

PhD téziszfüzet

Tiltott sáv nélküli  
alacsonydimenziós  
rendszerek elméleti  
vizsgálata: grafén és a  
Luttinger model

Bácsi Ádám

*Témavezető:* Dr. Viroztek Attila

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Fizika Tanszék

2014

## 1. A kutatások előzménye

Az utóbbi évtizedekben az alacsonydimenziós rendszerek, melyeknek dimenziószáma kisebb mint három, a szilárdtestfizikai kutatások középpontjába került. Ezen rendszerek közül több már része a mindennapi életünknek (pl. félvezető alapú mikroelektronikai áramkörök), míg mások jelenleg is aktív kutatás tárgyát képezik.

Az utóbbi években az egyik legintenzívebben kutatott alacsonydimenziós rendszer a grafén, amely egy szén atomokból álló, kétdimenziós méhsejtrács szerkezetű anyag. A grafén különlegességét az adja, hogy a kvázirészecskék parabolikus helyett lineáris disperziós relációval jellemezhetők, és tömegnélküli Dirac-fermionokként modellezhetők. A potenciális ipari alkalmazásokban fontos szerepet játszanak a grafénben megfigyelhető különleges elektromos jelenségek, így elméleti szempontból az egyik legfontosabb feladat ezek minél alaposabb megértése.

Az elektronok és szennyezők közti kölcsönhatás nagyban befolyásolja a grafén transzport tulajdonságait. A szennyezőkön való szóródás következménye az elektronsűrűségben megfigyelhető Friedel-oszcilláció is, amely kétdimenziós szabad elektrongázokban egy rövid hullámhosszú, nagy távolságokban  $r^{-2}$  szerint lecsengő oszcilláció. Grafénben korábbi elméleti munkák  $r^{-3}$  és  $r^{-2}$  lecsengést is jósoltak, de egyik számolás sem adott számot a sűrűségmoduláció atomi skálájú felbontásáról és hogy egy valódi mérésben milyen lecsengés várható. A lecsengés hatványfüggésére vonatkozó mérési eredmény egyelőre nem áll rendelkezésre.

A grafénnel kapcsolatos kutatások egy másik iránya, amely a lehetséges ipari alkalmazások szempontjából nagyon fontos lehet, az elektronszerkezetben egy lehetséges tiltott sáv nyitása. Ezt többek között az elektronok közti kölcsönhatás erősségének hangolásával lehetne megvalósítani (például mechanikai feszültség alkalmazásával). Az elektronok gyenge árnyékolóképessége miatt azt várhatjuk, hogy az elektronok közti kölcsönhatásnak fontos szerepe van a grafén elektromos tulajdonságaiban. Elméleti szempontból fontos kérdés, hogy milyen hatással lehet a kölcsönhatás az elektronszerkezetre és vajon milyen körülmények között érhető el az, hogy a diszperziós relációban esetleg egy tiltott sáv nyíljon. A kölcsönható rendszer egyik legegyszerűbb modellje a Hubbard-modell. Korábbi numerikus vizsgálatok azt mutatták, hogy félig töltött grafén esetén az on-site taszítást változtatva egy Mott-átalakulást találhatunk egy véges kritikus kölcsönhatás erősségnél. A kritikus pont környékén a tiltott sáv lineárisan tűnt el, de korábban nem térképezték fel a teljes kritikus viselkedést.

A grafén elektronszerkezetének egy érdekes tulajdonsága, hogy egy széles frekvencia tartományban az optikai transzmisszió, és egyúttal az optikai vezetőképesség független a frekvenciától. Utóbbi ráadásul a vezetőképesség kvantum  $\pi/2$ -szöröse. A frekvenciafüggetlen viselkedést a grafén alacsony energiás gerjesztéseivel meg lehet magyarázni. Nyitott kérdés volt azonban, hogy a grafén elektronjainak pontosan mely tulajdonsága az, ami alapvetően meghatározza az univerzális frekvenciafüggetlenséget és milyen más rendszerekben találhatunk hasonló viselkedést.

Az utóbbi évtizedben a grafén mellett a hideg atomi rendszereket is nagy érdeklődés övezte a rendszer paramétereinek extrém pontos hangolhatósága miatt. Ezekben a kísérletekben lehetővé vált olyan ismert elméleti modellek szimulációja, mint a Bose-Hubbard-modell vagy a Luttinger-modell. A kísérletek egy másik nagy előnye, hogy a kvantum folyamatok időbeli felbontása is elérhetővé vált, vagyis közvetlenül mérni lehet a különböző fizikai mennyiségek időfüggését. Elméleti szempontból tehát fontos feladat a kvantum rendszerek különböző időfüggő nemegyensúlyi folyamatainak tanulmányozása. Az egyik legegyszerűbb, kölcsönható rendszert leíró modell a Luttinger-modell, melynek Hamilton-operátora egzaktul diagonalizálható. Érdekes kérdés, hogy milyen relaxációt figyelhetünk meg, ha a rendszert kitérítjük egyensúlyi állapotából (például valamelyik paraméterének gyors megváltoztatásával) és hogyan írható le a relaxáció után kialakult állandósult állapot. Az integrálható modellekről (amilyen a Luttinger-modell is) ismert, hogy az állandósult állapot nem termális, hanem az úgynevezett diagonális sokasággal írható le.

## 2. Célkitűzések

A kutatásaim egyik fő irányvonala a grafén elektronszerkezetének minél alaposabb megismerése analitikus módszerekkel. Ennek célja a lehetséges ipari alkalmazások szempontjából fontos jelenségek megértése és azok háttérben álló alapvető tulajdonságok feltérképezése.

A grafénbeli Friedel-oszcillációt érintő, részben ellentmondásos, részben hiányos irodalmi eredmények motiválták a szennyezőn történő szóródással kapcsolatos vizsgálataimat. A kutatás célja egy jól lokalizált szennyező körül a lokális állapotossűrűség és az elektronsűrűség moduláció atomi skálájú viselkedésének leírása, melynek segítségével jóslatokat lehet tenni különböző térbeli felbontással rendelkező pásztázó elektron mikroszkóppal végzett mérésekre.

A Dirac-fermionok közti kölcsönhatás a grafén fizikájának egy másik fontos területe. A kutatásaim során célul tűztem ki a Mott-átalakulás kritikus viselkedésének meghatározását átlagtér közelítésben. A szokatlan kritikus exponensek motiválták a modell kiterjesztését tetszőleges hatványfüggvény állapotossűrűségű rendszerekre, melyek számos valós anyagban is előfordulnak.

Az egyrétegű és királishan rétegzett többrétegű grafénben mért optikai vezetőképesség univerzális frekvenciafüggése szolgált motivációként az általános kétsáv modellek optikai átmeneteivel kapcsolatos kutatásaimhoz. Céлом volt meghatározni, hogy milyen tulajdonságú rendszerekben találhatóunk a grafénéhez hasonló univerzális viselkedést.

A kutatásaim egy másik területe a kvantumrendszerek nem-egyensúlyi dinamikája. Az egydimenziós kölcsönható rendszereket leíró Luttinger-modellre vonatkozó korábbi elméleti számolások legtöbb esetben a zérus hőmérsékleti viselkedésre koncentráltak. A kutatásom célja a Luttinger-modell nem-egyensúlyi folyamataiban megfigyelhető véges hőmérsékleti effektusok vizsgálata volt. Az állandósult állapot jellemzésére szolgál az úgynevezett diagonális sokaság,

amely tetszőleges fizikai mennyiség várható értékét meghatározza a hosszú idejű limeszben. A diagonális sokaság jellemzése mellett célom volt a kísérletekben közvetlenül is mérhető mennyiségek hőmérsékletfüggésére jóslatokat tenni, például kiszámolni a rendszer teljes energiájának vagy a kvencs közben végzett munkának a statisztikáját.

### 3. Új kutatási eredmények

Doktori munkám eredményeit az alábbi tézispontokban foglalom össze.

1. Megvizsgáltam az egyrétegű grafénben egy jól lokalizált szennyező körül kialakuló Friedel-oszcilláció atomi skálájú helyfüggését. Born-közelítésben meghatároztam a lokális állapotsűrűség és az elektronsűrűség megváltozását a szennyező hatására. A szennyezőtől távol, az elektronsűrűség modulációja hosszú hullámhosszú oszcillációt mutat, melynek burkolója  $r^{-2}$  szerint cseng le. Figyelembe véve a jól lokalizált atomi hullámfüggvényeket és a különböző völgyek közti szóródást megmutattam, hogy egy pásztázó elektron mikroszkópos mérésben, amelynek felbontása rosszabb, mint három elemi cella, a vezető korrekció eltűnik és helyette egy  $r^{-3}$  lecsengésű modulációt találhatunk. Ha nincs a völgyek közti szóródás, akkor már egy atomi cellánál rosszabb felbontás is a vezető rend kioltásához vezethet. [1]

2. Tanulmányoztam az egyrétegű grafénben egy antiferromágneses rendeződéssel járó kvantum fázisátalakulás kritikus viselkedését átlagtér közelítésben. A talált kritikus exponensek különböznek a Landau elméletben megszokottaktól. A nemszokványos viselkedés magyarázható az állapotsűrűség energiafüggését tetzőleges hatványfüggvényre történő általánosításával. Levezettem, hogy a különböző kritikus exponensek hogyan függnak az állapotsűrűség  $r$  exponensétől. A  $-1 < r < 2$  tartományban jelentős  $r$ -függést találtam, sőt az  $r = 0$  pontban szingulárisan viselkednek az exponensek. Az  $r > 2$  tartományban a kritikus exponensek megegyeznek a szokásos átlagtér exponensekkel és függetlenek  $r$ -től. [2]
3. Kubo formula segítségével levezettem olyan általános két-sáv modellek optikai vezetőképességét, melyekben a részecskék egy pszeudospin szabadsági fokkal rendelkeznek. Megmutattam, hogy ha a pszeudospint csak a részecske impulzusának iránya határozza meg, vagyis a részecskék általános értelemben királisak, akkor az optikai vezetőképesség univerzális hatványfüggvény szerinti frekvenciafüggést mutat. A hatványfüggvény exponense  $(d - 2)/z$ , ahol  $d$  a rendszer dimenziója és  $z$  a dinamikai exponens. [3]
4. Megvizsgáltam egy kvantum kvencs után a Luttinger-modell állandósult állapotát teljesen meghatározó diagonális sokaságot, amely egybeesik a végső állapot

bozon betöltési számok együttes eloszlásával. Az eloszlásra kapott analitikus eredmény tetszőleges kvencs protokollra, kölcsönhatás erősségre és tetszőleges kezdeti hőmérsékletre érvényes. Egy adott módusban ráadásul univerzális viselkedést mutat abban az értelemben, hogy a kvencs protokolltól való függés csak és kizárólag a bozonszám várható értéken keresztül jelenik meg, az eloszlás minden további momentumát a várható érték már meghatározza. Megmutattam, hogy egy adott hullámszámhoz tartozó  $q$  és  $-q$  csatornában található bozonok közti korreláció a kezdeti hőmérséklet növelésével csökken, de sosem lesznek korrelálatlanok, hacsaknem adiabatikus a kvencs. Továbbá azt találtam, hogy a kvencs során gerjesztett bozonok száma növekszik a kezdeti hőmérséklettel. [4]

5. Tanulmányoztam a Luttinger-modellben egy hirtelen kvencs után a teljes energia és a kvencs közben végzett munka statisztikájának kezdeti hőmérséklettől való függését. Az eloszlások generátor függvényére perturbáció számítás keretein belül kapott analitikus eredményből numerikus Fourier transzformálással számítottam ki a sűrűségfüggvényeket, melyek jelentősen függnak a rendszer méretétől. Kis rendszerekben az eloszlások sűrűségfüggvénye erős hőmérsékletfüggést mutat. Nagy rendszerekben a teljes energia eloszlása pozitív irányba tolódik el, míg a munka sűrűségfüggvénye a zérus értéknél marad, a sűrűségfüggvények



alakjában azonban nem találtam jelentős deformációt. Megmutattam, hogy alacsony hőmérsékleten az eloszlások szórása  $\sim T^3$  szerint növekszik. [4]

## 4. Tézispontokhoz kapcsolódó publikációk

- [1] Á. Bácsi and A. Virosztek, Local density of states and friedel oscillations in graphene, *Phys. Rev. B* **82**, 193405 (2010)
- [2] Á. Bácsi, A. Virosztek, L. Borda and B. Dóra, Mean-field quantum phase transition in graphene and in general gapless systems, *Phys. Rev. B* **82**, 153406 (2010)
- [3] Á. Bácsi and A. Virosztek, Low-frequency optical conductivity in graphene and in other scale-invariant two-band systems, *Phys. Rev. B* **87**, 125425 (2013)
- [4] Á. Bácsi and B. Dóra, Quantum quench in the Luttinger model with finite temperature initial state, *Phys. Rev. B* **88**, 155115 (2013)

## 5. Egyéb publikációk

- [5] A. Virosztek and Á. Bácsi, Friedel oscillations around a short range scatterer: the case of graphene, *J. Su-*

*percond. Nov. Magn.* **25**, 691 (2012)

- [6] B. Dóra, Á. Bácsi, and G. Zaránd, Generalized Gibbs ensemble and work statistics of a quenched Luttinger liquid, *Phys. Rev. B* **86**, 161109 (2012)