



UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI
Facultatea de Fizică
Școala Doctorală de Fizică



Adrian – Constantin PENA

CONTROLUL PROPRIETĂȚILOR ELECTRICE,
TOPOLOGICE ȘI DE TRANSPORT ALE GRAFENEI PRIN
APLICAREA DE CÂMPURI EXTERNE

TEZĂ DE DOCTORAT
REZUMAT

Conducător științific

C.Ș. I Dr. Abil. Cristian Mihail
TEODORESCU

București, 2023

Mulțumiri

Vineri, 16:41, 17.03.2023

”Dacă am văzut mai departe decât ceilalți, este pentru că am stat pe umerii gigantilor”, celebra mulțumire a lui Isaac Newton pentru predecesorii săi descrie perfect inspirația pe care generațiile tinere de cercetători o primesc de la cei mai experimentați. Fiecare, cercetător sau nu, a avut la un moment dat gigantul său. La rândul meu, pe parcursul formării profesionale, am avut privilegiul de a interacționa sau colabora cu oameni de știință respectabili, care m-au îndrumat cu un înalt grad de profesionalism.

Acum, în prag de a încheia probabil cel mai important capitol din viața unui cercetător aflat la început de carieră, doresc să îmi adresez recunoștința Domnului C.Ș. I Dr. Cristian Mihail Teodorescu, conducătorul științific al tezei. Totodată, adresez mulțumiri Domnului Prof. Univ. Dr. Virgil Băran, care a avut de asemenea un impact major asupra inițierii mele. Înzestrați cu o capacitate intelectuală debordantă, dar și cu imaginație și intuiție pe măsură, acești doi distinși pedagogi mi-au oferit exemplul fizicianului desăvârșit, capabil de a trata cu tenacitate o largă varietate de domenii ale fizicii, de la cele mai comune, până la cele mai exotice. Pe lângă modalitățile fenomenologice sau tehnice de a aborda o temă de cercetare, am preluat de la dumnealor entuziamul cunoașterii, dorința și curajul de a deschide noi subiecte, căutând de fiecare dată explicații cât mai edificatoare.

Cu aceeași grațitudine, îmi îndrept gândul către Doamna Conf. Univ. Dr. Mădălina Boca, față de care nu pot avea decât respect pentru grija și atenția cu care m-a îndrumat în perioada studiilor de Licență și Master. Împreună, Doamna profesor și Domnul Lect. Univ. Dr. Cristian Stoica mi-au oferit exemplul gândirii limpezi, de o logică impecabilă, fără paradoxuri sau obscurități — adevărate calități ale unui pedagog desăvârșit. Interacțiunea de la orele de curs cu Domnii profesori, dar și nenumăratele consultații din afara orelor au reprezentat pentru mine primul contact real cu fizica teoretică.

De asemenea, cu deosebit respect voi menționa o parte dintre profesorii care și-au lăsat amprenta asupra modului în care, în prezent, înțeleg anumite fenomene sau asupra strategiei cu care tratez subiecte complet noi. Astfel, mulțumirile mele se îndreaptă acum către: Prof. Univ. Dr. Emil Barna — o personalitate emblematică a Universității din București, Prof. Univ. Dr. Lucian Ion, Lect. Univ. Dr. Marian Băzăvan, Conf. Univ. Dr. Petrică Cristea și Conf. Univ. Dr. Radu Paul Lungu.

Pentru discuțiile și sfaturile fructuoase, dar și pentru disponibilitatea cu care mi-a oferit ajutorul ori de câte ori am avut nevoie, adresez mulțumiri domnului C.Ș. I Dr. Marius Adrian Hușanu. De asemenea, transmit mulțumirile mele colegilor Cosmin Istrate și Cristian Radu, pentru toate discuțiile pe care le-am purtat, atinând cele mai captivante subiecte ale fizicii moderne. Mulțumesc totodată tuturor colegilor, convinși fiind că și de la dumnealor am preluat lecții importante.

Cuprins

1	Introducere	1
2	Structura cristalină a grafenei și spațiul reciproc. Structura de benzi energetice.	3
3	Generarea de stări electronice cvasilegate în dot-uri cuantice de grafenă prin aplicarea unui câmp magnetic uniform	7
3.1	Modelul teoretic	7
3.1.1	Descrierea stărilor fermionilor Dirac de masă nulă în interacție cu un câmp magnetic uniform	7
3.1.2	Împrăștierea electronilor pe un dot cuantic de grafenă în prezența unui câmp magnetic uniform	9
3.2	Rezultate numerice și interpretare	10
4	Efectul luminii polarizate circular asupra stărilor cvasilegate induse în dot-uri cuantice de grafenă prin aplicarea unui câmp magnetic uniform	15
4.1	Modelul teoretic	15
4.1.1	Descrierea stărilor fermionilor Dirac de masă nulă în interacție cu un câmp magnetic uniform și lumină polarizată circular	15
4.1.2	Împrăștierea electronilor pe dot-uri cuantice de grafenă în prezența unui câmp magnetic uniform și a luminii polarizate circular	17
4.2	Rezultate numerice și interpretare	17
5	Generarea de stări electronice cvasilegate în dot-uri cuantice de grafenă prin iradiere cu lumină elicoidală	23
5.1	Modelul teoretic	23
5.1.1	Descrierea stărilor fermionilor Dirac de masă nulă în interacție cu lumină elicoidală	23
5.1.2	Împrăștierea electronilor pe dot-uri cuantice de grafenă în prezența luminii elicoidale	24
5.2	Rezultate numerice și interpretare	25
6	Proprietăți spectrale, topologice și de transport cuantic de sarcină ale grafenei în câmp magnetic uniform și lumină polarizată circular	31
6.1	Modelul teoretic	31
6.1.1	Interacția grafenei cu un câmp magnetic uniform și lumină polarizată circular	31

6.1.2	Formalismul de transport Landauer–Büttiker în prezența unui câmp magnetic uniform și a luminii polarizate circular	33
6.2	Rezultate numerice și interpretare	34
6.2.1	Regimul nerezonant	34
6.2.2	Regimul rezonant	38
7	Concluzii	41
	Lista contribuțiilor proprii	47

Introducere

Grafena reprezintă o formă alotropică 2-dimensională a carbonului, având o structură cristalină care constă dintr-un aranjament hexagonal de specii atomice identice. Deși proprietățile principale ale grafenei au fost puse în evidență încă din anul 1947 de către P. R. Wallace [1], adevăratul impact științific a fost înregistrat începând cu anul 2004 când Andre Geim și Konstantin Novoselov au reușit pentru prima dată fabricarea acestui material la Universitatea din Manchester [2]. Acest succes, dar și studiile ulterioare au fost deosebit de apreciate în anii următori încât în 2010, Premiul Nobel în fizică a fost acordat echipei de cercetători formate din Andre Geim și Konstantin Novoselov pentru "groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene".

În decursul ultimului deceniu, descoperirea acestui prim material literalmente 2D a atras atât de multă atenție din partea cercetătorilor, atât din sectorul fizicii teoretice, dar și din cel experimental, încât grafena a devenit un nou domeniu de cercetare de sine stătător. Astfel, o serie colosală de experimente a demonstrat în ultimii ani proprietăți cu totul spectaculoase ale grafenei. De departe cel mai impresionant efect, anticipat inițial teoretic [3] și dovedit ulterior experimental [4], a fost așa-numita *tunelare Klein* sau *paradox Klein* [5]. Acesta este un proces relativist care constă în tunelarea perfectă a electronilor printr-o barieră de potențial, indiferent de mărimea acesteia. Așadar, grafena s-a instituit ca un mediu perfect în care pot fi analizate efecte relativiste.

Izolatorii topologici sunt materiale speciale care găzduiesc stări de conducție la suprafață, în timp ce în volum se comportă ca izolatori obișnuiți. Pe deasupra, această fază topologică a materiei s-a dovedit a fi foarte robustă în fața defectelor de structură [6, 7] și de aceea se urmărește implementarea acestor materiale în viitoarea tehnologie cuantică [8, 9, 10, 11, 12, 13]. De asemenea, aceste sisteme exotice au prezentat un interes deosebit pentru comunitatea științifică, și din perspectiva cercetării fundamentale. Până în prezent, în literatură a fost consemnată o serie de lucrări care a pus bazele teoretice ale fazei topologice a materiei [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23]. În final, cele mai notabile contribuții științifice în acest domeniu au condus la acordarea Premiului Nobel către fizicienii David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane și J. Michael Kosterlitz în anul 2016 pentru *theoretical discoveries of topological phase transitions and topological phases of matter*.

În lucrarea de față, sunt abordate două teme principale: generarea stărilor cvasilegate în dot-uri cuantice circulare de grafenă, în prezența unor câmpuri externe (Capitolele 3, 4 și 5) și manipularea proprietăților electronice, topologice și de transport cuantic de sarcină ale grafenei prin aplicarea luminii polarizate circular și/sau

a unui câmp magnetic (Capitolul 6).

Studiile prezentate în prima parte sunt similare din punct de vedere conceptual și urmăresc aceeași structură. Pentru a pune în evidență efectele de captură, este simulat un proces de împrăștiere a unui electron pe un dot cuantic de grafenă în prezența câmpurilor externe. Fiecare capitol este structurat după cum urmează. În prima parte, este prezentat un model care descrie interacția unui fermion Dirac cu câmpul aplicat, în formalismul mecanicii cuantice relativiste (ecuația Dirac–Weyl). În cea de a doua parte, este introdusă teoria împrăștierii și sunt definite mărimile care descriu cantitativ fenomenul. În cea de a treia parte, bazat pe elementele teoretice discutate, sunt prezentate analize numerice care au scopul de a evidenția într-o manieră cât mai ilustrativă modul în care aplicarea fiecărui tip de câmp facilitează generarea de stări cvasilegate. În Capitolul 3, este analizat cazul în care asupra dot-ului cuantic este aplicat un câmp magnetic uniform și perpendicular. De asemenea, este investigată și configurația în care, pe lângă câmpul magnetic, este prezent un potențial electrostatic. În Capitolul 4, sunt discutate efectele produse de lumina polarizată circular asupra stărilor cvasilegate induse de un câmp magnetic. În Capitolul 5, sunt investigate efectele de captură electronică datorate iradierii dot-ului cuantic cu lumină elicoidală [24, 25, 26, 27, 28].

În cea de a doua parte a lucrării, sunt analizate proprietățile grafenei în prezența luminii polarizate circular și/sau a câmpului magnetic, din punct de vedere al izolatoarelor topologice. Dat fiind faptul că grafena este un sistem înzestrat cu simetrie la inversia temporală, aplicarea celor două tipuri de câmpuri menționate mai sus rupe această simetrie, așadar induce o tranziție de fază topologică. Sunt analizate pe rând efectele produse de lumină, de câmpul magnetic și apoi de combinația celor două. Studiul se bazează pe un model de tip tight-binding, în care este inclusă contribuția din partea câmpurilor externe, formulat aplicând teorema Floquet. Analizând modelul, sunt extrase informații legate de proprietățile spectrale ale grafenei. Studiul își propune să coreleze aceste observații cu analiza de transport de sarcină prin grafenă, în prezența câmpurilor aplicate. Pentru aceasta, în cea de a doua parte a studiului este elaborat un model de transport de tip Landauer–Büttiker, în care se ține seama de iradierea cu lumină polarizată circular. În cea de a treia parte, este prezentată o analiză numerică concretă prin care sunt puse în evidență particularitățile fiecărei configurații de interacție (lumină, câmp magnetic și combinația lor), dar și efectele comune. Astfel, toate predicțiile bazate pe investigarea aspectelor legate de structura de bandă sunt evidențiate ulterior în analiza de transport.

Structura cristalină a grafenei și spațiul reciproc. Structura de benzi energetice.

Grafena este un material compus exclusiv din atomi de carbon care stabilesc legături covalente, aranjați într-o rețea hexagonală, conform Figurii 2.1. Configurația electronică a atomului de carbon este $1s^2 2s^2 2p^2$, iar structura prezentată în Figura 2.1 este rezultatul hibridizării de tip sp^2 între orbitalii $2s$, $2p_x$ și $2p_y$. Astfel este generată o geometrie moleculară trigonal-planară în care atomii constituenți formează legături puternice de tip σ în planul grafenei, care conțin trei electroni de valență. De asemenea, orbitalii $2p_z$ populați cu cel de al patrulea electron de valență stabilesc legături de tip π între atomii vecini pe direcția perpendiculară pe planul legăturilor σ [29].

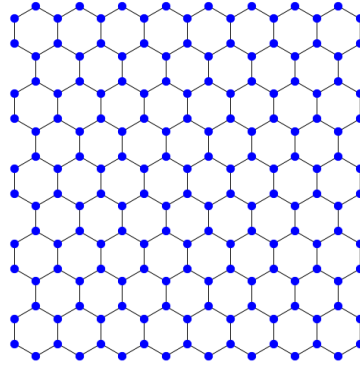


Figura 2.1: Structura hexagonală a grafenei.

Pentru început considerăm structura de grafenă prezentată în Figura 2.2. Celula unitară (zona gri) definită de vectorii rețelei Bravais $\mathbf{a}_1 = (a\sqrt{3}, 0)$ și $\mathbf{a}_2 = \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{3a}{2}\right)$ conține doi atomi pe care îi vom indexa în cele ce urmează cu A și, respectiv, B . Distanța dintre doi atomi vecini A și B este $a = 0.142$ nm (latura unei celule hexagonale). Rețeaua cristalină prezentată în Figura 2.2 poate fi interpretată ca un sistem format din lanțuri atomice zig-zag cuplate, în care atomii A și B sunt dispuși alternant. Fiecare lanț indexat de către $m = 1, 2, 3, \dots, M$ se întinde pe direcția axei x , în timp ce cuplajul este realizat pe direcția axei y . În interiorul fiecărui lanț, atomii sunt repertați prin indicele $n = 1, 2, 3, \dots, N$. În exemplul din figura respectivă, sistemul conține $M = 4$ lanțuri atomice, fiecare fiind alcătuit din câte $N = 9$ atomi.

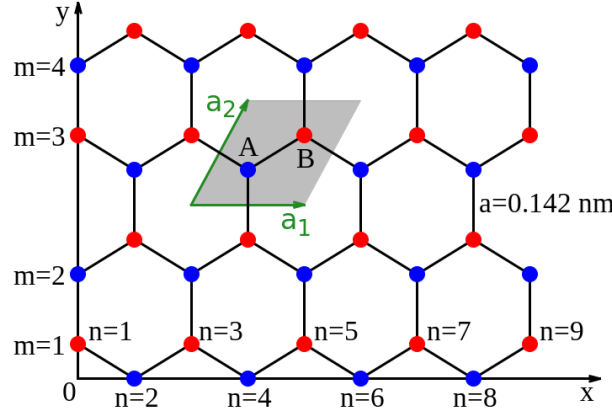


Figura 2.2: Structura cristalină a grafenei. Sistemul este interpretat ca un set de lanțuri atomice care se întind pe direcția axei x , cuplate pe direcția axei y , în care atomii A și B sunt dispuși alternant. În fiecare lanț reperat prin $m = 1, 2, 3, \dots, M$, poziția atomilor este indexată de către $n = 1, 2, 3, \dots, N$. În exemplul de față, sistemul este compus din $M = 4$ lanțuri, fiecare conținând câte $N = 9$ atomi. Celula unitară (zona gri) este reprezentată de vectorii rețelei Bravais $\mathbf{a}_1 = (a\sqrt{3}, 0)$ și $\mathbf{a}_2 = \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{3a}{2}\right)$ unde $a = 0.142$ nm este distanța dintre doi atomi $A - B$ vecini de ordin I .

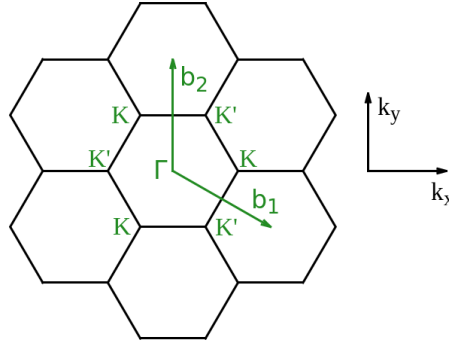


Figura 2.3: Spațiul reciproc. Rețeaua este de asemenea hexagonală, unde prima zonă Brillouin este reprezentată de hexagonul centrat în punctul Γ ales ca origine. Vectorii reciproci sunt $\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, -\frac{2\pi}{3a}\right)$ și $\mathbf{b}_2 = \left(0, \frac{4\pi}{3a}\right)$. Punctele de înaltă simetrie sunt K și K' .

Legea de dispersie are următoarea expresie:

$$E(k_x, k_y) = \pm \gamma \sqrt{3 + 2 \cos(k_x a \sqrt{3}) + 4 \cos\left(k_x \frac{a\sqrt{3}}{2}\right) \cos\left(k_y \frac{3a}{2}\right)}. \quad (2.1)$$

Înainte de a trece la discuția legată de proprietățile spectrale ale grafenei, introducem spațiul reciproc. Plecând de la definiția vectorilor unitari din spațiul real $\mathbf{a}_1 = (a\sqrt{3}, 0)$ și $\mathbf{a}_2 = \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{3a}{2}\right)$ și folosind relațiile de legătură dintre spațiul real și cel reciproc $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{i,j}$ cu $i, j = 1, 2$, obținem vectorii unitari din rețeaua reciprocă $\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, -\frac{2\pi}{3a}\right)$ și $\mathbf{b}_2 = \left(0, \frac{4\pi}{3a}\right)$. Acești doi vectori generează de asemenea o structură cristalină hexagonală, așa cum este construit în Figura 2.3. Observăm că în spațiul Fourier, distingem două tipuri de puncte de interes: $\Gamma : (0, 0)$ care este

centrul primei zone Brillouin și punctele de înalta simetrie K și K' . Astfel, în prima zonă Brillouin există trei perechi de puncte speciale neechivalente:

$$K : \left(-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right), \quad K' : \left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a} \right); \quad (2.2)$$

$$K : \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right), \quad K' : \left(-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right); \quad (2.3)$$

$$K : \left(-\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{3a} \right), \quad K' : \left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{3a} \right). \quad (2.4)$$

În ceea ce privește structura de benzi energetice, zona Brillouin a grafenei prezintă proprietăți foarte importante în vecinătatea punctelor K și K' . În Figura 2.4(a), este reprezentată legea de dispersie (2.1) în unități γ . Spectrul energetic are o lărgime de 6γ și este format din două pânze simetrice care se închid în fiecare punct $K(K')$. Perimetrul delimitat de către poligonul roșu reprezintă prima zonă Brillouin. În jurul fiecărui punct $K(K')$, se formează așa-numitele *conuri Dirac* unde energia dispersează liniar. Din acest motiv, punctele $K(K')$ se mai numesc și *puncte Dirac*. În Figura 2.4(b), este prezentată legea de dispersie în vecinătatea punctului K din relația (2.3). Așa cum se poate remarca, într-un anumit interval, legea de dispersie este liniară și simetrică față de planul de energie zero, ceea ce sugerează comportamente relativiste.

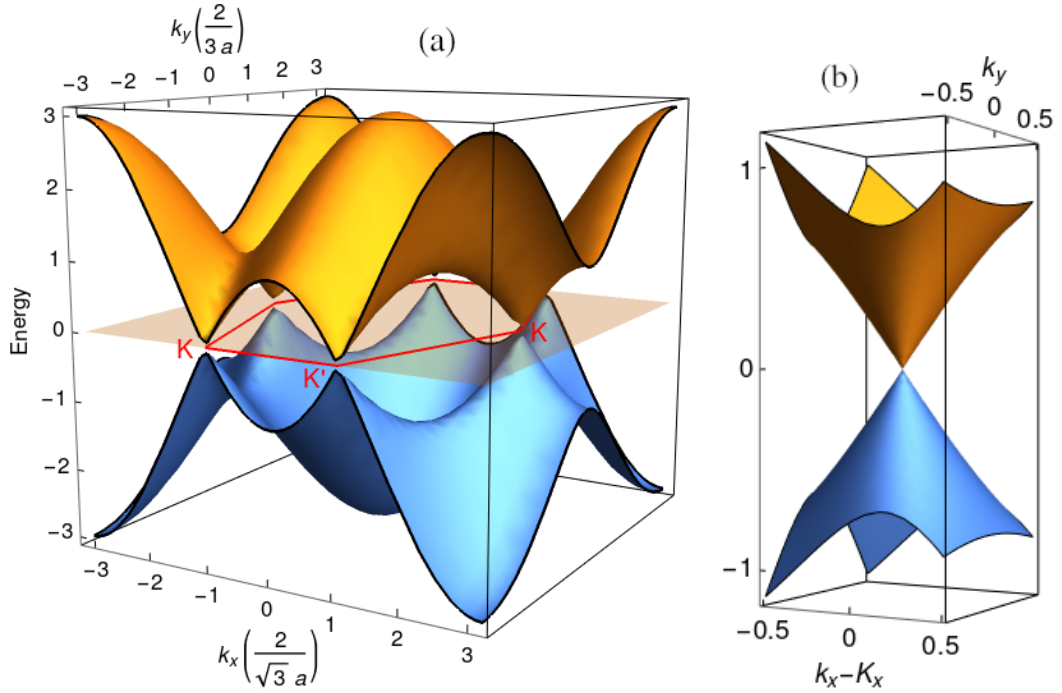


Figura 2.4: Legea de dispersie a grafenei în unități γ . (a) Dispersia energetică pe intervalul $k_x \in [-\pi, \pi) \times \frac{2}{\sqrt{3}a}$ și $k_y \in [-\pi, \pi) \times \frac{2}{3a}$. Lărgimea spectrului este 6γ și este format din două pânze care se închid în punctele K și K' unde sunt formate conurile Dirac. (b) Dispersia energetică (conul Dirac) în vecinătatea punctului $K : \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right)$.

Generarea de stări electronice cvasilegate în dot-uri cuantice de grafenă prin aplicarea unui câmp magnetic uniform

3.1 Modelul teoretic

3.1.1 Descrierea stărilor fermionilor Dirac de masă nulă în interacție cu un câmp magnetic uniform

În această secțiune, prezentăm un model care descrie interacția dintre un dot cuantic de grafenă circular, de raza R bine definită, cu un câmp magnetic ($\mathbf{B}$) extern și uniform. Descrierea teoretică pe care o vom aborda în cele ce urmează consideră un dot cuantic de grafenă plasat în planul orizontal xy , în timp ce câmpul magnetic este orientat în lungul axei z , perpendicular pe dot-ul cuantic. Schema sistemului studiat este prezentată în Figura 3.1.

Ținând cont de faptul că legea de dispersie în grafenă este liniară în vecinătatea punctelor Dirac, având o bandă interzisă nulă, electronii și, respectiv, golurile din conurile Dirac pot fi modelați ca fermioni Dirac liberi de masă nulă, care se mișcă cu viteza Fermi $v_F = c/300$, unde c reprezintă viteza luminii în vid [29]. În cele ce urmează, ne vom limita strict la acest regim, iar problema se reduce la descrierea cuantică a stărilor electronice de masă nulă în prezența unui câmp magnetic uniform.

Stările unui fermion Dirac de masă nulă aflat în câmp magnetic se supun ecuației Dirac staționare de masă nulă, care în coordonate polare are următoarea formă (originea sistemului de coordonate este stabilită în centrul dot-ului cuantic):

$$H(r, \varphi)\psi_k(r, \varphi) = E\psi_k(r, \varphi); \quad (3.1)$$

$$H(r, \varphi) = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot [-i\hbar \nabla - e\mathbf{A}(r)]. \quad (3.2)$$

În sistemul de referință ales, un punct este reperat prin setul (r, φ) , unde r este coordonata radială și, respectiv, φ cea azimutală. În expresia Hamiltonianului (3.2), $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_r, \sigma_\varphi)$ reprezintă vectorul Pauli, ale cărui componente sunt matricile Pauli, care în coordonate polare depind de φ și au următoarea definiție [30]:

$$\sigma_r = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_\varphi = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\varphi} \\ ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

De asemenea, $\hbar$ reprezintă constanta Planck redusă, e sarcina elementară, iar $\mathbf{A}(r) =$

$Br/2e_\varphi$ potențialul vector în etalonarea simetrică, unde B exprimă intensitatea câmpului magnetic și e_φ vectorul unitar în lungul direcției azimutale.

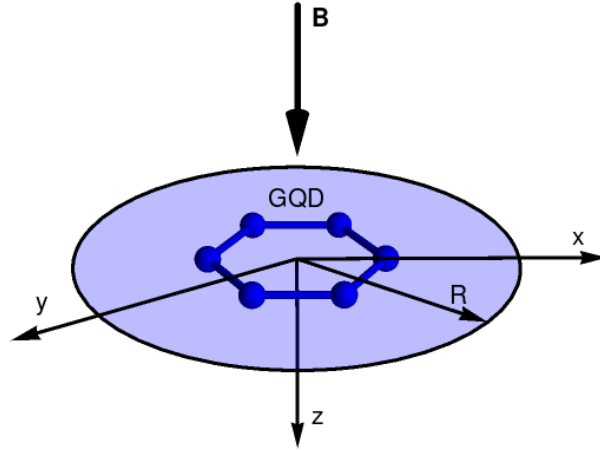


Figura 3.1: *Reprezentarea schematică a sistemului studiat.*

În continuare, ne propunem să exprimăm soluții particulare ale ecuației Dirac (3.1), impunând restricții fizice caracteristice sistemului studiat. Așa cum am menționat mai sus, studiem o problemă relativistă care presupune deopotrivă caracterizarea stărilor de energie pozitivă (electronii din banda de conducție) și, respectiv, energie negativă (golurile din banda de valență). Așadar, plecăm de la legea de dispersie liniară $E = \alpha v_F \hbar k$, unde $\alpha = \pm 1$ indexează soluțiile de energie pozitivă, respectiv, negativă. De asemenea, k reprezintă numărul de undă asociat fermionului Dirac.

Mai departe, ținând seama de faptul că Hamiltonianul (3.2) comută cu operatorul asociat momentului cinetic total $J_z = -i\hbar\partial_\varphi + \hbar/2\sigma_z$,

$$[H(r, \varphi), J_z] = 0, \quad (3.4)$$

în căutarea soluțiilor ecuației Dirac (3.1), plecăm de la următoarea funcție proprie spinorială a operatorului J_z :

$$\psi_k(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \psi_k^A(r) e^{il\varphi} \\ i\psi_k^B(r) e^{i(l+1)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

unde l este numărul cuantic asociat momentului cinetic orbital, luând valori întregi în intervalul $(-\infty, \infty)$. Funcțiile radiale din relația (3.5) vor avea următoarele expresii:

$$\psi_k^{A+}(r) = r^{|l|} e^{-r^2/4\lambda_B^2} F_1 \left(-\frac{\lambda_B^2 k^2}{2}, l+1, \frac{r^2}{2\lambda_B^2} \right); \quad (3.6a)$$

$$\psi_k^{A-}(r) = r^{|l|} e^{-r^2/4\lambda_B^2} F_1 \left(-l - \frac{\lambda_B^2 k^2}{2}, 1-l, \frac{r^2}{2\lambda_B^2} \right); \quad (3.6b)$$

$$\psi_k^{B+}(r) = \frac{\alpha}{2} k r^{|l|+1} e^{-r^2/4\lambda_B^2} {}_1F_1 \left(1 - \frac{\lambda_B^2 k^2}{2}, l+2, \frac{r^2}{2\lambda_B^2} \right); \quad (3.7a)$$

$$\begin{aligned} \psi_k^{B-}(r) = \alpha \frac{|l|!}{2k} r^{|l|-1} e^{-r^2/4\lambda_B^2} & \left[4l {}_1F_1 \left(-l - \frac{\lambda_B^2 k^2}{2}, 1-l, \frac{r^2}{2\lambda_B^2} \right) \right. \\ & \left. + \frac{(2l + \lambda_B^2 k^2)r^2}{\lambda_B^2} {}_1F_1 \left(1-l - \frac{\lambda_B^2 k^2}{2}, 2-l, \frac{r^2}{2\lambda_B^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.7b)$$

Indicii $\pm$ reprezintă stările cu $l \geq 0$ și, respectiv, $l < 0$.

3.1.2 Împrăștierea electronilor pe un dot cuantic de grafenă în prezența unui câmp magnetic uniform

În această secțiune, analizăm procesul de împrăștiere a unui electron pe un dot cuantic de grafenă, de rază R , în prezența unui câmp magnetic perpendicular și uniform. De asemenea, introducem mărimile care descriu cantitativ procesul studiat.

Considerăm un electron care se propagă către dot-ul cuantic de grafenă pe direcția axei x , la incidență normală, cu energia $E = v_F \hbar q$ unde q reprezintă numărul de undă asociat. Prin urmare, electronul incident este descris de o undă plană:

$$\psi_q^i(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{iqr \cos \varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l \begin{pmatrix} J_l(qr) e^{il\varphi} \\ iJ_{l+1}(qr) e^{i(l+1)\varphi} \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Funcția de undă de mai sus este descompusă într-o sumă infinită de stări de moment cinetic orbital bine definit, folosind bine-cunoscuta formulă Jacobi–Anger, $e^{iz \cos \varphi} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l J_l(z) e^{il\varphi}$. Ca rezultat al coliziunii, electronul incident este fie reflectat în regiunea exterioară dot-ului, fie transmis în interiorul acestuia. Menționăm faptul că studiem un proces de împrăștiere elastică, așadar vom impune legile de conservare specifice. Funcția de undă a electronului reflectat trebuie să îndeplinească condiția de undă emergentă, prin urmare vom considera următoarea descompunere în unde parțiale [31]:

$$\psi_q^r(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_l^r i^l \begin{pmatrix} H_l(qr) e^{il\varphi} \\ iH_{l+1}(qr) e^{i(l+1)\varphi} \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

În expresia de mai sus, $H_l(x)$ reprezintă funcția Hankel de speța I, de ordin l . Menționăm faptul că (i) $H_l(x)$ se comportă asimptotic ca $H_l(x) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{i(x - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4})}$ pentru $x \rightarrow \infty$, îndeplinind condiția fizică de undă emergentă și (ii) termenii sumei infinite din ecuația (3.9) reprezintă de asemenea stări de moment cinetic orbital bine definit. În cele din urmă, pe baza modelului introdus în Capitolul 3.1.1, funcția de undă a electronului transmis are următoarea expresie:

$$\psi_k^t(r, \varphi) = \sum_{l=-\infty}^{-1} c_l^t \begin{pmatrix} \psi_k^{A-}(r) e^{il\varphi} \\ i\psi_k^{B-}(r) e^{i(l+1)\varphi} \end{pmatrix} + \sum_{l=0}^{\infty} c_l^t \begin{pmatrix} \psi_k^{A+}(r) e^{il\varphi} \\ i\psi_k^{B+}(r) e^{i(l+1)\varphi} \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

În ecuația de mai sus, k este numărul de undă asociat electronului în interiorul dot-ului de grafenă. Procesul discutat este schematizat în Figura 3.2.

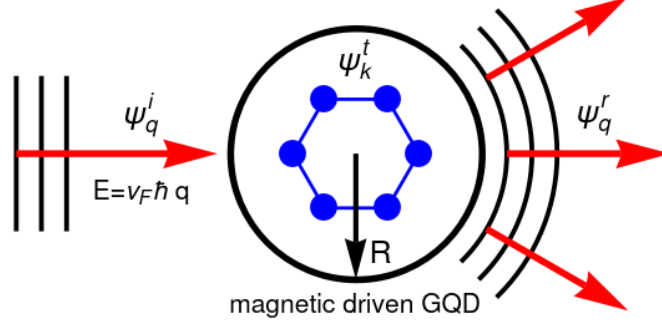


Figura 3.2: Descrierea schematică a procesului de împrăștiere.

Coeficienții de reflexie (c_l^r) și, respectiv, transmisie (c_l^t) sunt obținuți impunând următoarea condiție de continuitate a funcțiilor de undă pe frontiera dintre regiunile delimitate de extensia spațială a dot-ului cuantic:

$$\psi_q^i(R, \varphi) + \psi_q^r(R, \varphi) = \psi_k^t(R, \varphi). \quad (3.11)$$

Ținând cont de conservarea momentului cinetic și efectuând toate simplificările, obținem:

$$c_l^t = \frac{i\sqrt{2}e^{il\pi/2}}{\pi kr[H_l(qr)\psi_k^{B\pm}(kr) - H_{l+1}(qr)\psi_k^{A\pm}(kr)]}; \quad (3.12)$$

$$c_l^r = \frac{-J_l(qr)\psi_k^{B\pm}(kr) + J_{l+1}(qr)\psi_k^{A\pm}(kr)}{H_l(qr)\psi_k^{B\pm}(kr) - H_{l+1}(qr)\psi_k^{A\pm}(kr)}. \quad (3.13)$$

Pe baza funcțiilor de undă (3.8), (3.9) și (3.10), definim densitatea de probabilitate de localizare $\rho = \psi^\dagger \psi$ și, respectiv, curentul de probabilitate $\mathbf{j} = \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi$. În funcție de regiunile pe care dorim să le analizăm, înlocuim $\psi = \psi_k^t(r, \varphi)$ pentru a evalua densitatea/curentul în regiunea din interiorul dot-ului și, respectiv, $\psi = \psi_q^i(r, \varphi) + \psi_q^r(r, \varphi)$ pentru regiunea exterioară.

În final, introducem de asemenea și *eficiența de împrăștiere* definită ca raportul dintre secțiunea de împrăștiere și secțiunea geometrică a dot-ului cuantic [32, 33]:

$$Q = \frac{4}{qR} \sum_{l=-\infty}^{\infty} |c_l^r|^2. \quad (3.14)$$

Această mărime caracterizează în mod cantitativ magnitudinea interacției dintre câmpul aplicat și dot-ul cuantic.

3.2 Rezultate numerice și interpretare

În această secțiune, prezentăm principalele rezultate numerice obținute pe baza teoriei discutate în Capitolele 3.1.1 și 3.1.2. În cele ce urmează, vom efectua o analiză a împrăștierii unui electron pe un dot cuantic de grafenă, de rază $R = 50$ nm, în prezența unui câmp magnetic perpendicular și uniform, în raport cu eficiența de împrăștiere (Q), densitate (ρ) și curent ($\mathbf{j}$).

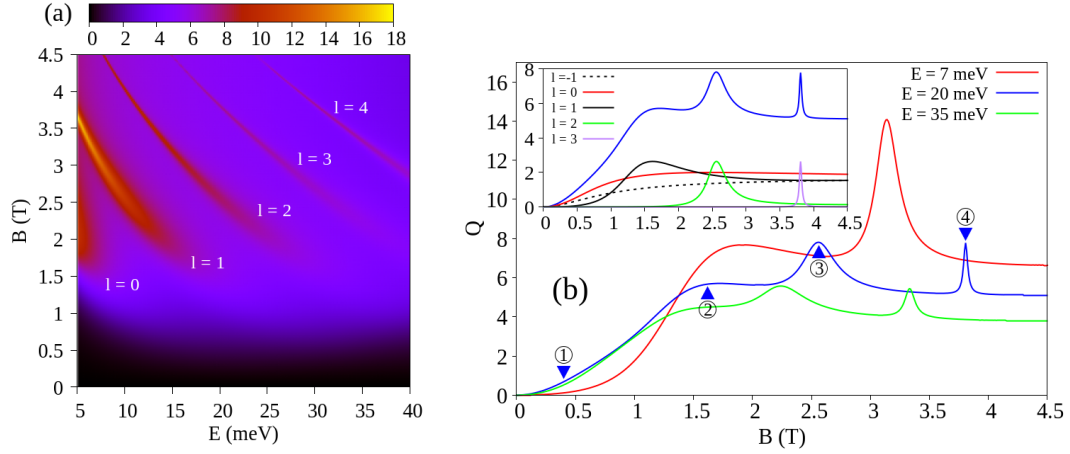


Figura 3.3: Analiza eficienței de împrăștiere în funcție de: (a) E și B ; (b) B , pentru trei valori fixate ale lui E . Inset-ul graficului (b) prezintă curba eficienței de împrăștiere pentru cazul $E = 20$ meV (curba albastră), descompusă în componentele asociate fiecăruia dintre modurile de împrăștiere $l = -1, 0, 1, 2, 3$.

Reamintim faptul că funcțiile de undă (3.8), (3.9) și (3.10) sunt exprimate ca sume infinite peste stări de moment cinetic orbital bine definit, așadar în analiza numerică vom păstra doar termenii relevanți în raport cu efectul studiat. Mai mult decât atât, procesul de împrăștiere poate fi înțeles ca o secvență de sub-procese, fiecare dintre acestea fiind asociat unei anumite stări de moment cinetic orbital bine definit, ca o consecință a legilor de conservare. Având în vedere discuția de mai sus, fiecare dintre evenimentele individuale de împrăștiere cu un l dat va fi numit în continuare *mod de împrăștiere* $l = \dots, -1, 0, 1, \dots$.

Începem analiza prin evaluarea eficienței de împrăștiere (Q), în raport cu energia electronului incident (E) și intensitatea câmpului magnetic aplicat (B). După cum poate fi observat în Figura 3.3(a), eficiența de împrăștiere prezintă un aspect oscilatoriu. Observăm în acest grafic cinci benzi de valori înalte, fiecare corespunzând unuia dintre modurile $l = 0, 1, 2, 3, 4$, după cum este indicat în imagine. Aceste vârfuri de intensitate sunt așa-numitele *rezonanțe de împrăștiere*, caracterizate prin capturarea temporară a electronului incident în interiorul dot-ului. Aceste stări electronice de captură, nefiind literalmente stări legate, vor fi numite *stări cvasilegate*.

Figura 3.3(b) prezintă o analiză detaliată a eficienței de împrăștiere în raport cu B , pentru trei valori ale energiei electronului incident. Pentru început, ne îndreptăm atenția asupra curbei albastre care corespunde cazului $E = 20$ meV. În inset, sunt prezentate individual curbele eficienței de împrăștiere corespunzătoare fiecărui mod participant. Modul $l = -1$ (curba discontinuă neagră) este excitat nerezonant, având cele mai mici valori în comparație cu celelalte moduri. În cazul modului $l = 0$ (curba roșie), împrăștierea este de asemenea nerezonantă, însă valorile eficienței de împrăștiere sunt puțin mai ridicate. Pe de altă parte, modul $l = 1$ (curba neagră) prezintă semnătura unei rezonanțe cu un peak foarte larg, centrat pe valoarea $B = 1.62$ T (vezi marker-ul 2), prin urmare în acest caz ne așteptăm să punem în evidență existența unor efecte de captură destul de reduse. În cazul $l = 2$ (curba verde), peak-ul rezonanței centrat pe $B = 3.8$ T (vezi marker-ul 3) este mai îngust, având un

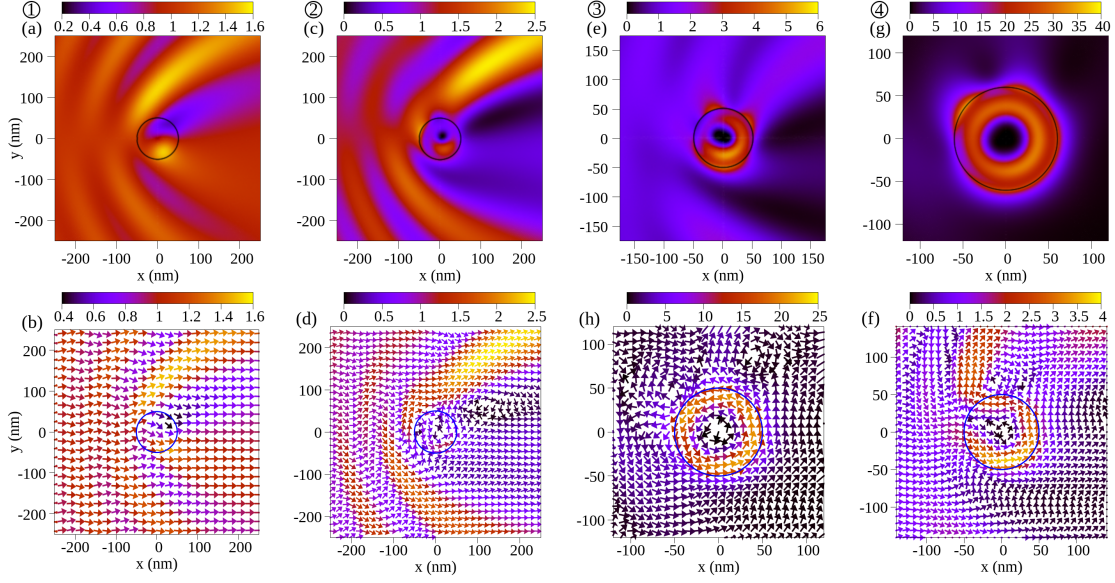


Figura 3.4: Analiza împrăștierei unui electron pe un dot cuantic de grafenă, în prezența unui câmp magnetic uniform. În fiecare coloană, prima imagine reprezintă densitatea de probabilitate de localizare, iar cea de a doua reprezintă curentul de densitate. Extensia spațială a dot-ului este figurată prin cercul negru în cazul densității și, respectiv, prin cercul albastru în cazul curentului. Regimurile de împrăștiere studiate sunt cele indicate în Figura 3.3(b), de la 1 la 4: (a) și (b) pentru $B = 0.4$ T; (c) și (d) pentru $B = 1.62$ T; (e) și (f) pentru $B = 2.56$ T; (g) și (h) pentru $B = 3.8$ T.

profil Lorentz evident și puțin asimetric, ceea ce indică efecte de captură relevante. În final, rezonanța asociată modului $l = 3$ (curba violet), centrată pe $B = 3.8$ T (vezi marker-ul 4) este evident cea mai îngustă, iar asimetria profilului Lorentz este absentă. Așa cum vom arăta în cele ce urmează și deja am anticipat în discuția de mai sus, cu cât este mai îngust profilul Lorentz al rezonanței de împrăștiere, cu atât mai proeminente vor fi efectele de captură electronică. În lumina acestei observații, ne vom aștepta la cele mai interesante procese de captură electronică pentru modul $l = 3$ și la efecte opuse pentru modurile $l = -1$ și $l = 0$.

În următoarea etapă, continuăm investigarea procesului de împrăștiere în termeni de densitate (ρ) și curent ($\mathbf{j}$). Ceea ce ne dorim este să punem în corespondență rezultatele discutate mai sus cu tabloul densității și cel al curentului în câmpul apropiat dot-ului cuantic. Vom trata doar cazul $E = 20$ meV.

În Figura 3.4, fiecare coloană este dedicată câte unuiia dintre regimurile de împrăștiere dintre cele indicate în Figura 3.3(b), de la 1 la 4. Graficul de sus reprezintă densitatea, iar cel de jos curgerea curentului. În cazul densității, extensia spațială a dot-ului este marcată prin cercul negru, iar în cazul curentului, prin cercul albastru.

Primul caz investigat este cel pentru $B = 0.4$ T [vezi marker-ul 1 din Figura 3.3(b)]. Evident, în acest regim împrăștierea este nerezonantă, așadar nu ne vom aștepta să întâlnim efecte de captură. Într-adevăr, așa cum se poate observa în Figura 3.4(a), unda electronică incidentă difractă pe dot-ul cuantic. Curentul reprezentat în Figura 3.4(b) confirmă de asemenea difracția funcției de undă incidente

pe dot-ul de grafenă.

Cel de al doilea caz analizat este pentru $B = 1.62$ T, unde curba rezonanței de împrăștiere prezintă un peak foarte lărgit, datorat excitării rezonante a modului $l = 1$ [vezi marker-ul 2 din Figura 3.3(b)]. Deși în acest regim împrăștierea este dominată de efecte de difracție [vezi Figura 3.4(c)], putem observa totuși valori mai ridicate ale densității în câmpul apropiat dot-ului. Difracția este confirmată din nou de către curgerea curentului în regiunea exterioară dot-ului [vezi Figura 3.4(d)]. Menționăm faptul că în acest regim de împrăștiere, pe lângă excitarea rezonantă slabă a modului $l = 1$, mai există modurile $l = -1$ și $l = 0$ excitate nerezonant, așa cum putem observa în inset-ul Figurii 3.3(b), ale căror efecte au fost deja discutate în analiza eficienței de împrăștiere. În continuare, ne îndreptăm atenția asupra regiunii interioare dot-ului. În acest caz, graficul densității nu este deloc concludent în ceea ce privește evidențierea efectelor de captură. În schimb, în Figura 3.4(d), constatăm cum curentul începe să urmărească o traiectorie rotațională în interiorul dot-ului cuantic. Acest comportament sugerează faptul că o stare cvasilegată a fost generată și putem asocia acest efect excitării rezonante a modului $l = 1$, în timp ce difracția a fost deja pusă pe seama celorlalte moduri de împrăștiere nerezonante, $l = -1$ și $l = 0$.

Al treilea caz examinat este $B = 2.56$ T [vezi marker-ul 3 din Figura 3.3(b)]. Reamintim faptul că în acest regim, pe lângă excitarea nerezonantă a modurilor $l = -1$ și $l = 0$, întâlnim o împrăștiere rezonantă asociată modului $l = 2$ cu o curbă a eficienței de împrăștiere care prezintă un profil Lorentz mai îngust și mult mai puțin asimetric. Mai mult decât atât, peste curbele modurilor $l = -1$, $l = 0$ și $l = 2$ este suprapusă și cea a modului $l = 1$, ceea ce sugerează un efect complex, caracterizat atât prin difracție, cât și prin efecte de captură care, din ce vom vedea, sunt evident dominante. Într-adevăr, Figurile 3.4(e) și 3.4(f) confirmă aceste anticipări. Valorile densității sunt mai mari decât în primele două cazuri studiate și, mai mult decât atât, ceea ce este important e că acestea sunt localizate în interiorul dot-ului. De asemenea, curentul pune în evidență generarea unei stări cvasilegate prin traiectoria aproape închisă pe care o urmează. Pe lângă aceasta, în partea dreaptă a dot-ului nu mai observăm împrăștierea înainte, ceea ce semnifică reducerea tunelării Klein. Efectele de captură discutate mai sus sunt asociate modului $l = 2$.

În final, ultimul regim investigat este pentru $B = 3.8$ T [vezi marker-ul 4 din Figura 3.3(b)]. În acest caz, $l = 3$ este modul excitat rezonant, al cărei curbe corespunzătoare a eficienței de împrăștiere este suprapusă cu cele ale modurilor $l = -1$, $l = 0$ și $l = 1$ [vezi inset-ul Figurii 3.3(b)]. Profilul specific de tip Lorentz are de data aceasta cea mai îngustă lățime, iar forma acestuia este perfect simetrică. În acest regim de împrăștiere, efectele de captură sunt cele mai vizibile de până acum și difracția este practic complet suprimată. În Figura 3.4(g), observăm cvasilocalizarea electronului incident în interiorul dot-ului de grafenă. Graficul densității este cel specific unui proces de captură electronică, iar valorile acesteia sunt chiar cu un ordin de mărime mai mari decât în primele trei cazuri studiate. Figura 3.4(h) relevă curgerea curentului pe o traiectorie complet închisă, ceea ce este semnătura fundamentală a unei stări cvasilegate. De asemenea, în vecinătatea imediat apropiată dot-ului cuantic, este vizibil cum electronul incident părăsește zona interioară, însă valorile curentului sunt extrem de reduse.

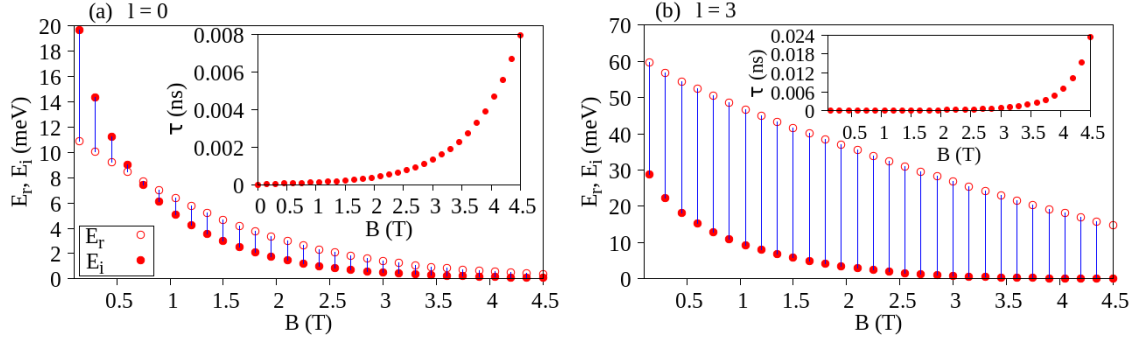


Figura 3.5: Valorile E_r (simbolurile goale) și, respectiv, E_i (simbolurile pline) ale energiei complexe $E = E_r - iE_i$, în funcție de B pentru: (a) $l = 0$ și (b) $l = 3$. În inset este prezentat timpul de captură pentru fiecare rezonanță identificată la un B dat.

Pe lângă analiza efectuată în termeni de eficiență de împrăștiere, densitate și curent, o caracterizare completă a efectelor de captură electronică trebuie să includă și o evaluare a timpilor de viață ai stărilor cvasilegate (timpii de captură).

Astfel, considerăm energii complexe de forma $E = E_r - iE_i$ cu $E_r, E_i > 0$, iar timpul de captură va fi dat de relația $\tau = \hbar/E_i$. Altfel, ținând cont de relația de dispersie liniară $E = v_F \hbar k$, numărul de undă va lua de asemenea valori complexe $k = k_r - ik_i$ și timpul de captură poate fi exprimat ca $\tau = 1/(v_F k_i)$. Pentru a determina valorile k complexe, vom rezolva numeric ecuația transcendentă

$$\frac{\phi_\kappa^A}{\phi_\kappa^B} = \frac{H_n(kr)}{H_{n+1}(kr)} \Big|_{r=R}, \quad (3.15)$$

pentru un mod de împrăștiere n dat. Fiecare soluție a ecuației (3.15) reprezintă o rezonanță de împrăștiere în spațiul energiei.

Având în vedere faptul că până acum am pus în evidență efecte aflate în opoziție pentru modurile $l = 0$ (difracție) și $l = 3$ (captură), aceste două moduri de împrăștiere vor fi examinate în continuare în termeni de timpi de captură. În Figura 3.5(a), prezentăm rezultate pentru $l = 0$, iar în Figura 3.5(b) pentru $l = 3$. Astfel, caracterizând aceste două scenarii cu efecte opuse, putem avea o imagine de ansamblu asupra sistemului studiat.

Ca efect global, observăm faptul că timpul de captură crește monoton odată cu creșterea intensității câmpului magnetic. În particular, pentru $l = 0$ creșterea timpului de captură devine vizibilă de la valori mai mici ale lui B , în comparație cu cazul $l = 3$. De altfel, în studiul procesului în termeni de eficiență de împrăștiere, am observat că modurile superioare sunt excitate rezonant la valori mai mari ale lui B , ceea ce este în acord cu rezultatele obținute pentru timpii de captură. O altă similitudine interesantă pe care dorim să o subliniem este rezonanța întâlnită pentru $l = 3$ la $B = 3.75$ și $E_r = 20.4473$ meV. Reamintim că o rezonanță a fost pusă în evidență pentru $E = 20$ meV la $B = 3.8$ pentru același mod de împrăștiere, vezi Figura 3.3(b).

Efectul luminii polarizate circular asupra stărilor cvasilegate induse în dot-uri cuantice de grafenă prin aplicarea unui câmp magnetic uniform

4.1 Modelul teoretic

4.1.1 Descrierea stărilor fermionilor Dirac de masă nulă în interacție cu un câmp magnetic uniform și lumină polarizată circular

În această secțiune, elaborăm un model teoretic uni-particulă care descrie stările electronice dintr-un dot cuantic de grafenă aflat simultan în câmp magnetic uniform și lumină polarizată circular. Considerăm un dot cuantic circular de rază R , plasat în planul orizontal xy , în timp ce câmpurile sunt aplicate în lungul axei z , perpendicular pe suprafața acestuia. Sistemul studiat este similar cu cel din Capitolul 3.1.1 (vezi Figura 3.1).

Stările particulelor pot fi descrise de soluții ale ecuației Dirac de masă nulă (ecuație Dirac–Weyl), în care câmpurile externe sunt introduse prin cuplaj minimal (similar cu modelul din Capitolul 3.1.1):

$$H(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r}, t); \quad (4.1)$$

$$H(\mathbf{r}, t) = -iv_F\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla - v_F e \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (4.2)$$

Primul termen din ecuația (4.2) descrie starea unui fermion Dirac liber (în absența câmpurilor), iar cel de al doilea introduce interacția cu câmpurile externe prin intermediul potențialului vector:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_M(\mathbf{r}) + \mathbf{A}_L(t). \quad (4.3)$$

În ecuația 4.3, $\mathbf{A}_M$ și $\mathbf{A}_L$ reprezintă potențialele vector asociate câmpului magnetic și, respectiv, luminii. Folosind etalonarea simetrică pentru câmpul magnetic și reprezentarea de tip undă plană pentru lumină [34], definim:

$$\mathbf{A}_M(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_M(r) = \frac{Br}{2}\mathbf{e}_\varphi; \quad (4.4a)$$

$$\mathbf{A}_L(t) = A_0 [\cos(\omega t)\mathbf{e}_x + \Lambda \sin(\omega t)\mathbf{e}_y]. \quad (4.4b)$$

În ecuația (4.4a), constanta B reprezintă intensitatea câmpului magnetic, unde $\mathbf{e}_\varphi$ este vectorul unitar în lungul direcției azimutale. În ecuația (4.4b), A_0 reprezintă o amplitudine constantă, ω este frecvența unghiulară a luminii, $\Lambda = \pm 1$ exprimă starea de polarizare a luminii (helicitatea) și $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$ sunt vectorii unitari în lungul axelor x , respectiv, y . Menționăm faptul că în cele ce urmează, vom păstra forma potențialului vector al luminii în reprezentarea Carteziană, pentru a diminua complexitatea calculelor.

Având în vedere faptul că prezența potențialului vector $\mathbf{A}_L(t)$ introduce în problema studiată o periodicitate temporală cu perioadă $T = 2\pi/\omega$, vom apela la teorema Floquet care garantează existența unor soluții particulare asociate cu un Hamiltonian periodic în timp cu perioada T [$H(\mathbf{r}, t) = H(\mathbf{r}, t + T)$], cu următoarea structură [35, 36, 37, 38, 39]:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iWt/\hbar} \phi(\mathbf{r}, t). \quad (4.5)$$

Cantitatea W este denumită *cvasienergie*.

În limita energiilor mici ale particulelor, problema se reduce la următoarea ecuație de evoluție efectivă, cvasistaționară:

$$[H_{\text{eff}}(\mathbf{r}) - W] \phi(\mathbf{r}) = 0; \quad (4.6)$$

$$H_F^{\text{eff}}(\mathbf{r}) = H_0(\mathbf{r}) + \frac{1}{\hbar\omega} [H_{-1}, H_1], \quad (4.7)$$

unde $\phi(\mathbf{r})$ este funcția spinorială necunoscută pe care o vom determina în cele ce urmează.

În continuare, introducem notațiile:

$$\kappa = \frac{W}{v_F \hbar}; \quad (4.8a)$$

$$\lambda_M = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}; \quad (4.8b)$$

$$\lambda_L = \left(\frac{v_F e^2 A_0^2}{\hbar^2 \omega} \right)^{-1}. \quad (4.8c)$$

Ținând cont de simetria azimutală a sistemului, spinorul necunoscut este scris în următoarea formă:

$$\phi(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \chi_A(r) e^{il\varphi} \\ i\chi_B(r) e^{i(l+1)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

cu funcțiile radiale:

$$\chi_A(r) = r^l e^{-r^2/(4\lambda_M^2)} L\left(\frac{\lambda_M^2}{2\lambda_L^2}(\lambda_L^2 k^2 - 1), l, \frac{r^2}{2\lambda_M^2}\right); \quad (4.10a)$$

$$\chi_B(r) = \frac{\lambda_L}{\lambda_M^2(\alpha k \lambda_L - \Lambda)} r^{l+1} e^{-r^2/(4\lambda_M^2)} L\left(\frac{\lambda_M^2}{2\lambda_L^2}(\lambda_L^2 k^2 - 1) - 1, l + 1, \frac{r^2}{2\lambda_M^2}\right). \quad (4.10b)$$

4.1.2 Împrăștierea electronilor pe dot-uri cuantice de grafenă în prezența unui câmp magnetic uniform și a luminii polarizate circular

În această secțiune, abordăm problema împrăștierei unui electron pe un dot cuantic de grafenă, în prezența unui câmp magnetic perpendicular și uniform și a luminii polarizate circular. Procesul investigat este similar cu cel descris în Capitolul 3.1.2, singura diferență constând în aplicarea luminii, pe lângă câmpul magnetic.

Astfel, funcția de undă incidentă și cea reflectată vor avea aceleași expresii ca în Capitolul 3.1.2, iar funcția de undă transmisă va fi formulată astfel:

$$\psi_t(r, \varphi) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_l^t \begin{pmatrix} \chi_A(r) e^{il\varphi} \\ i\chi_B(r) e^{i(l+1)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

unde $\chi_A(r)$ și $\chi_B(r)$ sunt cele două funcții introduse în secțiunea precedentă, respectiv (4.10a) și (4.10b).

Impunând condiția de continuitate a funcțiilor de undă pe frontiera extensiei spațiale a dot-ului cuantic

$$\psi_i(R, \varphi) + \psi_r(R, \varphi) = \psi_t(R, \varphi), \quad (4.12)$$

obținem coeficienții de transmisie (c_l^t) și, respectiv, de reflexie (c_l^r):

$$c_l^t = \frac{\sqrt{2} e^{i\frac{(l+1)\pi}{2}}}{\pi k R [H_l(kR) \chi_B(R) - H_{l+1}(kR) \chi_A(R)]}; \quad (4.13)$$

$$c_l^r = \frac{J_l(kR) \chi_B(R) - J_{l+1}(kR) \chi_A(R)}{H_{l+1}(kR) \chi_A(R) - H_l(kR) \chi_B(R)}. \quad (4.14)$$

Densitatea de probabilitate de localizare și curentul de densitate sunt definite ca $\rho = \psi^\dagger \psi$ și, respectiv, $\mathbf{j} = \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi$, unde

$$\psi = \begin{cases} \psi_i(r, \varphi) + \psi_r(r, \varphi) & \text{pentru regiunea exterioară;} \\ \psi_t(r, \varphi) & \text{pentru regiunea interioară.} \end{cases} \quad (4.15)$$

În final, introducem eficiența de împrăștiere:

$$Q = \frac{4}{qR} \sum_{l=-\infty}^{\infty} |c_l^r|^2. \quad (4.16)$$

4.2 Rezultate numerice și interpretare

În această secțiune, prezentăm principalele rezultate numerice privind analiza de împrăștiere a unui electron pe un dot cuantic de grafenă, în prezența câmpului magnetic și a luminii polarizate circular. Având în vedere faptul că efectele câmpului magnetic deja au fost puse în evidență în Capitolul 3, în cadrul acestui capitol,

urmărim felul în care aplicarea unui câmp electromagnetic monocromatic suplimentar afectează generarea stărilor cvasilegate. Cu alte cuvinte, investigăm posibilitatea de a excita rezonanțe de împrăștiere prin aplicarea luminii polarizate circular, în prezența unui câmp magnetic de fond cu intensitate constantă.

Mai departe, întreaga investigație va fi dedicată regimului nerezonant specificat mai sus ($R = 70$ nm, $B = 2.2$ T și $E = 20$ meV), însă de data aceasta pe lângă câmpul magnetic vom considera și iradierea cu lumină polarizată circular de frecvență unghiulară $\omega = 5 \times 10^{14}$ s⁻¹. Ca și în cazul precedent, vom începe prin analiza eficienței de împrăștiere, însă de data aceasta în raport cu B și intensitatea luminii aplicate $I_L = \epsilon_0 \omega^2 A_0^2$, cu $\epsilon_0 \approx 8.854 \times 10^{-12}$ F/m permitivitatea vidului. Având în vedere faptul că lumina polarizată circular se poate afla în două stări distincte de helicitate și anume pozitivă ($\Lambda = +1$) sau negativă ($\Lambda = -1$), vom exploata de la bun început această proprietate. Rezultatele sunt prezentate în Figura 4.1, graficele (a) și, respectiv, (b). Așa cum reiese din figurile corespunzătoare, iradierea cu lumina aflată în starea de helicitate pozitivă nu influențează semnificativ comportamentul eficienței de împrăștiere, așadar din punct de vedere fizic această configurație nu prezintă interes. Pe de altă parte, situația în care lumina aplicată se află într-o stare de helicitate negativă, eficiența de împrăștiere este drastic modificată de variația intensității luminii. După cum se observă, în spațiul $B - I_L$, rezonanțele se curbează către dreapta, suprapunându-se la o valoare $I_L \approx 1.4$ W/cm² pentru intensități mari ale câmpului magnetic. Astfel, în zona în care încă suprapunerea nu a avut loc, ținând fixată o valoare a lui B , poate fi stabilit ce mod de împrăștiere este excitat rezonant prin ajustarea intensității luminii. Reamintim faptul că în lipsa luminii, fiecare mod de împrăștiere este excitat la o anumită valoare specifică (diferită) a lui B . În Figura 4.1(c), prezentăm graficul eficienței de împrăștiere în funcție de I_L , pentru $B = 2.2$ T și $\Lambda = -1$ [în lungul liniei discontinue albe din graficul (b)]. În celelalte două grafice, (d) și (e), sunt figurate individual curbele eficienței de împrăștiere pentru modurile $l = 2, 3, 4$ și, respectiv, $l = 0, 1$. Din aceste figuri, remarcăm faptul că pe măsură ce intensitatea luminii crește, modurile de împrăștiere sunt excitate rezonant în ordine descrescătoare de la $l = 4$ la $l = 0$. Pe lângă $l = 4$ (curba roșie) și $l = 3$ (curba maro), care au aceleași profiluri Lorentz și în absența luminii, iradierea cu lumină în starea de helicitate negativă pare să modifice radical fenomenul de captură electronică. Remarcăm faptul că modul $l = 0$ este caracterizat de o rezonanță cu un peak foarte îngust, ceea ce indică faptul că aplicarea luminii poate fi o metodă foarte bună pentru a spori proprietățile de captură electronică a dot-urilor cuantice de grafenă.

În continuare, vom analiza în termeni de densitate și curent regimurile de împrăștiere indicate de la 1 la 4 în Figura 4.1(c). Primul caz pe care îl discutăm este pentru $I_L = 0.7$ W/cm², în mod evident nerezonant [marker-ul 2 din Figura 4.1(c)]. În graficul densității [Figura 4.2(a)], observăm efecte de difracție în exteriorul dot-ului și valori foarte reduse în interior, ceea ce confirmă evenimentul de împrăștiere nerezonantă. Cel de al doilea regim este pentru $I_L = 1.346$ W/cm², caz în care modul $l = 2$ este excitat rezonant [vezi marker-ul 3 din Figura 4.1(c)]. În Figura 4.2(b), remarcăm valori mari ale densității, localizate în interiorul dot-ului cuantic, ceea ce este în acord cu graficul eficienței de împrăștiere. Cu toate acestea, în exteriorul dot-ului se formează franje de difracție, însă cu valori ale densității nesemnificative,

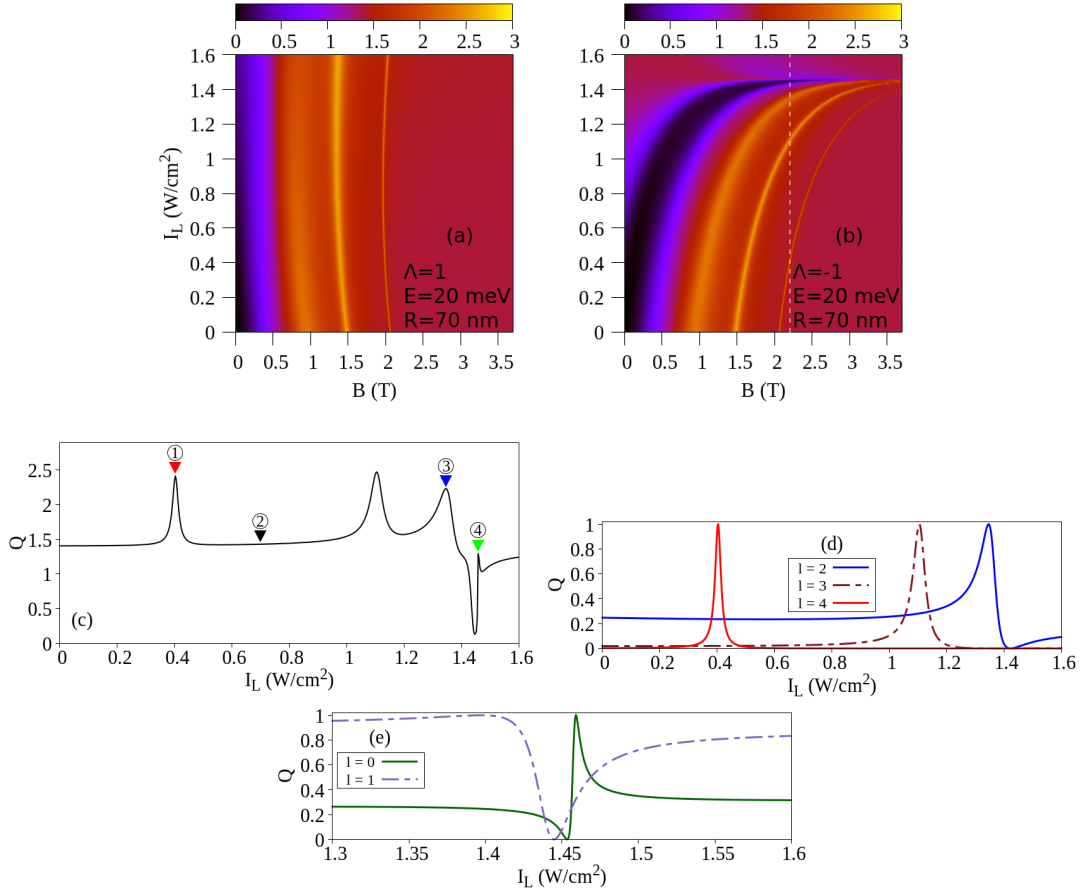


Figura 4.1: *Eficiența de împrăștiere în configurația iradierii cu lumină polarizată circular. (a) și (b) prezintă graficul eficienței de împrăștiere la $R = 70$ nm și $E = 20$ meV fixate, în funcție de B și I_L , pentru $\Lambda = +1$ și, respectiv, $\Lambda = -1$. (c) figurează graficul eficienței de împrăștiere în funcție de I_L , la $B = 2.2$ T fixat [în lungul liniei discontinue albe din (b)]. (d) și (e) reprezintă individual eficiența de împrăștiere pentru fiecare mod de împrăștiere, așa cum este indicat în fiecare figură.*

cea ce indică faptul că într-adevăr regimul în discuție poate fi considerat rezonant. Al treilea caz este $I_L = 0.403$ W/cm², corespunzător excitării rezonante a modului $l = 4$ [marker-ul 1 din Figura 4.1(b)]. De data aceasta, densitatea prezintă o imagine care indică efecte de captură mai puternice decât în regimul precedent. Pe lângă aceasta, profilul densității din interiorul dot-ului este specific unei stări cvasilegate, de moment cinetic orbital $l > 0$. De asemenea, asimetria graficului se datorează existenței unei împrăștieri nerezonante a modului $l = 2$. În termeni de eficiență de împrăștiere, această coexistență a celor două regimuri este transpusă în suprapunerea peak-ului asociat modului $l = 4$ cu coada profilului aferent modului $l = 2$, așa cum indică graficul din Figura 4.1(d). Ultimul caz discutat este cel al peak-ului centrat pe $I_L = 1.459$ E/cm² [vezi marker-ul 4 din Figura 4.1(c)]. În acest regim, este excitat rezonant modul $l = 0$ și prezintă cea mai îngustă lărgime, vezi curba verde din Figura 4.1(e). În Figura 4.2(d), observăm un profil al densității specific unei stări cvasilegate, de moment cinetic orbital $l = 0$ și, pe deasupra, valorile densității sunt cele mai ridicate în comparație cu primele trei cazuri investigate. În mod general, excitarea modurilor $l = 0$ este caracterizată de cele mai slabe efecte

de captură. În schimb, în configurația pe care o analizăm, performanțele remarcabile de captură asociate modului $l = 0$ sunt generate de aplicarea luminii polarizate circular aflată în starea de helicitate negativă.

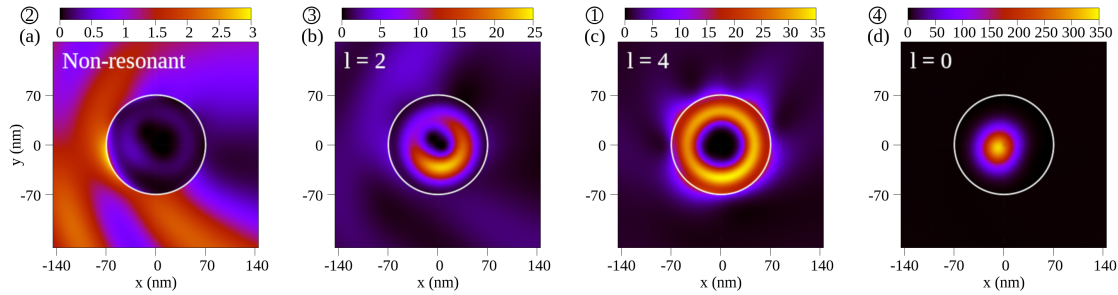


Figura 4.2: Densitatea de probabilitate de localizare pentru regimurile indicate de la 1 la 4 în Figura 4.1(c): (a) $I_L = 0.7 \text{ W/cm}^2$ [marker-ul negru 2], (b) $I_L = 1.346 \text{ W/cm}^2$ [marker-ul albastru 3], (c) $I_L = 0.403 \text{ W/cm}^2$ [marker-ul roșu 1] și (d) $I_L = 1.459 \text{ W/cm}^2$ [marker-ul verde 4].

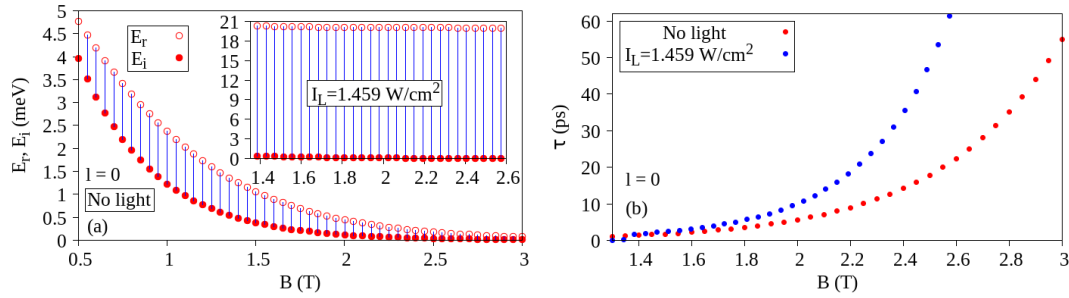


Figura 4.3: Analiza de împrăștiere în funcție de E_r , E_i și timpul de captură τ . (a) prezintă setul de valori (E_r, E_i) pentru fiecare rezonanță a modului $l = 0$, identificată la o valoare dată a lui B , în configurația fără lumină. În inset, sunt figurate aceleași rezultate pentru configurația în care sistemul este iradiat cu lumină polarizată circular, în starea de helicitate negativă, cu intensitatea $I_L = 1.459 \text{ W/cm}^2$. (b) prezintă timpul de captură calculat pentru fiecare dintre rezonanțele specificate în (a), pentru ambele configurații discutate.

În final, vom face o analiză a timpilor de captură. În Figura 4.3(a), sunt prezentate seturile (E_r, E_i) pentru fiecare rezonanță identificată la un B dat și $l = 0$, pentru configurația fără lumină aplicată. În inset, sunt prezentate aceleași rezultate, însă în prezența luminii cu o intensitate $I_L = 1.459 \text{ W/cm}^2$ [vezi marker-ul 4 din Figura 4.1(c)]. În ceea ce privește energiile de rezonanță, comportamentul sistemului este foarte diferit în funcție de configurația în care are loc împrăștierea. În absența luminii, energia electronului incident trebuie stabilită în mod corespunzător pentru fiecare valoare B a intensității câmpului magnetic, astfel încât o rezonanță de împrăștiere să fie excitată. Pe de altă parte, în configurația în care iradierea este aplicată, energia rezonantă este $E_r \approx 20 \text{ meV}$, indiferent de valoarea intensității câmpului magnetic. De asemenea, atât din graficul (a), cât și din (b) unde este reprezentat timpul de captură pentru fiecare rezonanță excitată la un B dat, deducem faptul că timpul de viață al stărilor cvasilegate crește monoton cu valoarea lui B . De asemenea, acest efect a fost deja discutat în Capitolul 3. În schimb, în

cazul configurației iradierii cu lumină polarizată circular, în starea de helicitate negativă, timpii de captură sunt semnificativ mai crescuți, mai ales în cazul unor intensități mai mari ale câmpului magnetic.

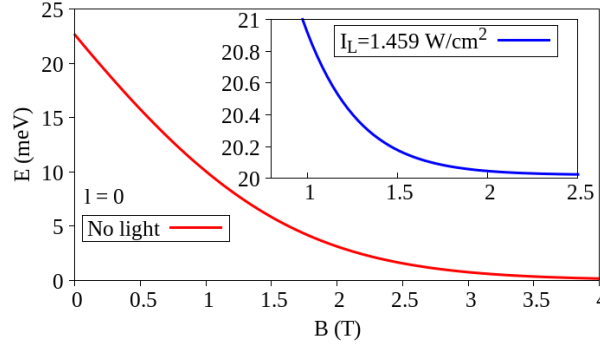


Figura 4.4: Nivelul Landau $l = 0$ în absența luminii (curba roșie) și în prezența luminii polarizate circular în starea de helicitate negativă cu intensitatea $I_L = 1.459 \text{ W/cm}^2$, în inset (curba albastră).

Încheiem investigația efectelor produse de lumina polarizată circular asupra stărilor cvasilegate cu o scurtă discuție. După cum este bine-cunoscut, un câmp magnetic uniform cuantifică spectrul energetic continuu din conurile Dirac în așa-zise *niveluri Landau*. În Figura 4.4, este reprezentat nivelul Landau $l = 0$ pentru configurația fără lumină aplicată (curba roșie) și, respectiv, pentru configurația iradierii cu lumină polarizată circular, în starea de helicitate negativă, cu intensitatea $I_L = 1.459 \text{ W/cm}^2$ în inset (curba albastră). În cazul în care lumina nu este aplicată, nivelul energetic variază considerabil cu valoarea intensității câmpului magnetic și pare să atingă un platou de valoare zero pentru valori $B > 4 \text{ T}$. Pe de altă parte, când iradierea este prezentă, nivelul energetic se modifică foarte lent și, mai mult decât atât, pentru valori $B > 1.5 \text{ T}$, acesta este practic constant cu valoarea $E \approx 20 \text{ meV}$. Revenind la Figura 4.3(a), am menționat faptul că în cazul iradierii, rezonanțele de împrăștiere sunt excitate la aceeași energie $E_r \approx 20 \text{ meV}$, indiferent de valoarea lui B . Atragem atenția aici asupra unei coincidențe interesante dintre valoarea la care se stabilizează nivelul Landau și valoarea constantă a energiilor de rezonanță. Altfel spus, stabilizarea nivelului Landau impune excitarea rezonanțelor de împrăștiere la o energie specifică platoului, în timp ce doar timpii de viață ai stărilor cvasilegate se modifică în raport cu B . Am arătat în Figura 4.4 faptul că iradierea grăbește stabilizarea nivelului Landau și, de fapt, acesta este mecanismul prin care aplicarea luminii controlează generarea stărilor cvasilegate și timpul de viață al acestora.

Generarea de stări electronice cvasilegate în dot-uri cuantice de grafenă prin iradiere cu lumină elicoidală

5.1 Modelul teoretic

5.1.1 Descrierea stărilor fermionilor Dirac de masă nulă în interacție cu lumină elicoidală

În această secțiune, introducem un model care descrie interacția unui dot cuantic de grafenă cu lumină elicoidală. Așa cum am procedat în capitolele anterioare, ne vom limita și în această situație la modelul continuu al grafenei, care este valid doar în cazurile excitațiilor slabe în jurul punctelor Dirac, unde dispersia energiei este liniară și particulele încărcate pot fi modelate în cadrul formalismului mecanicii cuantice relativiste. Vom considera dot-ul cuantic de rază R plasat în planul orizontal xy , în timp ce câmpul electromagnetic se propagă în lungul axei z , perpendicular pe dot.

Astfel, stările fermionilor Dirac de masă nulă, în interacție cu lumina elicoidală vor fi descrise de soluții ale ecuației Dirac 2D:

$$H(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r}, t); \quad (5.1)$$

$$H(\mathbf{r}, t) = H_0(\mathbf{r}, t) - ev_F\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{A}(\mathbf{r}, t). \quad (5.2)$$

Și de această dată, adoptăm un sistem de coordonate polar cu originea aleasă în centrul dot-ului cuantic, unde poziția este indicată prin vectorul $\mathbf{r} = (r, \varphi)$. În expresia Hamiltonianului 5.2, $\mathcal{A}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}\{\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\}$ reprezintă potențialul vector pe care îl vom introduce în cele ce urmează. Restul definițiilor sunt aceleași ca în Capitolele 3 și 4.

În ceea ce privește potențialul vector al luminii elicoidale, există mai multe definiții adoptate în literatură, iar în abordarea de față vom alege reprezentarea de tip Bessel [25, 26, 27, 28]:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0 \left(J_m(qr)e^{im\varphi}\boldsymbol{\epsilon}_\Lambda - \Lambda i \frac{q}{k_z} J_{m+\Lambda}(qr)e^{i(m+\Lambda)\varphi}\hat{\mathbf{z}} \right) e^{i(k_z z - \omega t)}. \quad (5.3)$$

În relația de mai sus, A_0 reprezintă o amplitudine reală și constantă, m sarcina topologică, ω frecvența unghiulară și $\boldsymbol{\epsilon}_\Lambda = \hat{\mathbf{x}} + \Lambda i\hat{\mathbf{y}}$ vectorul de polarizare în planul

xy , unde $\Lambda = \pm 1$ este numărul cuantic de helicitate, iar $\hat{x}$ și $\hat{y}$ sunt vectorii unitari în lungul axelor x și, respectiv, y . De asemenea, $J_m(x)$ este funcția Bessel de speța I, de ordin m .

$$\phi(r, \varphi) \approx \phi_0(r, \varphi) + \lambda^{-1} \zeta(r, \varphi). \quad (5.4)$$

În relația de mai sus, am introdus spinorul Dirac liber [40]

$$\phi_0(r, \varphi) = \begin{pmatrix} J_l(\kappa r) e^{il\varphi} \\ \alpha i J_{l+1}(\kappa r) e^{i(l+1)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

care satisface evident ecuației Dirac libere de masă nulă $(-i\sigma \cdot \nabla - \alpha|\kappa|) \phi_0(r, \varphi) = 0$, unde α este indexul de bandă cu valorile $\alpha = +1$ pentru banda de conducție (stări de energie pozitivă) și, respectiv, $\alpha = -1$ pentru banda de valență (stări de energie negativă). În continuare, ne propunem să găsim expresia spinorului de corecție $\zeta(r, \varphi) = (\zeta_A, \zeta_B)^T$.

În final obținem următoarele expresii:

$$\chi_A(r) = \frac{\Lambda \sqrt{\pi} r (\kappa r) (qr)^{2m}}{2^{2(m+1)} (m!)^2} \left[\alpha G_{2,4}^{2,1} \left(\kappa^2 r^2 \left| \begin{matrix} -m, \frac{1}{2} \\ 0, l, -l, -m-1 \end{matrix} \right. \right) - G_{2,4}^{2,1} \left(\kappa^2 r^2 \left| \begin{matrix} -m, \frac{1}{2} \\ 0, l+1, -l-1, -m-1 \end{matrix} \right. \right) \right]; \quad (5.6)$$

$$\chi_B(r) = \frac{\Lambda \pi r (qr)^{2m} (\kappa r)^{2l+1}}{2^{2(l+m+2)} (m!)^2} \left[\alpha \frac{{}_4F_3 \left(-\kappa^2 r^2 \left| \begin{matrix} l+m+1, l+\frac{1}{2} \\ l+m+2, l+1, 2l+1 \end{matrix} \right. \right)}{(l+m+1)(l!)^2} - \frac{(\kappa r)^2 {}_2F_3 \left(-\kappa^2 r^2 \left| \begin{matrix} l+m+2, l+\frac{3}{2} \\ l+m+3, l+2, 2l+3 \end{matrix} \right. \right)}{(l+m+2)[(l+1)!]^2} \right]. \quad (5.7)$$

5.1.2 Împrăștierea electronilor pe dot-uri cuantice de grafenă în prezența luminii elicoidale

În această secțiune, studiem împrăștierea unui electron pe un dot cuantic de grafenă în prezența luminii elicoidale. În principal, procesul pe care îl discutăm este similar cu cele din Capitolele 3.1.2 și 4.1.2. Electronul transmis este descris de funcția de undă spinorială

$$\psi_\kappa^t(r, \varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n^t \begin{pmatrix} \phi_\kappa^A e^{in\varphi} \\ \alpha i \phi_\kappa^B e^{i(n+1)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (5.8)$$

aşa cum am demonstrat în Capitolul 5.1.1., unde κ este numărul de undă asociat, în regiunea interioară a dot-ului.

Expresiile coeficienților de transmisie (c_n^t), respectiv reflexie (c_n^r):

$$c_n^t = \frac{\sqrt{2}e^{i\frac{(n+1)\pi}{2}}}{\pi k r [H_n(kr)\phi_\kappa^B(r) - H_{n+1}(kr)\phi_\kappa^A(r)]}; \quad (5.9)$$

$$c_n^r = \frac{J_n(kr)\phi_\kappa^B(r) - J_{n+1}(kr)\phi_\kappa^A(r)}{H_{n+1}(kr)\phi_\kappa^A(r) - H_n(kr)\phi_\kappa^B(r)}. \quad (5.10)$$

Aşa cum am menționat și în Capitolele 3 și 4, densitatea de probabilitate de localizare și curentul de densitate sunt definite ca $\rho = \psi^\dagger \psi$ și, respectiv, $\mathbf{j} = \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi$, unde

$$\psi = \begin{cases} \psi_i(r, \varphi) + \psi_r(r, \varphi) & \text{pentru regiunea exterioară;} \\ \psi_t(r, \varphi) & \text{pentru regiunea interioară.} \end{cases} \quad (5.11)$$

Totuși, spre deosebire de studiile anterioare, în cazul prezent vom defini diferit modurile de împrăștiere, așa cum este specificat în relațiile de mai jos:

$$\psi_\kappa^t(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} i^n c_n^t \left[\phi_\kappa^A \left(\frac{e^{in\varphi}}{e^{-in\varphi}} \right) + \alpha i \phi_\kappa^B \left(\frac{e^{-i(n+1)\varphi}}{e^{i(n+1)\varphi}} \right) \right]; \quad (5.12)$$

$$\psi_\kappa^r(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} i^n c_n^r \left[H_n(kr) \left(\frac{e^{in\varphi}}{e^{-in\varphi}} \right) + i H_{n+1}(kr) \left(\frac{e^{-i(n+1)\varphi}}{e^{i(n+1)\varphi}} \right) \right]. \quad (5.13)$$

În final, introducem și eficiența de împrăștiere:

$$Q = \frac{4}{kR} \sum_{n=0}^{\infty} |c_n^r|^2. \quad (5.14)$$

Observăm că de data aceasta, eficiența de împrăștiere este definită ca o sumă peste moduri de împrăștiere indexate începând cu $n = 0$, spre deosebire de definițiile din Capitolele 3 și 4. În acest fel, un mod de împrăștiere n cuplează stări de moment cinetic orbital $l - 1$ și $-l$, cu $l = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, \infty$. Reamintim faptul că în capitolele anterioare, fiecare mod de împrăștiere era asociat unei singure stări de moment cinetic orbital bine definit.

5.2 Rezultate numerice și interpretare

În această secțiune, prezentăm principalele rezultate numerice bazate pe teoria introdusă în Capitolul 5.1, respectând limitările discutate. Aşa cum am procedat și până acum, analiza de împrăștiere va fi efectuată în termeni de eficiență de împrăștiere (Q), densitate (ρ), curent ($\mathbf{j}$) și timp de captură (τ). Pe parcursul întregului studiu, ne vom limita la cazul $\omega = 10^{14}\text{s}^{-1}$, $m = 1$ și $\theta_k = 30^\circ$.

Pentru început, vom descrie configurația sistemului. Studiem împrăștierea unui electron în prezența luminii elicoidale, pe un dot cuantic de grafenă asupra căruia

este aplicat un potențial electrostatic $V > 0$. Începem prin a analiza eficiența de împrăștiere. Având în vedere faptul că lumina elicoidală este un tip de câmp electromagnetic structurat spațial, vom fi nevoiți să introducem *puterea totală mediată pe o perioadă de oscilație* $T = 2\pi/\omega$, pe care dot-ul cuantic o primește de la lumină, ca funcție de intensitatea A_0 a potențialului vector:

$$P_{GQD}(\text{mW}) = \beta A_0^2 (\mu\text{Vsm}^{-1}), \quad (5.15)$$

unde β este un factor care depinde de raza dot-ului cuantic R , când sunt fixate valorile ω , m și θ_k . În Figurile 5.1(a) și 5.1(b), este prezentată eficiența de împrăștiere (5.14) în funcție de raza dot-ului cuantic R și intensitatea potențialului vector A_0 , pentru un electron incident cu energia $E = 0.5$ meV, unde graficul (a) corespunde cazurilor $\Lambda = 1$ (helicitate pozitivă) și, respectiv, (b) $\Lambda = -1$ (helicitate negativă). Eficiența de împrăștiere reprezintă o măsură a intensității interacției dintre electronul incident și dot-ul cuantic, așadar observăm faptul că indiferent de starea de polarizare, iradierea cu lumină elicoidală influențează procesul de împrăștiere în mod definitoriu. Astfel, în ambele cazuri, la valori sub $A_0 \approx 1\mu\text{Vs/m}$, interacția este practic absentă. Pe măsură ce valorile A_0 cresc, efectul este guvernat de starea de helicitate a luminii în moduri fundamentale diferite, așa cum vom explica în cele ce urmează. În calculul prezentat, au fost considerate doar modurile relevante $n = 0$ și $n = 1$. În cazul $\Lambda = 1$, pe lângă faptul că valorile sunt de până la patru ori mai reduse, la valori constante ale razei, eficiența de împrăștiere are o creștere monotonă cu A_0 , ceea ce denotă efecte de împrăștiere nerezonantă. În schimb, pentru $\Lambda = -1$ excitarea rezonantă a modurilor de împrăștiere devine evidentă. În funcție de raza dot-ului cuantic, pe lângă modul $n = 0$, poate participa și $n = 1$, așa cum este indicat de către cele două linii discontinue albe. În Figura 5.1(c), este reprezentată eficiența de împrăștiere în funcție de P_{GQD} definită în relația (5.15), pentru cazurile $R = 220$ nm (curba roșie, $\beta = 0.68$) și, respectiv, $R = 280$ nm (curba albastră, $\beta = 1.8$) [în lungul celor două linii discontinue albe din graficul (b)]. Pentru fiecare curbă, valoarea P_{GQD} corespunzătoare este indicată prin săgeata de culoare specifică. În cazul $R = 220$ nm, doar modul $n = 0$ este excitat rezonant (vezi marker-ul 2), cu un profil al peak-ului foarte asimetric, cu valoarea maximă la $P_{GQD} = 4.95$ mW. Ca și în capitolele precedente, asimetria profilului curbei de rezonanță de împrăștiere este datorată rezonanțelor Fano. În schimb, în cazul $R = 280$ nm, pe lângă $n = 0$, intervine de asemenea și modul $n = 1$, cu maximul la $P_{GQD} = 32.36$ mW (vezi marker-ul 3). O analiză mai detaliată a curbei despre care discutăm, pentru fiecare mod de împrăștiere component este prezentată în Figura 5.1(d). După cum indică graficul respectiv, responsabil pentru rezonanțele Fano, este modul $n = 0$ (curba verde), caz în care nu ne așteptăm la efecte de captură notabile. În schimb, modul $n = 1$ (curba bleu) are un profil Lorentz cu o asimetrie aproape insesizabilă, așadar în acest regim de împrăștiere vom pune în evidență efecte de captură puternice.

Analizând Figura 5.1, concluzionăm faptul că împrăștierea unui electron pe un dot cuantic de grafenă în prezența luminii elicoidale este rezonantă doar în cazul helicității negative ($\Lambda = -1$), așadar în continuare vom studia doar acest regim în termeni de densitate și curent. Rezultatele sunt prezentate în Figura 5.2, unde fiecare coloană este dedicată unuia dintre regimurile indicate de la 1 la 3 în Figura 5.1(c). Localizarea spațială a dot-ului cuantic este marcată prin cercul alb în cazul densității și, respectiv, albastru pentru curent.

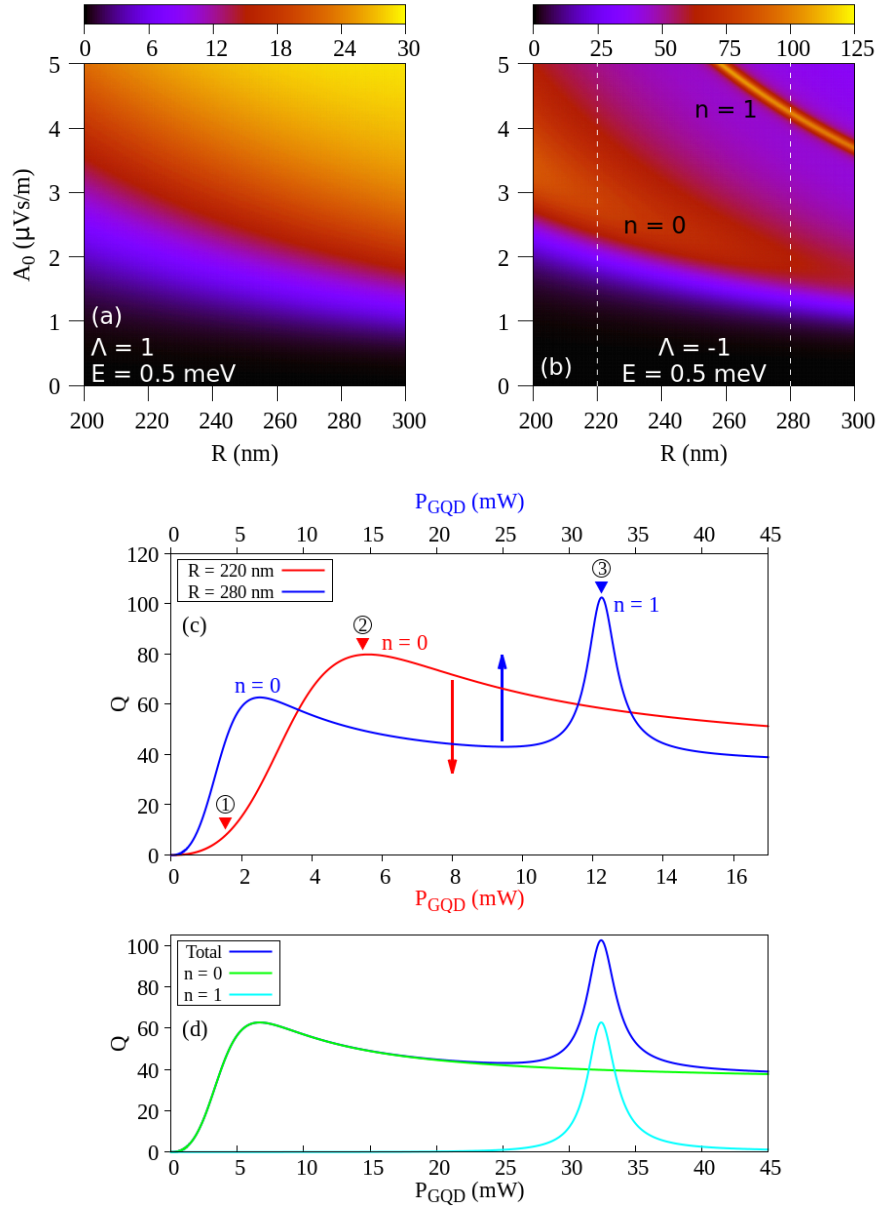


Figura 5.1: Eficiența de împrăștiere (5.14) pentru modurile $n = 0$ și $n = 1$, în cazul unui electron incident cu energia $E = 0.5$ meV. Eficiența de împrăștiere în funcție de R și A_0 pentru (a) $\Lambda = 1$ (helicitate pozitivă) și, respectiv, (b) $\Lambda = -1$ (helicitate negativă). (c) Eficiența de împrăștiere în funcție de P_{GQD} , pentru $R = 220$ nm (curba roșie) și, respectiv, $R = 280$ nm (curba albastră), în cazul $\Lambda = -1$ [în lungul liniilor verticale discontinue albe din (b)]. Valorile P_{GQD} se citesc pe axa inferioară pentru $R = 220$ nm și, respectiv, pe cea superioară pentru $R = 280$ nm, așa cum indică săgețile de culori specifice. (d) Eficiența de împrăștiere pentru fiecare mod component al curbei albastre din (c): $n = 0$ (curba verde), respectiv, $n = 1$ (curba bleu).

Primul caz analizat este pentru $R = 220$ nm și $P_{GQD} = 1.53$ mW [vezi markerul 1 din Figura 5.1(c)]. În acest regim, așa cum putem observa în Figura 5.2(a), densitatea are valori puțin mai mari în regiunea interioară a dot-ului decât în exterior, iar difracția este absentă. La prima vedere am fi tentați să considerăm că discutăm despre o rezonanță de împrăștiere, însă curentul [graficul (b)] dovedește

contrariul. După cum este bine-cunoscut, o stare cvasilegată este caracterizată de vortexuri de curent care țin capturat electronul în interiorul dot-ului cuantic, dar în regimul studiat observăm cum electronul incident traversează pur și simplu dot-ul cuantic. Într-adevăr, la extremitățile dot-ului, pe direcția axei $y = 0$, putem observa mici abateri de la traiectoria rectilinie a curentului, însă efectele nu sunt suficient de puternice încât să genereze o stare cvasilegată. De asemenea, efectul ar fi putut fi anticipat ținând cont de valoarea foarte redusă a intensității P_{GQD} și implicit a eficienței de împrăștiere, așa cum se poate vedea în Figura 5.1(c). Cel de al doilea caz analizat este pentru $R = 220$ nm și $P_{GQD} = 4.95$ mW [vezi marker-ul 2 din Figura 5.1(c)]. Reamintim că acești parametri corespund excitării rezonante a modului $n = 0$. În acest regim, în Figura 5.2(c), observăm valori maxime ale densității localizate în interiorul dot-ului cuantic, în vecinătatea extremității. Spre deosebire de cazul anterior, în situația actuală sunt generate două vortexuri de curent cu sensuri opuse în interiorul dot-ului, ceea ce confirmă existența unei stări cvasilegate, după cum se poate vedea în Figura 5.2(d). Cel de al treilea regim discutat este pentru $R = 280$ nm și $P_{GQD} = 32.36$ nW [vezi marker-ul 3 din Figura 5.1(c)]. Acești parametri corespund excitării rezonante a modului $n = 1$, unde după cum am menționat, așteptăm cele mai notabile efecte de captură. Ca și în cazul anterior, valorile maxime ale densității sunt înregistrate de asemenea în vecinătatea interioară a extremității dot-ului. În schimb, așa cum relevă Figura 5.2(e), în zona exterioară, densitatea este practic nulă. În ceea ce privește curentul, în graficul (f), remarcăm șase vortexuri cu sensuri alternante, care sunt responsabile de captura electronului în dot-ul cuantic de grafenă.

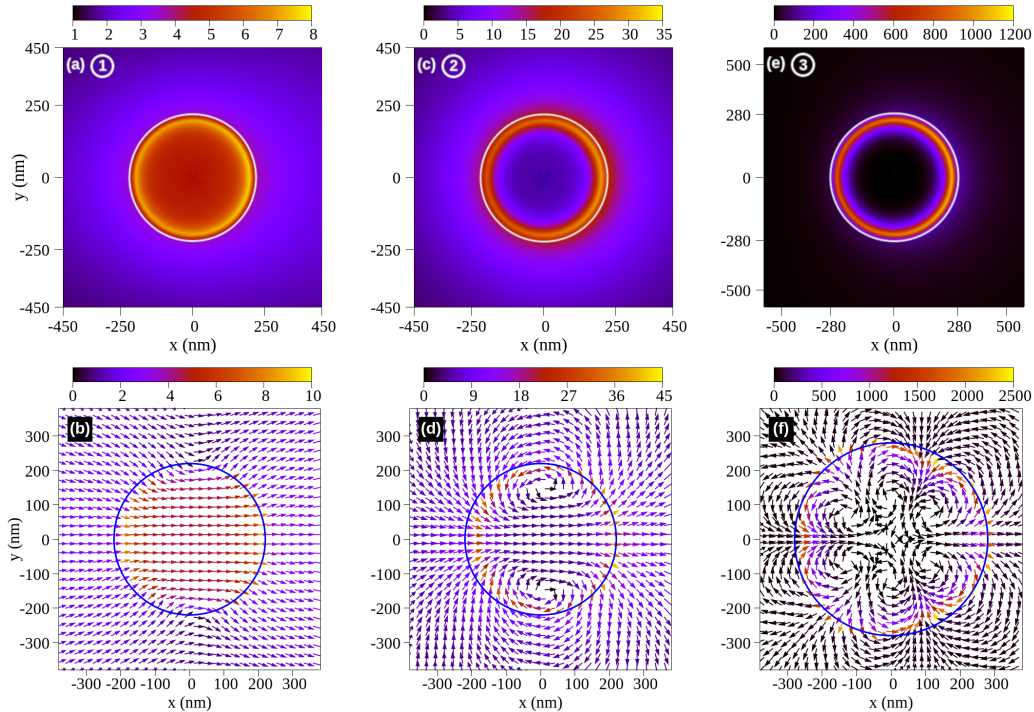


Figura 5.2: Densitatea de probabilitate de localizare (ρ) și curentul de densitate (j). În fiecare coloană, primul grafic reprezintă densitatea și, respectiv, cel de al doilea reprezintă curentul în raport cu coordonatele spațiale. Extensia spațială a dot-ului cuantic este marcată prin cerc alb în cazul densității, respectiv, albastru pentru curent.

Încheiem analiza efectelor de captură prin evaluarea timpilor de viață ai stărilor cvasilegate. În Figura 5.3, prezentăm seturile (E_r, E_i) în funcție de A_0 și P_{GQD} , pe baza soluțiilor numerice ale ecuației (3.15). Au fost studiate cazurile a două dot-uri cuantice cu aceleași raze ca și în cazul eficienței de împrăștiere, anume $R = 220$ nm și $R = 280$ nm. De asemenea, în inset-ul graficelor este reprezentat timpul de viață al fiecărei rezonanțe identificate. În primul caz ($R = 220$ nm), așa cum a rezultat din analiza eficienței de împrăștiere, este excitat rezonant modul $n = 0$. Ca observație generală, atragem atenția asupra creșterii monotone a timpului de captură cu $A_0(P_{GQD})$, ajungând la valori de până la $\tau = 20$ ps. Spre deosebire de

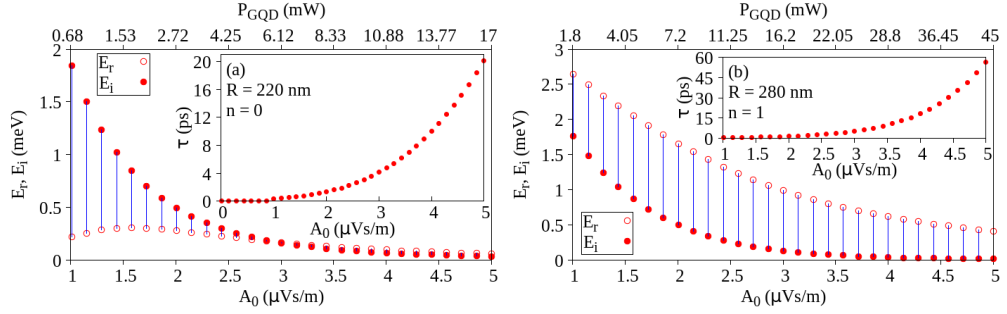


Figura 5.3: Valorile E_r și E_i ale energiei complexe $E = E_r - iE_i$ în cazul fiecărei rezonanțe identificate la un $A_0(P_{GQD})$ dat, pentru (a) $R = 220$ nm, $n = 0$ și (b) $R = 280$ nm, $n = 1$.

configurația prezentată în referințele [41, 42], unde timpii de captură sunt $\tau \sim 10^{-5}$ ns și $\tau \sim 10^{-4}$ ns, în situația în care lumina elicoidală este aplicată, performanțele de captură sunt evident îmbunătățite. În al doilea caz ($n = 1$), timpii de viață ai stărilor cvasilegate sunt chiar de până la trei ori mai mari. În ceea ce privește energiile de rezonanță, remarcăm faptul că efectele de captură iau naștere la energii diferite, specifice fiecărui mod de împrăștiere excitat. Pentru $n = 0$, plaja de energii de rezonanță este aproximativ de la 0.06 meV până la 0.3 meV, în timp ce pentru $n = 1$, energiile de rezonanță rezidă într-un interval puțin mai larg, de la 0.4 meV până la 2.6 meV. Cu toate acestea, analizând valorile corespunzătoare ale E_i din Figura 5.3, observăm că efectele notabile de captură sunt întâlnite la valorile mici ale energiei de rezonanță E_r , prin urmare pe lângă puterea luminii, trebuie aleasă corespunzător și energia electronului incident.

Proprietăți spectrale, topologice și de transport cuantic de sarcină ale grafenei în câmp magnetic uniform și lumină polarizată circular

6.1 Modelul teoretic

6.1.1 Interacția grafenei cu un câmp magnetic uniform și lumină polarizată circular

În această secțiune, prezentăm un model de tip tight-binding care descrie interacția grafenei cu un câmp electromagnetic monocromatic (lumină) și/sau un câmp magnetic uniform. În acest sens, considerăm o plachetă finită de grafenă, plasată în planul orizontal xy , în timp ce iradierea cu lumină ($\hbar\omega$) și câmpul magnetic ($\mathbf{B}$) sunt orientate în lungul axei z , perpendicular pe grafenă. Sistemul studiat este descris schematic în Figura 6.1(a).

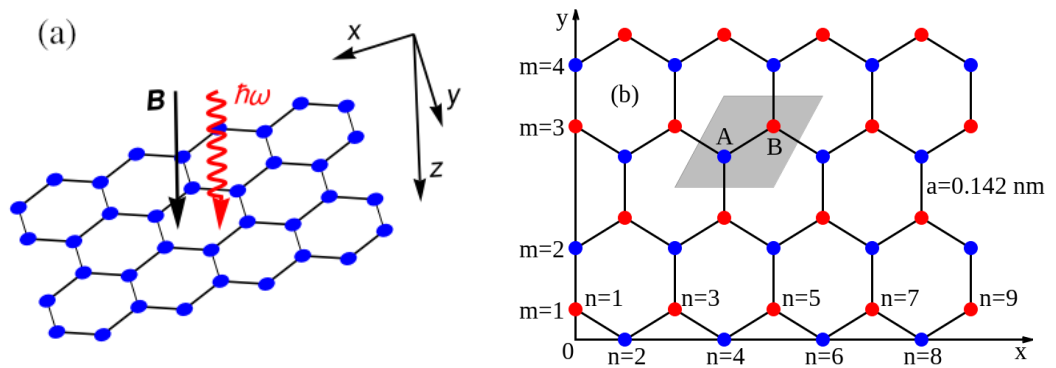


Figura 6.1: Schema sistemului studiat. (a) Placheta de grafenă este plasată în planul orizontal xy , în timp ce iradierea cu lumina ($\hbar\omega$) și câmpul magnetic ($\mathbf{B}$) sunt orientate în lungul axei z , perpendicular pe grafenă. (b) Structura cristalină a grafenei. Rețeaua poate fi interpretată ca un sistem de lanțuri atomice zig-zag cuplate, indexate prin $m = 1, 2, \dots, M$. De asemenea, fiecare lanț este compus din tipuri alternante de atomi A, respectiv, B, indexate prin $n = 1, 2, \dots, N$. În exemplul de față, $M = 4$ și $N = 9$. Celula unitară este reprezentată de poligonul de culoare gri, iar distanța dintre atomii A și B este $a = 0.142 \text{ nm}$.

Prezența celor două tipuri de câmp aplicate este exprimată în modelul pe care îl elaborăm de către potențialul vector:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_L(t) + \mathbf{A}_M(\mathbf{r}), \quad (6.1)$$

unde $\mathbf{A}_L(t)$ și $\mathbf{A}_M(\mathbf{r})$ sunt contribuțiile luminii și, respectiv, ale câmpului magnetic. Utilizând reprezentarea de tip undă plană pentru câmpul electromagnetic [34] și etalonarea Landau pentru câmpul magnetic, definim:

$$\mathbf{A}_L(t) = A_0 [\cos(\omega t)\mathbf{e}_x + \Lambda \sin(\omega t)\mathbf{e}_y]; \quad (6.2a)$$

$$\mathbf{A}_M(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_M(y) = -By\mathbf{e}_x. \quad (6.2b)$$

În relațiile de mai sus, $\mathbf{e}_x$ și $\mathbf{e}_y$ sunt vectorii unitari ai axelor x și, respectiv, y . În ecuația (6.2a), constanta reală A_0 este mărimea potențialului vector $\mathbf{A}_L(t)$, ω frecvența unghiulară și $\Lambda = \pm 1$ numărul cuantic de helicitate. În ecuația (6.2b), B este intensitatea câmpului magnetic.

Considerând sistemul din Figura 6.1(b), formulăm un model de tip tight-binding în formalismul cuantificării a II-a, folosind operatorii elementari a_{nm}/b_{nm} și $a_{nm}^\dagger/b_{nm}^\dagger$, care acționează în spațiul celei unitare astfel: a_{nm}/b_{nm} anihilează și, respectiv, $a_{nm}^\dagger/b_{nm}^\dagger$ creează un electron în atomul de tip A/B , în poziția atomică din rețeaua cristalină identificată prin coordonatele (n, m) . Prin urmare, neglijând gradul de libertate al spinului electronilor și considerând doar hopping-urile între atomii vecini de ordin I, Hamiltonianul uni-particulă, dependent de timp va avea următoarea expresie:

$$\begin{aligned} H(t) = & -\gamma \sum_{n,m} \exp[i\theta_m^R(t)] a_{n,m}^\dagger b_{n-1,m} - \gamma \sum_{n,m} \exp[i\theta_m^L(t)] a_{n,m}^\dagger b_{n+1,m} \\ & -\gamma \sum_{\substack{n,m \\ \langle A,B \rangle}} \exp[i\theta^U(t)] a_{n,m}^\dagger b_{n,m-1} - \gamma \sum_{\substack{n,m \\ \langle A,B \rangle}} \exp[i\theta^D(t)] b_{n,m}^\dagger a_{n,m+1} + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (6.3)$$

În expresia de mai sus, $\gamma = 2.8$ reprezintă parametrul de hopping, iar factorii exponențiali se datorează substituțiilor Peierls. De asemenea, fazele Peierls $\theta(t)$ sunt definite după cum urmează:

$$\theta(t) = \frac{-e}{h} \int_{\Gamma} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{s}, \quad (6.4)$$

unde e este sarcina elementară, h constanta Planck, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ potențialul vector, iar $d\mathbf{s}$ parametrizează direcția legăturii chimice dintre atomii A și B . De asemenea, notația $\langle A, B \rangle$ restricționează integrala doar la vecinii de ordin I.

Ținând seama de periodicitatea temporală a problemei, invocăm formalismul Floquet, iar Hamiltonianul devine:

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & H_0 + \hbar\omega & H_1 & H_2 & \dots \\ \dots & H_{-1} & H_0 & H_1 & \dots \\ \dots & H_{-2} & H_{-1} & H_0 - \hbar\omega & \dots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

Spectrul energetic al Hamiltonianului de mai sus constă din benzi identice denumite *replici Floquet* separate de o cantitate $\hbar\omega$ și cuplate de elementele din afara diagonalei principale.

În cazul unui regim nerezonant, caracterizat printr-o valoare $\hbar\omega$ mult mai mare decât 6γ , putem formula Hamiltonianul efectiv de frecvențe înalte:

$$H_{\text{HF}} = H_0 + \frac{1}{\hbar\omega}[H_{-1}, H_1]. \quad (6.6)$$

În expresiile (6.5) și (6.6), elementele H_p au următoarea definiție:

$$\begin{aligned} H_p = -\gamma i^p J_p \left(\frac{eaA_0}{h} \right) \sum_{\substack{n,m \\ \langle A,B \rangle}} [e^{i\pi\phi(m-5/6)} (e^{-ip\Lambda\pi/3} a_{n,m}^\dagger b_{n-1,m} + H.c.) \\ + e^{-i\pi\phi(m-5/6)} (e^{-ip\Lambda 2\pi/3} a_{n,m}^\dagger b_{n+1,m} + H.c.) \\ + \Lambda (ia_{n,m}^\dagger b_{n,m-1} - ib_{n,m}^\dagger a_{n,m-1} + H.c.)], \end{aligned} \quad (6.7)$$

unde $J_p(x)$ este funcția Bessel de speța I, de ordin p .

6.1.2 Formalismul de transport Landauer–Büttiker în prezența unui câmp magnetic uniform și a luminii polarizate circular

Pentru a studia efecte de transport cuantic de sarcină, vom considera un sistem în care plachetei de grafenă discutate în Capitolul 6.1.1 îi sunt atașate patru terminale, așa cum este prezentat în Figura 6.2. Terminalele respective sunt considerate lanțuri atomice semi-infinite, independente (care nu interacționează reciproc), conectate atomilor periferici din sistemul de grafenă și rolul pe care îl îndeplinesc este doar să injecteze sau să colecteze purtătorii de sarcină. De asemenea, considerăm aplicarea câmpurilor externe numai asupra grafenei, nu și asupra terminalelor.

În următoarea etapă, apelăm la formalismul Landauer–Büttiker. În acest sens, pentru a simula fenomene de transport, aplicăm o diferență de potențial $V_1 - V_4$ între terminalele 1 și 4, măsurând rezistența transversală (rezistența Hall) R_H între terminalele 2 și 3:

$$R_H = \frac{V_2 - V_3}{I_1}, \quad (6.8)$$

unde $V_2 - V_3$ reprezintă diferența de potențial înregistrată între terminalele 2 și 3, iar I_1 este curentul longitudinal care curge de la terminalul 1 către terminalul 4. Din moment ce terminalele 2 și 3 sunt lăsate libere, curenții corespunzători vor fi $I_2 = I_3 = 0$. Mai mult, fără a afecta generalitatea rezultatelor, considerăm $V_4 = 0$.

$$R_H = \frac{g_{24}g_{31} - g_{21}g_{34}}{\det(G)} \left(\frac{h}{2e^2} \right), \quad (6.9)$$

unde h/e^2 este cuanta elementară de rezistență, iar factorul $1/2$ denotă degenerarea de spin. De asemenea, conductivitatea g_{pq} este la rândul ei funcția de transmisie între terminalele p și q , definită ca

$$T_{pq} = \text{Tr} (\Gamma_p G_S^R \Gamma_q G_S^A). \quad (6.10)$$

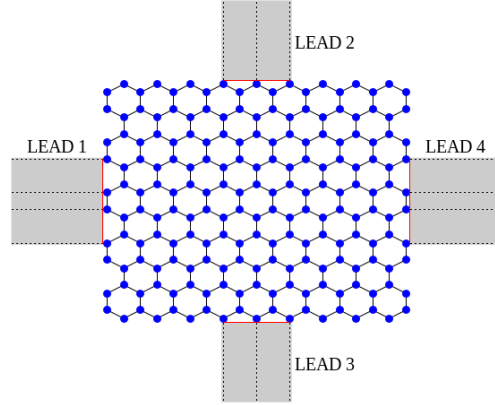


Figura 6.2: *Structura sistemului de transport. Placheta de grafenă studiată în Capitolul 6.1.1 are atașate patru terminale (componentele de culoare gri), cuplate și indexate așa cum este specificat în figură. Terminalele sunt considerate lanțuri atomice identice, semi-infinite și independente (fără interacții mutuale).*

În relația de mai sus, $G_S^A = G_S^{R\dagger}$ este funcția Green avansată. De asemenea, $\Gamma_p = i(\Sigma_p^R - \Sigma_p^A)$, unde $\Sigma_p^R = \Sigma_p$ este funcția Green retardată și $\Sigma_p^A = \Sigma_p^{R\dagger}$ este self-energia avansată corespunzătoare.

6.2 Rezultate numerice și interpretare

În această secțiune, investigăm grafena ca izolator topologic Floquet, prezentând principalele rezultate numerice privind efectele induse de lumina polarizată circular și câmpul magnetic asupra proprietăților spectrale și de transport ale grafenei. Urmărim să desfășurăm o analiză amplă în termenii indicați mai sus și să corelăm toate rezultatele în scopul de a oferi o explicație cât mai fundamentală și unificată a tranzițiilor de fază induse de către câmpurile externe aplicate.

Pentru o prezentare cât mai clară, considerăm că este cel mai util să discutăm separat particularitățile fiecărui regim de frecvențe ale luminii. În acest sens, vom începe cu regimul de interacție nerezonant, iar apoi prin comparație, vom descrie regimul frecvențelor mai mici, caz în care sunt excitate tranziții între replicile Floquet.

Menționăm că în cele ce urmează, toate energiile/cvsienergiile vor fi exprimate în unități $\gamma = 2.8$ eV și amplitudinea potențialului vector A_0 , în unități $\hbar/(ea)$. De asemenea, prin convenție, renunțăm la factorul $\hbar/(2e^2)$ din expresia rezistenței Hall (6.9).

6.2.1 Regimul nerezonant

În cazul regimului nerezonant, sistemul este caracterizat de Hamiltonianul (6.6). Începem prin a analiza mai înainte efectele produse de lumină, cu o energie a fotonului $\hbar\omega = 6\gamma$ (lărgimea de bandă a spectrului energetic al grafenei), în absența câmpului magnetic.

Pentru a efectua o investigație cât mai generală, vom porni cu analiza unui sistem de grafenă *infinit*. Urmărim, în acest caz, felul în care aplicarea luminii afectează spectrul cvasienergiei și celelalte fenomene emergente.

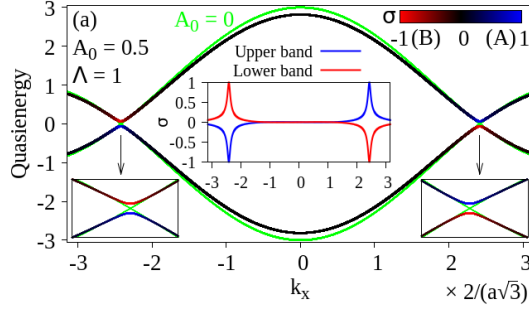


Figura 6.3: Cvasienergia în funcție de k_x în termeni de $2/(a\sqrt{3})$, pe direcția $k_y = 0$, pentru $\Lambda = 1$ și $A_0 = 0.5$.

În Figura 6.3, prezentăm dispersia cvasienergiei în funcție de k_x în termeni de $2/(a\sqrt{3})$, pe direcția $k_y = 0$, pentru $A_0 = 0.5$ și helicitate pozitivă a luminii ($\Lambda = 1$). Curba verde reprezintă dispersia energiei în absența luminii ($A_0 = 0$), pe direcția $k_y = 0$. Inset-urile din stânga și din dreapta figurează în detaliu cele două văi Dirac neechivalente. Observăm astfel cum cele două benzi energetice se intersectează formând conuri Dirac în absența luminii, în timp ce benzile de cvasienergie evită intersectarea când iradierea este prezentă, dând naștere unei benzi interzise în jurul punctelor K și K' . În continuare, pentru a pune în evidență ruperea simetriei chirale, introducem *polarizarea de sub-rețea*

$$\sigma = \frac{|\langle A|A \rangle|^2 - |\langle B|B \rangle|^2}{|\langle A|A \rangle|^2 + |\langle B|B \rangle|^2}, \quad (6.11)$$

care exprimă contribuția stărilor A și B pentru fiecare bandă de cvasienergie. Când $\sigma = 1$, participă exclusiv starea A , iar când $\sigma = -1$, participă exclusiv starea B . În primul rând, în vecinătatea lui K' , polarizarea pune în evidență în mod clar faptul că banda inferioară este populată cu stări de tip B , în timp ce banda superioară, cu stări de tip A . În schimb, în jurul punctului K , polarizarea este reversată. În al doilea rând, din moment ce în vecinătatea punctelor Dirac dispersia cvasienergiei înregistrează extreme locale, panta fiecărei curbe va avea atât valori pozitive, cât și negative, prin urmare în fiecare bandă particulele de același tip nu vor mai avea o viteză cu un sens bine definit. Altfel spus, chiralitatea *nu se mai conservă* pe măsură ce stările particulelor evoluează în jurul punctelor Dirac, iar acest comportament reprezintă tocmai *ruperea de simetrie chirală*. În inset-ul din mijlocul graficului (a), este reprezentată polarizarea de sub-rețea σ , pentru ambele benzi de cvasienergie, în funcție de k_x . Observăm în acest grafic faptul că polarizarea maximă este înregistrată în jurul coordonatelor k_x ale punctelor Dirac $K' : \left(\frac{-4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right)$ și $K : \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right)$. De asemenea, este mai vizibilă reversarea polarizării în cele două puncte K și K' .

Considerăm în continuare o panglică de grafenă infinită pe direcția x și finită pe direcția y . În această configurație, doar k_x rămâne un număr cuantic bun, așadar k_y va fi înlocuit de parametrul m care indexează lanțurile atomice în structura studiată.

Continuăm investigația în termeni de densitate locală de stări și efecte de transport. Având în vedere că studiem tot o panglică de grafenă, densitatea locală de stări poate fi definită doar în raport cu coordonata y , sub următoarea formă bine-cunoscută: $(-1/\pi) [G^R(m, m, E_F)]$. $G^R(m, m, E_F)$ este funcția Green a Hamiltonianului exprimat în spațiul Fourier, calculată la o energie corespunzătoare nivelului Fermi E_F și m reprezintă indexul lanțului atomic.

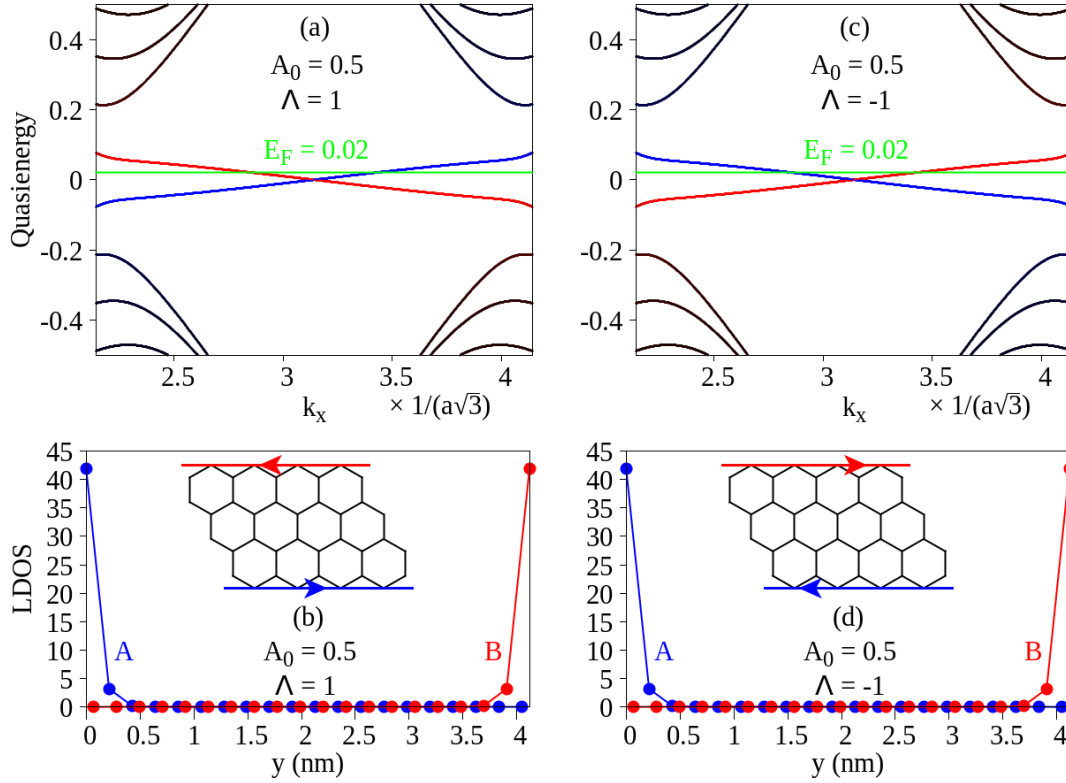


Figura 6.4: Dispersia cvasienergiei în funcție de k_x , în vecinătatea nivelului de zero, pentru $A_0 = 0.5$: (a) $\Lambda = 1$ și (c) $\Lambda = -1$. Chiralitatea particulelor (sensul vitezei) este reversată atunci când se schimbă starea de helicitate a luminii. Graficele (b) și (d) reprezintă densitatea locală de stări pentru $E_F = 0.02$ în cazul (a) și, respectiv, (d).

În Figura 6.4(a), este prezentată în detaliu dispersia cvasienergiei în vecinătatea valorii de zero, pentru $A_0 = 0.5$ și $\Lambda = 1$. Dacă, spre exemplu, stabilim nivelul Fermi la $E_F = 0.02$, conul Dirac va fi intersectat în jumătatea superioară, iar particulele de tip A și B vor avea sensuri opuse și bine definite ale vitezei, respectiv pozitiv și negativ. Pe lângă apariția acestor stări de chiralitate bine definită, cea mai importantă caracteristică a unui izolator topologic constă în localizarea stărilor respective. Figura 6.4(b) prezintă densitatea locală de stări corespunzătoare situației discutate mai sus. Astfel, remarcăm faptul că cele două stări de chiralitate bine definite sunt puternic confinate la *marginea* sistemului de grafenă. În consecință, așa cum este reprezentat schematic în inset-ul graficului (b), în lungul terminației zig-zag, sunt formate două canale de conducție cu sensuri opuse specifice. Acest efect al aplicării luminii polarizate circular va afecta puternic proprietățile de transport ale grafenei, așa cum vom demonstra în cele ce urmează. Pe deasupra, un alt fenomen foarte interesant se petrece la reversarea stării de helicitate a luminii. Așa cum relevă

graficul (c), pentru $\Lambda = -1$, chiralitatea particulelor este inversată. În schimb, din moment ce localizarea stărilor chirale nu este afectată, singurul efect este de a inter-schimba direcțiile canalelor de conducție formate în lungul terminației zig-zag. Mai departe, ținând seama de rezultatele prezentate mai sus, vom analiza și proprietățile de transport.

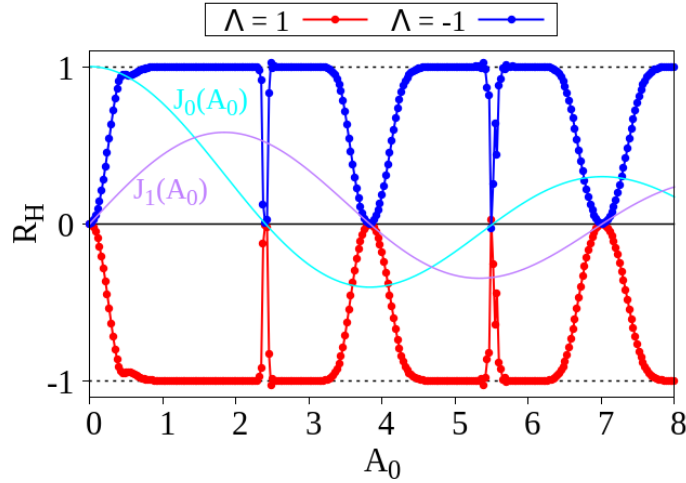


Figura 6.5: Valorile numerice ale R_H în funcție de A_0 , pentru $\Lambda = 1$ (simbolurile roșii) și, respectiv, $\Lambda = -1$ (simbolurile albastre). Graficul conține platouri specifice de valoare $R_H = \pm 1$ între zerourile funcțiilor Bessel $J_0(A_0)$ (curba bleu) și $J_1(A_0)$ (curba violet). Sistemul studiat conține $M = 20$ lanțuri atomice, fiecare cu câte $N = 35$ de atomi.

Pentru a studia transportul de sarcină, apelăm la modelul de transport pe care l-am dezvoltat în Capitolul 6.1.2 și examinăm valorile rezistenței Hall definită în relația (6.9). În Figura 6.5, sunt reprezentate valorile numerice ale R_H în funcție de A_0 , pentru cazurile ambelor stări de helicitate ale luminii. Sistemul studiat conține $M = 20$ lanțuri atomice, fiecare cu câte $N = 35$ atomi. Așa cum am anticipat, graficul evidențiază formarea de platouri ale rezistenței Hall, $R_H = \pm 1$. Mai mult, cuantificarea rezistenței Hall intervine între zerourile funcțiilor Bessel $J_0(A_0)$ și $J_1(A_0)$ (vezi curba bleu și, respectiv, cea violet). Acest comportament al sistemului este determinat de generarea stărilor chirale, controlată prin iradierea cu lumină polarizată circular. Pe deasupra, simetria graficului reflectă reversarea chiralității particulelor și implicit a sensurilor canalelor de conducție, la schimbarea stării de helicitate a luminii din $\Lambda = 1$ în $\Lambda = -1$.

În final, investigăm sistemul de grafenă supus simultan luminii și câmpului magnetic. În spectrul din Figura 6.6(a), distingem stările de volum de cele de margine folosind scala de culori negru-roșu, așa cum este specificat în imagine. În acest fel, prezența stărilor de margine în benzile interzise este evidentă. În primul rând, menționăm faptul că simetria spectrului în raport cu axa de cvasienergie zero nu mai este prezentă, așadar ne așteptăm să întâlnim efecte diferite de cazul în care era aplicat doar câmp magnetic. Din moment ce la un flux magnetic fixat ϕ , benzile interzise nu mai au aceeași lărgime, platourile de rezistență Hall se vor comporta în consecință, iar acest lucru este cel mai bine relevat de către curba roșie din graficul (b) ($\phi = 0.2$) și, respectiv, curba albastră ($\phi = 0.8$), pentru platourile $R_H = \pm 1$ în vecinătatea nivelului Fermi $E_F = 0$ [vezi de asemenea și barele verticale în graficul

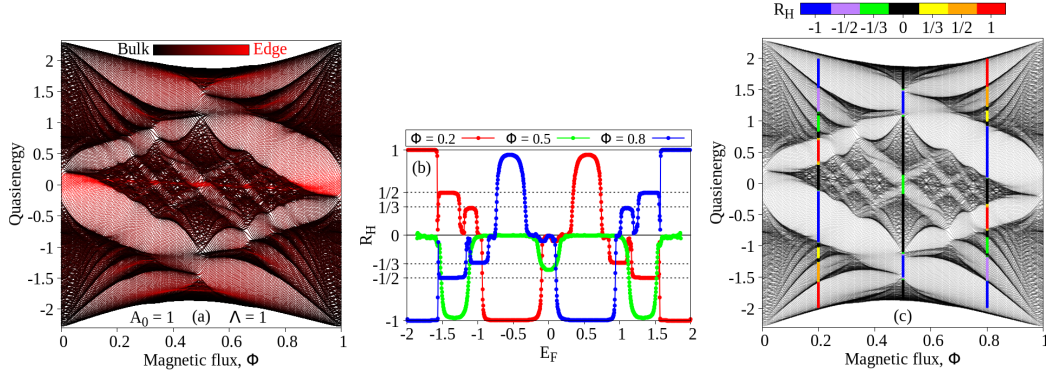


Figura 6.6: Analiza spectrului Hofstadter sub acțiunea luminii polarizate circular. Analiza transportului Hall

(c)]. În al doilea rând, observăm o mișcare a întregului spectru, așadar benzile interzise situate la extremele spectrului vor intra în intervalul nostru de interes $E_F \in (-2, 2)$. În termeni de transport, acest efect se traduce prin introducerea a două noi platouri $R_H = \pm 1$ la marginile intervalului de energie analizat. Un alt fenomen interesant al iradierii constă în activarea transportului transversal pentru $\phi = 0.5$ [vezi graficele (b) și (c)], care în absența luminii era interzis.

6.2.2 Regimul rezonant

Continuăm investigația cu cazul interacției rezonante, unde sunt permise tranziții între benzi Floquet vecine. Scopul analizei este de a înțelege cum introducerea unor replici Floquet suplimentare afectează proprietățile topologice și de transport ale sistemului de grafenă.

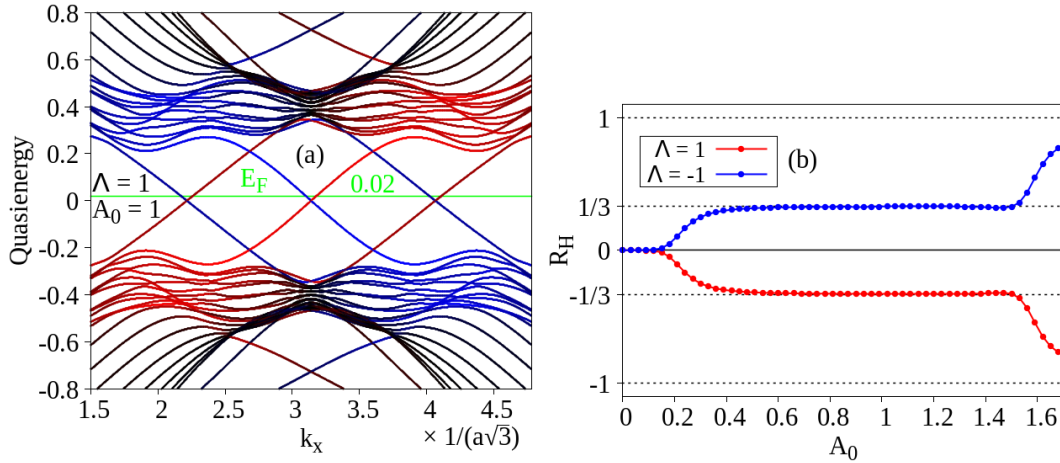


Figura 6.7: Dispersia cvasienergiei în cazul unei panglici de grafenă cu $M = 20$ lanțuri atomice zig-zag în raport cu k_x , pentru $A_0 = 1$. Observăm formarea a trei conuri Dirac în banda interzisă. (b) R_H în funcție de A_0 , pentru un sistem cu $M = 20$ și $N = 35$. Rezistența Hall prezintă un singur platou $R_H = \pm 1/3$, pentru $\Lambda = -1$, respectiv, $\Lambda = 1$.

Pentru a pune în evidență principalele particularități ale regimului rezonant, în cele ce urmează analizăm cazul $\hbar\omega = 0.5\gamma$, pentru valori $A_0 < 2$, în lipsa câmpului

magnetic. Reamintim că în această configurație, în cazul regimului nerezonant, platourile rezistenței Hall au valorile $R_H = \pm 1$ datorită faptului că în banda interzisă poate fi generat maxim un con Dirac. În situația regimului rezonant, intersectarea de ordin II a benzilor $n = \pm 1$ poate introduce în banda interzisă încă două conuri Dirac, așa cum este prezentat în Figura 6.7(a). Spre exemplu, dacă nivelul Fermi este stabilit la $E_F = 0.02$, atunci în diagrama rezistenței Hall [Figura 6.7(b)] va apărea un singur platou $R_H = -1/3$ pentru $\Lambda = 1$ și, respectiv, $\Lambda = 1/3$ pentru $\Lambda = -1$. Pe măsură ce valorile A_0 cresc, alte perechi de conuri Dirac pot fi introduse în banda interzisă, generând platouri de rezistență Hall. Din moment ce fiecare intersectare de ordin II introduce câte două conuri Dirac, putem generaliza valoarea rezistenței Hall corespunzătoare ca

$$R_H = \frac{1}{1 + 2n}, \quad (6.12)$$

unde n reprezintă numărul replicilor Floquet care stabilesc intersectări de ordin II.

În situația în care un câmp magnetic este aplicat pe lângă iradierea cu lumină polarizată circular, iau naștere spectre de tip Hofstadter mult mai complicate decât în cazul nerezonant, mai ales pentru valori mici ale energiei $\hbar\omega$. A se vedea spre exemplu referința [43]. Cu toate acestea, caracteristicile esențiale ale regimului nerezonant sunt exprimate prin relația (6.12), așadar ne vom limita doar la configurația în care doar lumina este aplicată. Evident, studiul s-ar fi putut extinde cu o investigație în care ambele câmpuri sunt prezente, însă din raționamentele discutate mai sus, o considerăm redundantă.

Concluzii

Lucrarea de față prezintă un studiu teoretic al proprietăților grafenei aflate sub acțiunea unor câmpuri externe, din două perspective: cea a efectelor de captură electronică în dot-uri cuantice, și respectiv, cea a izolatorilor topologici.

În cadrul studiului stărilor cvasilegate, au fost puse în evidență noi configurații care facilitează efectele de captură electronică în dot-uri cuantice de grafenă. Pentru aceasta, a fost investigată împrăștierea unui electron pe un dot cuantic de grafenă supus acțiunii unor câmpuri externe, urmărind în principal trei concepte definitorii pentru astfel de fenomene. În primul rând, procesele au fost descrise într-o manieră cantitativă, evaluând *eficiența de împrăștiere* – o măsură a intensității interacției dintre electronul incident și dot-ul cuantic de grafenă. După aceea, procesele au fost investigate în termeni de *densitate de probabilitate de localizare și curent de densitate*, o metodă foarte ilustrativă de a oferi o imagine fundamentală asupra generării/epuizării stărilor cvasilegate. În final, din moment ce captura electronică în dot-uri cuantice de grafenă este un fenomen tranzitoriu, pentru o analiză completă au fost evaluați *timpii de viață ai stărilor cvasilegate* identificate pentru anumiți parametri bine definiți. Concret, au fost investigate trei situații în care asupra dot-ului de grafenă acționează (i) un câmp magnetic uniform și un potențial electrostatic, (ii) o combinație de câmp magnetic uniform și lumină polarizată circular și (iii) lumină elicoidală, pentru a fi extrase informații legate de modul în care efectele de captură sunt influențate de anumiți parametri cum ar fi intensitatea câmpurilor aplicate, energia electronului incident, raza dot-ului cuantic etc.

În studiul grafenei ca izolator topologic Floquet s-a urmărit descrierea tranzițiilor de fază într-un mod cât mai fundamental și unificat, conectând concepte generale din fizica stării condensate ca structura de bandă energetică, densitate de stări și transport cuantic de sarcină. De asemenea, în mod particular, tranzițiile de fază topologică au fost explicate apelând la conceptele de spin, helicitate și chiralitate din teoria cuantică relativistă. În această manieră, grafena a fost sistematic investigată sub acțiunea luminii polarizate circular, a unui câmp magnetic uniform și a acțiunii simultane a acestora. Studiul a fost condus într-un mod comparativ, bazându-se pe evidențierea similitudinilor, dar mai cu seamă pe deosebirile dintre cele trei configurații menționate mai sus. În mod explicit, au fost urmărite tranzițiile de fază topologică induse de modificarea unor parametri definitorii ca frecvența, intensitatea și helicitatea luminii, intensitatea fluxului magnetic etc. Plecând de la conceptul abstract al proprietăților spectrale, s-a urmărit prezentarea tranzițiilor de fază dintr-o perspectivă cât mai plastică, ajungând la noțiunea concretă de transport de sarcină.

Bibliografie

- [1] P. R. Wallace, *The Band Theory of Graphite*, [Phys. Rev. **71**, 622 \(1976\)](#).
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, [Science **306**, 666 \(2004\)](#).
- [3] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene*, [Nature Phys **2**, 620–625 \(2006\)](#).
- [4] A. F. Young, and Philip Kim, *Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions*, [Nature Physics **5**, 222–226 \(2009\)](#).
- [5] N. Dombey, and A. Calogeracos, *Seventy years of the Klein paradox*, [Phys. Rep. **315**, 41–58 \(1999\)](#).
- [6] M. Z. Hasan, and C. L. Kane, *Colloquium: Topological insulators*, [Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 \(2010\)](#).
- [7] X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Topological insulators and superconductors*, [Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 \(2011\)](#).
- [8] D. Hsieh, Y. Xia, L. Wray, D. Qian, A. Pal, J. H. Dil, J. Osterwalder, F. Meier, G. Bihlmayer, C. L. Kane *et al.*, *Observation of Unconventional Quantum Spin Textures in Topological Insulators*, [Science **323**, 5916 \(2009\)](#).
- [9] J. Moore, *The birth of topological insulators*, [Nature **464**, 194–198 \(2010\)](#).
- [10] H. P. Paudel, and M. N. Leuenberger, *Three-dimensional topological insulator quantum dot for optically controlled quantum memory and quantum computing*, [Phys. Rev. B **88**, 085316 \(2013\)](#).
- [11] B. Bhattacharyya, V. P. S. Awana, T. D. Senguttuvan, V. N. Ojha, and S. Husale, *Proximity-induced supercurrent through topological insulator based nanowires for quantum computation studies*, [Sci Rep **8**, 17237 \(2018\)](#).
- [12] Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, *Magnetic topological insulators*, [Nat Rev Phys **1**, 126–143 \(2019\)](#).
- [13] T. W. Schmitt, M. R. Connolly, M. Schleenvoigt, C. Liu, O. Kennedy, J. M. Chávez-García, A. R. Jalil, B. Bennemann, S. Trellenkamp, F. Lentz *et al.*, *Integration of Topological Insulator Josephson Junctions in Superconducting Qubit Circuits*, [Nano Lett. **22**, 7, 2595–2602 \(2022\)](#).

- [14] K. von Klitzing, *The quantized Hall effect*, [Rev. Mod. Phys. 58, 519 \(1986\)](#).
- [15] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*, [Phys. Rev. Lett. 49, 405 \(1982\)](#).
- [16] S. Ryu, and Y. Hatsugai, *Topological Origin of Zero-Energy Edge States in Particle-Hole Symmetric Systems*, [Phys. Rev. Lett. 89, 077002 \(2002\)](#).
- [17] L. Fu, and C. L. Kane, *Topological insulators with inversion symmetry*, [Phys. Rev. B 76, 045302 \(2007\)](#).
- [18] C. L. Kane, and E. J. Mele, *Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect*, [Phys. Rev. Lett. 95, 146802 \(2005\)](#).
- [19] H. M. Price, T. Ozawa, and I. Carusotto, *Quantum Mechanics with a Momentum-Space Artificial Magnetic Field*, [Phys. Rev. Lett. 113, 190403 \(2014\)](#).
- [20] T. Ozawa, H. M. Price, and I. Carusotto, *Momentum-space Harper-Hofstadter model*, [Phys. Rev. A 92, 023609 \(2015\)](#).
- [21] T. Ozawa, H. M. Price, and I. Carusotto, *Quantum Hall effect in momentum space*, [Phys. Rev. B 93, 195201 \(2016\)](#).
- [22] F. D. M. Haldane, *Nobel Lecture: Topological quantum matter*, [Rev. Mod. Phys. 89, 040502 \(2017\)](#).
- [23] M. Jangjan, and M. V. Hosseini, *Topological properties of subsystem-symmetry-protected edge states in an extended quasi-one-dimensional dimerized lattice*, [Phys. Rev. B 106, 205111 \(2022\)](#).
- [24] A. Afanasev, Carl E. Carlson, and Asmita Mukherjee, *Off-axis excitation of hydrogenlike atoms by twisted photons*, [Phys. Rev. A 88, 033841 \(2013\)](#).
- [25] O. Matula, A. G. Hayrapetyan, V. G. Serbo, A. Surzhykov, and S. Fritzsche, *Atomic ionization of hydrogen-like ions by twisted photons: angular distribution of emitted electrons*, [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 46, 205002 \(2013\)](#).
- [26] M.B. Farías, G.F. Quinteiro, and P.I. Tamborenea, *Photoexcitation of graphene with twisted light*, [Eur. Phys. J. B 86, 432 \(2013\)](#).
- [27] H. M. Scholz-Marggraf, S. Fritzsche, V. G. Serbo, A. Afanasev, and A. Surzhykov, *Absorption of twisted light by hydrogenlike atoms*, [Phys. Rev. A 90, 013425 \(2014\)](#).
- [28] G. F. Quinteiro, C. T. Schmiegelow, D. E. Reiter, and T. Kuhn, *Reexamination of Bessel beams: A generalized scheme to derive optical vortices*, [Phys. Rev. A 99, 023845 \(2019\)](#).
- [29] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *The electronic properties of graphene*, [Rev. Mod. Phys. 81, 109 \(2009\)](#).

- [30] M. Loewe, F. Marquez, and R. Zamora, *The cylindrical δ -potential and the Dirac equation*, [J. Phys. A: Math. Theor.](#) **45** 465303 (2012).
- [31] J. Cserti, A. Pályi, and C. Péterfalvi, *Caustics due to a Negative Refractive Index in Circular Graphene p - n Junctions*, [Phys. Rev. Lett.](#) **99**, 246801 (2007).
- [32] R. L. Heinisch, F. X. Bronold, and H. Fehske, *Mie scattering analog in graphene: Lensing, particle confinement, and depletion of Klein tunneling*, [Phys. Rev. B](#) **87**, 155409 (2013).
- [33] C. Schulz, R. L. Heinisch, and H. Fehske, *Electron Flow in Circular Graphene Quantum Dots*, [Quantum. Matter](#) **4**, 346–351 (2015).
- [34] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (New York: Wiley, 1999).
- [35] J. H. Shirley, *Solution of the Schrödinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time*, [Phys. Rev. B](#) **138**, 979 (1965).
- [36] H. Li, B. Shapiro, and T. Kottos, *Floquet scattering theory based on effective Hamiltonians of driven systems*, [Phys. Rev. B](#) **98**, 121101(R) (2018).
- [37] C. Wurl, and H. Fehske, *Floquet scattering of light and sound in Dirac optomechanics*, [Phys. Rev. A](#) **98**, 063812 (2018).
- [38] V. Junk, P. Reck, C. Gorini, and K. Richter, *Floquet oscillations in periodically driven Dirac systems*, [Phys. Rev. B](#) **101**, 134302 (2020).
- [39] U. De Giovannini, and H. Hübener, *Floquet analysis of excitations in materials*, [J. Phys. Mater.](#) **3** 012001 (2020).
- [40] N. M. R. Peres, J. N. B. Rodrigues, T. Stauber, and J. M. B. Lopes dos Santos, *Dirac electrons in graphene-based quantum wires and quantum dots*, [J. Phys.: Condens. Matter](#) **21**, 344202 (2009).
- [41] P. Hewageegana, and V. Apalkov, *Electron localization in graphene quantum dots*, [Phys. Rev. B](#) **77**, 245426 (2008).
- [42] Y. Pan, H. Ji, X.-Q. Li, and H. Liu, *Quasi-bound states in an NPN-type nanometer-scale graphene quantum dot under a magnetic field*, [Sci Rep](#) **10**, 20426 (2020).
- [43] S. H. Kooi, A. Quelle, W. Beugeling, and C. M. Smith, *Genesis of the Floquet Hofstadter butterfly*, [Phys. Rev. B](#) **98**, 115124 (2018).

Lista contribuțiilor proprii

1. Adrian Pena, *Electron trapping in magnetic driven graphene quantum dots*, Physica E Low Dimens. Syst. Nanostruct. **141**, 115245 (2022).
doi: [10.1016/j.physe.2022.115245](https://doi.org/10.1016/j.physe.2022.115245)
AIS = 0.449
JIF = 3.369
2. Adrian Pena, *Lifetime enhancement of quasibound states in graphene quantum dots via circularly polarized light*, Phys. Rev. B **105**, 125408 (2022).
doi: [10.1103/PhysRevB.105.125408](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.125408)
AIS = 0.977
JIF = 3.908
3. Adrian Pena, *Electron trapping in twisted light driven graphene quantum dots*, Phys. Rev. B **105**, 045405 (2022).
doi: [10.1103/PhysRevB.105.045405](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.045405)
AIS = 0.977
JIF = 3.908
4. Adrian Pena, *Control of spectral, topological and charge transport properties of graphene via circularly polarized light and magnetic field*, Results Phys. **46**, 106257 (2023).
doi: [10.1016/j.rinp.2023.106257](https://doi.org/10.1016/j.rinp.2023.106257)
AIS = 0.622
JIF = 4.565