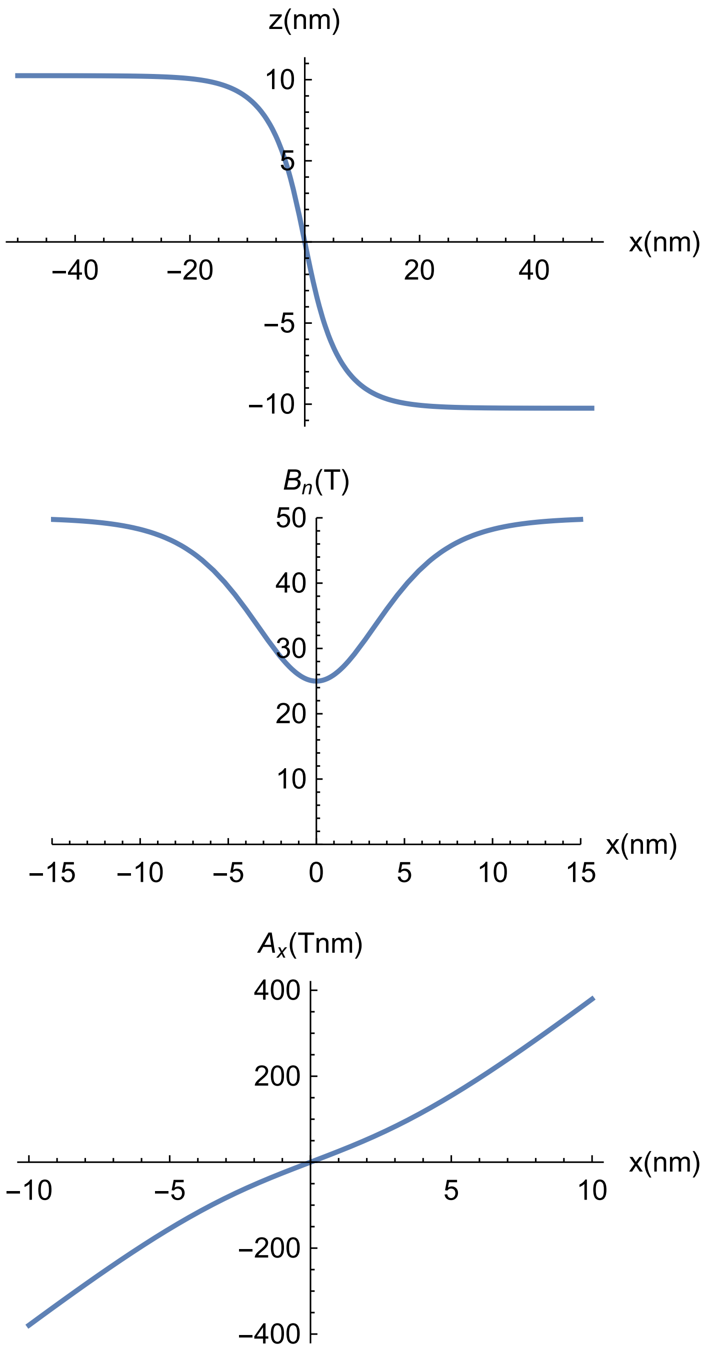
De energiewaarden en golffuncties voor verschillende waarden van C_1, C_2 en B_0 worden numeriek gevonden. De grondtoestandsenergie blijkt, net zoals bij ongebogen grafeen, altijd gelijk aan 0 te zijn. Interessant is te kijken naar de energie van de eerste en tweede aangeslagen toestanden. Er worden plots gemaakt van deze energieën in functie van zowel C_1 als C_2 als B_0, weergegeven in Figuur 10, 11 en 12.

Naast de energieniveaus is het ook interessant de spinor componenten ψ_A en ψ_B van Ψ_1 te bestuderen. Ψ_0 is minder interessant vermits op het nulde niveau een van de spinor componenten gelijk is aan nul. Telkens wordt het geval $B_0 = 50$ T onderzocht. De spinor van de eerste aangeslagen toestand is in ongebogen grafeen volgens het “tight-binding” principe een superpositie van de nulde en de eerste aangeslagen toestand van een harmonische oscillator. In het gebogen grafeen worden gelijkaardige spinor componenten weergegeven. Wijzigen van de parameter C_2 heeft niet veel effect op de golffuncties. Naarmate de absolute waarde van C_2 kleiner wordt, wordt de plooiing steiler. De pieken van beide curves zijn iets hoger. Dit wordt weergegeven in Figuur 13 tot 16.

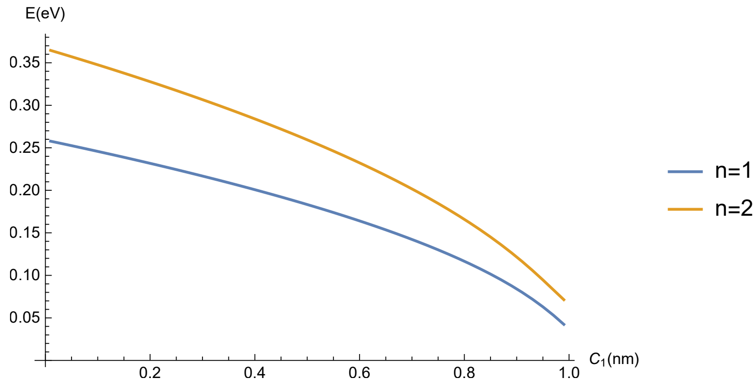
Vervolgens wordt onderzocht wat het effect is van het veranderen van C_1. Deze parameter verhogen vergroot duidelijk de afstand tussen het hoogste en laagste deel van de laag. Het effect op de golffuncties wordt weergegeven in Figuur 17, 18 en 19. Naarmate C_1 verhoogt verlagen de pieken van de golffunctie en worden ze meer uitgespreid.

Wanneer C_1 groter is dan 1 zal is vergelijking (138) nog steeds oplosbaar, de laag maakt een s-vorm en de normaalcomponent van het magneetveld zal dus omkeren op sommige delen van de laag. Opdat (138) oplosbaar blijft, mag C_1 maximaal 2 zijn (anders is $\frac{B_n}{B_0}$ kleiner dan -1 en dus onmogelijk de cosinus van een hoek). Ook voor $C_1 = 2$ blijkt de differentiaalvergelijking geen oplossing te hebben. C_1 moet dus kleiner dan 2 blijven. In Figuur 20, 21 en 22 is te zien dat voor $C_2 = 10$ nm de de tweede spinor component uit elkaar wordt getrokken naarmate C_1 opgevoerd wordt richting 2. Voor waarden van C_2 van andere grootte orden gebeurt dit niet (Zie Figuur 23) bij $B_0 = 50$ T. De vergelijking voor de laag geeft niet de volledige s-vorm, dus wordt enkel de normaalcomponent van het magneetveld weergegeven.

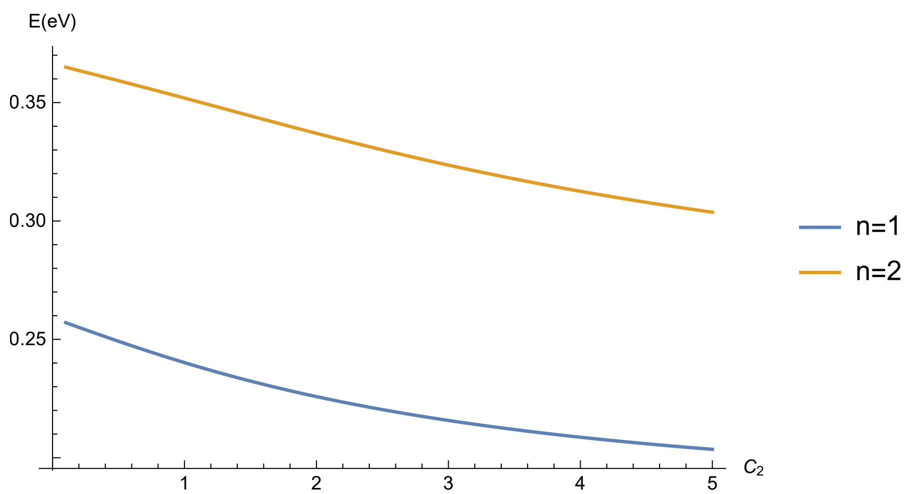
Wanneer het magnetisch veld tegengesteld ligt op sommige delen van de laag, blijkt de golffunctie wel interessante effecten te vertonen. Zo schuiven de pieken in de golffunctie van de eerste aangeslagen toestand uit elkaar. Dit zou ook bereikt moeten kunnen worden via een variabel magnetisch veld, het is echter makkelijker om het grafeen te plooien. Of grafeen plooibaar genoeg is om deze interessante effecten te ondervinden wordt besproken in 5.3.



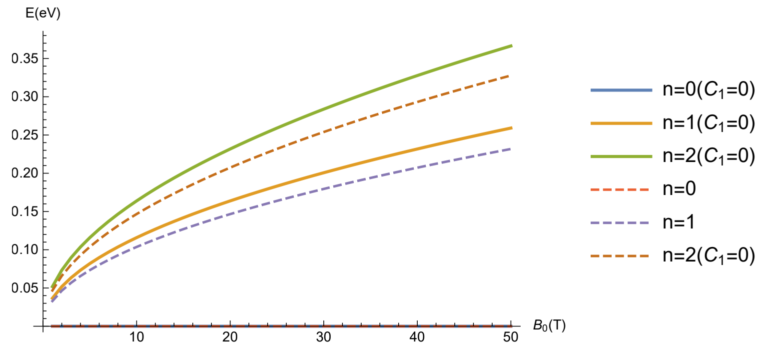
Figuur 9: De plooiing in de grafeenlaag, het corresponderende magneetveld, en de gekozen vectorpotentiaal. Dit geval correspondeert met parameters $C_1 = 0.5$, $C_2 = 5$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$(zie verder).



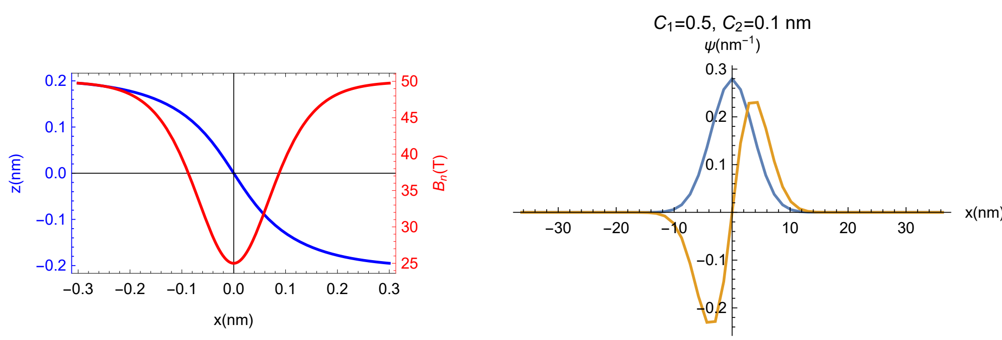
Figuur 10: Energieniveaus in functie van C_1, met $C_2 = 100$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$, de grondtoestandsenergie is altijd 0 en wordt niet weergegeven vermits dan de andere grafieken uit proportie worden getrokken. Enkel de positieve waarden worden weergegeven (de negatieve zijn gewoon het tegengestelde hiervan).



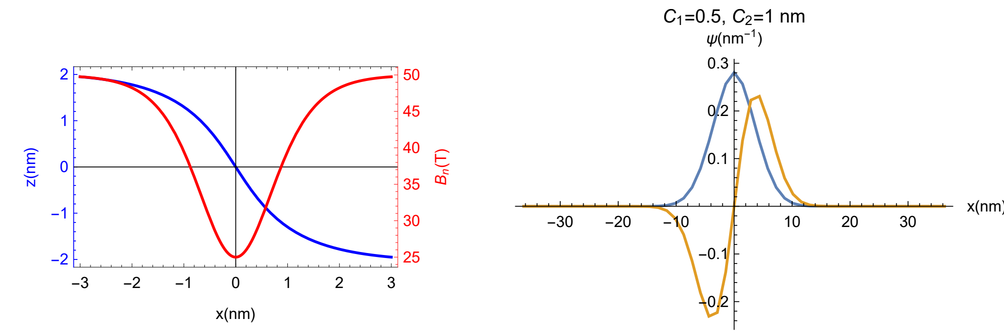
Figuur 11: Energieniveaus in functie van C_2, met $C_1 = 0.5$, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$, de grondtoestandsenergie is wederom altijd 0 en wordt niet weergegeven om dezelfde reden als in Figuur 10. Het n=1 niveau in ongebogen grafeen blijkt ongeveer te overlappen met het n=2 niveau in gebogen grafeen in dit geval. Ook hier worden enkel de positieve waarden weergegeven vermits de negatieve gewoon het tegengestelde hiervan zijn.



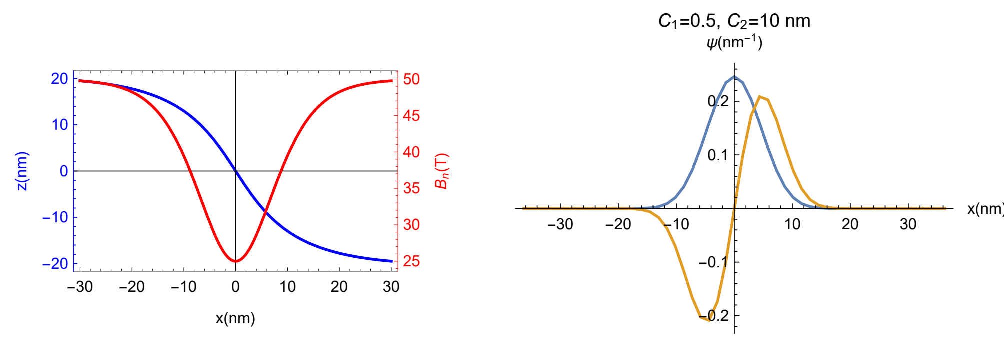
Figuur 12: De energieniveaus in functie van B_0, met $C_1 = 0.2$, $C_2 = 100$ nm en $k_y = 0\ nm^{-1}$. De volle lijnen geven de ongestoorde niveaus uit Figuur 8 weer, opnieuw worden de negatieve waarden hier niet weergegeven, maar zijn gewoon het tegengestelde van de positieve waarden.



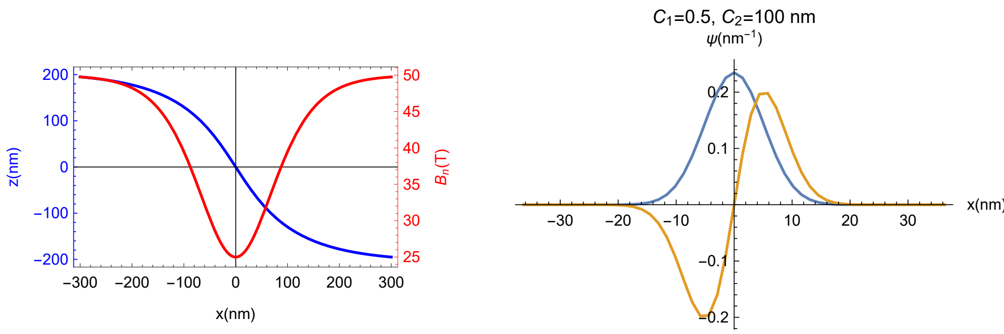
Figuur 13: Laag en magnetisch veld links, en spinor componenten (n=1) rechts, als $C_1 = 0.5$, $C_2 = 0.1$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$.



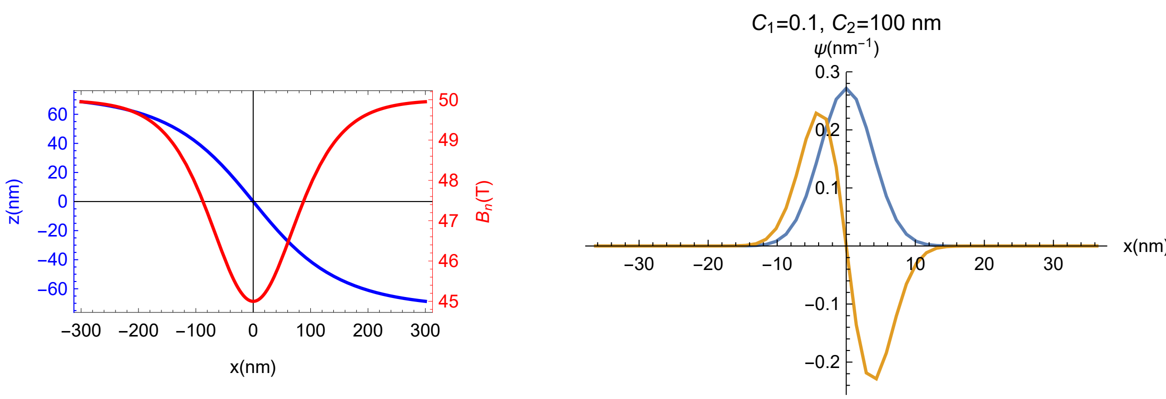
Figuur 14: Laag en magnetisch veld links, en spinor componenten (n=1) rechts, als $C_1 = 0.5$, $C_2 = 1$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0$ nm^{-1}.



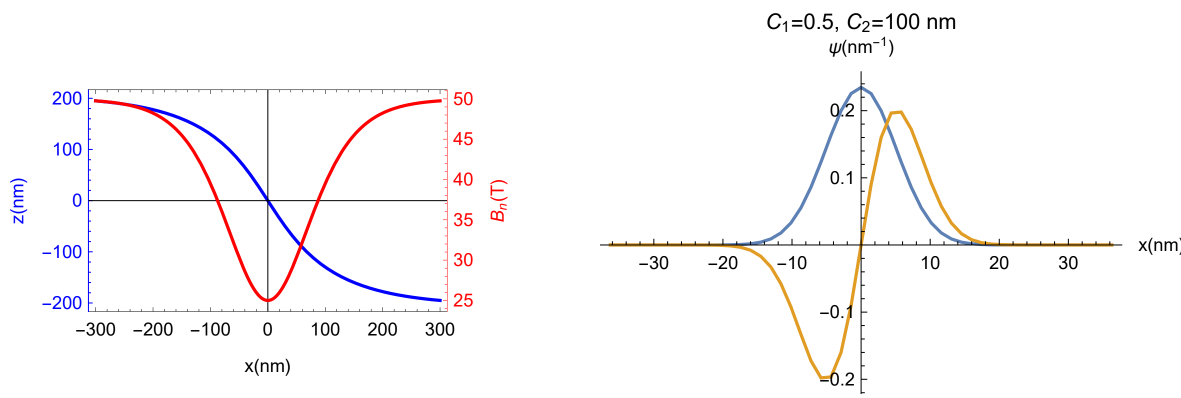
Figuur 15: Laag en magnetisch veld links, en spinor componenten (n=1) rechts, als $C_1 = 0.5$, $C_2 = 10$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0$ nm^{-1}.



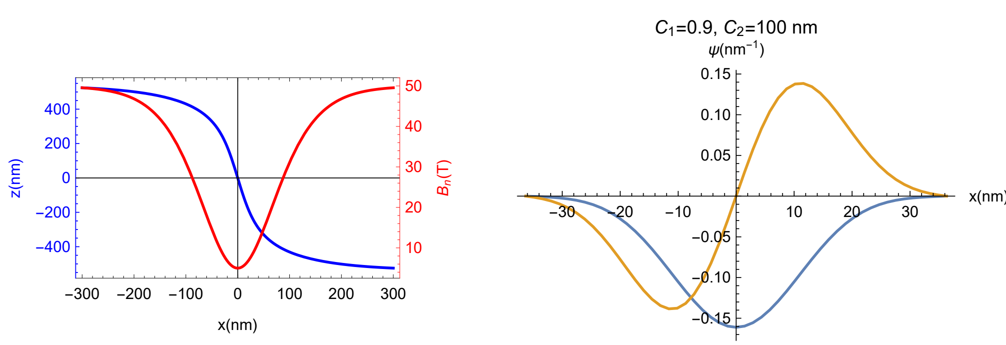
Figuur 16: Laag en magnetisch veld links, en spinor componenten (n=1) rechts, als $C_1 = 0.5$, $C_2 = 100$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$.



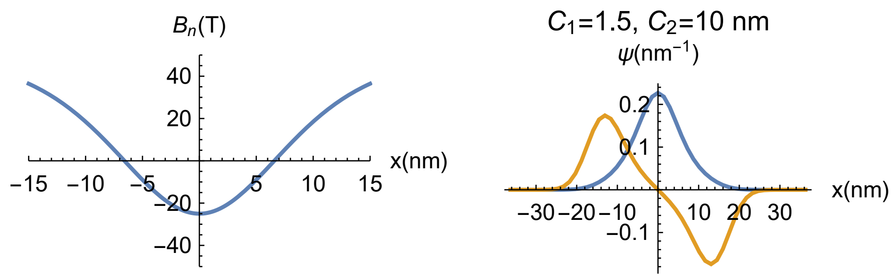
Figuur 17: Laag en magnetisch veld links, en spinor componenten (n=1) rechts, als $C_1 = 0.1$, $C_2 = 100$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$.



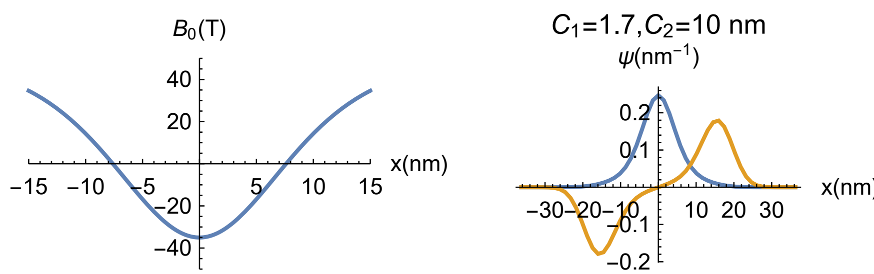
Figuur 18: Laag en magnetisch veld links, en spinor componenten (n=1) rechts, als $C_1 = 0.5$, $C_2 = 100$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$.



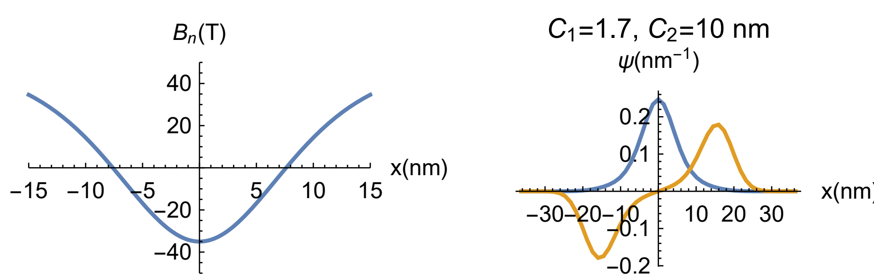
Figuur 19: Laag en magnetisch veld links, en spinor componenten (n=1) rechts, als $C_1 = 0.9$, $C_2 = 100$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$.



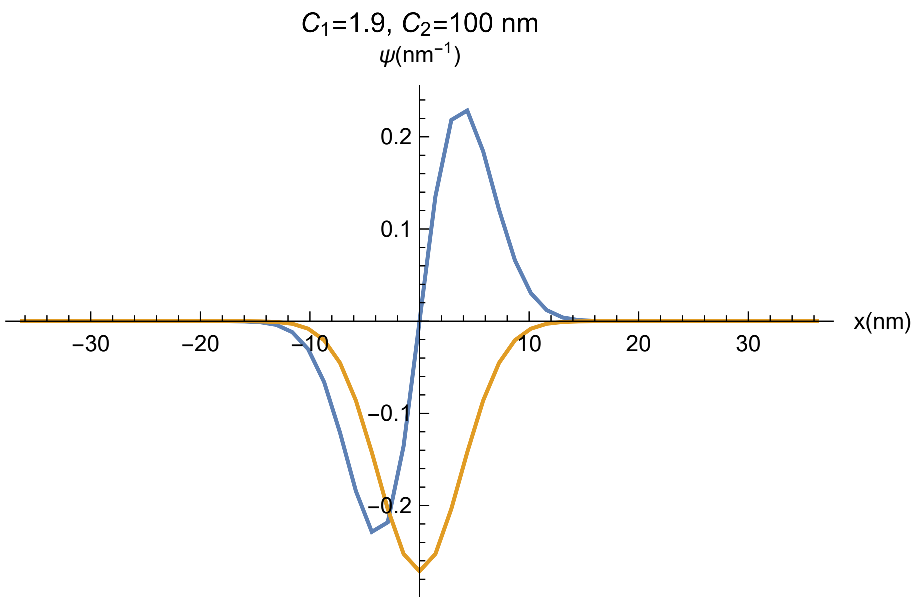
Figuur 20: Normaalcomponent magnetisch veld en golffunctie als $C_1 = 1.5$, $C_2 = 10$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$.



Figuur 21: Normaalcomponent magnetisch veld en golffunctie als $C_1 = 1.7$, $C_2 = 10$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$.



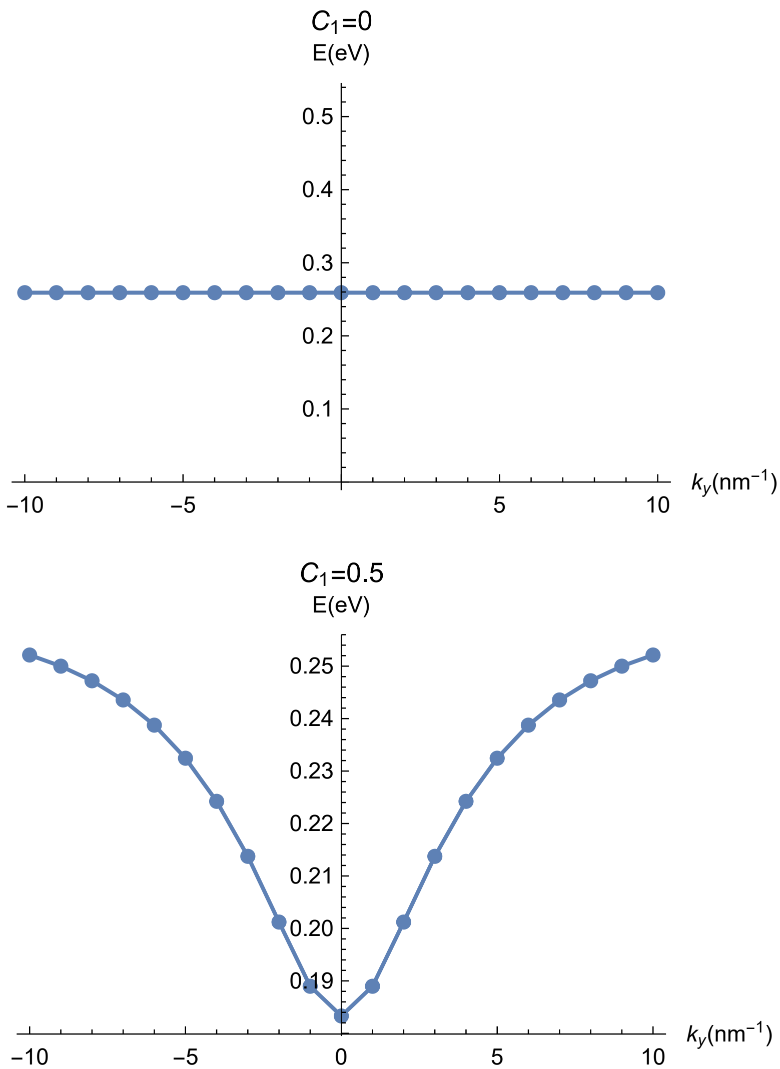
Figuur 22: Normaalcomponent magnetisch veld en golffunctie als $C_1 = 1.9$, $C_2 = 10$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0\ nm^{-1}$.



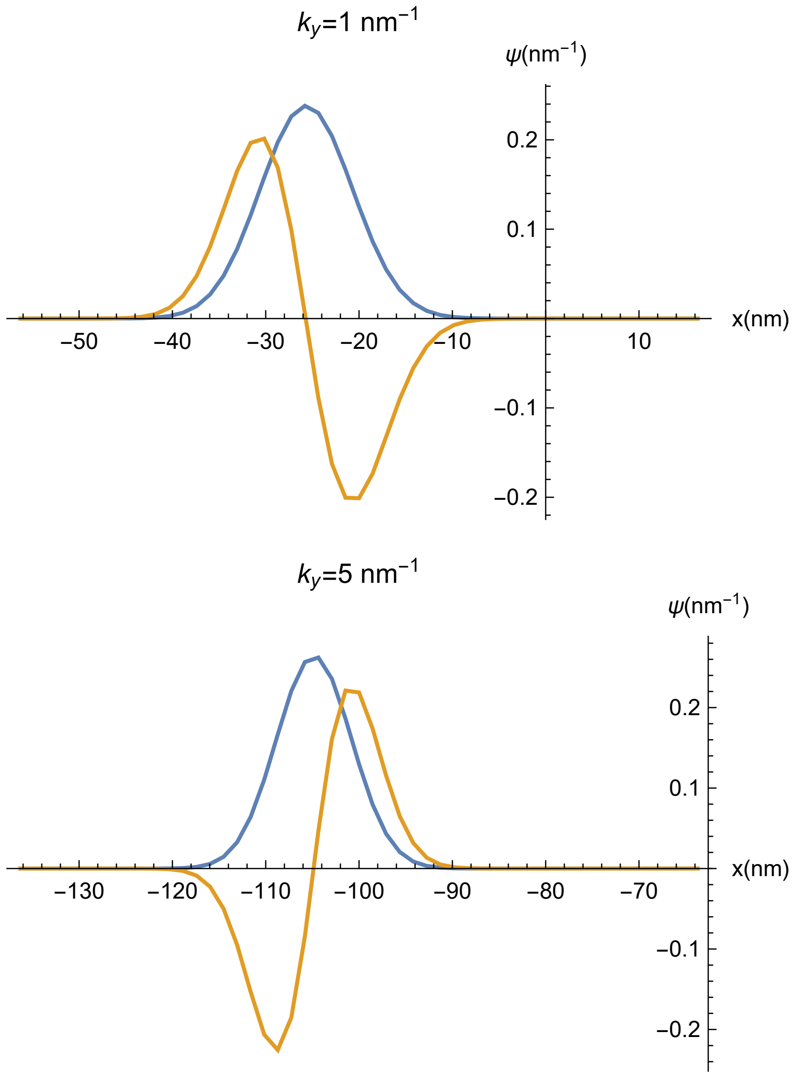
Figuur 23: Golffunctie als $C_1 = 1.9$ en $C_2 = 100$ nm, $B_0 = 50$ T en $k_y = 0$ nm^{-1}. De tweede spinor component wordt niet uit elkaar getrokken.

5.2 Energieniveaus en golffuncties voor verschillende waarden van het kwantumgetal k_y

Zoals gezien in Figuur 3 zorgt een golfgetal k_y in de Landau ijk voor een verplaatsing evenredig met $-k_y$ van de verwachte waarde van x. Vermits een verplaatsing van het elektron in de x-richting in gebogen grafeen zorgt dat het elektron op een andere positie in de plooiing terecht kan komen, kan dit de energie en golffunctie van het elektron veranderen. De grondtoestand zal nog altijd energie gelijk aan 0 hebben voor elke k_y en elke plooiing. Dus worden zowel voor ongebogen als gebogen grafeen de energieniveaus van de eerste aangeslagen toestand weergegeven onder een magnetisch veld. Dit wordt weergegeven in Figuur 24. Het verband is constant voor ongebogen grafeen, terwijl een functie lijkend op de functie van het magneetveld gevonden wordt voor het gebogen geval. De golffunctie voor verschillende waarden van k_y wordt weergegeven in Figuur 25. Het is duidelijk dat de golffunctie wederom opschuift met $-k_y$, en dus ook de verwachte waarde van x. Het verband is hier echter geen simpele rechte evenredigheid zoals bij het vrije deeltje.



Figuur 24: Energie van het $n = 1$ niveau in functie van het golfgetal k_y, op de bovenste figuur voor $C_1 = 0$, $C_2 = 100$ nm, $B_0 = 50$ T, op de onderste figuur voor $C_1 = 0.5$, $C_2 = 100$ nm, $B_0 = 50$ T.



Figuur 25: De spinor componenten voor verschillende waarden van k_y. $C_1 =$ 0.5, C_2 =100 nm, B_0 =50 T.

5.3 Strain

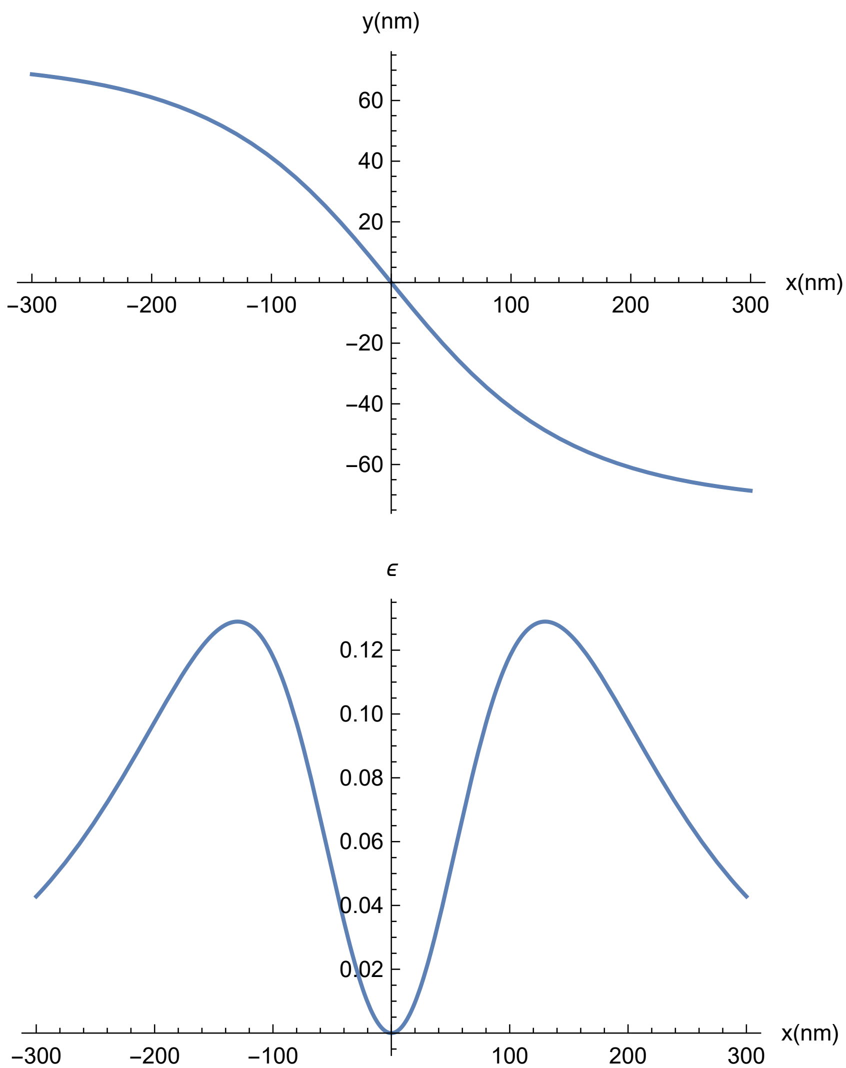
Er wordt in deze sectie onderzocht in hoeverre het mogelijk is de plooiingen uit de vorige subsecties aan te leggen zonder dat de laag breekt. De strain wordt gegeven door de verhouding van de uitrekking op de oorspronkelijke lengte. Dit wordt gegeven door een dimensieloze grootheid ϵ, waarvoor geldt

$$\epsilon = -\left(\frac{z''(x)}{\sqrt{1+(z'(x))^2}^3}\right) z(x). \tag{143}$$

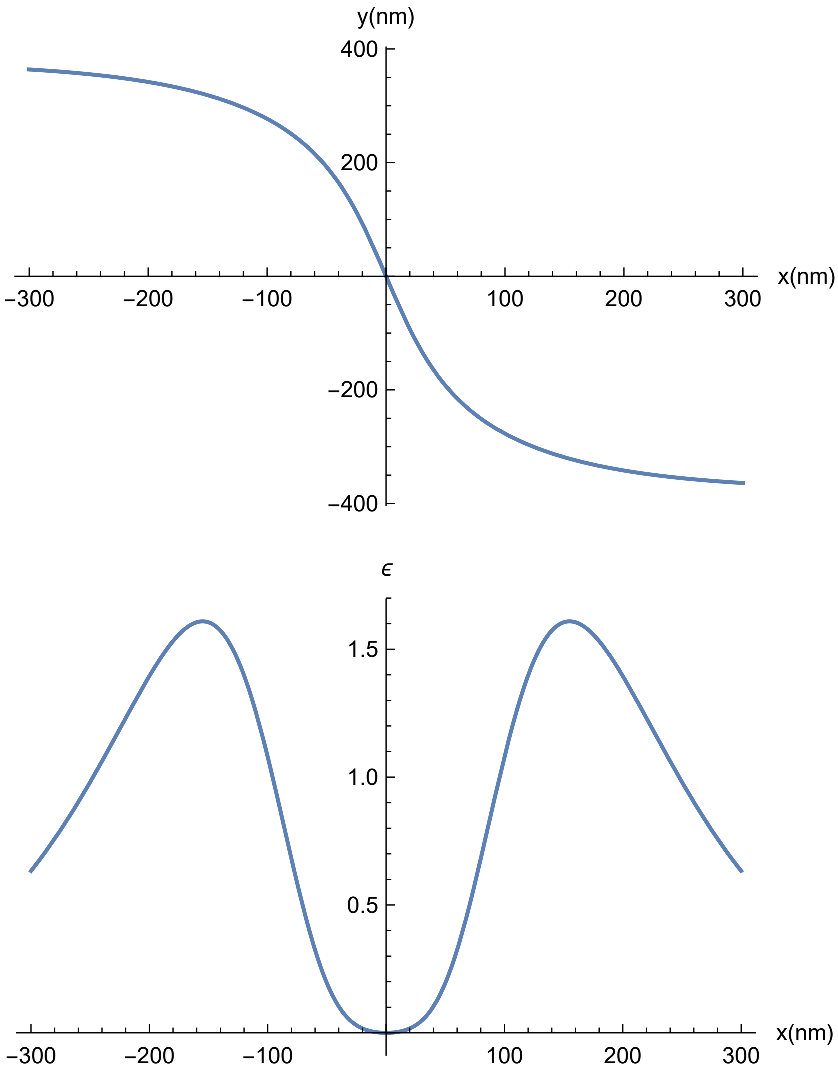
Grafeen kan een maximale strain van 0.25 aan zonder te breken. De strain in functie van de positie wordt voor enkele concrete gevallen weergegeven om een beeld te scheppen van wat de limieten van het plooien zijn.

In Figuur 26 en 27 wordt de stain weergegeven in functie van de positie, samen met de corresponderende laag. De strain gaat naar 0 op oneindig, bereikt een maximum halverwege de buiging, gaat dan terug naar 0 midden in de buiging, stijgt dan terug tot halverwege de plooiing en gaat tenslotte terug naar 0. Uit de figuren is het duidelijk dat de limieten van strain al worden overschreden lang voor de s-vorm, die leidt tot de uiteengetrokken spinor component uit 5.1, wordt bereikt. Echter kan alle interessante fysica nog altijd bereikt worden door uit te zoomen, de plooiing over een grotere afstand aan te leggen (met een langere grafeenlaag), en het magneetveld te verhogen (voor zover dit mogelijk is).

Er kan ook nog opgemerkt worden dat in het algemeen het buigen van grafeen (strain aanleggen), leidt tot een pseudomagneetveld. Grafeen gaat zich gedragen alsof er een magneetveld op aangebracht is, zonder dat dit er echt is. Met dit effect wordt echter geen rekening gehouden in deze bachelorproef. [7]



Figuur 26: Strain in functie van de positie en het bijhorende profiel als $C_1 = 0.1$ en $c_2 = 100$ nm.



Figuur 27: Strain in functie van de positie en het bijhorende profiel als $C_1 = 0.8$ en $c_2 = 100$ nm.

6 Besluit

Door substitueren van de vectorpotentiaal in de stationaire Schrödinger vergelijking kunnen de energieniveaus en de golffunctie van een tweedimensionaal vrij deeltje met lading $-e$ in een magnetisch veld berekend worden. De golffunctie hangt af van de gekozen ijk voor de vectorpotentiaal. Bij de Landau ijk zijn de twee kwantumgetallen n en k_y (golfgetal). Bij de symmetrische ijk zijn de kwantumgetallen n en l (eigenwaarde impulsmomentoperator langs as loodrecht op het vlak). Bij de Landau ijk zijn de gevonden golffuncties evenredig met de Hermiet polynomen, bij de symmetrische ijk met de Laguerre polynomen.

Voor grafeen wordt de "tight-binding" Hamiltoniaan, benaderd voor lage energieën, gebruikt om te vinden wat de energieniveaus en spinor componenten van een elektron zijn wanneer een magneetveld aangelegd wordt. Voor vlak grafeen kan dit analytisch opgelost worden. De energie van een elektron in grafeen blijkt evenredig met $\sqrt{B_0}$. De spinor die het n-de niveau beschrijft bevat een component ψ_{n-1} en een component ψ_n. De ψ_n blijken gewoon de eigenfuncties van het tweedimensionale vrije deeltje in de Landau ijk te zijn.

Vervolgens wordt de laag grafeen gebogen volgens een soort boogtangens functie. Enkel de normaalcomponent B_n van het aangelegde magneetveld (B_0) moet bij tweedimensionale laag grafeen in rekening gebracht worden. Dit werd gedaan via de Landau ijk. Een stelsel differentiaalvergelijkingen wordt gevonden dat enkel numeriek oplosbaar is. Via de eindige elementen methode werden de energieniveaus en spinor componenten gevonden. De energie van de grondtoestand blijft 0. De energie van andere toestanden daalt echter ten opzichte van het ongeplooide geval. Hoeveel hangt af van parameters C_1 en C_2 die de plooiing beschrijven. Nog altijd is de energie evenredig met $\sqrt{B_0}$. De spinor componenten van de eerste aangeslagen toestand lijken op de componenten van het ongeplooide geval. Kleine veranderingen treden op bij verandering van de parameters C_1 en C_2. De effecten blijven klein zolang C_1 kleiner blijft dan 1. Wordt C_1 groter dan 1, dan neemt de laag een s-vorm aan De tweede component van de spinor van de eerste aangeslagen toestand wordt dan uit elkaar getrokken mits C_2 en B_0 juist gekozen worden.

Aangezien bij de Landau ijk de verwachtingswaarde van de x-coordinaat verandert met k_y hangt de energie van een elektron in gebogen grafeen ook af van k_y. Immers verschuift het deeltje door k_y naar een gedeelte van de laag dat meer of minder geplooid is. Zo kan de normaalcomponent van het magnetisch veld op de positie van het deeltje groter of kleiner zijn, zodat de energie ook verandert.

Deze bachelorproef kan vervolgd worden. Er kan onderzocht worden wat het bijkomend effect van een strain geïnduceerde pseudomagneetveld is op alles dat besproken werd. Ook kan een volledige uitdrukking gevonden worden voor de s-vorm die bekomen wordt wanneer C_1 groter is dan 1. Zo kan het feit dat een van de spinor componenten van het $n = 1$ niveau uit elkaar getrokken wordt misschien gerelateerd worden aan iets in de kromming van de laag. Tenslotte kan het ook interessant zijn andere plooiingen van een monolaag grafeen te onderzoeken.

Referenties

[1] DUBOIS, S., M-M. Zanolli, Z., Declerck, X. & Charlier, J-C (2009). *Electronic properties and quantum transport in Graphene-based nanostructures.* The European Physics Journal B, 72(1), 1-24, https://doi.org/10.1140/epjb/e2009-00327-8

[2] PEETERS, F. *Inleiding Kwantummechanica* (versie van 25/09/2017)

[3] KATSNELSON, M. (2007) *Graphene: carbon in two dimensions.* Materials Today, 10(1-2), 20-27 https://doi.org/10.1016/S1369-7021(06)71788-6

[4] PEARL, D. (05/062011) *Graphene: The coolest material that shouldn't exist*, http://sitn.hms.harvard.edu, https://bit.ly/2IUrINr

[5] GEIM, A.K. & NOVOSELOV K.S. (2007) *The rise of graphene*, Nature Materials, 6, 183-191 https://doi.org/10.1038/nnano.2010.224

[6] VAN DER DONCK, M. (2015) *Enorme pseudomagneetvelden in bilaag grafeen*, Masterthesis UA

[7] LEVY, N. Et al. (2010) *Strain-Induced Pseudo–Magnetic Fields Greater Than 300 Tesla in Graphene Nanobubbles*, 329(5991), 544-54, https://doi.org/10.1126/science.1191700

A Vergelijking laag

De vergelijking voor z in functie van x, voldoet aan de differentiaalvergelijking

$$cos\left(\arctan\left(z'(x)\right)\right) = 1 - \frac{C_1}{\cosh^2\left(\frac{x}{C_2}\right)}. \tag{144}$$

Mathematica kan deze functie oplossen, en geeft de vergelijking

$$z(x) = C_3 \pm \frac{iC_1C_2\sqrt{\frac{-1+C_1-\cosh\left(\frac{2x}{C_2}\right)}{-2+C_1}}\left(-1+2C_1-\cosh\left(\frac{2x}{C_2}\right)\right)}{(C_1-1)\left(1-2C_1+\cosh^2\left(\frac{2x}{C_2}\right)\right)\sqrt{C_1\left(1-C_1+\cosh\left(\frac{2x}{C_2}\right)\right)}}$$

$$\left(2\left(C_1-1\right)EllipticF\left(\frac{ix}{C_2},\frac{2}{C_1-2}\right) - C_1 EllipticPi\left(\frac{1}{1-C_1},\frac{ix}{C_2},\frac{2}{C_1-2}\right)\right), \tag{145}$$

met C_3 een derde constante, met de dimensie van lengte, die de hoogte van het centrum van de laag geeft. De positieve en negatieve oplossing corresponderen met dezelfde laag maar dan omgekeerd. De figuren in deze bachelorproef werden allemaal gemaakt met de min-oplossing.