

PÉCSI TUDOMÁNYEGYETEM

Fizikai Intézet

**Kvázi-kétdimenziós  
elektronrendszerek gerjesztései  
mágneses térben**

Sári Judit

Tézisfüzet



*Témavezető:*

Tőke Csaba

2015

## Bevezetés

Az elmúlt évtizedben soha nem látott fejlődés játszódott le a kétdimenziós és kvázi-kétdimenziós anyagi rendszerek kutatásának területén, elsősorban az egyrétegű grafén 2005-beni felfedezésének köszönhetően, [17], [22]. A grafén újszerűsége kétdimenziós (2D) természetében gyökerezik, és számos különleges tulajdonsághoz vezet, mint például a lineáris völgyek megjelenése az alacsony energiás sávszerkezetben, vagy a nemkonvencionális kvantum Hall effektus, [5], [6]. A grafén elektronjai kielégítik a tömeggel nem rendelkező részecskékre vonatkozó Dirac egyenletet, habár a fénysebességnél nagyságrendekkel alacsonyabb Fermi sebességgel, mégis, ez a tény adhat alapot a Dirac elektron elnevezésre és teszi a grafént az első 2D rendszerré, amelyben Dirac-kúpok találhatóak.

A grafénnel kapcsolatos kutatások fellendülésének motorja az, hogy a grafén az első valóban 2D anyag, amelyet izoláltak, ez utat nyitott számos más 2D anyag felfedezésének is. Egy kiemelkedő csoport az átmenetifém dikalkogenidek, így a  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{WS}_2$  vagy  $\text{WSe}_2$ , [21]. Emellett kitüntetett figyelem övez más anyagokat is, így egyebek mellett a hexagonális bór nitridet, szilicént, germanént, szilícium karbidot is. A 2D anyagokra vonatkozó legfrissebb eredményekről kiváló áttekintés ol-

vasható a [14] összefoglaló cikkben. Érdekes azonban megjegyeznünk, hogy az előbbi anyagok tulajdonságaikban, sáv szerkezetükben lényegesen különbözhetnek. Épp ez a változatosság teszi a 2D anyagok kutatását különösen is intenzív területté.

A grafén nem pusztán 2D természete, hanem lineáris diszperziós relációja miatt is a figyelem középpontjába került, s felkeltette az érdeklődést más, akár háromdimenziós kristályok iránt is, amelyeknek alacsony energiás sáv szerkezetében Dirac-kúpok alakulnak ki. Ezen kristályok csoportjába tartoznak bizonyos kvázi-2D modellel leírható szerves kristályok, így az  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> (aI3) is, melyben a Fermi energia közelében lévő Dirac-kúpok nagy nyomáson vagy mechanikai feszültség hatására jelennek meg [16], [18], [19].

Ugyan lenyűgöző a fejlődés a 2D anyagok vizsgálatának területén, észre kell vennünk, hogy számos kérdés mind a mai napig megválaszolatlan. Minden kétséget kizáróan a grafén a leginkább ismert 2D anyag, azonban itt is számos nyitott kérdés van még, ezekről bővebben a [2] és [11] referenciákban olvashatunk. Ugyanez különösen is igaz a többi 2D anyag esetében. Mindezen megfontolások alapján hisszük, hogy a kvázi-2D anyagi rendszerek vizsgálata időszerű, és számos új eredménnyel kecsegtet.

## Célkitűzések és módszerek

Jelen értekezés kvázi-2D elektronrendszerek egyrészecskés és kollektív gerjesztéseit vizsgálja merőleges mágneses térben, ahol egész számú kvantum Hall vagy kvantum Hall ferromágneses állapotok jelennek meg. Elméleti kutatásunk kiterjed egyrétegű, kétrétegű grafénre, valamint az aI3-re.

Az aI3 különösen is érdekes számunkra, hisz a grafénnel ellentétben Dirac-kúpjai anizotropok és dőltek, ugyan a dőlést és anizotrópiát meghatározó paraméterek értékei elméleti számításokból becsülhetők csak, kísérleti eredmények erre vonatkozóan nem ismertek, [7], [9], [10]. A dolgozat egyik célkitűzése olyan kísérleti eljárást javasolni, amellyel ezen paraméterek kísérletileg is meghatározhatók. A 3. fejezetben meghatározzuk egyrészecskés képbén az anyag magneto-optikai tulajdonságait, s azt találjuk, hogy az izotrop, nem dőlt esethez képest számos új átmenet válik megengedetté, s ez az abszorpciós együtttható oszcilláló viselkedéséhez vezet magas energiákon. Az abszorpciós együtttható mérése lehetővé teszi a keresett paraméterek értékeinek kísérleti meghatározását.

Mindemellett, nemcsak a Dirac-kúpok dőlésének mértéke ismeretlen, egyes elméleti és kísérleti eredmények szerint a Dirac-kúpok mellett egy tömeggel rendelkező völgy is található az

első Brillouin zónában, [1], [15]. Ez az állítás azonban rendkívül vitatott, s más kísérletekben nem nyert megerősítést [20]. A 4. fejezetben a részecske-lyuk gerjesztési spektrumot és a sűrűség-sűrűség válaszfüggvényt határozzuk meg azzal a céllal, hogy megmutassuk: a parabolikus és a lineáris völgyek válasza jól elkülöníthető a számolt mennyiségekben, ha a mágneses teret vagy a Fermi energiát hangoljuk. Elméleti jóslataink alapján lehetőség nyílt az alacsony energiás sáv szerkezet pontos meghatározására.

Az 5. fejezetben a kétrétegű grafént állítjuk középpontba, elsősorban a kölcsönhatási effektusok vizsgálatát tűzve ki célul. Meghatározzuk a rendszer elemi gerjesztéseinek, a magneto-excitonoknak a diszperziós relációját átlagtérközelítésben, [3], [4], [8], [12], [13], azzal a céllal, hogy rávilágítsunk a Coulomb kölcsönhatás szerepére, s meghatározzuk, hogy az milyen mértékben módosítja a diszperziós relációt az egyrészecske képből kapott eredményekhez képest. Azt találjuk, hogy a Landau szintek keveredése lényegesen módosítja a diszperziós relációt mind véges, mind nulla hullámszám vektoroknál, valamint az egyes módusok orbitális jellege is megváltozik véges hullámszám vektornál.

## Tézispontok

1. Megoldottam az  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> sajátérték, sajátvektor problémáját merőleges mágneses térben az anyag azon nagy nyomású fázisában, amelyben Dirac-kúpok jelennek meg az alacsony energiás sávszerkezetben. A levezetésnél kihasználtam a kapcsolódó Dirac egyenlet relativisztikusan kovariáns alakját, s párhuzamot vontam ezen szerves félvezető és a grafén között, ha utóbbit az anyag síkjára merőleges mágneses térbe és síkban fekvő elektromos térbe tesszük. Ráműtöttem, hogy az elektromos tér grafénben és a Dirac-kúpok dőlése a szerves félvezető sávszerkezetében ugyanazt a szerepet játsza, s mind a két anyag esetén azonos Landau állapotok kialakulásához vezet [III].
2. Az előbbi párhuzamot kihasználva meghatároztam az abszorpciók együtthatót egyazon formalizmussal mind az  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> magas nyomású fázisára mágneses térben, mind grafénre merőleges mágneses és síkbeli elektromos terekben. Meghatároztam a perturbatív mátrixelemeket ciklikusan poláros beeső fény esetén. Megmutattam, hogy a forgási szimmetria sérülése miatt a grafénben mágneses tér jelenlétében lehetséges  $\propto \delta_{|m|,|n|\pm 1}$  átmeneteken kívül új

átmenetek sora válik megengedetté. Megvizsgáltam az újonnan megjelenő átmenetek szerkezetét, s Fourier transzformáció segítségével megmutattam, hogy az átmenetek speciális mintázata az abszorpciós együttható oszcilláló viselkedéséhez vezet magas frekvenciákon. Ezen oszcillációk mind grafén, mind  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$  esetén mérhetőek, javaslatot tettem arra, hogy az utóbbi anyagnál ez az oszcilláló viselkedés hogyan használható ki a dőlést jellemző  $\beta$  paraméter és a dőlés szögét megadó  $\theta_{\text{tilt}}$  meghatározására [III].

3. Meghatároztam az  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$  kollektív gerjesztéseit az anyag magas nyomású fázisában mágneses térben véletlen fázis közelítésben. Kiszámoltam a frekvenciafüggő dielektromos függvényt és a sűrűség-sűrűség válaszfüggvényt egy olyan sáv szerkezet modellt feltételezve, amelyben a Dirac kúpok mellett egy parabolikus völgy is található a Brillouin zónában. Beazonosítottam a lineáris magnetoplazmonokat a lineáris völgyekben és a plazmon módusokat mind a lineáris, mind a parabolikus völgyekben; megvizsgáltam a lineáris völgyek anizotrópiájának hatását a kialakuló kollektív módusokra. Megmutattam, hogy mágneses tér vagy a Fermi energia hangolásával a rendszer válasza változtatható: ha a Fermi energia a Dirac pont feletti értékre hangolt, akkor

csak a lineáris völgyek, ha a Dirac pont alá hangolt, akkor mind a három völgy hozzájárul a rendszer válaszához. Megvizsgáltam, hogy az előbbi esetben miként vezet a lineáris völgyek anizotrópiája a kollektív gerjesztések egy sajátos, a völgyek között létrejövő csillapodásához: az egyik völgy részecske-lyuk gerjesztései akkor is leárnyékolják a másik völgy plazmon-módusát, ha az a saját tiltott tartományába esik. Megmutattam továbbá, hogy az utóbbi esetben a völgyek közötti csillapodásban a parabolikus völgy is részt vesz, s ez adja a rendszer teljes válaszának jelentős részét. Kitértem arra is, hogy a Fermi energia hangolása hogyan befolyásolja az árnyékolást: a parabolikus völgy által dominált, izotrop árnyékolás a Fermi energia növelésével a lineáris völgyek által meghatározott, anizotrop módon árnyékolt tartományba vihető [II].

4. Kiszámoltam a magnetoexcitonok diszperziós relációját kétrétegű grafén esetén átlagtér közelítésben. Beazonosítottam az energiában az egyrészecskés energiakülönbségen kívül megjelenő három tagot, ezek egyrészt, a részecskének és a lyuknak a betöltött állapotokkal vett kicserélődési energiájának különbsége, másrészt a direkt dinamikai kölcsönhatás a két részecske között, végül a két részecske közötti kicserélődési



kölcsönhatás. Számba vettem a lehetséges magnetoexcitonokat egész betöltési számok esetén: egyrészt kvantum Hall tartományban, amikor a legfelső Landau szint teljesen betöltött, másrészt egyéb, egész betöltési számok esetén, amikor szimmetriasértő kvantum Hall ferromágneses állapotok alakulnak ki. Megmutattam, hogy a Coulomb kölcsönhatás figyelembe vétele jelentősen módosítja a Landau szintek energiáját mind a  $k \rightarrow 0$  határesetben, mivel kétrétegű grafén esetén Kohn tétele nem alkalmazható, mind véges hullámszám vektornál is. Megmutattam továbbá, hogy a Landau szintek keveredése eltűnteti a szintek kereszteződését. Demonstráltam, hogy a szintek keveredése elsősorban közepes  $k$  hullámszám vektor tartományban jelentős. Ez a tartomány rugalmatlan fényszórással érhető el [I].

# Publikációs jegyzék

## 1. Az értekezéshez kapcsolódó saját publikációk

Referált folyóiratban megjelent publikációk:

- [I] J. Sári and C. Tóke, Phys. Rev. B **87**, 085432 (2013).
- [II] J. Sári, C. Tóke, and M. O. Goerbig, Phys. Rev. B **90**, 155446 (2014).
- [III] J. Sári, M. O. Goerbig, and C. Tóke, Phys. Rev. B **92**, 035306 (2015).

## Irodalomjegyzék

- [1] P. Alemany, J. P. Pouget, and E. Canadell, *Phys. Rev. B* **85**, 195118 (2012).
- [2] D. N. Basov, M. M. Fogler, A. Lanzara, F. Wang, and Y. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 959 (2014).
- [3] Yu. A. Bychkov, S. V. Iordanskii, and G. M. Eliashberg, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **33**, 152 (1981) [*Sov. Phys. JETP Lett.* **33**, 143 (1981)].
- [4] Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **85**, 1826 (1983) [*Sov. Phys. JETP* **58**, 1062 (1983)].
- [5] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [6] M. O. Goerbig, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1193 (2011).
- [7] T. Himura, T. Morinari, and T. Tohyama, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 464202 (2011).
- [8] C. Kallin and B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* **30**, 5655 (1984).
- [9] S. Katayama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, *J. Phys.: Conf. Series* **132**, 012003 (2008).

- 
- [10] A. Kobayashi, S. Katayama, Y. Suzumura, and H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 034711 (2007).
- [11] V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1067 (2012).
- [12] I. V. Lerner and Yu. E. Lozovik, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **78**, 1167 (1978) [*Sov. Phys. JETP* **51**, 588 (1980)].
- [13] A. H. MacDonald, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **18**, 1003 (1985).
- [14] P. Miró, M. Audiffred, and T. Heine, *Chem. Soc. Rev.* **43**, 6537 (2014).
- [15] M. Monteverde, M. O. Goerbig, P. Auban-Senzier, F. Navarin, H. Henck, C. R. Pasquier, C. Mézière, and P. Batail, *Phys. Rev. B* **87**, 245110 (2013).
- [16] K. Murata, S. Kagoshima, S. Yasuzuka, H. Yoshino, and R. Kondo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 051015 (2006).
- [17] K.S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).

- 
- [18] N. Tajima, S. Sugawara, M. Tamura, Y. Nishio, and K. Kajita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 051010 (2006).
- [19] N. Tajima and K. Kajita, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **10**, 024308 (2009).
- [20] N. Tajima, T. Yamauchi, T. Yamaguchi, M. Suda, Y. Kawasugi, H. M. Yamamoto, R. Kato, Y. Nishio, and K. Kajita, *Phys. Rev. B* **88**, 075315 (2013).
- [21] Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, and M. S. Strano, *Nat. Nanotechnol.* **7**, 699 (2012).
- [22] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).