

Fizički fakultet  
Univerziteta u Beogradu

Vedran Raca

# Grafenske kvantne tačke

diplomski rad

Mentor: Prof. Dr. Milica Milovanović

Beograd, april 2015.

*Ovaj rad je nastao u Laboratoriji za primenu računara u nauci Instituta za fiziku u Zemunu pod rukovodstvom Prof.*

*Dr. Milice Milovanović.*

*Želeo bih da joj se zahvalim na uvodu u ovu oblast, strpljenju, nesebičnoj podršci i mnogobrojnim diskusijama.*

*Takođe se zahvaljujem Prof. Dr. Edibu Dobardžiću za diskusije i pomoći u programiranju, bez koje ovaj rad ne bi bio moguć.*

“Kad eliminišete sve što je nemoguće, ono što ostane, ma kako izgledalo čudno, predstavlja rešenje.“

Šerlok Holms

## SADRŽAJ:

1. Uvod .....	1
2. Uvod u grafenske kvantne tačke (GKT).....	2
3. GKT u beskonačnoj kružnoj potencijalnoj jami.....	8
3.1. Slučaj za nerelativističku česticu.....	8
3.2. Slučaj relativističke čestice ili jednoslojnog grafena .....	10
3.2.1. Svojstvene energije i stanja .....	10
3.2.2. Granični uslovi .....	11
3.2.3. Svojstvena stanja za $E < 0$ i veli $\tau = -1$ .....	14
3.3. Slučaj dvoslojnog grafena .....	17
3.3.1. Svojstvene energije i stanja .....	17
3.3.2. Granični uslovi .....	18
3.3.3. Svojstvena stanja za $E < 0$ i $\tau = -1$ .....	24
4. Ekscitonska nestabilnost u kvantnim tačkama jednoslojnog grafena .....	26
4.1. Uvođenje Kulonove interakcije.....	27
4.2. Slučaj kada uzimamo samo veli stepen slobode $\tau = \pm 1$ i kada je $N=0$ .....	28
4.3. Slučaj kada uzimamo spinski $s = \pm 1$ i veli $\tau = \pm 1$ stepen slobode i kada je $N=0$ .....	33
4.4. Termodinamički limit.....	39
5. Ekscitonska nestabilnost u GKT dvoslojnog grafena.....	40
5.1. Termodinamički limit.....	40
6. Zaključak .....	42
Literatura .....	43

## 1. Uvod

Ovaj rad započecemo opisom grafena i dvoslojnog grafena te njihovom elektronskom strukturom. Pri opisu grafena koristi se Dirakov hamiltonijan u kontinualnoj aproksimaciji, dok se za opis dvosloja koristi niskoenergetski efektivni hamiltonijan u takođe u kontinualnoj aproksimaciji. Daćemo i kratak opis kvantnih taćaka, opisati njihovu strukturu i ukazati na primene.

Grafenske kvantne taćke su u poslednje vreme postale predmet intenzivnog proućavanja, zbog njihove netoksićnosti, lake dostupnosti, elektro-optićkih osobina, beskonaćnog Borovog radijusa itd. Mi ćemo se u trećem poglavlju skoncentrisati na ispitivanje svojstvenih stanja i svojstvenih energija za grafenske krućne kvantne taćke nastale postavljanjem grafena u beskonaćnu krućnu potencijalnu jamu. U ovakvom modelu kvantne taćke nema prolaska elektrićne struje izvan granica koje omeđavaju kvantnu taćku. U slućaju dvosloja razlika potencijala unutar taćke je nula, a izvan je beskonaćna.

Svojstveni problem za kvantnu taćku jednoslojnog grafena ovog tipa je već bio rećen, mi smo detaljno opisali postupak i na analogan ali znatno komplikovaniji naćin to isto uradili i za slućaj dvoslojnog grafena. Ovakve kvantne taćke nisu realne, razlika izmeću dvosloja ne moće biti beskonaćna. Mećuim, videćemo da svojstveni vektori za najniće nivoe  $i$  za male vrednosti radijusa mogu da posluće kao dobra aproksimacija za realnije slućajeve, kao što je kvantna taćka u konaćnom parabolićnom potencijalu. U petom poglavlju ćemo da iskoristimo prethodne rezultate da bi smo ispitali šta se dešava sa osnovnim stanjem kada uvedemo Kulonovu interakciju izmeću elektrona. Mi ćemo pretpostaviti da je Kulonova interakcija parametrizovana parametrom  $\alpha$ . Kako se  $\alpha$  bude menjalo tako će se menjati i osnovno stanje koje viće neće biti vakuum. Za prostor stanja poćetnog hamiltonijana nećemo uzimati celo svojstveni prostor već samo konaćni isećeni potprostor. Za jednosloj videćemo za koje vrednosti  $\alpha$  ekscitonska fizika postaje bitna i to u slućaju kada uzimamo samo veli stepen slobode i u slućaju kada uzimamo i veli i spinski stepen slobode.

Ispitaćemo i termodinamićki limit i videti da  $\alpha$  ne zavisi od  $R$ . U petom poglavlju ispitaćemo ekscitonsku fiziku za dvoslojni grafen. Ispitaćemo termodinamićki limit i videćemo da u ovom slućaju  $\alpha$  zavisi od  $R$  i da već za malo kritiće  $R_c$  ekscitonska fizika postaje znaćajna.

## 2. Uvod u grafenske kvantne tačke (GKT)

Ugljenik ili karbon (C, lat. carbonemum) je nemetal i pripada IV grupe. U prirodi postojedva stabilna izotopa:  $C^{12}$ ,  $C^{13}$  i jedan nestabilni izotop  $C^{14}$  koji nastaje od  $N^{14}$  u gornjim slojevima atmosfere. Za ugljenik se zna još od davnina od i u svetu je poznat pod nazivom *carbo*, što znači ugalj. Francuski hemičar Antoan Loren de Lavoazije je prvi ugljenik svrstao među hemijske elemente. Stvaranje jezgra atoma ugljenika nastaje u takozvanom trostrukom alfa procesu, istovremenim sudarom triju  $\alpha$ -čestica (jezgra helija) unutar ogromne zvezde giganta ili supergiganta.

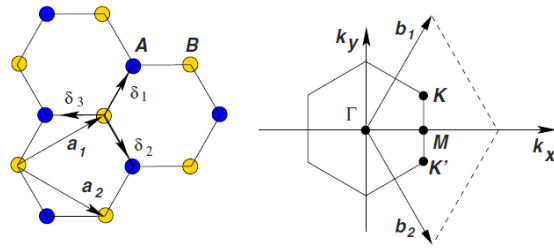
Zahvaljujući svojoj elektronskoj strukturi koja dozvoljava pojavu  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$  hibridizacija, omogućeno mu je da formira više alotropskih modifikacija od bilo kog drugog elementa u prirodi. Među alotropske modifikacije ugljenika pre svega spadaju, odavno nam poznati grafit i dijamant (3D).

U zadnje vreme su otkriveni i intenzivno proučavani fuleren (0D) i grafen (2D). Na većim skalama poznate strukture grafena su nanotube (1D), nanopupoljci (kombinacija nanotuba i fulerena) i nanotrake (trake grafena).

Avgusta 2014. međunarodni tim istraživača sa virdžinskog Commonwealth univerziteta i istraživača sa kineskih i japanskih univerziteta su otkrili penta-grafen. Radi se o novoj alotropskoj modifikaciji ugljenika sačinjenoj od pentagonalne rešetke ugljenika slične Kairo pentagonalnim pločama.

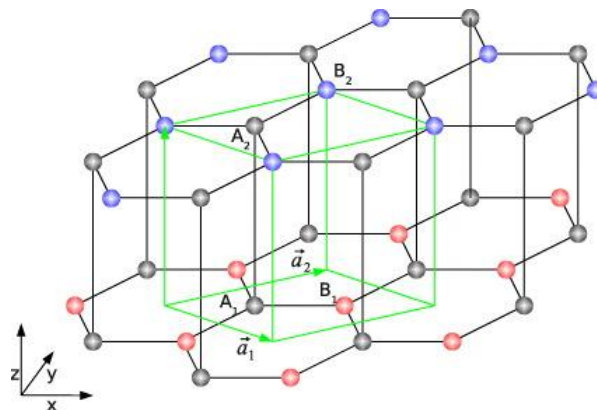
U ovom radu posebnu pažnju ćemo posvetiti 2D alotropskoj modifikaciji ugljenika grafenu. Grafen predstavlja ravanski sloj gusto poređanih atoma ugljenika u 2D šestougaoonu kristalnu rešetku. Grafen poseduje mnoge neobične osobine. Oko 200 puta je jači od čelika, elektricitet provodi jako dobro kao i bakar, skoro u potpunosti je providan i toliko je gust da ni najmanji atomi gasa ne mogu da prođu kroz njega. Ime grafen prvi put spominju Boehm, Setton i Stumpp 1994-te godine [1]. Pored toga što je grupa sa Mančesterskog univerziteta, predvođena Gajmom i Novoselom 2004. godine prvi put uspeva da dobije grafen [2], ovaj 2D kristal je proučavan još od kasnih četrdesetih godina. Grafen se može zaviti u 0D fuleren, umotati u 1D nanotube, iseći u 2D nanotrake i napakovati u 3D grafen, zbog čega je polazna tačka za ispitivanje ovih nanostrukture. Grafen je takođe pogodan za izradu tzv.grafenskih kvantnih tačaka o kojima će se u ovome radu najviše govoriti.

Njegova (grafena) neobična elektronska struktura omogućava ispitivanje (2+1) – dimenzionalnu kvantne elektrodinamike. Ukoliko povećamo broj slojeva grafena, elektronska struktura počinje da se menja. Jednostavnu elektronsku strukturu poseduju grafen i njegov dvosloj, već od 3-10 slojeva elektronska struktura je znatno komplikovanija, a strukture koje poseduju preko 10 slojeva, ne mogu se više smatrati 2D kristalom [3]. Mi ćemo se u ovom radu ograničiti samo na elektronsku strukturu jednoslojnog i dvoslojnog grafena.



Slika 2.1: Šestougaona rešetka grafena dobijena kao superpozicija dve trougaone podrešetke A i B, sa bazisnim vektorima  $a_i$ ,  $i = 1,2$  za podrešetku A i vektorima  $\delta_i$ ,  $i= 1,2,3$  koji povezuju A sa B. Na drugoj slici šestougao je simetrična, a romb pomenena Brillouenova zona šestougaone rešetke. Vektori recipročne rešetke su  $b_i$ ,  $i = 1,2$ .

Jednoslojni grafen ima formu šestougaone rešetke (oblik saća), koja može da se posmatra kao dve trougaone podrešetke A i B ili ekvivalentno preko jedne trougaone rešetke čiji bazis čini par susednih atoma A i B. U slučaju dvoslojnog grafena imamo dve rešetke postavljene jedna iznad druge, tako da formiraju tzv. Bernalovo pakovanje. Atomi iz A1 podrešetke nalaze se tačno ispod atoma iz A2 podrešetke dok su atomi koji pripadaju B1 podrešetki smeštenim direktno ispod centra šestouglova gornjeg sloja. Jednačina ćelija jednoslojnog grafena sadrži dva atoma A i B, u slučaju dvosloja sadrži četiri atoma A1, B1, A2, B2. Rastojanje između dva najbliža atoma ugljenika je  $a_{cc} = 1,42\text{Å}$  i predstavlja konstantu rešetke, dok je rastojanje između različitih slojeva oko  $3,5\text{Å}$ . Vektori primitivnih translacija jednoslojne rešetke su  $\vec{a}_1 = a(1/2, \sqrt{3}/2)$  i  $\vec{a}_2 = a(1/2, -\sqrt{3}/2)$ , gde je  $a = |a_1| = |a_2| = \sqrt{3}a_{cc}$ , dok su za vektori recipročne rešetke  $\vec{b}_1 = 2\pi/a(1, 1/\sqrt{3})$  i  $\vec{b}_2 = 2\pi/a(1, -1/\sqrt{3})$  i za njih važi  $a_i b_j = 2\pi\delta_{ij}$ . Temena simetrične Brillouenove zone jednosloja nazivaju se K tačkama i imaju koordinate  $\pm 2\pi/a(1, 1/\sqrt{3})$ ,  $\pm 2\pi/a(1, -1/\sqrt{3})$  i  $\pm 2\pi/a(2/3, 0)$ . Od ovih šest tačaka imamo samo dve neekvivalentne i biramo ih tako da pripadaju pomenoj Brillouenovoj zoni, tako imamo  $\vec{K}_{\pm} = \pm 2\pi/a(2/3, 0)$ .



Slika 2.2: Rešetka dvoslojnog grafena. Jedinična ćelija sadrži četiri atoma: A1, B1 iz donjeg sloja i A2, B2 iz gornjeg sloja.

Pri opisu elektronske strukture jednoslojnog i dvoslojnog grafena koristili smo nekoliko ključnih aproksimacija.

1. Aproksimacije koje se pojavljuju u modelu jake veze, uključujući efekt izmene samo između najbližih suseda.

2. Kontinualna aproksimacija.

3. Aproksimacija niskoenergetskog efektivnog hamiltonijana.

Treća aproksimacija se primenjuje samo u slučaju dvoslojnog grafena.

Što se tiče modela jake veze, on predstavlja metod za proučavanje elektronskih grana čvrstoga tela. Koristi se skup aproksimativnih talasnih funkcija zasnovanih na superpoziciji talasnih funkcija izolovanih atoma lokalizovanih na svakom položaju atoma u čvrstom telu. Elektroni u modelu su čvrsto vezani za atom kome pripadaju i imaju ograničenu interakciju sa stanjima i potencijalima ostalih atoma. Interakcija između atoma na različitim položajima može se smatrati kao perturbacija.

U grafenu  $sp^2$  hibridizacija ugljenikovih atoma, omogućavaju da se preostale  $2p_z$  orbitali pri formiranju  $\pi$  veze slabo preklapaju. Ova činjenica nam omogućava korišćenje modela jake veze. Pri opisu grafena se zanemaruje preklapanje  $2p_z$  orbitala i uzima u obzir efekt izmene samo između najbližih atoma ugljenika. U dvoslojnom grafenu pojavljuje se i interakcija između različitih slojeva. Energija prelaza između najbližih atoma ugljenika i između atoma različitih slojeva za jednoslojni i dvoslojni grafen u hamiltonijanu modela jake veze u drugoj kvantizaciji [4], označeni su sa parametrima intreakcije  $t$  i  $t_\perp$ .

Što se tiče kontinualne aproksimacije, kada pređemo u impulsnu reprezentaciju, koristeći Furijerov transform, u hamiltonijanu se javlja strukturni geometrijski faktor  $\gamma(\vec{k})$  [3]. Disperziona relacija za jednoslojni grafen tada glasi :

$$E_\pm(\vec{k}) = \pm \varepsilon(\vec{k}) = \pm t |\gamma(\vec{k})| = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2(k_x a / 2) + 4 \cos(k_x a / 2) \cos(\sqrt{3} k_y a / 2)} \quad (2.1)$$

Imajući u vidu da jednačina ćelija sadrži dva atoma, od kojih svaki daje po jedan elektron po jediničnoj ćeliji i da se zanemaruje spin-orbita interakcija, sledi da je svaki nivo dvostruko degenerisan. Grana  $E_-(\vec{k})$  je valentna grana i potpuno je popunjena, dok je  $E_+(\vec{k})$  provodna grana i potpuno je prazna. Ove grane su prikazane na slici 2.3.

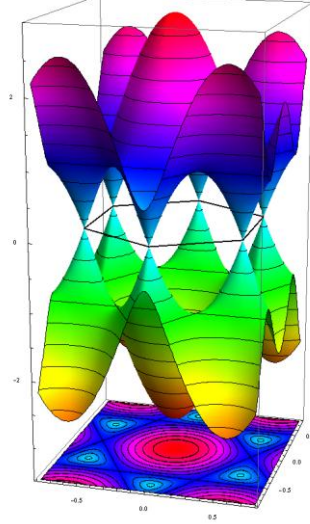
U tačkama  $\vec{K}_\pm$  disperziona energija je jednaka nuli, dok je u njihovoj okolini približna vrednost  $\varepsilon(\vec{K}_\pm + \vec{k}) \approx \mp t a \frac{\sqrt{3}}{2} (k_x \mp i k_y)$ .

U slučaju dvosloja javljaju se četiri grane sa disperzionom relacijom:

$$E_a^\pm(\vec{k}) = \frac{\Delta^2}{4} + t^2 |\gamma(\vec{k})|^2 + \frac{t_\perp^2}{2} + \left( (-1)^\alpha \sqrt{\left(\frac{t_\perp}{2}\right)^2 + t^2 |\gamma(\vec{k})|^2 (\Delta^2 + t_\perp^2)} \right) \quad (2.2)$$



( $\alpha = 1, 2$ );  $\Delta$  - je razlika potencijala među slojevima, gde su  $E_1^\pm(\vec{k})$  grane za niže energije, dok su  $E_2^\pm(\vec{k})$  visokoenergetske grane ( $|E_2^\pm(\vec{k})| \geq t_\perp$ ) koje odgovaraju „dimeru“ A1A2 i rezultat su interakcije među slojevima.



Slika 2.3: Elektronske trake u grafenu. Provodna i valentna traka se dodiruju u šest  $\vec{K}$  tačaka od kojih su dve neekvivalentne. U okolinama  $\vec{K}$  tačaka grane su konusnog oblika.

Za niskoenergetske ekscitacije disperziona relacija je  $E_1^\pm(\vec{K}_\pm + \vec{k}) \cong \pm \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ,  $\left(m = \frac{2\hbar t_\perp}{3a^2 t^2}\right)$ .

Upravo razvijanje hamiltonijana i spinora u kojima se hamiltonijan reprezentuje u okolini tačaka  $\vec{K}_\pm$  predstavlja kontinualnu aproksimaciju.

Transportne pojave zavise od niskoenergetskih grana, pa je potrebno naći niskoenergetski efektivni hamiltonijan [3]. Pri ovoj aproksimaciji se pretpostavlja da je apsolutna vrednost razlike potencijala između slojeva  $|\Delta| \ll t_\perp$  mnogo manja od parametra interakcije između slojeva. Aproksimacija obezbeđuje izdvajanje podprostora sa niskoenergetskim granama.

Nakon svih ovih aproksimacija, konačno u impulsnoj reprezentaciji hamiltonijani za jednoslojni 1. i dvoslojni grafen 2. glase:

1.  $H(k) = \hbar v_F \vec{k} \vec{\sigma}$ ,  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$  - Paulijeve matrice (2.3)

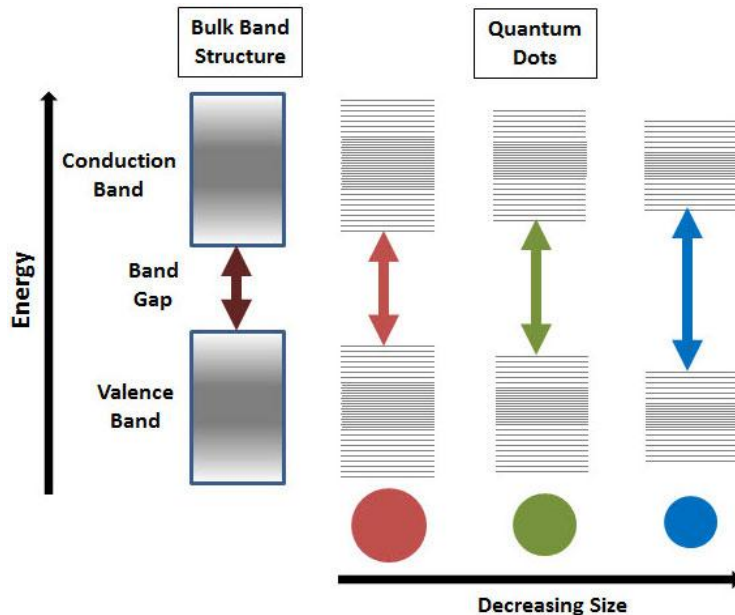
2.  $H_K^{eff}(k) = -\frac{\hbar}{2m} [(k_x^2 - k_y^2)\sigma_x + 2k_x k_y \sigma_y] = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \vec{n} \vec{\sigma}$ ,  $\vec{k} = k(\cos \phi_k, \sin \phi_k)$  i (2.4)

$$\vec{n} = n(\cos 2\phi_k, \sin 2\phi_k)$$

Treba napomenuti da se u opisu grafena pojavljuje analogon spinu, kao posledica postojanja dve podrešetke A i B. Prvoj odgovara pseudostanje pseudostanje  $|\uparrow\rangle$ , a drugoj  $|\downarrow\rangle$ . Pseudospin ćemo označiti sa  $\sigma$ .

Dobijeni hamiltonijani će biti polazna tačka za modelovanje grafenskih kvantnih tačaka (KT). Kvantne tačke (KT) je poluprovodnička nanostruktura kod koje su nosioci naelektrisanja lokalizovani u sva tri prostorna pravca. KT su sačinjene od nekoliko desetina do nekoliko desetina hiljada atoma i na taj način predstavljaju prelaz između čvrstog tela (kristala) i pojedinog atoma. Za razliku od čvrstih tela, odnos broj atoma na površini i u unutrašnjosti je mnogo veći [5]. Površinski efekti na KT se ne mogu zanemariti. KT je prvi otkrio Alexey Ekimov 1981. [6], u staklenoj matrici, posle ih je otkrio Luis E. Brus 1985. u koloidnom rastvoru. Termin “kvantna tačka“ je skovao Mark Reed [7].

Zbog male veličine, elektroni u kvantnim tačkama su zarobljeni u malom prostoru (kvantna potencijalna jama) i kada je radijus poluprovodničkog nanokristala manji od ekscitonskog Borovog radijusa (ekscitonski Borov radijus je srednje rastojanje između elektrona u provodnoj grani i šupljine u valentnoj grani, nastale ekscitacijom datog elektrona) imamo kvantizaciju energetske nivoa[8]. Borov radijus za GKT je beskonačan.

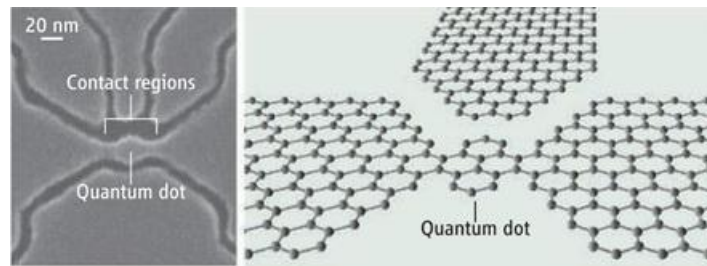


Slika 2.4. Na slici se vidi povećanje energetske procepa između valentne i provodne zone poluprovodnika, sa smanjenjem veličine kvantne tačke.

Ukoliko radijus kvantne tačke smanjujemo, energetske procep između valentne i provodne raste. Ovo ima za posledicu da pri deekscitaciji kvantne tačke dođe do promene emitovane svetlosti od crvene do plave, kada se njen radijus smanjuje .

Kvantne tačke imaju široku primenu, od izgradnje LED-a (svetlećih dioda), displeja, SSD osvetljenja, solarnih ćelija, biosenzora u medicini, do potencijalnih kandidata za izradu kvantnih računara. GKT su osim što imaju beskonačan Borov radijus značajne i zbog njihove netoksičnosti, lake dostupnosti i samih osobina grafena.

U ovom radu ograničićemo se na beskonačnu kružu grafensku kvantnu tačku. Unutar ove GKT potencijal je jednak nuli, a izvan potencijal je beskončan, dakle zidovi su joj neprobojni.



Slika 2.5. Grafenska kvantna tačka

### 3. GKT u beskonačnoj kružnoj potencijalnoj jami

#### 3.1. Slučaj za nerelativističku česticu

Krenućemo od određivanja energetskog spektra i svojstvenih stanja za nerelativističku česticu u beskonačnoj kružnoj potencijalnoj jami.

Posle ćemo ovo proširiti na slučaj kada imamo hamiltonijan koji opisuje jednoslojni grafen (Dirakova jednačina) i slučaj za dvoslojni grafen sa niskoenergetskim efektivnim hamiltonijanom.

Ovi rezultati će nam poslužiti za ispitivanje ekscitonske nestabilnosti u grafenskim kvantnim tačkama. Takođe, pokazaćemo da ovi rezultati mogu da posluže kao aproksimacija GKT sa konačnim potencijalom i realnijim graničnim uslovima. Takav primer je GKT u dvoslojnom grafenu sa konačnim paraboličnim potencijalom, obrađena u referenci [9].

Nerelativistička čestica u beskonačnoj kružnoj potencijalnoj jami opisana je sledećim hamiltonijanom [10]:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \quad (3.1)$$

i

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r \geq R \end{cases} \quad (3.2)$$

Vremenski nezavisna Šredingerova jednačina u ovom slučaju je:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Psi(r, \varphi) = E \Psi(r, \varphi) \quad (3.3)$$

Dalje u računu moramo izvršiti separaciju promenljivih na sledeći način  $\Psi(r, \varphi) = R(r)\theta(\varphi)$ . Iz ovoga dobijamo ugaonu i radijalnu jednačinu:

$$\frac{d^2\theta(\varphi)}{d\varphi^2} = -m^2\theta_m(\varphi) \quad (3.4)$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{m^2}{r} R(r) = -k^2 R(r) \quad (3.5)$$

i

$$k = \sqrt{2\mu E / \hbar^2} \quad (3.6)$$

Ugaona jednačina ima rešenje  $\theta_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ . Periodični uslov  $\theta_m(\varphi + 2\pi) = \theta_m(\varphi)$

implicira:

$$e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi} \Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.7)$$

Ugaoni moment može se pojaviti samo u diskretnim celobrojnim vrednostima. Konačno jednačina za radijalnu komponentu kad izvršimo smenu  $z = kr$  je:

$$\frac{d^2 R(z)}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dR(z)}{dz} + \left(1 - \frac{m^2}{z^2}\right) R(z) = 0 \quad (3.8)$$

koja je zapravo Beselova jednačina. Ona ima dva nezavisna rešenja za svaku vrednost  $|m|$ , regularno  $J_m(z)$  i singularno  $Y_m(z)$  (divergira kad  $z \rightarrow 0$ ) koje se odbacuje. Regularno rešenje zadovoljava granični uslov:  $J_m(kR) = 0$  (3.9)

, što dovodi do nula struja na granici.

Energetski spektar koji se dobija iz ovog graničnog uslova glasi:

$$E_{(m,n_r)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{\hbar}{2\mu R^2} (z_{(m,n_r)})^2 \quad (3.10)$$

Ovde je  $z_{(m,n_r)}$ ,  $n_r$ -ta nula. Beselove  $J_m(z)$  funkcije. Potrebno je još izvršiti normalizaciju kompletne talasne funkcije:

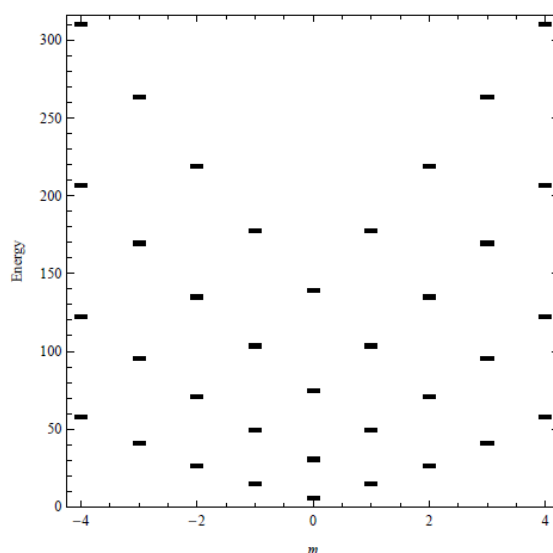
$$|N_{(m,n_r)}|^2 \int_0^{2\pi} \int_0^R [J_{(m,n_r)}(kr)]^2 r dr d\varphi = 2\pi \frac{1}{k^2} \int_0^{kR} [J_m(z)]^2 z dz = 1 \quad (3.11)$$

$$\Rightarrow N_{(m,n_r)} = \left\{ \pi [J_{m^2}(z_{mn}) - J_{m-1}(z_{mn}) J_{m+1}(z_{mn})] \right\}^{-\frac{1}{2}} \quad (R=1 \wedge k_{mn} = z_{mn}) \quad (3.12)$$

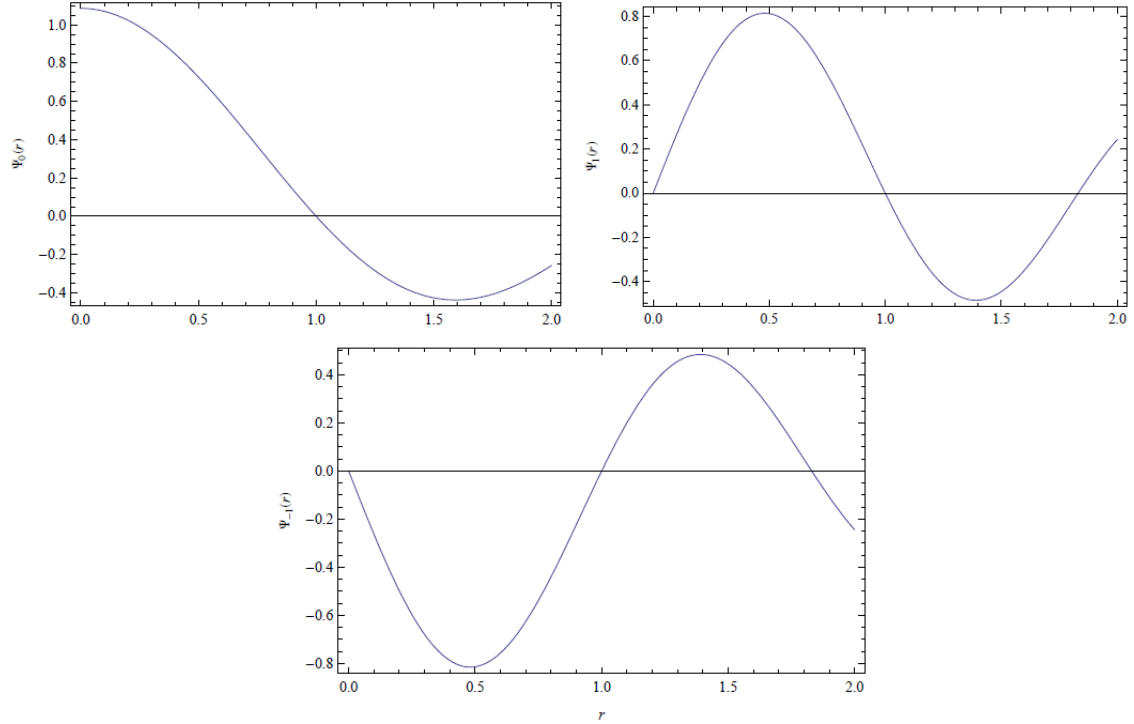
Energije normalizacione konstante za najniža tri su:

$$\begin{aligned} E_{00} &= 5.8 & N_{00} &= 1.1 \\ E_{10} &= 14.7 & N_{10} &= 1.4 \\ E_{-10} &= 14.7 & N_{-10} &= 1.4 \end{aligned} \quad (3.13)$$

( $E$  je u jedinicama  $\frac{\hbar}{2\mu R^2}$ )



Slika 3.1. Vrednosti energija u funkciji ugaonog momenta  $m$  za slučaj nerelativističke čestice u beskonačnoj kružnoj potencijalnoj jami.



Slika 3.2. Talasne funkcije za najniža tri energetska nivoa za nerelativističku česticu u beskonačnoj kružnoj potencijalnoj jami, radijusa  $R=1$ . Relevantne vrednosti talasnih funkcija su u okviru radiusa  $KT$ . Struja normalna na granicu  $KT$  u  $R=1$  uvek je jednaka nuli.

### 3.2. Slučaj relativističke čestice ili jednoslojnog grafena

#### 3.2.1. Svojtstvene energije i stanja

Poznato je da na niskim skalama energije kvazičestice u jednoslojnom grafenu su opisane sa Dirakovim hamiltonijanom, koji glasi:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \nabla + \hat{V}(r)\sigma_z \quad (3.14)$$

U slučaju konačnog potencijala oblika:

$$V(r) = V\theta(R-r) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r < R \\ V, & R \leq r < \infty \end{cases} \quad (3.15)$$

Hamiltonijan glasi [11] ( $R=1$ ):

$$\hat{H} = \hbar v_F \begin{bmatrix} V\theta(1-r) & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & -V\theta(1-r) \end{bmatrix} = \hbar v_F \begin{bmatrix} V\theta(1-r) & -i\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ -i\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) & -V\theta(1-r) \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

( $\theta$  - step funkcija)

Prelaz na polarne koordinate:

$$\left( \frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} \right) = e^{i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.17)$$

omogućava nam lakše rešavanje svojstvenog problema:

$$\hat{H}\Psi(r) = E\Psi(r) \quad (3.18)$$

$$\Rightarrow (V - E)\Psi_1 = ie^{-i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Psi_2 \quad (3.19)$$

$$(V + E)\Psi_2 = ie^{i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \Psi_1 \quad (3.20)$$

( $\hbar v_F = 1$ )

Na osnovu kružne simetrije našeg problema, pretpostavimo da je rešenje sledećeg oblika:

$$\Psi(r) = \begin{bmatrix} \Psi_1(r) \\ \Psi_2(r) \end{bmatrix} = e^{im\varphi} \begin{bmatrix} a(r) \\ ie^{i\varphi} b(r) \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

Ubacivanje ove forme rešenja u 3.18 i 3.19 sistem diferencijalnih jednačina dobijamo:

$$(V - E)a = -\left( \frac{d}{dr} + \frac{m+1}{r} \right) b \quad (3.22)$$

$$(V + E)b = \left( \frac{d}{dr} - \frac{m}{r} \right) a \quad (3.23)$$

Kad raspregnemo ovaj sistem linearnih diferencijalnih jednačina dobijamo jednačinu za  $a$ :

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r} \right) a(r) = -(V - E)^2 a \quad (3.24)$$

Ako zamenimo konačni potencijal  $V$  sa potencijalom 3.2, rešenja za  $a(r)$  su:

$$a(r) = A_{mn} J_m(k_{mn} r) \quad (3.25)$$

Ukoliko ovo rešenje vratimo u (3.22), konačno dobijamo:

$$\Psi(r) = \begin{bmatrix} \Psi_1(r) \\ \Psi_2(r) \end{bmatrix} = e^{im\varphi} \begin{bmatrix} AJ_m(kr) \\ Aie^{i\varphi} J_{m+1}(kr) \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

Ostalo je još da se nađe konstanta  $A$ .

### 3.2.2. Granični uslovi

I) Osnovni granični uslov je da nema prolaska struje izvan radijusa  $r = R$ . Iz ovoga sledi:

$$\vec{n} \langle \vec{j} \rangle = \cos \varphi \langle j_x \rangle + \sin \varphi \langle j_y \rangle = 0 \quad (r = R) \quad (3.27)$$

$$j_x = \frac{\partial H}{\partial k_x} = \sigma_x \quad \wedge \quad j_y = \frac{\partial H}{\partial k_y} = \sigma_y \quad (3.28)$$

$$\Rightarrow \cos \varphi \Psi^* \hat{\sigma}_x \Psi + \sin \varphi \Psi^* \hat{\sigma}_y \Psi = 0 \Rightarrow \quad (3.29)$$

$$\Rightarrow \cos \varphi (\Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1) + \sin \varphi (-i \Psi_1^* \Psi_2 + i \Psi_2^* \Psi_1) = 0 \quad (3.30)$$

$$\Rightarrow e^{-i\varphi} \Psi_1^* \Psi_2 + e^{i\varphi} \Psi_2^* \Psi_1 = 0 \quad (3.31)$$

$$\Rightarrow \cos \varphi R_e(\Psi_1^* \Psi_2) + \sin \varphi (\Psi_1^* \Psi_2) = 0 \quad (r = R) \quad (3.32)$$

Pretpostavimo sledeće:  $\Psi_1(R) = f_1(R) e^{i\varphi_1}$  (3.33)

$$\Psi_2(R) = f_2(R) e^{i\varphi_2} \quad (3.34)$$

$$\Rightarrow \cos \varphi \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + \sin \varphi \sin(\varphi_2 - \varphi_1) = \cos \frac{\pi}{2} \quad (3.35)$$

$$\Rightarrow \cos((\varphi_2 - \varphi_1) - \varphi) = \cos \frac{\pi}{2} \quad (3.36)$$

$$\Rightarrow \varphi_2 - \varphi_1 = \varphi + \frac{\pi}{2} \quad (3.37)$$

$$\Rightarrow \frac{\Psi_2}{\Psi_1} = \frac{f_2(R)}{f_1(R)} e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)} = B e^{i(\varphi + \frac{\pi}{2})} \quad (3.38)$$

Sad je potrebno odrediti konstantu  $B = \frac{f_2(R)}{f_1(R)}$ .

II) Uzmimo u obzir dodatni granični uslov [12]. Rešenja svojstvenog problema Dirakovog hamiltonijana u Dekartovim koordinatama i u oblasti  $V = 0$ , su ravni talasi oblika:

$$(k = \hbar v_F E = E) \Psi_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} \\ e^{\frac{1}{2}i\theta_0} \end{bmatrix} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (3.39)$$

Da bismo odredili koeficijent  $B$ , potrebno je prvo da nađemo koeficijent refleksije  $R$  za upadni i reflektovani ravni talas na granici koja omeđava potencijalnu jamu.

Talasna funkcija unutar potencijalne jame (upadni plus reflektovani talas) je:

$$\Psi = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{bmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} \\ e^{\frac{1}{2}i\theta_0} \end{bmatrix} \cdot e^{i\vec{k}_0\vec{r}} + R \begin{bmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\theta_1} \\ e^{\frac{1}{2}i\theta_1} \end{bmatrix} \cdot e^{i\vec{k}_1\vec{r}} \right\} \quad (3.40)$$

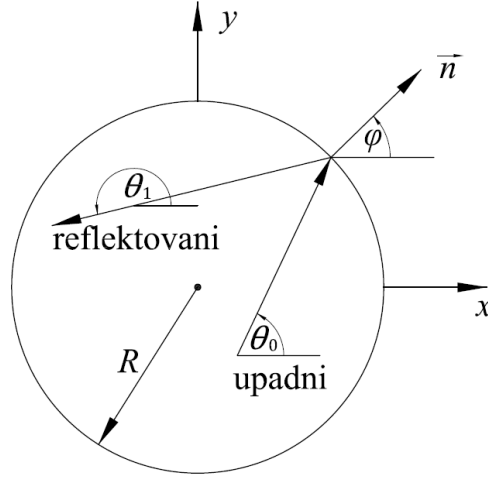
Veza između uglova ova dva talasa je:

$$\theta_1 = \pi + 2\varphi - \theta_0 \quad (3.41)$$

Videti sliku 3.3 :



Ove komponente talasa unutar jame, moraju kontinualno da se nadovezuju na talas izvan jame (zašivanje).



Slika 3.3. Upadni i reflektovani ravni talas unutar kružne kvantne tačke

Talasna funkcija koja je sa vanjske strane potencijalne jame, a koja osciluje duž njene granice i čiji je talasni broj  $\kappa$ , a energija je  $E^2 = V^2 - q^2 + \kappa^2$ , u slučaju konačnog konstantnog potencijala  $V$  je:

$$\Psi = T \left\{ \begin{array}{l} -i[(V+E)(q-\kappa)]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}i\varphi} \\ [(V-E)(q-\kappa)]^{\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{2}i\varphi} \end{array} \right\} e^{i\kappa s - qn} / [2(Vq - E\kappa)]^{\frac{1}{2}} \quad (3.42)$$

Pri računanju izvršena je smena  $\partial_x \pm i\partial_y = e^{\pm i\varphi} (\partial_n \pm \partial_s)$  gde su  $n, s$  normalna i tangencionalna koordinata.

Ukoliko pustimo da  $V \rightarrow \infty$  što povlači da  $q \rightarrow \infty$  zašivanje na granici u ovom limesu glasi:

$$e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} + R e^{-\frac{1}{2}i\theta_1} = -iTe^{-\frac{1}{2}i\varphi} \quad (3.43)$$

$$e^{\frac{1}{2}i\theta_0} + R e^{\frac{1}{2}i\theta_1} = Te^{\frac{1}{2}i\varphi} \quad (3.44)$$

Dalje treba da eliminišemo  $T$ :

$$i \left( e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} + R e^{-\frac{1}{2}i\theta_1} \right) e^{\frac{1}{2}i\varphi} = \left( e^{\frac{1}{2}i\theta_0} + R e^{\frac{1}{2}i\theta_1} \right) e^{-\frac{1}{2}i\varphi} \quad (3.45)$$

$$\Rightarrow i \left( e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} + R e^{-\frac{1}{2}\pi} e^{\frac{1}{2}i\theta_0} e^{-i\varphi} \right) e^{i\varphi} = \left( e^{\frac{1}{2}i\theta_0} + R e^{\frac{1}{2}\pi} e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} e^{i\varphi} \right) \quad (3.46)$$

$$\Rightarrow i e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} e^{i\varphi} + R e^{\frac{1}{2}i\theta_0} = i R e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} e^{i\varphi} + e^{\frac{1}{2}i\theta_0} \quad (3.47)$$

$$\Rightarrow R = 1$$

Na osnovu ovoga dobijamo odnos prve i druge komponente spinora:

$$\frac{\Psi_1(R)}{\Psi_2(R)} = \frac{e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} + e^{-\frac{1}{2}i\theta_1}}{e^{\frac{1}{2}i\theta_0} + e^{\frac{1}{2}i\theta_1}} = \frac{e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} - ie^{\frac{1}{2}i\theta_0} e^{-i\varphi}}{e^{\frac{1}{2}i\theta_0} + ie^{-\frac{1}{2}i\theta_0} e^{i\varphi}} = \frac{1}{ie^{i\varphi}} \frac{(e^{-\frac{1}{2}i\theta_0} - ie^{\frac{1}{2}i\theta_0} e^{-i\varphi})}{(-ie^{\frac{1}{2}i\theta_0} e^{-i\varphi} + e^{-\frac{1}{2}i\theta_0})} = -ie^{-i\varphi} \quad (3.48)$$

Sad možemo da izračunamo konstantu  $B$ , koja je u našem slučaju 1.

$$\text{Dalje imamo:} \quad \frac{\Psi_1(R)}{\Psi_2(R)} = \frac{J_m(kR)}{ie^{i\varphi} J_{m+1}(kR)} = -ie^{-i\varphi} \quad (3.49)$$

$$\Rightarrow J_m(k_{mn}) = J_{m+1}(k_{mn}) \quad (3.50)$$

Iz ovog uslova dobijamo energetski spektar. Ostalo je još da normiramo našu talasnu funkciju:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int_0^R \int_0^{2\pi} |\Psi(r, \varphi)|^2 r dr d\varphi = 1 \quad (3.51)$$

$$2\pi |A_{mn}|^2 \int_0^R (|a(r)|^2 + |b(r)|^2) r dr = 1 \quad (3.52)$$

$$2\pi |A_{mn}|^2 \int_0^R (|J_m(kr)|^2 + |J_{m+1}(kr)|^2) r dr = \left\{ \pi [J_m^2 + J_{m-1} J_{m+1} - J_{m+1}^2 - J_m J_{m+2}] \right\} \quad (3.53)$$

$$\Rightarrow A_{mn} = \left\{ \pi [J_m^2(k_{mn}) - J_{m+1}(k_{mn}) J_{m-1}(k_{mn}) + J_{m+1}^2(k_{mn}) - J_m(k_{mn}) J_{m+2}(k_{mn})] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.54)$$

Energije i normalizacione konstante za najniža tri nivoa su:

1.	$E_{00} = 1.4$	$A_{00} = 0.6$	
2.	$E_{10} = 2.6$	$A_{10} = 0.93$	(3.55)
3.	$E_{-10} = 3.1$	$A_{-10} = 0.89$	

### 3.2.3. Svojtvena stanja za $E < 0$ i veli $\tau = -1$

Ispitajmo sad svojtvene funkcije za negativne vrednosti energije i za veli  $\tau = -1$  stepen slobode.

Neka je  $\hat{A} = \hat{U} \hat{\kappa}$  antiunitarni operator, gde je  $\hat{U}$  unitarni deo, a  $\hat{\kappa}$  operator kompleksne konjugacije. Delovanjem ovog operatora, stanja se transformišu na sledeći način [12]:

$$\Psi' = \hat{U} \hat{\kappa} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} = \hat{U} \begin{bmatrix} \Psi_1^* \\ \Psi_2^* \end{bmatrix} \quad (3.56)$$

Proizvoljna opservabla  $\hat{B}$  se transformiše na sledeći način:

$$B' = \hat{A} \hat{B} \hat{A}^{-1} = \hat{U} \hat{\kappa} \hat{B} \hat{\kappa} \hat{U}^\dagger = \hat{U} \hat{B}^* \hat{U}^\dagger \quad (3.57)$$

Prvo pokažimo da je spektar simetričan oko  $E = 0$ . Razmotrimo slučaj kada je:

$$\hat{U} = \hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.58)$$

Pod dejstvom operatora  $\hat{A} = \hat{\sigma}_x \hat{k}$  hamiltonijan se transformiše na sledeći način:

$$\hat{H}' = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V & -i(\partial_x - i\partial_y) \\ -i(\partial_x + i\partial_y) & -V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = -\hat{H} \quad (3.59)$$

To znači da ako je  $\Psi$  svojstveno stanje od  $\hat{H}$  za svojstvenu vrednost  $E$ , onda za

$$\Psi' = \begin{bmatrix} \Psi_2^* \\ \Psi_1^* \end{bmatrix} \quad (3.60)$$

$$\text{važi } \hat{H}\Psi' = -E\Psi' \quad (3.61)$$

Sada još da pokažemo da  $\hat{H}$  ne poseduje simetriju vremenske translacije. Kada je  $\hat{A}$  operator vremenske inverzije  $\hat{T}$ , onda je  $\hat{U}$ :

$$\hat{U} = i\hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.62)$$

$\hat{H}$  se tad transformiše na sledeći način:

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V & -i(\partial_x - i\partial_y) \\ -i(\partial_x + i\partial_y) & -V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} -V & i(\partial_x - i\partial_y) \\ -i(\partial_x + i\partial_y) & V \end{bmatrix} = \hat{\sigma}_x \hat{k} - \hat{V}(r)\sigma_z \neq \hat{H} \end{aligned} \quad (3.63)$$

Ovde je narušena vremenska inverzija. Ukoliko je  $\Psi$  svojstveno stanje našeg Hamiltonijana, sa potencijalom  $V$  i energijom  $E$ , onda je:

$$\text{za } \Psi' = \begin{bmatrix} \Psi_2^* \\ -\Psi_1^* \end{bmatrix} \quad (3.64)$$

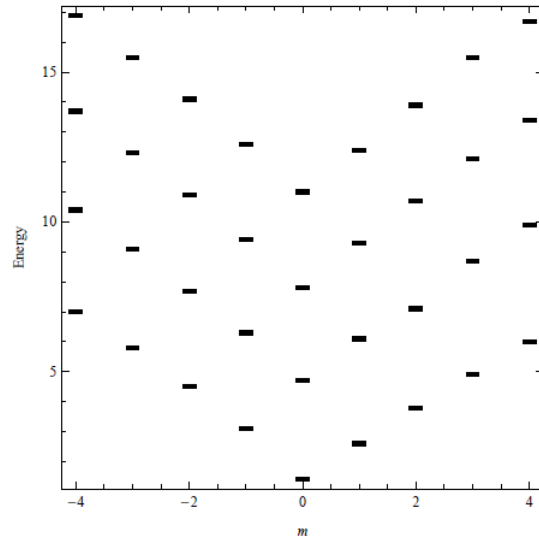
$$\hat{H}_{\tau=-1}\Psi' = E\Psi' \quad (3.65)$$

svojstveno stanje našeg hamiltonijana sa energijom  $E$  i potencijalom  $-V$ . Ovo odgovara slučaju veli stepena slobode  $\tau = -1$ .

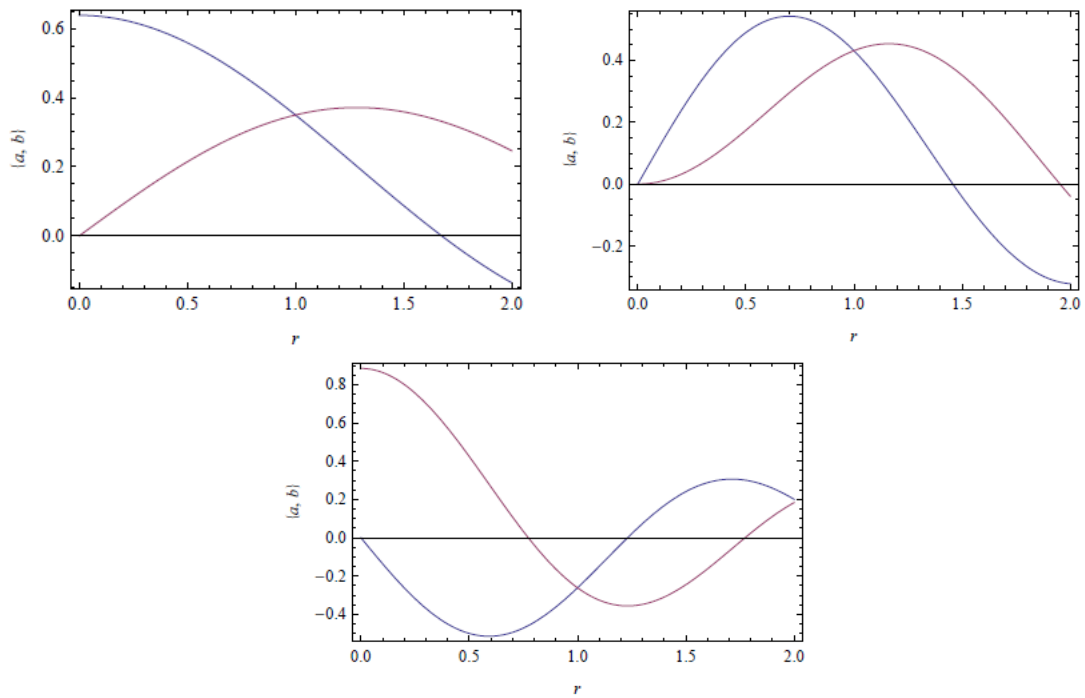
Što se tiče energetskog spektra za negativne energije, on je isti po konfiguraciji kao i za pozitivne energije, jedino je razlika u predznaku. Za slučaj velija  $\tau = -1$ , konfiguracija spektra je nešto drugačija, jer se dobija da je konstanta  $B = -1$  kad  $V \rightarrow \infty$ , pa je spektar određen na sledeći način:

$$J_m(k_{mm}) = -J_{m+1}(k_{mm}) \quad (3.66)$$

Na sledećim slikama možemo videti energetski spektar našeg Hamiltonijana za najniže vrednosti:



Slika 3.4. Vrednost energije u funkciji ugaonog momenta  $m$  za slučaj jednoslojnog grafena u beskonačnoj kružnoj potencijalnoj jami i to kada je  $\tau=1$ .



Slika 3.5. Talasne funkcije za najniža tri energetska nivoa u slučaju jednoslojnoj grafena ubeskonačnoj kružnoj potencijalnoj jami, radijusa  $R=1$ . Relevantne rednosti talasnih funkcija su u okviru radijusa  $KT$  u  $R=1$  uvek je jednaka nuli.

### 3.3. Slučaj dvoslojnog grafena

#### 3.3.1. Svojtvene energije i stanja

Dvoslojni grafen opisujemo u kontinualnoj aproksimaciji i sa niskoenergetskim efektivnim Hamiltonijanom:

$$\hat{H}_\tau^{\text{eff}}(k) = -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{bmatrix} 0 & (k_x - ik_y)^2 \\ (k_x + ik_y)^2 & 0 \end{bmatrix} + \hat{V}(r)\sigma_z \quad (3.67)$$

Uzmimo da je  $\frac{\hbar^2}{m} = 1$  i da je  $\tau = 1$ , tako da imamo:

$$\hat{H}_\tau^{\text{eff}}(k) = \hat{H} = -\frac{1}{2} \left[ (k_x^2 - k_y^2)\sigma_x + 2k_x k_y \sigma_y \right] + \hat{V}(r)\sigma_z \quad (3.68)$$

Rešimo sad svojstveni problem hamiltonijana  $\hat{H}$  u koordinatnoj reprezentaciji, za konačan potencijal [11]  $\hat{V}(r) = V\theta(1-r)$ :

$$-\frac{1}{2} \begin{bmatrix} V\theta(1-r) & (\partial_x - i\partial_y)^2 \\ (\partial_x + i\partial_y)^2 & -V\theta(1-r) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} \quad (3.69)$$

$$\Rightarrow (E - V)\Psi_1 = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \Psi_2 \quad (3.70)$$

$$(E + V)\Psi_2 = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \Psi_1 \quad (3.71)$$

Dobili smo sistem od dve linearne diferencijalne jednačine drugog reda. One mogu lako da se raspregnu.

$$\left[ \frac{1}{2} \nabla^4 - (E - V)^2 \right] \Psi_1 = \left[ \frac{1}{2} \Delta + (E - V) \right] \left[ \frac{1}{2} \Delta - (E - V) \right] \Psi_1 \quad (3.72)$$

Uzmimo da je naš spinor oblika:

$$\Psi(r) = \begin{bmatrix} \Psi_1(r) \\ \Psi_2(r) \end{bmatrix} = e^{im\phi} \begin{bmatrix} a(r) \\ e^{i^2} b(r) \end{bmatrix} \quad (3.73)$$

Kad u diferencijalnoj jednačini za  $\Psi_1(r)$ , zamenimo  $\Psi_1(r)$  sa  $e^{im\phi} a(r)$  dobijamo:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left[ \pm(E - V) - \frac{m^2}{r^2} \right] \right\} a = 0 \quad (3.74)$$

Rešenje ove dve diferencijalne jednačine unutar beskonačne kružne potencijalne jame su Beselova i modifikovana Beselova funkcija.

Ukupno rešenje je superpozicija ove dve funkcije. Tako da imamo:

$$a(r) = FJ_m(kr) + GI_m(kr) \quad (3.75)$$

Slično dobijamo i za  $\Psi_2(r) = e^{i(m+2)\phi} b(r)$ :

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left[ \pm(E-V) - \frac{(m+2)^2}{r^2} \right] \right\} b(r) = 0 \quad (3.76)$$

$$b(r) = FJ_{m+2}(kr) + GI_{m+2}(kr) \quad (3.77)$$

Ukupni spinor je oblika:

$$\Psi(r) = \begin{bmatrix} \Psi_1(r) \\ \Psi_2(r) \end{bmatrix} = e^{im\varphi} \begin{Bmatrix} FJ_m(kr) + GI_m(kr) \\ e^{i2\varphi} [FJ_{m+2}(kr) + GI_{m+2}(kr)] \end{Bmatrix} \quad (3.78)$$

Da bismo dobili energetski spektar i potpuno odredili svojstvene vektore, moramo da ispitamo granične uslove i izvršimo normalizaciju.

### 3.3.2. Granični uslovi

Imamo dva granična uslova

I) Srednja vrednost pseudospinskog dela efektivnog hamiltonijana na granici potencijalne jame, trebala bi biti jednaka nuli. Ovo je zahtev da je energija konacna kad potencijal ide u beskonačnost na granici:

$$V \langle \sigma_z \rangle = 0 \quad (r = R) \quad (3.79)$$

$$\langle \sigma_z \rangle = \Psi^* \sigma_z \Psi = \begin{bmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \\ & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix} = |\Psi_1|^2 - |\Psi_2|^2 = 0 \quad (3.80)$$

$$\Rightarrow |a(R)|^2 = |b(R)|^2 \quad (3.81)$$

$$\Rightarrow a(r) = \pm b(r) \quad (3.82)$$

II) Očekivane vrednosti struje normalne na granicu, na samoj granici ( $r=R$ ) je jednaka nuli:

$$\vec{n} \langle \vec{j} \rangle = \cos \varphi \langle j_x \rangle + \sin \varphi \langle j_y \rangle = 0 \quad (r = R) \quad (3.83)$$

$$j_x = \frac{\partial \hat{H}}{\partial k_x} = k_x \hat{\sigma}_x + k_y \hat{\sigma}_y; \quad j_y = \frac{\partial \hat{H}}{\partial k_y} = -k_y \hat{\sigma}_x + k_x \hat{\sigma}_y; \quad (3.84)$$

Dalje nastavljamo (podrazumevajući da je  $r = R$ )

$$\begin{aligned} \vec{n} \langle \vec{j} \rangle &= \cos \varphi \langle k_x \sigma_x \rangle + \sin \varphi \langle k_x \sigma_y \rangle + \cos \varphi \langle k_y \sigma_y \rangle - \sin \varphi \langle k_y \sigma_x \rangle = \\ &= \cos \varphi (\Psi_1^* k_x \Psi_2 + \Psi_2^* k_x \Psi_1) - i \sin \varphi (\Psi_1^* k_y \Psi_2 - \Psi_2^* k_y \Psi_1) \\ &\quad - i \cos \varphi (\Psi_1^* k_y \Psi_2 - \Psi_2^* k_y \Psi_1) - \sin \varphi (\Psi_1^* k_x \Psi_2 + \Psi_2^* k_x \Psi_1) = \\ &= e^{-i\varphi} \Psi_1^* k_x \Psi_2 + e^{i\varphi} \Psi_2^* k_x \Psi_1 - i e^{-i\varphi} \Psi_1^* k_y \Psi_2 + i e^{i\varphi} \Psi_2^* k_y \Psi_1 = 0 \end{aligned} \quad (3.85)$$

Izrazimo  $k_x, k_y$  preko polarnih koordinata:

$$k_x = -i \left( e^{-i\varphi} \frac{\partial}{\partial r} + e^{i\varphi} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left( -e^{-i\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + e^{i\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = -i2 \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2i \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.86)$$

$$k_y = \left( e^{-i\varphi} \frac{\partial}{\partial r} - e^{i\varphi} \frac{\partial}{\partial r} \right) - i \left( e^{-i\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + e^{i\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = -i2 \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{i2 \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.87)$$

Kad uvrstimo ovo u granični uslov za struju dobijamo:

$$\begin{aligned} \bar{n} \langle \bar{j} \rangle &= \left[ e^{-i\varphi} (-i2 \cos \varphi) \left\langle \Psi_1 \frac{\partial}{\partial r} \Psi_2 \right\rangle + e^{i\varphi} (-i2 \cos \varphi) \left\langle \Psi_2 \frac{\partial}{\partial r} \Psi_1 \right\rangle - i e^{-i\varphi} (-i2 \sin \varphi) \right. \\ &\quad \left. \left\langle \Psi_1 \frac{\partial}{\partial r} \Psi_2 \right\rangle + e^{i\varphi} (-i2 \sin \varphi) \left\langle \Psi_2 \frac{\partial}{\partial r} \Psi_1 \right\rangle \right] + \left[ e^{-i\varphi} \frac{2 \sin \varphi}{r} \left\langle \Psi_1 \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_2 \right\rangle + \right. \\ &\quad \left. + e^{i\varphi} \frac{2 \sin \varphi}{r} \left\langle \Psi_2 \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_1 \right\rangle - e^{-i\varphi} \frac{2 \cos \varphi}{r} \left\langle \Psi_1 \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_2 \right\rangle + e^{i\varphi} \frac{2 \cos \varphi}{r} \left\langle \Psi_2 \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_1 \right\rangle \right] \\ &= -i2 \left[ e^{-i2\varphi} \left\langle \Psi_1 \frac{\partial}{\partial r} \Psi_2 \right\rangle + e^{i2\varphi} \left\langle \Psi_2 \frac{\partial}{\partial r} \Psi_1 \right\rangle \right] + \\ &\quad - e^{-i2\varphi} \frac{2}{r} \left\langle \Psi_1 \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_2 \right\rangle + e^{i2\varphi} \frac{2}{r} \left\langle \Psi_2 \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_1 \right\rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.88)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \bar{n} \langle \bar{j} \rangle &= -2i \left[ \left\langle a(r) \frac{\partial}{\partial r} b(r) \right\rangle + \left\langle b(r) \frac{\partial}{\partial r} a(r) \right\rangle \right] - \\ &\quad - \frac{i2(m+2)}{r} \langle a(r)b(r) \rangle + \frac{i2m}{r} \langle b(r)a(r) \rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.89)$$

Da bismo izračunali energetski spektar, uvrstićemo prvi granični uslov u drugi.

Ovde nismo u mogućnosti da izračunamo konstantu  $B$  kao u jednoslojnom grafenu, iz razloga što ne postoji rešenje slično rešenju 3.42 ( u jednoslojnom grafenu ) konačne energije . Zbog toga ispitujemo dva slučaja  $a(R) = \pm b(R)$ .

1)  $B=1$  ili  $a(R) = b(R)$

$$\begin{aligned} \bar{n} \langle \bar{j} \rangle &= -2i \left[ a(r) \frac{\partial b(r)}{\partial r} + b(r) \frac{\partial a(r)}{\partial r} \right] - \frac{4i}{r} a(r)b(r) = \\ &= -2i \left[ a(r) \frac{\partial b(r)}{\partial r} + a(r) \frac{\partial a(r)}{\partial r} \right] - \frac{4i}{r} a(r)b(r) \end{aligned} \quad (3.90)$$

$$\begin{aligned} \bar{n} \langle \bar{j} \rangle &= - \left[ \frac{\partial b(r)}{\partial r} + \frac{\partial a(r)}{\partial r} \right] + \frac{2}{r} b(r) = \\ &= - \left[ \frac{\partial b(r)}{\partial r} + \frac{\partial a(r)}{\partial r} \right] + \frac{b(r) + b(r)}{r} = \\ &= - \left[ \frac{\partial b(r)}{\partial r} + \frac{\partial a(r)}{\partial r} \right] + \frac{b(r) + a(r)}{r} = 0 \end{aligned} \quad (3.91)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial a(r)}{\partial r} + \frac{\partial b(r)}{\partial r} = - \frac{a(r) + b(r)}{r} \quad / \frac{1}{k} \quad (3.92)$$

$$\begin{aligned} \text{i} \quad xJ'_m(x) &= mJ_m(x) - xJ_{m+1}(x) \\ xI'_m(x) &= mI_m(x) - xI_{m+1}(x) \end{aligned} \quad (3.93)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow F \left[ \frac{mJ_m}{x} - J_{m+1} \right] + G \left[ \frac{mI_m}{x} + I_{m+1} \right] + F \left[ \frac{(m+2)J_{m+2}}{x} - J_{m+3} \right] \\ + G \left[ \frac{(m+2)I_{m+2}}{x} + I_{m+3} \right] = - \frac{FJ_m + GI_m + FJ_{m+2} + GI_{m+2}}{x} \end{aligned} \quad (3.94)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{m+1}{x}a + \frac{m+3}{x}b - F \left[ J_{m+1} + \frac{2(m+2)}{x}J_{m+2} - J_{m+1} \right] + G[I_{m+1} + I_{m+3}] = \\ = \frac{m+1}{x}a + \frac{m+3}{x}b - F \frac{2(m+2)}{x} + G(I_{m+1} + I_{m+3}) = 0 \end{aligned} \quad (3.95)$$

$$\text{i} \quad FJ_{m+2} = b - GI_{m+2} \quad (3.96)$$

$$\Rightarrow \frac{m+1}{x}a + \frac{m+3}{x}b - 2(m+2)\frac{b}{x} + \frac{GI_{m+2}}{x} + G[I_{m+1} + I_{m+3}] = 0 \quad (3.97)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (m+1)a + (m+3)b - 2(m-2)b + Gx[I_{m+1} + I_{m+3}] = \\ = ma + a + ma + 3a - 2ma - 4a + Gx[I_{m+1} + I_{m+3}] = \\ = Gx[I_{m+1} + I_{m+3}] = 0 \end{aligned} \quad (3.98)$$

Obzirom da funkcija  $x[I_{m+1}(x) + I_{m+1}(x)]$  nema nula izuzev možda u nuli, onda sledi da je  $G=0$ , a traženi spinor je oblika:

$$\Psi(r) = F_{mn} \begin{bmatrix} e^{im\varphi} J_m(k_{mn}r) \\ e^{i(m+2)\varphi} J_{m+2}(k_{mn}r) \end{bmatrix} \quad (3.99)$$

Normiranjem dobijamo konstantu  $F$  i konačnu formu spinora. Dakle:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= |F_{mn}|^2 2\pi \int_0^R (|J_m(kr)|^2 + |J_{m+2}(kr)|^2) r dr = |F_{mn}|^2 \frac{2\pi}{k^2} \int_0^{kR} (|J_m(z)|^2 + |J_{m+2}(z)|^2) z dz = \\ &= \left\{ \pi \left[ J_m^2(z_{mn}) - J_{m-1}(z_{mn})J_{m+1}(z_{mn}) + J_{m+2}^2(z_{mn}) - J_{m+1}(z_{mn})J_{m+3}(z_{mn}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.100)$$

$$F_{mn} = \left\{ \pi \left[ J_m^2(z_{mn}) - J_{m-1}(z_{mn})J_{m+1}(z_{mn}) + J_{m+2}^2(z_{mn}) - J_{m+1}(z_{mn})J_{m+3}(z_{mn}) \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.101)$$

Što se tiče energetskeg spektra, on se dobija iz odnosa :

$$\frac{a(r)}{b(r)} = 1 \Rightarrow J_m(kr) = J_{m+2}(kr) \quad (3.102)$$

$$k = k_{mn} = \frac{z_{mn}}{R} = \frac{\sqrt{E_{mn}}}{R} \quad (3.103)$$

$$\Rightarrow J_m(z_{mn}) = J_{m+2}(z_{mn}) \quad (R=1) \quad (3.104)$$

Energije i normalizacione konstante za najniža tri nivoa:

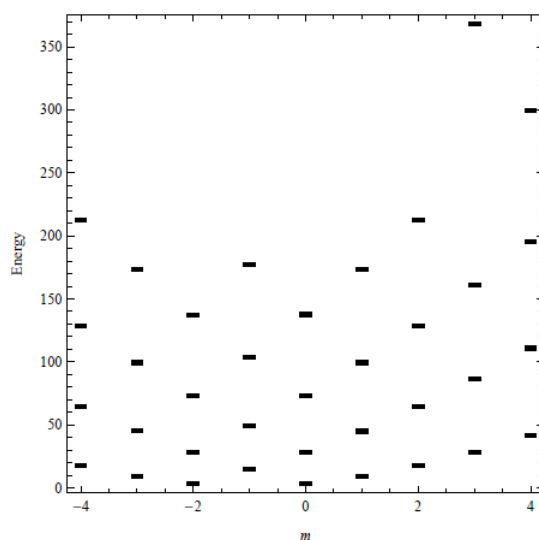
$$1. E_{00} = 3.4 \quad F_{00} = 0.8$$



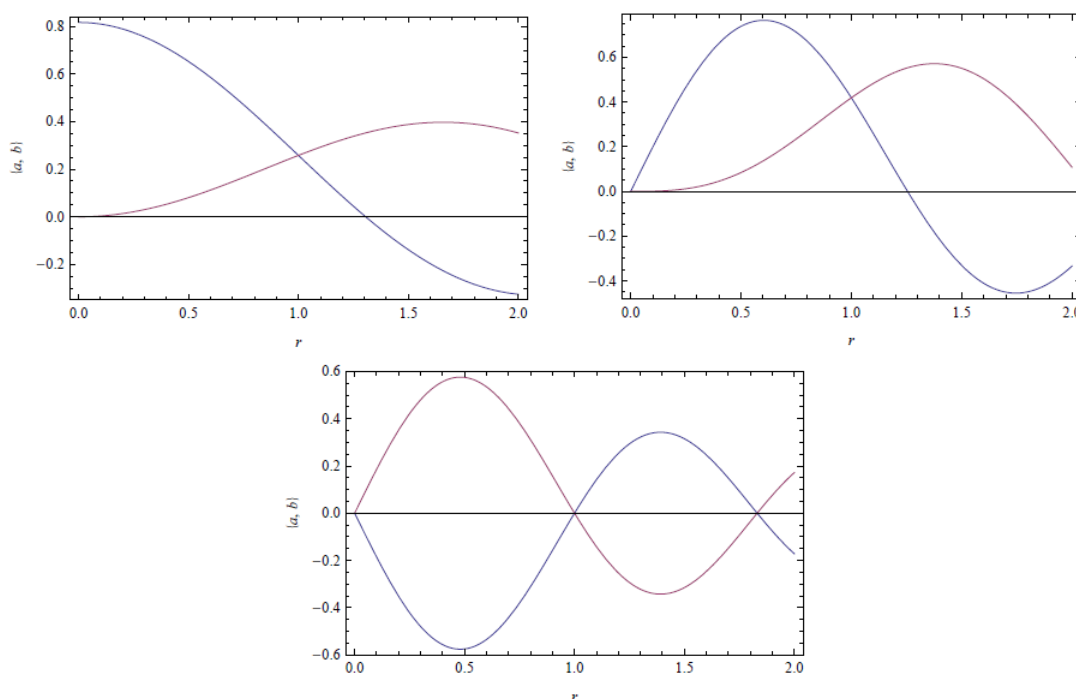
$$2. E_{10} = 9.3 \quad F_{10} = 1.3 \quad (3.105)$$

$$3. E_{-10} = 14.7 \quad F_{-10} = 1$$

Na sledećim slikama se vidi svojstveni vektori i energetska spektar za najniža stanja.



Slika 3.6. Vrednost energije u funkciji ugaonog momenta  $m$  za slučaj dvoslojnog grafena u beskonačnoj cilindričnoj potencijalnoj jami.



Slika 3.7. Talasne funkcije za najniža tri energetska nivoa u slučaju dvoslojnoj grafena ubeskonačnoj kružnoj potencijalnoj jami , radijusa  $R=1$  . Uslovi za struju su isti kao i za jednoslojnu GKT. Kvntni brojevi rešenja i kvaliativano ponašanje svojstvenih funkcija za malo  $r$  se poklapaju sa prva 3 rešenja u referenci [9] u slučaju paraboličkog potencijala .

2)  $B = -1$  ili  $a(R) = -b(R)$

$$\begin{aligned}\bar{n}\langle\bar{j}\rangle &= -2i\left[a(r)\frac{\partial b(r)}{\partial r} + b(r)\frac{\partial a(r)}{\partial r}\right] - \frac{4i}{r}a(r)b(r) = \\ &= \left[a(r)\frac{\partial b(r)}{\partial r} - a(r)\frac{\partial a(r)}{\partial r}\right] - \frac{2}{r}b(r) \\ &= \left[\frac{\partial b(r)}{\partial r} - \frac{\partial a(r)}{\partial r}\right] = -\frac{b(r) - a(r)}{r}\end{aligned}\quad (3.106)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial b(r)}{\partial r} - \frac{\partial a(r)}{\partial r} = -\frac{a(r) - b(r)}{r} \quad / \frac{1}{k} \quad (3.107)$$

$$\Rightarrow F\frac{dJ_m}{dx} + G\frac{dI_m}{dx} - F\frac{dJ_{m+2}}{dx} - G\frac{dI_{m+2}}{dx} = -\frac{FJ_m + GI_m - FJ_{m+2} - GI_{m+2}}{x} \quad (3.108)$$

$$\begin{aligned}F\left[\frac{mJ_m}{x} - J_{m+1}\right] + G\left[\frac{mI_m}{x} + I_{m+1}\right] - F\left[\frac{(m+2)J_{m+2}}{x} - J_{m+3}\right] - \\ - G\left[\frac{(m+2)I_{m+2}}{x} + I_{m+3}\right] = -\frac{FJ_m + GI_m - FJ_{m+2} - GI_{m+2}}{x}\end{aligned}\quad (4.107)$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow F\left[\frac{(m+1)J_m}{x} - J_{m+1}\right] + G\left[\frac{(m+1)I_m}{x} + I_{m+1}\right] - F\left[\frac{(m+3)J_{m+2}}{x} - J_{m+2}\right] - \\ - G\left[\frac{(m+3)I_{m+2}}{x} + I_{m+3}\right] = 0 \Rightarrow\end{aligned}\quad (3.109)$$

$$\begin{aligned}\frac{(m+1)}{x}a - \frac{(m+3)}{x}b + [-FJ_{m+1} + GI_{m+1}] - [-FJ_{m+3} + GI_{m+3}] = 0 \\ \frac{(m+1)}{x}a - \frac{(m+3)}{x}b + F[J_{m+3} - J_{m+1}] + G[I_{m+3} + I_{m+1}] = \\ = \frac{(m+1)}{x}a - \frac{(m+3)}{x}b + F[J_{m+3} - J_{m+1}] + G\left[\frac{2(m+2)}{x}I_{m+2} + I_{m+1} - I_{m+1}\right] = \\ = \frac{(m+1)}{x}a - \frac{(m+3)}{x}b + G\frac{2(m+2)}{x}I_{m+2} + F[J_{m+3} - J_{m+1}] = 0\end{aligned}\quad (3.110)$$

$$GI_{m+2} = b - FJ_{m+2} \Rightarrow \quad (3.111)$$

$$\begin{aligned}(m+1)a - (m+3)b + 2(m+2)b - FJ_{m+2} + Fx[J_{m+3} - J_{m+1}] = \\ = -(m+1)b - (m+3)b + 2(m+2)b + F[x(J_{m+3} + J_{m+1}) - J_{m+2}] = \\ = -mb - mb - mb - 3b + 2mb + 2b + F[x(J_{m+3} + J_{m+1}) - J_{m+2}] \\ = F[x(J_{m+3} - J_{m+1}) - J_{m+2}] = 0\end{aligned}\quad (3.112)$$

$$\Rightarrow F = 0 \quad \vee \quad x[J_{m+3}(x) - J_{m+1}(x)] - J_{m+2} = 0 \quad (3.113)$$

a)  $F = 0 \Rightarrow$  Tada je spinor sledećeg oblika:

$$\Psi(r) = G_{mn} \begin{bmatrix} e^{im\varphi} I_m(k_{mn}r) \\ e^{i(m+2)\varphi} I_{m+2}(k_{mn}r) \end{bmatrix} \quad (3.114)$$

Spektralna formula u ovom slučaju je:

$$I_m(kr) = -I_{m+2}(kr) \quad (3.115)$$

Konstanta  $G$  se dobija normiranjem i glasi:

$$G_{mn} = \left\{ \pi \left[ I_m^2 - I_{m-1}I_{m+1} + I_{m+2}^2 - I_{m+1}I_{m+3} \right] \right\}^{-\frac{1}{2}} \quad (3.116)$$

Za slučaj kad je  $F = 0$  ne postoji diskretan energetski spektar.

$$b) \quad x[J_{m+3}(x) - J_{m+1}(x)] - J_{m+2}(x) = 0 \quad (3.117)$$

$$\text{i iz uslova} \quad a(r) = -b(r) \Rightarrow \quad (3.118)$$

$$(FJ_m(x) + GI_m(x)) = -[(FJ_{m+2}(x) + GI_{m+2}(x))] \quad (3.119)$$

$$\Rightarrow \frac{F}{G} = -\frac{I_m + I_{m+2}}{J_m + J_{m+2}} \quad (3.120)$$

$$\Rightarrow G = -\frac{J_m + J_{m+2}}{I_m + I_{m+2}} F \quad (3.121)$$

Izvršimo normalizaciju da bismo dobili  $F$  :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= 2\pi |F_{mn}|^2 \int_0^{kR} \left\{ \left[ J_m(kr) + \frac{G_{mn}}{F_{mn}} I_m(kr) \right]^2 + \left[ J_{m+2}(kr) + \frac{G_{mn}}{F_{mn}} I_m(kr) \right]^2 \right\} r dr = \\ &= |F_{mn}|^2 \frac{2\pi}{k^2} \int_0^z \left\{ \left[ J_m^2(x) + 2 \frac{G_{mn}}{F_{mn}} J_m(x) I_m(x) + \frac{G_{mn}^2}{F_{mn}^2} I_m^2(x) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \left[ J_{m+2}^2(x) + 2 \frac{G_{mn}}{F_{mn}} J_m(x) I_m(x) + \frac{G_{mn}^2}{F_{mn}^2} I_{m+2}^2(x) \right] \right\} x dx = 1 \end{aligned} \quad (3.122)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{2\pi}{k^2} |F_{mn}|^2 \left\{ \left[ \frac{x^2}{2} (J_m^2 - J_{m-1}J_{m+1} + J_{m+2}^2 - J_{m+1}J_{m+3}) + \frac{x^2}{2} \frac{G_{mn}^2}{F_{mn}^2} (I_m^2 - I_{m-1}I_{m+1} + I_{m+2}^2 - I_{m+1}I_{m+3}) \right] + \right. \\ \left. + \frac{2x}{2} \frac{G_{mn}}{F_{mn}} (J_{m+1}I_m + I_{m+1}J_m + J_{m+3}I_{m+2} + I_{m+3}J_{m+2}) \right\} \Big|_0^{kR} = 1 \quad (r = R = 1) \end{aligned} \quad (3.123)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow F_{mn} = \left\{ \pi \left[ (J_m^2 - J_{m-1}J_{m+1} + J_{m+2}^2 - J_{m+1}J_{m+3}) + \left( \frac{J_m + J_{m+2}}{I_m + I_{m+2}} \right)^2 (I_m^2 - I_{m-1}I_{m+1} + I_{m+2}^2 - I_{m+1}I_{m+3}) - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2}{k_{mn}} \frac{J_m + J_{m+2}}{I_m + I_{m+2}} (J_{m+1}I_m + I_{m+1}J_m + J_{m+3}I_{m+2} + I_{m+3}J_{m+2}) \right] \right\}^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.124)$$

Energije i normalizacione konstante za najniža tri nivoa

$$\begin{aligned}
 1. \quad E_{00} &= 11 & F_{00} &= 1 & G_{00} &= -0.01 \\
 2. \quad E_{10} &= 20 & F_{10} &= 1.1 & G_{10} &= -0.01 \\
 3. \quad E_{-10} &= 4.7 & F_{-10} &= 0.8 & G_{-10} &= 0
 \end{aligned} \tag{3.125}$$

Vrednost najnižeg energetskog nivoa za  $E_{00}$  za  $B=1$  je 3.4, a najnižeg energetskog nivoa  $E_{-10}$  za  $B=-1$  je 4.7.

Kao što vidimo  $E_{00}(B=1) < E_{-10}(B=-1)$ , prema tome, prvi slučaj za  $B=1$  je niže vrednosti. Sa slike 3.6 se može uočiti da su najniži nivoi dvostruko degenerisani za beskonačnu kružnu potencijalnu jamu.

### 3.3.3. Svojevstvena stanja za $E < 0$ i $\tau = -1$

Uradimo analogno kao za jednosloni grafen:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}' &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \left( -\frac{1}{2} \right) \begin{bmatrix} V & (k_x - ik_y)^2 \\ (k_x + ik_y)^2 & -V \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -V & (k_x - ik_y)^2 \\ (k_x + ik_y)^2 & V \end{bmatrix} = \\
 &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} V & (k_x - ik_y)^2 \\ (k_x + ik_y)^2 & -V \end{bmatrix} \tag{3.126}
 \end{aligned}$$

Ukoliko je  $\Psi$  svojevstveno stanje refektivnog hamiltonijana sa potencijalom  $V$  i energijom  $E$ , onda je:

$$\text{za } \Psi' = \begin{bmatrix} \Psi_2^* \\ \Psi_1^* \end{bmatrix} \tag{3.127}$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{\tau=-1} \Psi' = E \Psi' \tag{3.128}$$

svojevstveno stanje Hamiltonijana sa energijom  $E$  i potencijalom  $-V$ . Ovo odgovara slučaju veli stepena slobode  $\tau = -1$ .

Pri vremenskoj inverziji, naš Hamiltonijan se transformiše na sledeći način:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}' &= -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V & (k_x - ik_y)^2 \\ (k_x + ik_y)^2 & -V \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \\
 &= -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -V & -(k_x - ik_y)^2 \\ -(k_x + ik_y)^2 & V \end{bmatrix} = -\hat{H} \tag{3.129}
 \end{aligned}$$

Na osnovu ovoga zaključujemo da su svojevstvena stanja za negativne energije sledeća:

$$\Psi' = \begin{bmatrix} \Psi_2^* \\ -\Psi_1^* \end{bmatrix} \tag{3.130}$$

$$\Rightarrow \hat{H}\Psi' = -E\Psi' \quad (3.131)$$

Što se tiče spektra za negativne energije, po konfiguraciji je isti kao za pozitivne. Spektar za slučaj  $\tau = -1$  je identičan spektru za slučaj  $\tau = 1$ .

Spektar beskonačne kružne jame je simetričan za razliku od slučaja kada postoji konačna potencijalna razlika  $0 < V(r) < \infty$  između slojeva. Na primer, kada je kvantna tačka sa konačnim parabolični potencijalom. Za paraboličnu kvantna tačku u dvoslojnom grafenu, sa konačnom potencijalnom razlikom, spektar je asimetričan. Za najniže nivoe i male vrednosti  $r$ , kvalitativne osobine svojstvenih funkcija za ova dva slučaja su održane. To znači da se pod tim uslovima, parabolička kvantna tačka [9] može aproksimirati beskonačnom kružnom.

## 4. Ekscitonska nestabilnost u kvantnim tačkama jednoslojnog grafena

Efekti Kulonove interakcije u jednoslojnom grafenu omogućavaju nam realizaciju jako korelisane verzije kvantne elektrodinamike, pomoću 2D dostupnih sistema. Konstanta fine strukture je relativno velika,  $\alpha = e^2 / \hbar \epsilon v_F \approx 2.2 / \epsilon$  gde je  $\epsilon$  efektivna dielektrička konstanta za određeni supstrat. Fermijeva brzina je  $v_F = e / 300 \approx 10^6 \text{ m/s}$ .

Na kritičkoj vrednosti  $\alpha_c$ , očekuje se prelaz semimetal-izolator, zbog pojave elektron-pozitronskih parova. Za  $\alpha > \alpha_c$  semimetal prelazi u Motov izolator, energija nastalih ekscitonskih parova počinje da bude niža od energije vakuuma. U slučaju beskonačnog jednoslojnog grafena prelaz semimetal-izolator je fazni prelaz drugog reda [13,14,15].

Monte-Karlo simulacije kvantne rešetke su pokazale da je  $\alpha_c \approx 1.1$  za beskonačni jednoslojni grafen. Ipak, ekscitonska nestabilnost nije eksperimentalno uočena.

U našem slučaju, proučavamo konačnu verziju ekscitonske nestabilnosti u potencijalnoj kružnoj jami radijusa  $r = R$ . Mi proučavamo u odnosu na referencu [16] osnovno stanje za  $N=0$  intereagujućih elektrona (vakuum+Kulonova interakcija) na vrhu Dirakovog mora (odgovara hemijskom potencijalu  $\mu = 0$ ) u slučaju jednoslojnog grafena.

Naš osnovni jednočestični hamiltonijan  $\hat{H}_0$  u elektro-magnetnom polju glasi:

$$H_0 = \hat{v}\sigma \left( \hat{p} + \frac{e}{c} \hat{A} \right) + \hat{V}(r)\sigma_z\tau_z - \mu_B \hat{S}\hat{B} \quad (4.1)$$

$\hat{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$  - spinske Paulijeve matrice

$\mu_B$  = Borov magneton, sa Lande-ovim faktorom  $g_e = 2$

$\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$  - Paulijeve matrice

$\tau_z$  - Paulijeva matrica koja odgovara veli stepenu slobode

$A(r)$  - statistički vektorski potencijal, koji omogućava uključanje magnetnog polja  $B$ , gde

biramo gejdž  $A = \frac{1}{2} B_z (-y, x)^T$ .

Mi ćemo se ograničiti na slučaj kada je  $B = 0$ , a naš hamiltonijan  $\hat{H}_0$  je:

$$\hat{H}_0 = v_F \hat{\sigma} \hat{p} + \hat{V}(r)\sigma_z\tau_z \quad (4.2)$$

Različite vrednosti velija  $\tau = \pm 1$  su raspregnute, tako da spin  $S = \pm \frac{1}{2}$  stvara dvostruku degeneraciju.

Ako dodamo magnetno polje, vektorski potencijal prikazan pomoću  $\Phi_a^{(+)}, \Phi_a^{(-)}$  ima dijagonalnu strukturu i za kvantne brojeve  $(m, \tau, s)$  i za provodno/valentnih grana indeks  $\pm 1$ .

Numeričkom dijagonalizacijom dobijamo svojstvene energije  $\tilde{E}_a > 0$  i  $\tilde{E}_{\bar{a}} < 0$  te svojstvene vektore. Na kraju uključujemo Zemanov član.

Numeričkom dijagonalizacijom dobijamo svojstvene energije  $\tilde{E}_a > 0$  i  $\tilde{E}_{\bar{a}} < 0$ , te svojstvene vektore. Na kraju uključujemo Zemanov član. Uzimajući da je  $B = B_z$ , potpuna energija  $E_a > 0$  je data sa:

$$E_a = E_{\tilde{a}} - s\mu_B B, \quad s = \pm 1 \quad (4.3)$$

Slično je i za  $E_{\bar{a}} < 0$ .

Zemanov član je poprilično mali, ali uklanja spinsku degeneraciju, dok  $A(r)$  može da uklanja veli degeneraciju.

#### 4.1. Uvođenje Kulonove interakcije

Dakle, u slučaju neintereagujućih elektrona, svi nivoi za  $E_{\bar{a}} < 0$  su popunjeni . U drugoj kvantizaciji operator polja je:

$$\Psi(r) = \sum_a \Phi_a^{(+)}(r)c_a + \sum_{\bar{a}} \Phi_{\bar{a}}^{(-)}(r)d_{\bar{a}}^\dagger \quad (4.4)$$

$c_a$  - operator anihilacije za jednočestično stanje  $\Phi_a^{(+)}$

$d_{\bar{a}}^\dagger$  - operator kreacije za jednočestično stanje  $\Phi_{\bar{a}}^{(-)}$ .

Pošto hamiltonijan komutira sa  $\hat{\tau}_z, \hat{S}B$ , možemo da pišemo:

$$\Psi(r) = \sum_{\tau's} \Psi_{\tau s}(r) \quad (4.5)$$

Hamiltonijan je dat sa:

$$\hat{H} = \hat{H}_k + \hat{H}_I \quad (4.6)$$

$$\hat{H}_k = \sum_a E_a c_a^\dagger c_a + \sum_{\bar{a}} |E_{\bar{a}}| d_{\bar{a}}^\dagger d_{\bar{a}} - \text{kinetički član} \quad (4.7)$$

$$\hat{H}_I = \frac{\hbar v_F}{2} \alpha \sum_{\tau\tau' s s'} \int \frac{dr dr'}{|r-r'|} : \Psi_{\tau s}^\dagger(r) \Psi_{\tau' s'}^\dagger(r') \Psi_{\tau' s'}(r') \Psi_{\tau s}(r) : - \text{interakcioni član} \quad (4.8)$$

Unošenjem operatora polja u Hamiltonijan 4.6, sad ga možemo podeliti na dva dela na drugačiji način:

$$\hat{H} = \hat{H}_{FIX} + \hat{H}' \quad (4.9)$$

Prvi deo  $\hat{H}_{FIX}$  ili fiksni deo komutira sa operatorom broja elektrona,  $\hat{N}_e = \sum_a c_a^\dagger c_a$ , i brojem šupljina  $\hat{N}_h = \sum_{\bar{a}} d_{\bar{a}}^\dagger d_{\bar{a}}$ . Ceo hamiltonijan komutira samo sa  $\hat{N} = \hat{N}_e - \hat{N}_h$ . Mi imamo

$\hat{N}$  dostupnih elektrona i  $\hat{N}_{eh} = \hat{N}_h$  elektron-pozitron parova na vrhu Dirakomovog mora.  $\hat{N}$  je očuvano dok  $\hat{N}_{eh}$  fluktuiraju.

$$[\hat{H}, \hat{N}] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{N}_{eh}] \neq 0, \quad [\hat{H}, \hat{N}_h] \neq 0 \quad (4.10)$$

$$[\hat{H}_{FIX}, \hat{N}_e] = [\hat{H}_{FIX}, \hat{N}_h] = 0 \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{FIX} = \hat{H}_k + \frac{1}{2} \sum_{aba'b'} (V_{abb'a} - \delta_{ss'} V_{aba'b'}) c_a^\dagger c_b^\dagger c_b c_a + \frac{1}{2} \sum_{\bar{a}\bar{b}\bar{b}'\bar{a}'} (V_{\bar{a}\bar{b}\bar{b}'\bar{a}'} - \delta_{ss'} V_{\bar{a}\bar{b}\bar{a}'\bar{b}'}) d_{\bar{a}}^\dagger d_{\bar{b}}^\dagger d_{\bar{b}'} d_{\bar{a}'} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{aa'bb'} (V_{\bar{a}\bar{b}\bar{b}'\bar{a}'} - \delta_{ss'} V_{\bar{a}\bar{b}\bar{a}'\bar{b}'}) c_a^\dagger d_{\bar{b}}^\dagger d_{\bar{b}'} c_a \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\hat{H}' = \hat{h} + \hat{h}^\dagger \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} \hat{h} = \frac{1}{2} \sum_{ab\bar{a}'\bar{b}'} (V_{ab\bar{a}'\bar{b}'} - \delta_{ss'} V_{ab\bar{a}'\bar{b}'}) c_a^\dagger c_b^\dagger d_{\bar{b}'}^\dagger d_{\bar{a}'}^\dagger + \frac{1}{2} \sum_{aa'bb'} \delta_{s,-s'} V_{ab\bar{a}'\bar{b}'} c_a^\dagger d_{\bar{a}'}^\dagger d_{\bar{b}'} c_b + \\ + \sum_{abb'\bar{a}'} (V_{abb'\bar{a}'} - \delta_{ss'} V_{bab'\bar{a}'}) c_a^\dagger d_{\bar{a}'}^\dagger c_b^\dagger c_b - \sum_{a\bar{a}'\bar{b}\bar{b}'} (V_{\bar{a}\bar{b}\bar{b}'\bar{a}'} - \delta_{ss'} V_{\bar{a}\bar{b}\bar{a}'\bar{b}'}) c_a^\dagger d_{\bar{a}'}^\dagger d_{\bar{b}'}^\dagger d_{\bar{b}'} \end{aligned} \quad (4.14)$$

Pri izračunavanju matičnih elemenata važi zakon održavanja ugaonog momenta:  $m_a + m_{a'} = m_b + m_{b'}$ . Indeks  $a$  nosi kvantne brojeve energetskog stanja  $n$ , angularnog momenta  $m$ , spina  $s$  i veličja  $\tau$ , tj.  $a = (n, m, s, \tau)$ .

Primer izračunavanja matičnih koeficijenata :

$$\begin{aligned} V_{aa'b'b} = (4\pi)^2 \alpha \Delta_0 A_a A_{a'} A_b A_{b'} \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{q,\ell} \int_0^1 dr' r'^{-\ell} \left[ J_{m_a}(E_a r) J_{m_b}(E_b r) + J_{m_a+1}(E_a r) J_{m_b+1}(E_b r) \right] \\ \int_0^r dr (r')^{\ell+1} \left[ J_{m_a}(E_a r') J_{m_b}(E_b r') + J_{m_a+1}(E_a r') J_{m_b+1}(E_b r') \right] \end{aligned} \quad (4.15)$$

$E_a$  je u jedinicama od  $\Delta_0 = \hbar v_F / R$  i  $q = |m_b - m_a|$ . Koeficijenti  $C_{q,\ell}$  nestaju kada je  $\ell + q$  neparno ili kada je  $\ell < q$ . Za  $q = \ell = 0$  imamo  $C_{00} = 1/R$ , inače

$$C_{q,\ell} = \frac{(2\ell-1)!!^{(\ell+q)/2} (n-1/2)(n-\ell-1)}{2^{\ell+1} \ell! \prod_{n=1}^{(\ell+q)/2} n(n-\ell-1/2)} \quad (4.16)$$

## 4.2. Slučaj kada uzimamo samo veli stepen slobode $\tau = \pm 1$ i kada je $N=0$

$$\begin{aligned} \hat{H}_I = \frac{\hbar v_F}{2} \sum_{\tau\tau'} \int \frac{dr dr'}{|r-r'|} : \left[ \Psi_{\uparrow}^\dagger(r) \Psi_{\uparrow}^\dagger(r') \Psi_{\uparrow}(r) \Psi_{\uparrow}(r) + \Psi_{\downarrow}^\dagger(r) \Psi_{\downarrow}^\dagger(r') \Psi_{\downarrow}(r) \Psi_{\downarrow}(r) + \right. \\ \left. + \Psi_{\uparrow}^\dagger(r) \Psi_{\downarrow}^\dagger(r') \Psi_{\downarrow}(r) \Psi_{\uparrow}(r) + \Psi_{\downarrow}^\dagger(r) \Psi_{\uparrow}^\dagger(r') \Psi_{\uparrow}(r) \Psi_{\downarrow}(r) \right] := \hat{H}_{\tau=\tau'} + \hat{H}_{\tau \neq \tau'} \end{aligned}$$

Zatim ograničimo se na potprostor stanja zadatim uslovom da su kvantni broj energetskog stanja i angularnog momenta jednak nuli ( $n=0$  i  $m=0$ ) i uzmimo u obzir samo jedan takav nivo



u provodnoj zoni i samo jedan nivo u valentnoj zoni . U tom slučaju operatori u drugoj kvantizaciji imaju sledeći oblik :

(4.17)

$$\Psi_{\uparrow\downarrow}^\dagger(r) = \Phi_{\uparrow\downarrow}^{\dagger(+)}(r)c_{\uparrow\downarrow}^\dagger + \Phi_{\uparrow\downarrow}^{\dagger(-)}(r)d_{\uparrow\downarrow}^\dagger \quad (5.18)$$

$$\Psi_{\uparrow\downarrow}(r) = \Phi_{\uparrow\downarrow}^{(+)}(r)c_{\uparrow\downarrow} + \Phi_{\uparrow\downarrow}^{(-)}(r)d_{\uparrow\downarrow} \quad (5.19)$$

Sa  $\uparrow$  i  $\downarrow$  označavamo  $\tau = 1$  i  $\tau = -1$ .

Odredimo sad komponente  $\Phi_{\uparrow\downarrow}^{\dagger(\pm)}(r)$  i  $\Phi_{\uparrow\downarrow}^{(\pm)}(r)$ :

1.)  $\tau = 1$  :

a)  $E_a > 0$  ;  $a = (n=0, m=0, \tau=1)$  :

$$\Phi_a^{(+)}(r) = A_{00} \begin{bmatrix} J_0(kr) \\ ie^{i\varphi} J_1(kr) \end{bmatrix} ; \quad \Phi_a^{\dagger(+)}(r) = A_{00} \begin{bmatrix} J_0(kr) \\ -ie^{-i\varphi} J_1(kr) \end{bmatrix}^T \quad (4.20)$$

b)  $E_{\tilde{a}} < 0$  ;  $\tilde{a} = (n=0, m=0, \tau=1)$  :

$$\Phi_{\tilde{a}}^{(-)}(r) = A_{00} \begin{bmatrix} -ie^{-i\varphi} J_1(kr) \\ J_0(kr) \end{bmatrix} ; \quad \Phi_{\tilde{a}}^{\dagger(-)}(r) = A_{00} \begin{bmatrix} ie^{i\varphi} J_1(kr) \\ J_0(kr) \end{bmatrix}^T \quad (4.21)$$

2.)  $\tau = -1$  :

a)  $E_a > 0$  ;  $a = (n=0, m=0, \tau=-1)$  :

$$\Phi_a^{(+)}(r) = A_{00} \begin{bmatrix} -ie^{-i\varphi} J_1(kr) \\ -J_0(kr) \end{bmatrix} ; \quad \Phi_a^{\dagger(+)}(r) = A_{00} \begin{bmatrix} ie^{i\varphi} J_1(kr) \\ -J_0(kr) \end{bmatrix}^T \quad (4.22)$$

b)  $E_{\tilde{a}} < 0$  ;  $\tilde{a} = (n=0, m=0, \tau=-1)$  :

$$\Phi_{\tilde{a}}^{(-)}(r) = A_{00} \begin{bmatrix} -J_0(kr) \\ ie^{i\varphi} J_1(kr) \end{bmatrix} ; \quad \Phi_{\tilde{a}}^{\dagger(-)}(r) = A_{00} \begin{bmatrix} -J_0(kr) \\ -ie^{-i\varphi} J_1(kr) \end{bmatrix}^T \quad (4.23)$$

Odredimo do kraja naš interakcioni hamiltonijan:

$$\hat{H}_{\tau=\tau'} = \frac{\hbar v_F}{2} \int \frac{drdr'}{|r-r'|} : \left\{ \left[ \Psi_{\uparrow}^\dagger(r) \Psi_{\uparrow}^\dagger(r') \Psi_{\uparrow}(r) \Psi_{\uparrow}(r') \right] + \left[ \Psi_{\downarrow}^\dagger(r) \Psi_{\downarrow}^\dagger(r') \Psi_{\downarrow}(r) \Psi_{\downarrow}(r') \right] \right\} :=$$

$$= \frac{\hbar v_F}{2} \int \frac{drdr'}{|r-r'|} : \left[ \left( \Phi_{\uparrow}^{\dagger(+)}(r) c_{\uparrow}^\dagger + \Phi_{\uparrow}^{\dagger(-)}(r) d_{\uparrow}^\dagger \right) \left( \Phi_{\uparrow}^{\dagger(+)}(r') c_{\uparrow}^\dagger + \Phi_{\uparrow}^{\dagger(-)}(r') d_{\uparrow}^\dagger \right) \right.$$

$$\left. \left( \Phi_{\uparrow}^{(+)}(r') c_{\uparrow} + \Phi_{\uparrow}^{(-)}(r') d_{\uparrow} \right) \left( \Phi_{\uparrow}^{(+)}(r) c_{\uparrow} + \Phi_{\uparrow}^{(-)}(r) d_{\uparrow} \right) \right] : + \hat{H}_{\downarrow} =$$

$$:= \left[ V_{\uparrow\uparrow}^{++++} c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{+++-} c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} d_{\uparrow}^\dagger + V_{\uparrow\uparrow}^{+--+} c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{----} c_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} c_{\uparrow} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{-+++} d_{\uparrow} c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} c_{\uparrow} + \right.$$

$$+ V_{\uparrow\uparrow}^{++--} c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow}^\dagger + V_{\uparrow\uparrow}^{+-+-} c_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} c_{\uparrow} d_{\uparrow}^\dagger + V_{\uparrow\uparrow}^{-+--} d_{\uparrow} c_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} d_{\uparrow}^\dagger + V_{\uparrow\uparrow}^{--++} c_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} +$$

$$+ V_{\uparrow\uparrow}^{-+-+} d_{\uparrow} c_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{--+-} d_{\uparrow} d_{\uparrow} c_{\uparrow} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{+-} c_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow}^\dagger + V_{\uparrow\uparrow}^{-+} d_{\uparrow} c_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow}^\dagger +$$

$$\left. + V_{\uparrow\uparrow}^{--} d_{\uparrow} d_{\uparrow} c_{\uparrow} d_{\uparrow}^\dagger + V_{\uparrow\uparrow}^{--} d_{\uparrow} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^\dagger c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{--} d_{\uparrow} d_{\uparrow} d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow}^\dagger \right] : + \hat{H}_{\downarrow} =$$

$$\begin{aligned}
&= \left[ V_{\uparrow\uparrow}^{++++} c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} c_{\uparrow} - V_{\uparrow\uparrow}^{++++} c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{++++} c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{++++} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} c_{\uparrow} c_{\uparrow} - V_{\uparrow\uparrow}^{++++} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} c_{\uparrow} c_{\uparrow} + \right. \\
&\quad + V_{\uparrow\uparrow}^{++--} c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} + V_{\uparrow\uparrow}^{++--} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} c_{\uparrow} - V_{\uparrow\uparrow}^{++--} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} c_{\uparrow} - V_{\uparrow\uparrow}^{++--} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} c_{\uparrow} - \\
&\quad - V_{\uparrow\uparrow}^{--++} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{--++} d_{\uparrow} d_{\uparrow} c_{\uparrow} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{--++} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - V_{\uparrow\uparrow}^{--++} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - \\
&\quad \left. - V_{\uparrow\uparrow}^{--++} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{--++} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\uparrow}^{--++} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\uparrow} \right] + \hat{H}_{\downarrow\downarrow} \quad (4.24)
\end{aligned}$$

$\hat{H}_{\downarrow\downarrow}$  se izračunava na analogan način.

Zadržali smo dvofermionske članove sa  $c_{\uparrow}$  i  $c_{\downarrow}$  zbog sistematskog praćenja matričnih elemenata.

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\tau\tau'} &= \frac{\hbar v_F}{2} \int \frac{dr dr'}{|r-r'|} : \left\{ \left[ \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(r) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(r') \Psi_{\downarrow}(r') \Psi_{\uparrow}(r) \right] + \left[ \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(r) \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(r') \Psi_{\uparrow}(r') \Psi_{\downarrow}(r) \right] \right\} : = \\
&= \left[ V_{\uparrow\downarrow}^{++++} c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow} c_{\uparrow} - V_{\uparrow\downarrow}^{++++} c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow} + V_{\uparrow\downarrow}^{++++} c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow} + V_{\uparrow\downarrow}^{++++} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} c_{\downarrow} c_{\uparrow} - V_{\uparrow\downarrow}^{++++} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} c_{\downarrow} c_{\uparrow} + \right. \\
&\quad + V_{\uparrow\downarrow}^{++--} c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} + V_{\uparrow\downarrow}^{++--} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} c_{\downarrow} - V_{\uparrow\downarrow}^{++--} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} c_{\downarrow} - V_{\uparrow\downarrow}^{++--} c_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} c_{\uparrow} + \\
&\quad + V_{\uparrow\downarrow}^{--++} c_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\downarrow}^{--++} d_{\uparrow} d_{\downarrow} c_{\downarrow} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\downarrow}^{--++} c_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - V_{\uparrow\downarrow}^{--++} c_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - \\
&\quad \left. - V_{\uparrow\downarrow}^{--++} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow} c_{\downarrow} + V_{\uparrow\downarrow}^{--++} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow} c_{\uparrow} + V_{\uparrow\downarrow}^{--++} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\downarrow} \right] + \hat{H}_{\uparrow\downarrow} \quad (4.25)
\end{aligned}$$

$\hat{H}_{\uparrow\downarrow}$  se računa na analogan način kao i  $\hat{H}_{\downarrow\uparrow}$  samo se zameni  $\uparrow\downarrow$  sa  $\downarrow\uparrow$ .

Što se tiče notacije u koeficijentima  $V$ , u gornjem indeksu  $+$  označava  $\Phi^{(+)}$ ,  $-$  označava  $\Phi^{(-)}$ , a donji indeksi, prvi označava  $\tau$ , a drugi  $\tau'$ . Spoljašnji gornji indeksi su vezani za  $r$ , a unutrašnji za  $r'$ .

Da bismo do kraja izračunali naš hamiltonijan moramo da izračunamo sve koeficijente. Zbog toga je neophodno Kulonov potencijal razviti u red koristeći Ležandrove funkcije:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|r-r'|} &= \frac{1}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \varphi}} = \frac{1}{r_{>}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left( \frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^{\ell} P_{\ell}(\cos \varphi), \quad \text{ovde je } r_{>} = \max(r, r') \quad \text{i} \\
r_{<} &= \min(r, r') \quad (4.26)
\end{aligned}$$

U našem slučaju  $m_a = m_a' = m_b = m_b' = 0$ . Jedine moguće kombinacije koje daju koeficijent  $V$  različit od nule su dva tipa integrala:

$$\begin{aligned}
V_1 &= \alpha(4\pi)^2 \Delta_0 A_{00}^4 \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{0,\ell} \int_0^1 dr r^{-\ell} \left[ J_0^2(E_{00}r) + J_1^2(E_{00}r) \right] \cdot \int_0^r dr' r'^{(\ell-1)} \left[ J_0^2(k_{00}r') + J_1^2(k_{00}r') \right] = \\
&= \alpha C_1 = \alpha N_{00} \cdot 0.68 \quad (4.27)
\end{aligned}$$

$$V_2 = \alpha(4\pi)^2 \Delta_0 A_{00}^4 \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{1,\ell} \int_0^1 dr r^{-\ell} \left[ J_0(E_{00}r) J_1(E_{00}r) \right] \cdot \int_0^r dr' r'^{(\ell+1)} \left[ J_0(E_{00}r') J_1(E_{00}r') \right] =$$

$$= \alpha C_2 = \alpha N_{00} \cdot 0.016 \quad (4.28)$$

$$\Delta_0 = 1 \quad i \quad N_{00} = (4\pi)^2 A_{00}^4 = 26.15 \quad (4.29)$$

$$V_1 = 1.78\alpha \quad (4.30)$$

$$V_2 = 0,41\alpha$$

$$\text{I) } \begin{aligned} V_{\tau=\tau'}^{++++} &= V_{\tau=\tau'}^{+---} = V_{\tau=\tau'}^{-++-} = V_{\tau=\tau'}^{----} = V_1 \\ V_{\tau=\tau'}^{+--+} &= V_{\tau=\tau'}^{-+-+} = V_2 \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\text{II) } \begin{aligned} V_{\tau \neq \tau'}^{++++} &= V_{\tau \neq \tau'}^{+---} = V_{\tau \neq \tau'}^{-++-} = V_{\tau \neq \tau'}^{----} = V_1 \\ V_{\tau \neq \tau'}^{+--+} &= V_{\tau \neq \tau'}^{-+-+} = -V_2 \end{aligned} \quad (4.32)$$

Na osnovu ovih rezultata, naš hamiltonijan je oblika:

$$\begin{aligned} \hat{H} = E_{00}(c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\uparrow} + c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\downarrow}) + |E_{00}|(d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow} + d_{\downarrow}^{\dagger}d_{\downarrow}) + V_1(-2c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\uparrow}c_{\downarrow} - 2c_{\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger}c_{\uparrow}d_{\uparrow} - 2c_{\downarrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger}c_{\downarrow}d_{\downarrow} - \\ 2c_{\downarrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow}d_{\uparrow} - 2c_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger}c_{\uparrow}d_{\downarrow} - 2d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger}d_{\uparrow}d_{\downarrow}) + V_2(2c_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger}c_{\downarrow}d_{\downarrow} - 2c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow} - 2c_{\uparrow}c_{\downarrow}d_{\uparrow}d_{\downarrow}) \end{aligned} \quad (4.33)$$

Da bismo mogli odrediti matrice elemente hamiltonijana, moramo da preciziramo u kom prostoru stanja radimo. Za prostor stanja uzimamo šestodimenzionalni potprostor koji je isečen iz beskonačnog svojstvenog prostora. Uzeli smo u obzir sve mogućnosti stvaranja parova su popunjeni  $n=0, m=0$  i  $\tau=\pm 1$  za  $E_a < 0$ , a dostupna za ekscitaciju  $n=0, m=0$  i  $\tau=\pm 1$  za  $E_a > 0$  stanja.

Naš potprostor stanja je

$$\beta\kappa = [ |0\rangle, c_{\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, c_{\downarrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, c_{\uparrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, c_{\downarrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, c_{\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow}^{\dagger}d_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle ]^T = [ |0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, |5\rangle ]^T \quad (4.34)$$

$$\text{Matrični koeficijenti } H_{mm} = \langle m | \hat{H} | n \rangle \text{ su: } \langle m | \hat{H} | n \rangle = 0, \{ m, n = 1, \dots, 4 \text{ i } m \neq n \} \quad (4.35)$$

$$\langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle = \langle 1 | \hat{H} | 1 \rangle = \langle 2 | \hat{H} | 2 \rangle = \langle 3 | \hat{H} | 3 \rangle = \langle 4 | \hat{H} | 4 \rangle = 2(|E_{00}| - V_1 + V_2) \quad (4.36)$$

$$\langle 0 | \hat{H} | 5 \rangle = \langle 5 | \hat{H} | 0 \rangle = -2V_2$$

A matrica je:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & & & & & -2V_2 \\ & 2(|E_{00}| - V_1 + V_2) & & & & \\ & & 2(|E_{00}| - V_1 + V_2) & & & \\ & & & 2(|E_{00}| - V_1) & & \\ & & & & 2(|E_{00}| - V_1) & \\ -2V_2 & & & & & 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) \end{bmatrix} \quad (4.37)$$

$$\text{Neka je } C = -2V_2, A = 2(|E_{00}| - V_1 + V_2), B = 2(|E_{00}| - V_1), D = 2A \quad (4.38)$$

Potrebno je dijagonalizovati deo hamiltonijana čiji potprostor sadrži vektore  $|0\rangle$  i  $|5\rangle$  :

$$H_{|0\rangle, |5\rangle} = \begin{bmatrix} 0 & -2V_2 \\ -2V_2 & 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & C \\ C & 2A \end{bmatrix} \quad (4.39)$$

$$\begin{vmatrix} E & C \\ C & 2A-E \end{vmatrix} = -E(2A-E) - C^2 = E^2 - 2AE - C^2 = 0 \quad (4.40)$$

$$E_{|0\rangle,|5\rangle} = \frac{2A \pm \sqrt{4A^2 + 4C^2}}{2} = A \pm \sqrt{A^2 + C^2} \quad (4.41)$$

$$E_0 = A - \sqrt{A^2 + C^2}, E_1 = A, E_2 = A, E_3 = B, E_4 = B, E_5 = A + \sqrt{A^2 + C^2} \quad (4.42)$$

Dalje određujemo polarizaciju  $P$ , koja predstavlja meru udela pojedinih ekscitonskih stanja u stanju najniže energije. Izračunava se kao kvadrat apsolutne vrednosti koeficijenata određenog ekscitonskog stanja u stanju najniže energije.

Određivanje polarizacije je bitno da bi smo odredili vrednost  $\alpha$  za koju ekscitonska fizika postaje značajna.

Polarizacija za najnižu energiju  $E_0 = A - \sqrt{A^2 + C^2}$ :

$$\begin{bmatrix} -A + \sqrt{A^2 + C^2} & C \\ C & A + \sqrt{A^2 + C^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |0\rangle \\ |5\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.43)$$

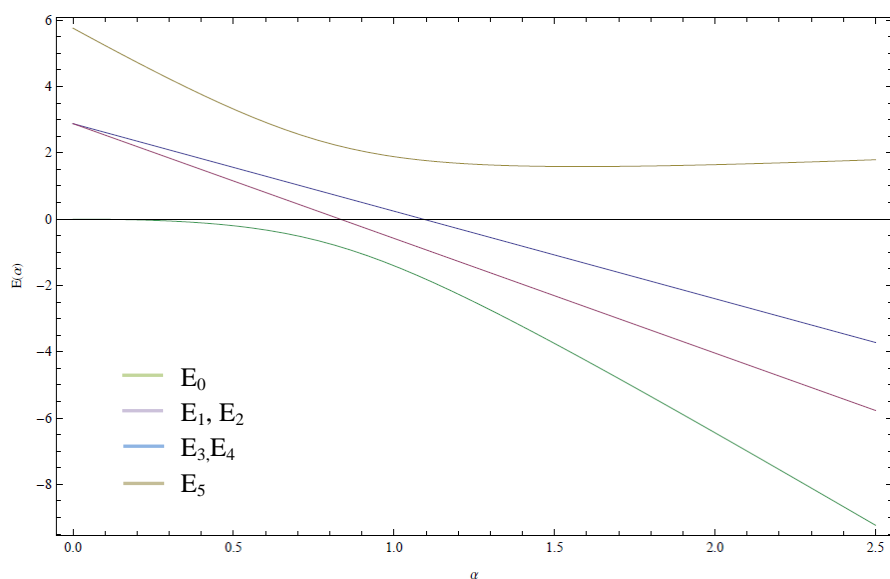
$$|E_{|0\rangle,|5\rangle}\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{A - \sqrt{A^2 + C^2}}{C}\right)^2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{A - \sqrt{A^2 + C^2}}{C} \end{bmatrix} \quad (4.44)$$

$$\Rightarrow P = \frac{\left(\frac{A - \sqrt{A^2 + C^2}}{C}\right)^2}{1 + \left(\frac{A - \sqrt{A^2 + C^2}}{C}\right)^2} = \frac{1}{D + 1} \quad (4.45)$$

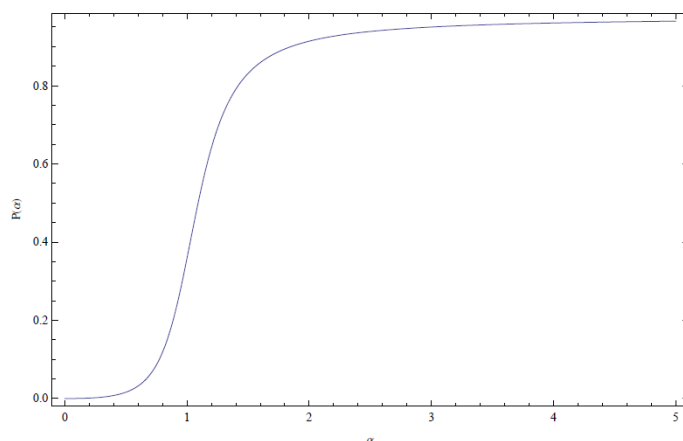
$$D = \left(\frac{A - \sqrt{A^2 + C^2}}{C}\right)^2 \quad (4.46)$$

Na sledećim slikama se vidi zavisnost energija i polarizacije od  $\alpha$ .

Iz grafika se vidi da polarizacija postaje značajna (0.5) za vrednost  $\alpha \approx 1$ .



Slika 4.1. Zavisnost energija od vrednosti koeficijenta  $\alpha$  za slučaj jednoslojnog grafena, kada imamo samo veli stepen slobode. Različiti energetske nivoi su označeni sa  $E_0, E_1, E_2, E_3, E_4$  i  $E_5$ .



Slika 4.2. Zavisnost polarizacije od vrednosti koeficijenta  $\alpha$  za slučaj jednoslojnog grafena, kada imamo samo veli stepen slobode.

### 4.3. Slučaj kada uzimamo spinski $s = \pm 1$ i veli $\tau = \pm 1$ stepen slobode i kada je $N=0$

U opštem slučaju kada uzimamo u obzir spin, za jednoslojni grafen spinori su:

a)  $E_a > 0$  ,  $\underline{a} = (n, m, \tau = 1, m_s)$

$$\Phi_a^{(+)}(\mathbf{r}) = A_{mn} e^{im\varphi} \begin{bmatrix} J_m(kr) \\ ie^{i\varphi} J_{m+1}(kr) \end{bmatrix} \chi(s, m_s) \quad (4.47)$$

b)  $E_{\tilde{a}} < 0$  ,  $\underline{\tilde{a}} = (n, m, \tau = 1, m_s)$

$$\Phi_a^{(-)}(r) = A_{mn} e^{-im\varphi} \begin{bmatrix} -ie^{-i\varphi} J_{m+1}(kr) \\ J_m(kr) \end{bmatrix} \chi(s, m_s) \quad (4.48)$$

c)  $E_a > 0$  ,  $a = (n, m, \tau = -1, m_s)$

$$\Phi_a^{(+)}(r) = A_{mn} e^{-im\varphi} \begin{bmatrix} -ie^{-i\varphi} J_{m+1}(kr) \\ -J_m(kr) \end{bmatrix} \chi(s, m_s) \quad (4.49)$$

d)  $E_a < 0$  ,  $\tilde{a} = (n, m, \tau = -1, m_s)$

$$\Phi_a^{(-)}(r) = A_{mn} e^{im\varphi} \begin{bmatrix} -J_m(kr) \\ ie^{i\varphi} J_{m+1}(kr) \end{bmatrix} \chi(s, m_s) \quad (4.50)$$

U našem slučaju je  $m_a = m_{a'} = m_b = m_{b'} = 0$ . Interakcioni hamiltonijan, možemo da podelimo na sledeći način:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar v_F}{2} \int \frac{dr dr'}{|r-r'|} : \Psi_{\tau s}^\dagger(r) \Psi_{\tau' s'}^\dagger(r') \Psi_{\tau' s'}(r') \Psi_{\tau s}(r) : \\ &= \hat{H}_{\tau=\tau', m_s=m_s} + \hat{H}_{\tau=\tau', m_s \neq m_s} + \hat{H}_{\tau \neq \tau', m_s=m_s} + \hat{H}_{\tau \neq \tau', m_s \neq m_s} \\ &= \left[ \left( \hat{H}_{++\uparrow\uparrow} + \hat{H}_{++\downarrow\downarrow} + \hat{H}_{-\uparrow\uparrow} + \hat{H}_{-\downarrow\downarrow} \right) + \left( \hat{H}_{++\uparrow\downarrow} + \hat{H}_{++\downarrow\uparrow} + \hat{H}_{-\uparrow\downarrow} + \hat{H}_{-\downarrow\uparrow} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left( \hat{H}_{+\uparrow\uparrow} + \hat{H}_{+\downarrow\downarrow} + \hat{H}_{-\uparrow\uparrow} + \hat{H}_{-\downarrow\downarrow} \right) + \left( \hat{H}_{+\uparrow\downarrow} + \hat{H}_{+\downarrow\uparrow} + \hat{H}_{-\uparrow\downarrow} + \hat{H}_{-\downarrow\uparrow} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.51)$$

Na osnovu selekcionih pravila o slaganju ugaonih momenata sledeći koeficijenti u razvoju hamiltonijana su različiti od nule (za sve moguće kombinacije spina):

$$\text{I) } \begin{aligned} V_{\tau=\tau'}^{++++} &= V_{\tau=\tau'}^{+---} = V_{\tau=\tau'}^{-++-} = V_{\tau=\tau'}^{----} = V_1 \\ V_{\tau=\tau'}^{+--+} &= V_{\tau=\tau'}^{-++-} = V_2 \end{aligned} \quad (4.52)$$

$$\text{II) } \begin{aligned} V_{\tau \neq \tau'}^{++++} &= V_{\tau \neq \tau'}^{+---} = V_{\tau \neq \tau'}^{-++-} = V_{\tau \neq \tau'}^{----} = V_1 \\ V_{\tau \neq \tau'}^{+--+} &= V_{\tau \neq \tau'}^{-++-} = -V_2 \end{aligned} \quad (4.53)$$

Pojedini članovi u hamiltonijanu su:

$$\hat{H}_{\tau=\tau', m_s=m_s} = 2(V_2 - V_1) \left[ c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow} c_{+\uparrow} + c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow} c_{+\downarrow} + c_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow} c_{-\uparrow} + c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow} c_{-\downarrow} \right] \quad (4.54)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\tau=\tau', m_s \neq m_s} &= \left\{ V_1 \left[ 2 \left( c_{+\uparrow}^\dagger c_{+\downarrow}^\dagger c_{+\downarrow} c_{+\uparrow} + c_{-\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger c_{-\downarrow} c_{-\uparrow} + d_{+\uparrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow} d_{+\uparrow} + d_{-\uparrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow} d_{-\uparrow} \right) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2 \left( c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow} c_{+\uparrow} + c_{-\uparrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow} c_{-\uparrow} + c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow} c_{+\downarrow} + c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow} c_{-\downarrow} \right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - 2V_2 \left[ c_{+\uparrow}^\dagger c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger + c_{-\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger + c_{+\uparrow} c_{+\downarrow} d_{+\downarrow} d_{+\uparrow} + c_{-\uparrow} c_{-\downarrow} d_{-\downarrow} d_{-\uparrow} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\tau \neq \tau', m_s=m_s} &= \left\{ V_1 \left[ 2 \left( c_{+\uparrow}^\dagger c_{-\uparrow}^\dagger c_{-\uparrow} c_{+\uparrow} + c_{+\downarrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger c_{-\downarrow} c_{+\downarrow} + d_{+\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow} d_{+\uparrow} + d_{+\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow} d_{+\downarrow} \right) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2 \left( c_{+\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow} c_{+\uparrow} + c_{+\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow} c_{+\downarrow} + c_{-\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow} c_{-\uparrow} + c_{-\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow} c_{-\downarrow} \right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - 2V_2 \left[ c_{+\uparrow}^\dagger c_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger + c_{+\downarrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger + c_{+\uparrow} c_{-\uparrow} d_{-\uparrow} d_{+\uparrow} + c_{+\downarrow} c_{-\downarrow} d_{-\downarrow} d_{+\downarrow} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.56)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\tau \neq \tau', m_s \neq m_s'} = & \left\{ V_1 \left[ 2 \left( c_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger c_{-\downarrow} c_{-\downarrow} + c_{+\downarrow}^\dagger c_{-\uparrow}^\dagger c_{-\uparrow} c_{+\downarrow} + d_{+\uparrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow} d_{+\uparrow} + d_{+\downarrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow} d_{+\downarrow} \right) - \right. \right. \\ & \left. \left. - 2 \left( c_{+\uparrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow} c_{+\uparrow} + c_{+\downarrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow} c_{+\downarrow} + c_{-\uparrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow} c_{-\uparrow} + c_{-\downarrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow} c_{-\downarrow} \right) \right] - \right. \\ & \left. - 2V_2 \left[ c_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger + c_{+\downarrow}^\dagger c_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger + c_{+\uparrow} c_{-\downarrow} d_{-\downarrow} d_{+\uparrow} + c_{+\downarrow} c_{-\uparrow} d_{-\uparrow} d_{+\downarrow} \right] \right\} \quad (4.57) \end{aligned}$$

Odredimo sad zavisnost svojstvenih energija našeg hamiltonijana u zavisnosti od koeficijenta  $\alpha$ . Nakon toga je potrebno naći zavisnost polarizacije od  $\alpha$  za najniži energetski nivo. Prostor stanja koji koristimo uključuje vakuum sve moguće ekscitonske ekscitacije sa jednim, dva, tri i četiri različita elektron-šupljina para.

Hamiltonijan je blok-dijagonalan i blokovi su dati za bazis  $\beta_i$  ili za nekoliko bazisa  $\beta_{ij}$  ispod matrica  $H_i$ .

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & -2V_2 & -2V_2 & -2V_2 & -2V_2 & 0 \\ -2V_2 & 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) & 2V_2 & 2V_2 & 0 & -2V_2 \\ -2V_2 & 2V_2 & 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) & 0 & 2V_2 & -2V_2 \\ -2V_2 & 2V_2 & 0 & 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) & 2V_2 & -2V_2 \\ -2V_2 & 0 & 2V_2 & 2V_2 & 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) & -2V_2 \\ 0 & -2V_2 & -2V_2 & -2V_2 & -2V_2 & 8(|E_{00}| - V_1 + V_2) \end{pmatrix} \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} \beta_1 = & \left\{ |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle, \right. \\ & \left. c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle \right\} \quad (4.59) \end{aligned}$$

$$H_2 = \begin{pmatrix} 2(|E_{00}| - V_1 + V_2) & 2V_2 & -2V_2 & -2V_2 \\ 2V_2 & 2(|E_{00}| - V_1 + V_2) & -2V_2 & -2V_2 \\ -2V_2 & -2V_2 & 6(|E_{00}| - V_1 + V_2) & 2V_2 \\ -2V_2 & -2V_2 & 2V_2 & 6(|E_{00}| - V_1 + V_2) \end{pmatrix} \quad (4.60)$$

$$\beta_{21} = \left\{ c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle \right\} \quad (4.61)$$

$$\beta_{22} = \left\{ c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle \right\} \quad (4.62)$$

$$H_3 = \begin{pmatrix} 2(|E_{00}| - V_1) & 2V_2 \\ 2V_2 & 2(3|E_{00}| - 3V_1 + 2V_2) \end{pmatrix} \quad (4.63)$$

$$\beta_{31} = \left\{ c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle \right\} \quad (4.64)$$

$$\beta_{32} = \left\{ c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\uparrow}^\dagger d_{-\uparrow}^\dagger c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle \right\} \quad (4.65)$$

$$\beta_{33} = \left\{ c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle \right\} \quad (4.66)$$

$$\beta_{34} = \left\{ c_{+\downarrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger |0\rangle, c_{+\uparrow}^\dagger d_{+\uparrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{-\downarrow}^\dagger c_{-\downarrow}^\dagger d_{+\downarrow}^\dagger |0\rangle \right\} \quad (4.67)$$

$$H_4 = \begin{pmatrix} 2(2|E_{00}| - 2V_1 + V_2) & 2V_2 \\ 2V_2 & 2(2|E_{00}| - 2V_1 + 2V_2) \end{pmatrix} \quad (4.68)$$

$$\beta_{41} = \{c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.69)$$

$$\beta_{42} = \{c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.70)$$

$$\beta_{43} = \{c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.71)$$

$$\beta_{44} = \{c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.72)$$

$$H_5 = \begin{pmatrix} 2(|E_{00}| - V_1) & -2V_2 \\ -2V_2 & 2(3|E_{00}| - 3V_1 + 2V_2) \end{pmatrix} \quad (4.73)$$

$$\beta_{51} = \{c_{\uparrow+}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.74)$$

$$\beta_{52} = \{c_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.75)$$

$$\beta_{53} = \{c_{\downarrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.76)$$

$$\beta_{54} = \{c_{\downarrow-}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.77)$$

I jednodimenzionalni brojevi sa jednim vektorom u bazisu

$$H_6 = 2(|E_{00}| - V_1) \quad (4.78)$$

$$\beta_{6i} = \{c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger |0\rangle, c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.79)$$

$$H_7 = 4(|E_{00}| - V_1) \quad (4.80)$$

$$\beta_{7i} = \{c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, \\ c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle, c_{\downarrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.81)$$

$$H_8 = 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) \quad (4.82)$$

$$\beta_{8i} = \{c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.83)$$

$$H_9 = 2(2|E_0| - 2V_1 + V_2) \quad (4.84)$$

$$\beta_{9i} = \{c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger |0\rangle, \\ c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger |0\rangle, \\ c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\downarrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\downarrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle, \\ c_{\downarrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.85)$$

$$H_{10} = 2(3|E_0| - 3V_1 + 2V_2) \quad (4.86)$$

$$\beta_{10i} = \{c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow+}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger |0\rangle, \\ c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger c_{\downarrow+}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle, c_{\uparrow+}^\dagger d_{\uparrow-}^\dagger c_{\uparrow-}^\dagger d_{\downarrow+}^\dagger c_{\downarrow-}^\dagger d_{\downarrow-}^\dagger |0\rangle\} \quad (4.87)$$



U sledećem rešavamo svojstveni problem.

Za jednodimenzionalne blokove je rezultat očigledan.

Za  $H_5$  su svojstvene vrednosti

$$E_{5\pm} = 2 \left( 2|E_{00}| - 2V_1 + V_2 \pm \sqrt{(|E_{00}| - V_1 + V_2)^2 + V_2^2} \right) \quad (4.88)$$

i odgovarajući nenormirani svojstveni vektori

$$v_{5\pm} = \left( |E_{00}| - V_1 + V_2 \mp \sqrt{(|E_{00}| - V_1 + V_2)^2 + V_2^2}, V_2 \right)^T. \quad (4.89)$$

Za  $H_4$ :

$$E_{4+} = 4(|E_{00}| - V), \quad E_{4-} = 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) \quad (4.90)$$

$$v_{4\pm} = (\mp 1, 1)^T. \quad (4.91)$$

Za  $H_3$  su svojstvene vrednosti  $E_{3\pm} = E_{5\pm}$  a svojstveni vektori:

$$v_{3\pm} = \left( -|E_{00}| + V_1 - V_2 \pm \sqrt{(|E_{00}| - V_1 + V_2)^2 + V_2^2}, V_2 \right)^T. \quad (4.92)$$

Za  $H_2$ :

$$E_{2,1} = 2(|E_{00}| - V_1)$$

$$E_{2,2} = 2(3|E_{00}| - 3V_1 + 2V_2) \quad (4.93)$$

$$E_{2\pm} = 2 \left( 2|E_{00}| - 2V_1 + 3V_2 \pm \sqrt{(|E_{00}| - V_1 + V_2)^2 + 4V_2^2} \right)$$

$$v_{2,1} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_{2,2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad v_{2\pm} = \begin{pmatrix} |E_{00}| - V_1 + V_2 \mp \sqrt{(|E_{00}| - V_1 + V_2)^2 + 4V_2^2} \\ |E_{00}| - V_1 + V_2 \mp \sqrt{(|E_{00}| - V_1 + V_2)^2 + 4V_2^2} \\ 2V_2 \\ 2V_2 \end{pmatrix}, \quad (4.94)$$

Za  $H_1$  su rezultati komplikovaniji.

Ako se uvede novi bazis :

$$\beta_1 = \left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \quad (4.95)$$

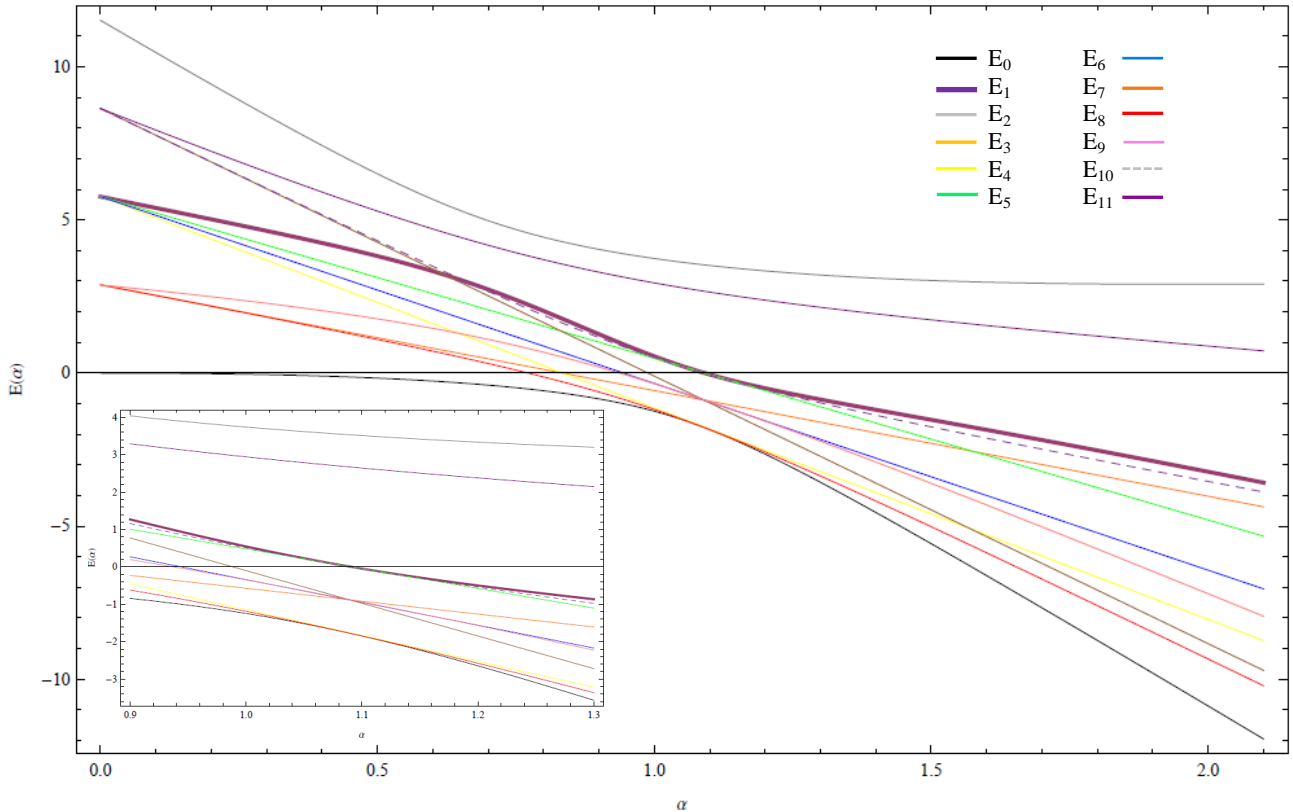
Hamiltonijan dobija oblik:

$$H'_1 = \begin{pmatrix} 4(|E_{00}| - V_1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4V_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4V_2 & 4(|E_{00}| - V_1 + V_2) & -4V_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4V_2 & 8(|E_{00}| - V_1 + V_2) \end{pmatrix} \quad (4.96)$$

Prva tri vektora u 4.95 su svojstveni za prve tri vrednosti hamiltonijana na dijagonali . Na sledećim graficima se vidi zavisnost energija i polarizacija od  $\alpha$  .

Na grafiku za energiju se nalaze numerički određene svojstvene vrednosti za  $H'_1$ , označene sa  $E_0, E_1$  i  $E_2$  u zavisnosti od  $\alpha$  i ostale energije koje su:

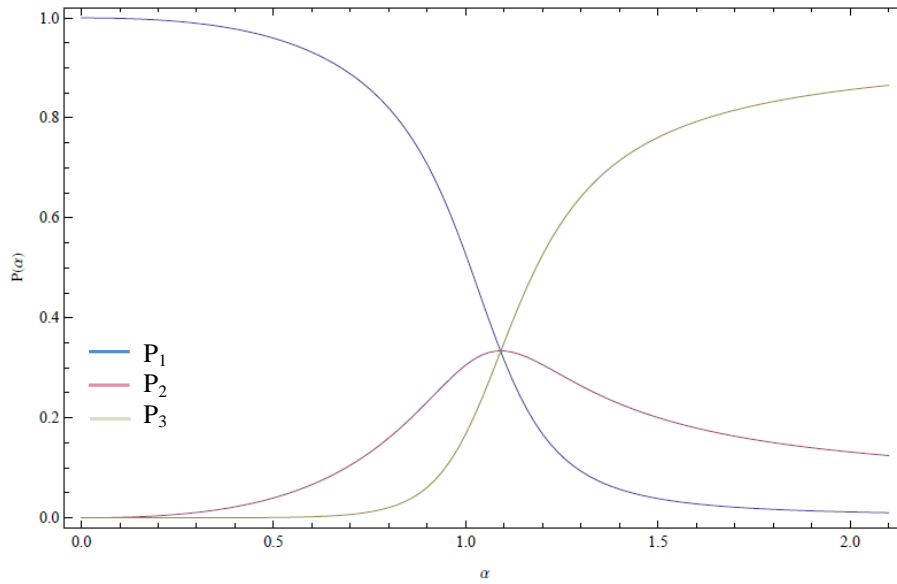
$$\begin{aligned} E_3 &= 2(|E_{00}| - V_1), E_4 = 4(|E_{00}| - V_1), E_5 = 4(|E_{00}| - V_1 + V_2), E_6 = 2(2|E_{00}| - 2V_1 + V_2) \\ E_7 &= 2(3|E_{00}| - 3V_1 + 2V_2), E_{8(-)/10(+)} = 2\left(2|E_{00}| - 2V_1 + V_2 \pm \sqrt{(|E_{00}| - V_1 + V_2)^2 + 4V_2^2}\right) \\ E_{9(-)/11(+)} &= 2\left(2|E_{00}| - 3V_1 + 2V_2 \pm \sqrt{(|E_{00}| - V_1 + V_2)^2 + 4V_2^2}\right) \end{aligned} \quad (4.97)$$



Slika 4.3. Zavisnost energija od vrednosti koeficijenta  $\alpha$  za slučaj jednoslojnog grafena, kada imamo veli i spinski stepen slobode. Različiti energetske nivou su označeni sa

$E_0, E_1, E_2, E_3, E_4, E_5, E_6, E_7, E_8, E_9, E_{10}$  i  $E_{11}$ .

Sa grafika polarizacije se vidi da je  $\alpha \sim 1.1$  kada potpuno polarisani ekscitoni postaju bitni.



Slika 4.4. Zavisnost polarizacije od koeficijenta  $\alpha$  za slučaj jednoslojnog grafena, kada imamo veli i spinski stepen slobode za najnizi energetski nivo. Različite polarizacije su označene sa  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_3$ . Vakuumsko stanje je označeno sa  $P_1$ , nepotpuna polarizacija sa  $P_2$  i potpuna polarizacija sa  $P_3$ .

#### 4.4. Termodinamički limit

U termodinamičkom limitu ocena prelaza, tj. kad ekscitonska fizika počinje da bude značajna, se dobija izjednačavanjem ocene kinetičke energije za najniži nivo i ocene Kulonove energije za Kulonov par :

$$\frac{v_F}{R} \sim \alpha \frac{e^2}{R} \rightarrow \alpha \sim 1 \quad R \rightarrow \infty \quad (4.98)$$

Vidimo da  $\alpha$  ne zavisi od  $R$  i da je srazmerno 1.

## 5. Ekscitonska nestabilnost u GKT dvoslojnog grafena

Za dvoslojni grafen važe slična pravila za određivanje ekscitonske nestabilnosti, glavna razlika je u strukturi spinora.

U opštem slučaju struktura spinora je:

a)  $E_a > 0$  ,  $\underline{a} = (n, m, \tau = 1, m_s)$

$$\Phi_a^{(+)}(r) = F_{mn} e^{im\phi} \begin{bmatrix} J_m(k_{mn}r) \\ ie^{i2\phi} J_{m+2}(k_{mn}r) \end{bmatrix} \chi(s, m_s) \quad (5.1)$$

b)  $E_{\tilde{a}} < 0$  ,  $\underline{\tilde{a}} = (n, m, \tau = 1, m_s)$

$$\Phi_{\tilde{a}}^{(-)}(r) = F_{mn} e^{-im\phi} \begin{bmatrix} e^{-i2\phi} J_{m+2}(k_{mn}r) \\ -J_m(k_{mn}r) \end{bmatrix} \chi(s, m_s) \quad (5.2)$$

c)  $E_a > 0$  ,  $\underline{a} = (n, m, \tau = -1, m_s)$

$$\Phi_a^{(+)}(r) = F_{mn} e^{-im\phi} \begin{bmatrix} e^{-i2\phi} J_{m+2}(k_{mn}r) \\ J_m(k_{mn}r) \end{bmatrix} \chi(s, m_s) \quad (5.3)$$

d)  $E_{\tilde{a}} < 0$  ,  $\underline{\tilde{a}} = (n, m, \tau = -1, m_s)$

$$\Phi_{\tilde{a}}^{(-)}(r) = F_{mn} e^{im\phi} \begin{bmatrix} J_m(k_{mn}r) \\ -e^{i2\phi} J_{m+2}(k_{mn}r) \end{bmatrix} \chi(s, m_s) \quad (5.4)$$

Pokazaćemo da u termodinamičkom limitu u slučaju dvoslojnog grafena postoji kritični radijus  $R_c$  koji je veoma mali .

### 5.1. Termodinamički limit

Procenjujemo energiju slobodnog elektrona za kružnu kvantnu tačku kao:

$$E_k \sim \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{R^2} \quad (5.5)$$

Ovo možemo da napišemo na sledeći način :

$$E_k \sim \frac{t^2}{t_{\perp}} \times \frac{a^2}{R^2} \quad (5.6)$$

gde je  $t$  parametar interakcije susednih atoma unutar jednog sloja grafena,  $t_{\perp}$  je parametar interakcije najbližih suseda između različitih slojeva,  $a$  konstanta rešetke za grafen. Ove koeficijente smo uveli u drugom poglavlju.

Ocena Kulonove energija između parova je :

$$E_c \sim \alpha \frac{e^2}{R} \sim \alpha t \frac{a}{R} \sim t \frac{a}{R} \quad (5.7)$$

Kada je  $E_k \sim E_c$  dobijamo da je kritični radijus:

$$R_c \sim a \frac{t}{t_{\perp}} \sim 10a \quad (5.8)$$

## 6. Zaključak

U ovom radu smo ispitali energetske spektar i svojstvene vektore za GKT u beskonačnoj kružnoj potencijalnoj jami. Dobijene rezultate smo dalje iskoristili za ispitivanje konačne verzije ekscitonske nestabilnosti u GKT. Za KT dvoslojnog grafena ispitivani svojstveni vektori za najniža tri nivoa i za male vrednosti radijusa mogu da se uporede sa slučajem kada imamo konačan parabolični potencijal [9]. Vidi se da su osnovne osobine očuvane. Što se tiče ekscitonske nestabilnosti u KT jednoslojnog grafena koristili smo egzaktnu dijagonalizaciju u ograničenom prostoru najnižeg energetskog nivoa i bez prisustva ekstra elektrona u odnosu na moguće ekscitonske escitacije. Proučavali smo i slučaj bez spina (samo sa veli stepenom slobode) i sa spinom. U slučaju sa spinom smo uočili kvantni prelaz (promenu) u ovom problemu, veoma malih dimenzija prostora na vrednosti alfa oko 1.1 što je blisko rezultatu dobijenom Monte-Carlo metodom za kvantni fazni prelaz u grafenu u [14]. U odnosu na referencu [16] mi smo razmatrali promenu vakuuma u prisustvu interakcije, a bez prisustva ekstra elektrona i nedvosmisleno utvrdili postojanje prelaza u KT kao mesto dodira najnižih nivoa.

U slučaju dvoslojnog grafena u termodinamičkom limitu za najniži nivo vidimo da  $\alpha$  zavisi od  $R$  i da za već malo kritično  $R_c$  ekscitonska fizika postaje značajna. Za velike vrednosti  $R \gg R_c$  možemo uzeti u obzir nestabilnosti koje se događaju u termodinamičkom limitu. Dalje možemo pretpostaviti postojanje konačne razlike unutar kvantne tačke, okolnost razmatrana u [17] u termodinamičkom limitu. „Hibridna“ stanja tu opisana bi mogla da opišu i objasne odsustvo degeneracije jednog stepena slobode (na primer spina) u eksperimentu [18] bez prisustva magnetnog polja.

## Literatura

- [1] P.H. Boehm , Setton, R., and Stumpp, E. *Pure Appl. Chem.* **66** , 1893 (1994) .
- [2]K.S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Norozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Gregoriava, A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [3] M. Radonjić, “Kvantni Holov efekat u grafenu“, Diplomski rad, (2007).
- [4]K. S. Novoselov, A.K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson , S. V. Dubonos, I. V. Gregoriava, A. A. Firsov, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [5] R. C. Ashoori , *Nature* **379**, 413 (1996).
- [6] A. Ekimov, A. Onuschenko , *Soviet Physics Semiconductor USSR* **16**, 775 (1982).
- [7] M. Reed , N. Randall , R. Aggarwal , R. Matyi , T. Moor , E. Wetsel , *Phys. Rev. Lett.* **60**, 535 (1988).
- [8] S. M. Reimann, M. Manninen, *Rev. of Mod. Phys.* **74**, 1283 (2002).
- [9] J. Milton Pereira Jr., P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, *Nan. Lett.***7946** (2007).
- [10] R. W. Robinett, *Eur. J. Phys.* **24**, 231 (2003).
- [11] A. Matulis, F. M. Peteers, *Phys. Rev.* **B77**, 115423 (2007).
- [12] M. V. Berry and R. J. Mondrgon, *Proc. R. Soc. Lond. A* **412**, 53 (1987).
- [13] J. E. Drut, T. A. Lahde, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 026802 (2009).
- [14] J. E. Drut, T. A. Lahde, *Phys. Rev. B* **79**,165425 (2009).
- [15] J. E. Drut, T. A. Lahde, *Phys. Rev. B* **79**, 241405(R) (2009).
- [16] R. Egger, T. Pannanen, and H. Siedentop, *Phys. Rev. B* **83**, 085409 (2011).; R. Egger, T. Pannanen, *Phys. Rev. B* **84**, 155456 (2011).
- [17] E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, V. A. Miransky, *Phys. Rev. B* **86**, 125439 (2012).
- [18] M. T. Allen, J. Martin, A. Yacoby, *Nature Communications* **3**, 934 (2012).