

ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN
Khoa Vật lý

Sinh viên: Nguyễn Hải Châu

**TRẠNG THÁI GIẢ LIÊN KẾT TRONG
GRAPHENE**

LUẬN VĂN TỐT NGHIỆP HỆ ĐẠI HỌC CHÍNH QUY
Ngành: Vật lý lý thuyết

Thầy giáo hướng dẫn: GS.TSKH. Nguyễn Văn Liễn

Hà nội ngày 25 tháng 5 năm 2008

Lời cảm ơn

Tôi tin rằng bất kỳ sinh viên nào khi viết những dòng cuối cùng này để hoàn thành luận văn tốt nghiệp của mình đều có nhiều những cảm nghĩ riêng tư. Đối với tôi, bốn năm học đại học đã giúp tôi lớn mạnh về nhiều mặt. Trường đại học không chỉ là một môi trường khoa học, nó còn là môi trường giúp sinh viên trưởng thành. Không tránh khỏi những khó khăn về điều kiện vật chất và tinh thần, không tránh khỏi va vấp mà ở đâu trong cuộc sống cũng có, vượt lên tất cả những điều đó là tình cảm thầy trò, bạn bè, anh em sinh viên trong học tập ...

Có được tất cả những điều đó là nhờ sự giúp đỡ tận tình của các thầy cô, những người đã trực tiếp giảng dạy và giúp đỡ tôi không chỉ về chuyên ngành mà còn nhiều mặt khác của cuộc sống. Cha mẹ và anh chị luôn là người động viên tinh thần từ những ngày tôi học phổ thông. Và không thể không kể đến các bạn sinh viên đã giúp đỡ tôi trong học tập và những vấn đề khác nhau trong cuộc sống, giúp tôi hiểu hơn tình cảm con người với con người trong khó khăn.

Không thể nào kể đến tên tất cả mọi người trong trang giấy ngắn ngủi này, tôi chỉ dám bày tỏ lòng biết ơn đến tất cả mọi người.

Tôi xin chân thành cảm ơn thầy giáo đã trực tiếp hướng dẫn tôi hoàn thành luận văn này, thầy Nguyễn Văn Liễn. Những ngày cuối khóa, may mắn được học tập ở viện Vật lý lý thuyết và Điện tử, dưới sự chỉ bảo tận tình của thầy cùng với các anh chị ở trung tâm Vật lý lý thuyết, tôi đã được hiểu thêm một chút về hoạt động học tập và nghiên cứu, về quan hệ con người trong khoa học.

Và cuối cùng tôi xin cảm ơn bạn Hoàng Mạnh Tiến, bạn cùng lớp đã kiểm tra tính toán trực tiếp, mà tôi có lẽ cũng không thể hoàn thành luận văn này nếu không có sự giúp đỡ đó.

Hà Nội 25 tháng 5 năm 2008

Sv. Nguyễn Hải Châu

Mục lục

Mở đầu	2
Chương 1. Các tính chất điện tử cơ bản của Graphene	7
1.1. Cấu trúc tinh thể	7
1.2. Cấu trúc vùng năng lượng	8
1.3. Phương trình Dirac	12
Chương 2. Các trạng thái giả liên kết	17
2.1. Giải phương trình Dirac với thế một chiều bằng phương pháp T-ma trận	17
2.2. Các trạng thái giả liên kết	22
2.3. Giải thích hiện tượng bằng mô hình liên kết mạnh một chiều	37
Kết luận	45
Tài liệu tham khảo	46

Mở đầu

Một trong những điều kỳ lạ đã từng làm ngạc nhiên các nhà hóa học chính là sự thống nhất đến hoàn hảo của ngành hóa học hữu cơ. Sự biến đổi hóa học phong phú và bí ẩn của thế giới hóa sinh học, liên quan đến hợp chất hữu cơ, thật ngạc nhiên lại qui về sự biến đổi về hình thái liên kết của một loại nguyên tử duy nhất: nguyên tử Carbon. Về mặt hóa học mà nói, điều đó có cơ sở là cấu trúc điện tử đặc biệt của nguyên tử Carbon, giúp cho nó có khả năng hình thành các liên kết hữu cơ-các mạch Carbon của phân tử sống. Khả năng liên kết mềm dẻo như vậy của nguyên tử Carbon không những có ý nghĩa với hóa học hữu cơ mà còn dẫn đến sự tồn tại của các hệ kết tập khác nhau của nguyên tử Carbon. Các dạng thù hình khác nhau, từ than chì cho đến kim cương của Carbon không chỉ phong phú về hình thái mà còn độc đáo cả về tính chất.



Hình 1. Phân tử AND.

Nửa cuối thế kỷ 20, khi vật lý học đi sâu nghiên cứu các cấu trúc nano, các nhà vật lý một lần nữa chạm trán với nguyên tố độc đáo có một không hai này.

Chúng ta đều biết rằng công nghệ bán dẫn với transistor truyền thống đã phát triển hết sức mạnh mẽ suốt từ thập kỷ 50. Bằng chứng hùng hồn cho sự phát triển đó chính là định luật Moore với sự tăng theo hàm mũ của mật độ transistor trên chip điện tử Silicon. Tuy nhiên, mật độ transistor sẽ đạt đến giới hạn mà tại đó các nguyên lý hoạt động cho transistor cổ điển không còn đúng nữa, đó là vấn đề chính mà các nhà vật lý và kỹ thuật đã lo ngại khi tiếp tục giảm kích thước “bóng bán dẫn”. Thúc đẩy về kỹ thuật khai sinh ra khoa học nano và công nghệ nano. Đồng thời với việc nghiên cứu các hiệu ứng mới xảy ra ở cấu trúc nano là việc nghiên cứu công nghệ chế tạo và ứng dụng của linh kiện nano. Công nghệ nano đặt ra các yêu cầu mới cho vật liệu. Việc tìm kiếm vật liệu mới làm cơ sở cho linh kiện nano đóng vai trò then

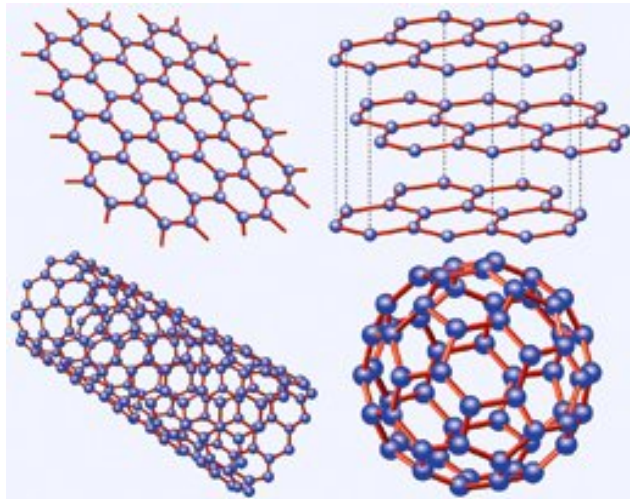


Hình 2. Transistor truyền thống.

chốt trong cuộc cách mạng công nghệ hiện đại này.

Trong quá trình tìm kiếm vật liệu hợp lý làm cơ sở cho nền công nghệ nano trong tương lai, người ta hy vọng rằng chính Carbon, với những tính chất độc đáo của nó sẽ giúp các nhà vật lý giải quyết được vấn đề này. Nhiều người cho rằng, rất có thể trong tương lai Carbon sẽ thay thế cho Silic, và công nghệ bán dẫn truyền thống sẽ được thay thế bằng công nghệ nano dựa trên các nguyên tắc hoàn toàn mới.

Các cấu trúc nano của nguyên tố Carbon như quả cầu Fullerenes C_{60} (*Fullerenes Carbon ball C_{60}*), ống nano Carbon (*Carbon nano-tube*), dải nano Carbon (*Carbon nano-ribbon*) đã và đang được nghiên cứu sôi nổi trong lĩnh vực vật lý nano trong mấy thập kỷ qua. Về nguyên tắc, các cấu trúc đó đều có một nền cấu trúc chung là cấu trúc Graphene.



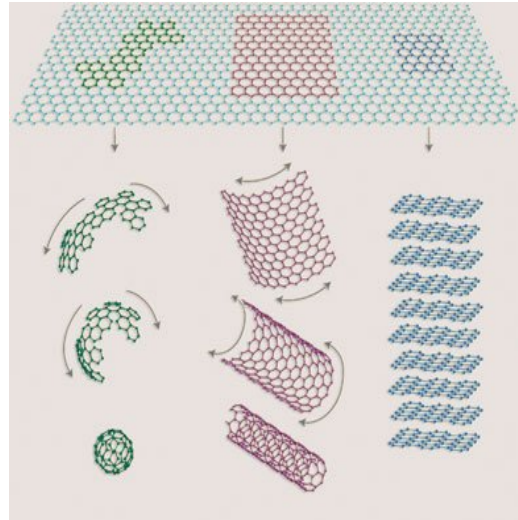
Hình 3. Graphene, Graphite, Carbon Nano-tube và Fullerenes C_{60} Carbon-ball.

Graphene đơn giản là một lớp đơn nguyên tử mạng của tinh thể than chì. Mặc dù vậy, mới chỉ gần đây, năm 2004 (theo [5]), người ta mới tạo được một lớp đơn nguyên tử như vậy trên một đế SiO_2 phục vụ cho nghiên cứu. Cũng cần nói rằng, điều đó không có nghĩa là sự tồn tại của Graphene trong tự nhiên là một hiện tượng nặng về nhân tạo: chính khi ngòi bút chì của họa sĩ mài trên giấy, các lớp nguyên tử than chì bị tách ra đã hình thành các cấu trúc Graphene ngay trên trang giấy. Như đã nói, cấu trúc Graphene mang tính cơ sở về lý thuyết của các cấu trúc nano Carbon. Từ mặt phẳng Graphene ta có thể hình thành lên các ống nano Carbon bằng cách cuộn mặt phẳng mạng theo một chiều nào đó, với một chu kỳ nào đó, để

thu được các ống nano Carbon khác nhau. Hoặc có thể cắt mặt Graphene theo một đường nào đó, với độ rộng nào đó, để thu được các dải nano Carbon khác nhau. Dạng đường biên cuốn cũng như đường biên cắt phân biệt các ống nano Carbon và dải nano Carbon khác nhau với các tính chất điện tử khác nhau. Như trình bày trong [5] về ống nano Carbon và trong [11] về dải nano Carbon, tính chất điện (nói riêng) của chúng phụ thuộc trực tiếp vào dạng biên. Điều đó cho thấy sự đa dạng về tính chất điện tử của các cấu trúc này, cho phép thực hiện các cấu trúc khác nhau với các mục đích kỹ thuật khác nhau.

Sự linh hoạt về cấu trúc và tính chất như vậy là cơ sở đảm bảo cho khả năng chế tạo các linh kiện nano phong phú về tính năng trên một loại vật liệu đơn giản.

Về lý thuyết, hệ khí điện tử hai chiều hình thành trong Graphene có tính chất khác biệt so với các hệ điện tử hai chiều thông thường trong các dị cấu trúc bán dẫn khiến cho nghiên cứu lý thuyết về Graphene trở lên hết sức lý thú. Cấu trúc tinh thể đặc biệt của Graphene là nguyên nhân tính chất đặc biệt về cấu trúc vùng năng lượng (*band-structure*) của Graphene. Kết quả là các kích thích sơ cấp (*elementary-excitations*) của hệ điện tử (*chất lỏng lượng tử Fermi*) trong tinh thể Graphene là các lượng tử không tuân theo phương trình theo kiểu Schrodinger. Khí điện tử hai chiều trong Graphene là khí điện tử hai chiều giả tương đối tính, chúng được mô tả bằng phương trình tựa Dirac (*Dirac-like equation*) hai chiều cho hạt không khối lượng.



Hình 4. Sự hình thành các cấu trúc nano khác nhau từ Graphene.

Giống như các hạt tương đối tính, hành vi của các giả hạt Dirac này đôi khi rất lý thú. Năm 2006, Katsnelson và các đồng tác giả mô tả hiện tượng chui ngầm Klein¹, hay nghịch lý Klein trong Graphene [8]. Khác với hiện tượng chui ngầm cổ

¹ Hiện tượng chui ngầm Klein đề xuất năm 1930 bởi O.Klein dựa trên phương trình Dirac. Đó là hiện tượng chui ngầm của electron vào miền có thế rất cao (so với khối lượng nghỉ của electron), mà theo quan niệm cơ lượng cổ điển lẽ ra phải là miền cấm đối với electron. Một hiện tượng khác tương đương với nghịch lý Klein (thường gọi là Chiral Tunneling) là xác suất chui ngầm của electron qua một rào thế vuông góc đủ cao đạt gần đơn vị và giảm theo sự tăng độ cao bờ thế (điều này trái ngược với quan niệm suy từ phương trình Schrodinger: rào thế cao sẽ làm suy giảm mạnh sự chui ngầm của electron).

điện, xác suất chui ngầm của electron trong trường hợp này phụ thuộc trực tiếp vào xung lượng ngang của electron². Nói riêng, khi xung lượng ngang bằng không, xác suất chui ngầm của electron luôn bằng một, không phụ thuộc vào độ cao cũng như hình dạng bờ thế.

Hiện tượng chui ngầm Klein khiến cho việc cầm tù electron để tạo các Quantum Dot trở thành một thách thức đối với vật lý. Mà như chúng ta đều biết, trong vật lý nano các Quantum Dot là các “viên gạch” xây dựng nên các linh kiện nano. Do đó việc cầm tù các electron Dirac trong Graphene đã thu hút nhiều sự chú ý của các nhà nghiên cứu trong những năm gần đây.

Các tác giả đều chỉ ra rằng không thể cầm tù electron với xung lượng ngang bằng không. Nhưng ngay cả trong trường hợp xung lượng ngang khác không sự cầm tù electron cũng là không bình thường. Với hố thế vuông góc thành cao hữu hạn, Pereira và các đồng tác giả đã chỉ ra phổ trạng thái liên kết của electron phụ thuộc vào xung lượng ngang [6]. Mặt khác, các tác giả của cả [6] và [9] đều cho thấy đối với thế có dạng tiệm cận vô hạn *không tốt* các trạng thái không thể là liên kết thực sự mà luôn luôn là các trạng thái giả liên kết với thời gian sống hữu hạn nào đó. Chen và các đồng tác giả đã tính chi tiết năng lượng và thời gian sống đối với các Quantum Dot hai chiều đồng thời nghiên cứu các mức Fock-Darwin của chúng dựa trên phổ các trạng thái giả liên kết [10]. Mặt khác, trong bài toán một chiều, Silvestrov và Efetov chỉ ra rằng có thể tạo ra các trạng thái cộng hưởng trong Graphene chỉ với một bờ thế [9]. Tác giả cũng đưa ra đánh giá bán cổ điển và gần đúng của hệ số truyền, cho thời gian sống cũng như độ rộng các mức cộng hưởng.

Trong luận văn này chúng tôi tiến hành tính trực tiếp thời gian sống hay độ rộng mức năng lượng của các trạng thái giả liên kết trong Quatum Dot một bờ thế hình thang như trong [9]³ và cấu trúc hai bờ thế vuông góc. Tương tự như phép giải các trạng thái liên kết trong nguyên tử Hydrogen, ta đưa ra phương trình xác định đồng thời năng lượng và hằng số phân rã của trạng thái (mô tả bằng một điểm trên mặt phẳng phức), đó cũng là ý tưởng của bài toán trong Quatum Dot hai chiều được giải trong [10]. Bài toán của chúng ta đặt ra với hệ một chiều, tuy nhiên khác với việc viết trực tiếp hàm sóng Dirac và áp dụng điều kiện biên lên hàm sóng này, là

²Xung lượng ngang là xung lượng vuông góc với lát cắt chính một chiều của bờ thế, về mặt lý thuyết là trị riêng của xung lượng theo phương này. Trong thực tế, thành phần xung lượng vuông góc với dải nano Carbon, hoặc trục của ống nano Carbon hay mô-men xung lượng trong các Quantum Dot hai chiều sẽ đóng vai trò xung lượng ngang trong mỗi trường hợp cụ thể.

³Trong [9] các tác giả sử dụng thế parabol.

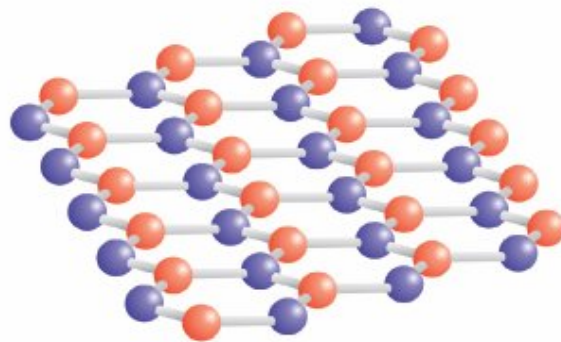
phương pháp được dùng trong [6] khi tính toán các trạng thái liên kết, chúng ta sẽ dùng phương pháp T -Ma trận. Thay cho biểu thức tường minh của phương trình phổ chúng ta sẽ viết phương trình cho ma trận truyền của hệ. Với phương pháp đó, ta không cần thiết viết tường minh biểu thức phương trình, điều này thực ra là tương đối khó khăn, trừ trong trường hợp một bờ thế vuông góc như các tác giả nói trên đã xét.

Chương 1. Các tính chất điện tử cơ bản của Graphene

Bắt đầu từ cấu trúc mạng của Graphene ta đi vào khảo sát các tính chất của mạng thuận và mạng đảo của Graphene. Cấu trúc vùng của Graphene được tính toán với phương pháp gần đúng liên kết mạnh (tight-binding). Cuối cùng thực hiện khai triển gần đúng khối lượng hiệu dụng sẽ cho phương trình Dirac mô tả các giả hạt electron trong mạng Graphene.

1.1. Cấu trúc tinh thể

Trước tiên ta bắt đầu từ việc khảo sát cấu trúc tinh thể của Graphene. Tinh thể Graphene là một mạng hai chiều các nguyên tử Carbon sắp xếp tại đỉnh các ô lục giác của mặt phẳng giống như bề mặt tổ ong. Ba trong số bốn điện tử hóa trị của Carbon hình thành ba orbital lai hóa sp^2 , thực hiện các liên kết σ (σ) với các nguyên tử lân cận bảo đảm sự bền vững của mạng, điện tử cuối cùng thực hiện liên kết π (π) không định xứ (còn gọi là liên kết liên hợp π (π)) trên toàn mạng quyết định các tính chất điện của Graphene.



Hình 5. Mô hình mạng tinh thể Graphene.

Mạng tinh thể của Graphene là mạng tam giác với các vector tịnh tiến cơ sở $\vec{a}_1 = a(\sqrt{3}/2, 1/2)$, $\vec{a}_2 = a(\sqrt{3}/2, -1/2)$ với gốc mạng gồm hai nguyên tử Carbon (A, B) (xem Hình 5 và 6), trong đó a là hằng số mạng. Dễ dàng thấy rằng $a = \sqrt{3}a_{cc}$ trong đó a_{cc} là độ dài liên kết Carbon-Carbon quen thuộc trong hóa học hữu cơ. Theo [5], $a = 0.246 \text{ nm}$.

Từ các vector tịnh tiến cơ sở ta có thể xây dựng các vector mạng đảo và vùng Brillouin thứ nhất của Graphene một cách dễ dàng như chỉ ra trên Hình 7.

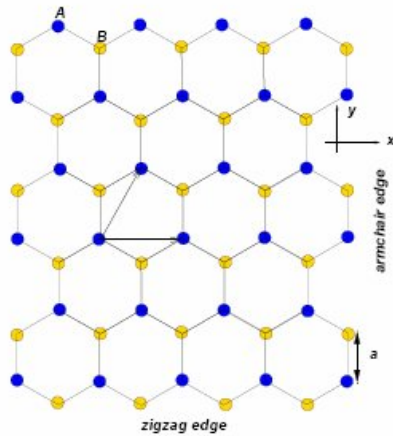
Vùng Brillouin thứ nhất của Graphene có dạng lục giác đối xứng với trục quay bậc 6 qua điểm Γ . Trong sáu đỉnh của vùng Brillouin chỉ có hai đỉnh (K, K') là không tương đương, các đỉnh còn lại thu được bằng cách tịnh tiến các điểm này

một vector mạng đảo.

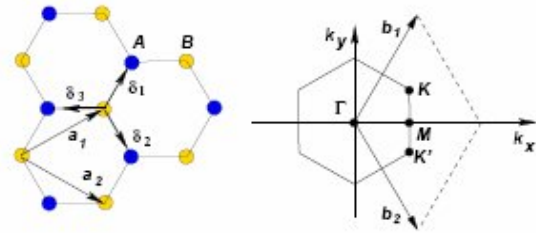
Có thể tưởng tượng mạng tinh thể Graphene gồm hai mạng tinh thể tam giác giống nhau A và B lồng vào nhau. Như trong tính toán cấu trúc vùng dưới đây chỉ ra chi tiết, sự đồng nhất về cấu trúc của hai mạng thành phần dẫn đến một hệ quả quan trọng là sự suy biến của trạng thái electron trong tinh thể tại các đỉnh của vùng Brillouin. Chính do sự suy biến đó, kết quả phép gần đúng khối lượng hiệu dụng cho thấy electron trong tinh thể Graphene được mô tả bằng phương trình Dirac. Vì vậy các điểm này còn được gọi với tên “điểm Dirac”.

1.2. Cấu trúc vùng năng lượng

Trên cơ sở các hiểu biết về cấu trúc tinh thể, ta tiến hành khảo sát cấu trúc vùng năng lượng (*band-structure*) của electron trong Graphene. Cấu trúc vùng năng lượng của Graphene đã được nghiên cứu khá chi tiết bằng tính toán với gần đúng



Hình 6. Các vector tịnh tiến cơ sở.



Hình 7. Các vector mạng đảo và vùng Brillouin thứ nhất.

liên kết mạnh (*tight-binding*) và *ab-initio* [5]. Ở đây ta nêu ra tính toán bằng phương pháp gần đúng liên kết mạnh và kết quả so sánh với phương pháp *ab-initio* trích dẫn từ [5].

Như đã nói, ba điện tử hóa trị của nguyên tử Carbon tham gia vào liên kết cộng hóa trị với lai hóa sp^2 , điện tử hóa trị thứ tư tham gia vào hình thành vùng dẫn của Graphene. Thực chất là ta sẽ thu được liên kết liên hợp π (π) trên toàn mạng hai chiều Graphene, electron thứ tư của tất cả các nguyên tử Carbon tạo thành lớp khí điện tử hai chiều trên mặt Graphene gây nên các tính chất điện đặc thù của Graphene.

Hàm sóng của electron trong gần đúng liên kết mạnh được tìm dưới dạng tổ hợp tuyến tính của hai hàm Block liên kết mạnh trên hai mạng thành phần:

$$\psi = C_A \varphi_A + C_B \varphi_B \quad (1.1)$$

Trong đó:

$$\varphi_A(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} p_z(\vec{r} - \vec{R}_A - \vec{R})$$

$$\varphi_B(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} p_z(\vec{r} - \vec{R}_B - \vec{R})$$

Với $p_z(\vec{r})$ là hàm nút nguyên tử quen thuộc trong vật lý chất rắn (thông thường ta lấy $p_z(\vec{r})$ chính là Orbital p_z của nguyên tử Carbon), N_0 là số ô nguyên tử mà trên đó ta áp dụng điều kiện biên tuần hoàn Born-Von Karman.

Dưới dạng đơn giản nhất, năng lượng của trạng thái electron là trị riêng của Hamiltonian liên kết mạnh (điều này tương ứng với việc ta coi các hàm cơ sở là trực giao, tức là bỏ qua các tích phân phủ theo tinh thân của phương pháp *LCAO-trực giao*):

$$H = \begin{pmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

Các yếu tố ma trận được tính trực tiếp theo định nghĩa:

$$H_{AA} = 1/N_0 \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} e^{i\vec{k}(\vec{R}' - \vec{R})} \langle p_z^{A, \vec{R}} | H | p_z^{A, \vec{R}'} \rangle$$

$$H_{AB} = 1/N_0 \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} e^{i\vec{k}(\vec{R}' - \vec{R})} \langle p_z^{A, \vec{R}} | H | p_z^{B, \vec{R}'} \rangle$$

Trong đó ta ký hiệu $p_z^{A/B, \vec{R}} = p_z(\vec{r} - \vec{R}_{A/B} - \vec{R})$.

Thực hiện tính toán đối với các mạng vô hạn ($N_0 \rightarrow \infty$) (một cách chặt chẽ là các mạng đủ lớn sao cho số lượng các nguyên tử ở biên là không đáng kể với số lượng các nguyên tử của toàn mạng), ta lưu ý rằng trong các biểu thức trên, khi cho một trong hai chỉ số (\vec{R}, \vec{R}') biến đổi ta thấy tổng có tính đối xứng đối với tất cả các vị trí khác nhau trên mạng của chỉ số kia, kết quả là thừa số $1/N_0$ sẽ tự động triệt tiêu khi thực hiện lấy tổng theo một chỉ số, do đó có thể viết lại các số hạng này

dưới dạng :

$$H_{AA} = \sum_{\bar{R}'} e^{i\bar{k}\bar{R}'} \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{A,\bar{R}'} \rangle$$

$$H_{AB} = \sum_{\bar{R}'} e^{i\bar{k}\bar{R}'} \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,\bar{R}'} \rangle$$

Khai triển hệ thức trên, giữ lại đến các phối trí cấp hai:

$$H_{AA} = \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{A,0} \rangle + \sum_{p=1}^6 e^{i\bar{k}\bar{R}_p} \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{A,\bar{R}_p} \rangle \quad (1.3)$$

$$H_{AB} = \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,0} \rangle + e^{-i\bar{k}\bar{a}_1} \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,-\bar{a}_1} \rangle + e^{-i\bar{k}\bar{a}_2} \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,-\bar{a}_2} \rangle \quad (1.4)$$

Trong đó biểu thức của H_{AA} gồm một số hạng cấp không và sáu số hạng cấp hai, tương ứng với năng lượng nút và số hạng tích phân phủ của sáu nguyên tử cùng loại gần nhất, biểu thức của H_{AB} gồm ba số hạng cấp một tương ứng với ba số hạng tích phân phủ của ba nguyên tử khác loại gần nhất.

Ngoài ra ta có $H_{BB} = H_{AA}$ do tính đối xứng của hai mạng thành phần, và $H_{AB} = H_{BA}^*$ do tính liên hợp Hermite của toán tử Hamilton.

Như đã nói, với phương pháp *LCAO-trực giao*, ta không cần tính các số hạng xen phủ của hàm sóng.

Đặt:

$$\alpha = \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{A,0} \rangle$$

$$\beta = \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{A,\bar{R}_p} \rangle$$

$$\gamma = \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,0} \rangle = \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,-\bar{a}_1} \rangle = \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,-\bar{a}_2} \rangle$$

Ta có:

$$H_{AA} = H_{BB} = \alpha + \beta \sum_{p=1}^6 e^{i\bar{k}\bar{R}_p} \quad (1.5)$$

$$H_{AB} = H_{BA}^* = \gamma(1 + e^{-i\bar{k}\bar{a}_1} + e^{-i\bar{k}\bar{a}_2}) \quad (1.6)$$

Hamiltonian liên kết mạnh như vậy có thể chéo hóa dễ dàng, kết quả là ta thu được hệ thức tán sắc dưới dạng:

$$E^{\pm}(\vec{k}) = \alpha + \beta f(\vec{k}) \pm \gamma \sqrt{3 + f(\vec{k})} \quad (1.7)$$

Trong đó :

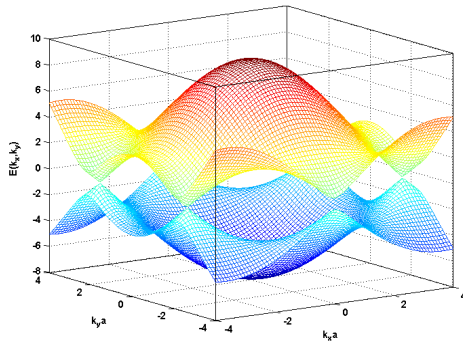
$$f(\vec{k}) = 2\cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_1) + 2\cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_2) + 2\cos[\vec{k} \cdot (\vec{a}_2 - \vec{a}_1)] \quad (1.8)$$

Hoặc khai triển theo các tọa độ trực giao:

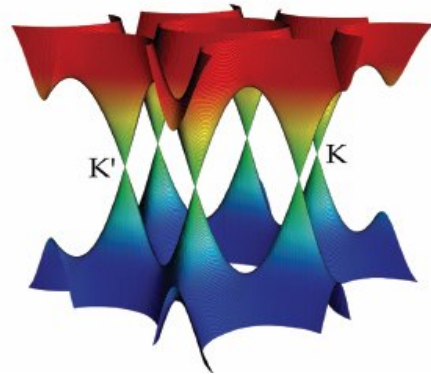
$$f(\vec{k}) = 4\left(\cos\frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos\frac{k_y a}{2} + \cos^2\frac{k_y a}{2}\right) - 2 \quad (1.9)$$

Ta thấy ngay α xấp xỉ bằng thế ion hóa của electron p trong nguyên tử Carbon khi ba điện tử còn lại ở trong trạng thái lai hóa sp^2 . Trong các tính toán vật lý quan tâm đến dạng của cấu trúc vùng, ta có thể lấy α làm gốc tính năng lượng do đó trong công thức trên ta đặt $\alpha = 0$. Theo số liệu từ [4] $\beta \approx 0.1eV$, $\gamma \approx 2.8eV$.

Thông thường các đóng góp của các phối trí cấp hai là nhỏ nên nói chung ta dừng lại ở các phối trí cấp một và đặt $\beta = 0$, kết quả thu được hệ thức đơn giản dưới



Hình 8. Cấu trúc vùng năng lượng của Graphene.



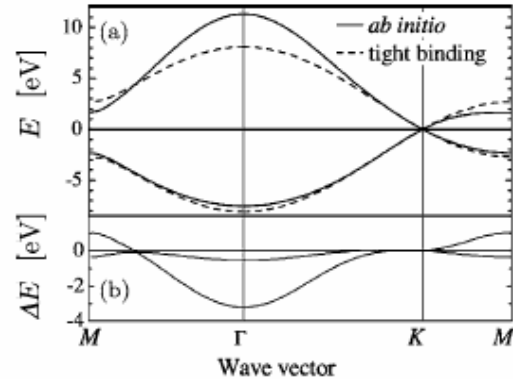
Hình 9. Mặt Fermi gồm các điểm rời rạc của Graphene.

dạng $E^{\pm}(\vec{k}) = \pm \gamma \sqrt{3 + f(\vec{k})}$. Trong công thức, dấu cộng mô tả cấu trúc vùng dẫn nằm ngay trên vùng hóa trị mô tả bởi dấu trừ. Vùng Brillouin của Graphene có dạng lục giác mô tả trên Hình 7. Vùng dẫn và vùng hóa trị tiếp xúc nhau ở sáu đỉnh của vùng Brillouin (Hình 8, 9), trong đó ta nhắc lại rằng chỉ có hai điểm K và K' là không tương đương. Tại các điểm này (điểm Dirac) hàm sóng của electron suy biến tương ứng với hai trạng thái cơ sở trên mạng A và B . Như thấy rõ từ phương pháp gần đúng liên kết mạnh, toán tử Hamilton khi đó suy biến bội hai đối với hai hàm cơ sở. Đối với Graphene tinh khiết, vùng hóa trị hoàn toàn lấp đầy bởi các

điện tử đóng góp từ các nút, trong khi đó vùng dẫn hoàn toàn trống, và như vậy mặt Fermi của Graphene là tập rời rạc gồm hai điểm K và K' . Như vậy, Graphene chính là một bán kim điểm hình.

Ta lưu ý rằng khi tính đến bỏ chính cấp hai như vậy, cấu trúc vùng của Graphene không còn tính đối xứng giữa vùng dẫn và vùng hóa trị qua mặt Fermi. Tuy nhiên như đã nói thông thường trong tính toán hầu hết các hiện tượng ta chỉ giữ

Hình 10. Kết quả so sánh phương pháp *tight-binding* và phương pháp *ab-initio*.



đến gần đúng cấp một, khi đó vùng dẫn và vùng hóa trị hoàn toàn đối xứng qua mặt Fermi và phương trình cho electron trong Graphene có dạng đơn giản nhất.

Nhóm Reich (2002) đã thực hiện tính toán với phương pháp *tight-binding* (nhưng chỉ giữ đến các phối trí bậc nhất) và cho kết quả so sánh với phương pháp *ab-initio* trên Hình 10. Ta có thể thấy sự đối xứng của vùng dẫn và vùng hóa trị khi bỏ qua các phối trí cấp hai như đã nói. Các tính toán *tight-binding* đầy đủ hơn (Hình 8) cho kết quả gần hơn với phương pháp *ab-initio*.

Cuối cùng ta lưu ý rằng, theo nhiều nhà nghiên cứu, có nhiều lý do dẫn đến sự tách suy biến của điểm Dirac (chẳng hạn sự tương tác của đế đến các nút của mạng Graphene) [12]. Điều đó nghĩa là năng lượng của hai trạng thái cơ sở sẽ khác nhau chút ít. Mặc dù vậy sự tách suy biến này sẽ không đóng vai trò bản chất trong các tính toán của ta dưới đây. Về mặt toán học, việc chuyển từ *phương pháp nhiễu loạn suy biến* đến *nhiều loạn gần suy biến* như vậy là một bước chuyển liên tục.

1.3. Phương trình Dirac

Đến đây chúng ta đã có đủ cơ sở để tiến hành phép gần đúng khối lượng hiệu dụng cho điện tử trong Graphene. Như đã nói, trong Graphene tinh khiết vùng hóa trị hoàn toàn được lấp đầy bởi các điện tử từ các nguyên tử trong mạng, trong khi

vùng dẫn hoàn toàn trống, mặt Fermi là mặt rời rạc gồm hai nhóm ba điểm tương đương. Quan tâm đến các tính chất của electron gần mặt Fermi, như thông thường, ta sẽ dùng phương pháp gần đúng khối lượng hiệu dụng. Kết quả phép gần đúng khối lượng hiệu dụng đối với Graphene chính là phương trình tựa Dirac hai chiều cho electron trong mạng Graphene. Việc này đã được DiVincenzo và Mele thực hiện chi tiết và đơn giản năm 1985 [7], ở đây ta tóm tắt lập luận nguyên văn của các tác giả để rút ra phương trình Dirac hai chiều làm cơ sở cho các lập luận sau này.

“... Khi không có thế tạp, khai triển gần đúng khối lượng hiệu dụng tương đương với khai triển $K.P$ tại lân cận điểm K . Trong lý thuyết khai triển $K.P$ hàm sóng của electron tại vector sóng $\vec{k} = \vec{K} + \vec{\kappa}$ được cho bởi:

$$\psi(\vec{\kappa}, \vec{r}) = f_1(\vec{\kappa})e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}}\psi_1(K, \vec{r}) + f_2(\vec{\kappa})e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}}\psi_2(K, \vec{r}) \quad (1.10)$$

Thế ψ vào phương trình Schrodinger⁴, giữ lại số hạng cấp một của $\vec{\kappa}$ và lấy $E_F = 0$ ta được phương trình trị riêng:

$$\frac{\hbar}{m}\vec{\kappa}\cdot\begin{pmatrix} \vec{p}_{11} & \vec{p}_{12} \\ \vec{p}_{21} & \vec{p}_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f_1(\vec{\kappa}) \\ f_2(\vec{\kappa}) \end{pmatrix} = E(\vec{\kappa})\begin{pmatrix} f_1(\vec{\kappa}) \\ f_2(\vec{\kappa}) \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

Trong đó $\vec{p}_{ij} = \int \psi_i^*(K, \vec{r})\vec{p}\psi_j(K, \vec{r})d\vec{r}$. Có thể chỉ ra bằng lý thuyết nhóm hoặc trực tiếp từ phương pháp gần đúng liên kết mạnh, rằng ma trận của toán tử xung lượng có dạng:

$$\vec{p} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{e}_x - i\vec{e}_y \\ \vec{e}_x + i\vec{e}_y & 0 \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

Trong đó \vec{e}_x, \vec{e}_y là các vector đơn vị của mặt phẳng, \vec{p} là hệ số liên quan đến cấu trúc vùng của Graphene. Từ đó ta có thể chéo hóa dễ dàng ma trận trên và thu được:

$$E(\vec{\kappa}) = \pm P|\vec{\kappa}| \quad (1.13)$$

Với $P = (2\pi\hbar/m)\vec{p}$.

⁴ Ở đây tác giả nói đến phương trình Schrodinger cho electron trong mạng Graphene với thế tuần hoàn gây bởi các nút mạng như thông thường trong phương pháp khai triển $K.P$.

Như vậy thực chất của kết quả của phép khai triển $K.P$ là thay thế cấu trúc vùng của Graphene bằng hệ thức tán sắc hình nón tại mặt Fermi.

Khi đặt trường ngoài lên hệ, đối xứng tịnh tiến nói chung bị phá vỡ và trạng thái lượng tử của electron không còn được đặc trưng bởi \vec{k} . Do đó chúng ta sẽ dùng đến một sự mở rộng nhỏ của hàm thử:

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \int d\vec{k} f_1(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi_1(K, \vec{r}) + \int d\vec{k} f_2(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi_2(K, \vec{r}) \quad (1.14)$$

Đặt hàm thử vào phương trình Schrodinger ta đi đến phương trình tích phân:

$$P \begin{pmatrix} 0 & \kappa_x - i\kappa_y \\ \kappa_x + i\kappa_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1(\vec{k}) \\ f_2(\vec{k}) \end{pmatrix} + \int d\vec{k}' U(\vec{k} - \vec{k}') \begin{pmatrix} f_1(\vec{k}') \\ f_2(\vec{k}') \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} f_1(\vec{k}) \\ f_2(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

Trong đó: $U(\vec{q}) = \int dz \bar{\rho}(z) \left(\int d\vec{q}' e^{-i\vec{q}'\cdot\vec{r}} U(\vec{r}) \right)$ chính là biến đổi Fourier của thế tạp $U(\vec{r})$ lấy trung bình theo trục Oz . Để rút ra phương trình này chúng ta đã áp dụng gần đúng tiêu chuẩn của lý thuyết khối lượng hiệu dụng là thế tạp biến thiên chậm so với khoảng cách đặc trưng của ô mạng.

Để hoàn tất việc rút ra phương trình Dirac ta thực hiện biến đổi Fourier phương trình trên, kết quả là phương trình tích phân chuyển thành phương trình vi phân:

$$\frac{P}{i} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1(\vec{r}) \\ F_2(\vec{r}) \end{pmatrix} = (E - U(\vec{r})) \begin{pmatrix} F_1(\vec{r}) \\ F_2(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

Và phương trình sóng trong biểu diễn tọa độ là:

$$\psi(\vec{r}) = F_1(\vec{r}) \psi_1(K, \vec{r}) + F_2(\vec{r}) \psi_2(K, \vec{r}) \quad (1.17)$$

Phương trình sóng có dạng tích của hàm vỏ (*envelope-function*) biến đổi chậm và hàm Bloch như quen thuộc trong vật lý chất rắn ...”

Phương trình trên chính là phương trình Dirac hai chiều cho electron trong Graphene mà ta mong muốn. Hai trạng thái của electron trên hai mạng thành phần đóng vai trò là hai thành phần *Spin* và tên gọi *giả Spin* (*Pseudo-Spin*) dành cho chúng là hoàn toàn xứng đáng.

Khi các điểm Dirac bị tách suy biến như đề cập đến trước đây. Việc hiệu chỉnh phương trình Dirac chỉ đơn giản là thêm vào số hạng khối lượng nghỉ (giả khối lượng nghỉ) của electron [12]. Kết quả là ta có dạng đầy đủ của phương trình Dirac sẽ được sử dụng như sau:

$$H_D \psi(x, y) = \left[-i\hbar v_0 (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}) + \sigma_z m v_0^2 + U(x, y) \right] \psi(x, y) = E \psi(x, y) \quad (1.18)$$

Trong đó v_0 là vận tốc Fermi của Graphene và $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, σ_z là các ma trận Pauli quen thuộc trong cơ học lượng tử.

Một vấn đề khác cần nói đến là trong Graphene ta có một mặt Fermi sáu điểm với hai điểm không tương đương K và K' . Khai triển $K.P$ tại điểm K và K' là tương tự nhau, qua một phép biến đổi biểu diễn, điểm này có thể biến thành điểm kia. Do đó chúng đều được mô tả bằng phương trình Dirac hai chiều tương tự nhau với sự chuyển đơn giản $p_y \rightarrow -p_y$. Theo [11], khi vắng mặt các tương tác đặc biệt (cụ thể là các hiệu ứng liên quan đến biên của dải nano Carbon) thì các electron sẽ tồn tại trong các thung lũng riêng biệt như các không gian con bất biến của Hamiltonian. Do đó trong tính toán, ta chỉ cần thực hiện đối với electron tại lân cận K của vùng Brillouin, kết quả tương tự được thiết lập cho lân cận K' , và các hiện tượng liên quan đến sự “tương tác” giữa các thung lũng khác nhau là không đáng lo lắng.

Quay trở lại với phương trình Dirac, để khảo sát các tính chất tổng quát của phương trình Dirac đơn giản nhất là ta đi giải phương trình Dirac đối với electron tự do:

$$H_D \psi(x, y) = \left[-i\hbar v_0 (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}) + \sigma_z m v_0^2 \right] \psi(x, y) = E \psi(x, y) \quad (1.19)$$

Nghiệm của phương trình có thể tìm dưới dạng hàm riêng của xung lượng:

$\psi(x, y) = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} e^{ik_x x + ik_y y}$. Thế nghiệm này vào phương trình trên ta có:

$$\left[\hbar v_0 (\vec{\sigma} \cdot \vec{k}) + \sigma_z m v_0^2 - E \right] \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (1.20)$$

Do đó ta có $\det \left[\hbar v_0 (\vec{\sigma} \cdot \vec{k}) + \sigma_z m v_0^2 - E \right] = 0$. Khai triển hệ thức trên cho ta $E^2 = (\hbar v_0 \vec{k})^2 + m^2 v_0^4$, chính là phương trình Hamilton tương đối tính trong thuyết

tương đối cổ điển. Phương trình cho hai nghiệm với hai dấu của năng lượng

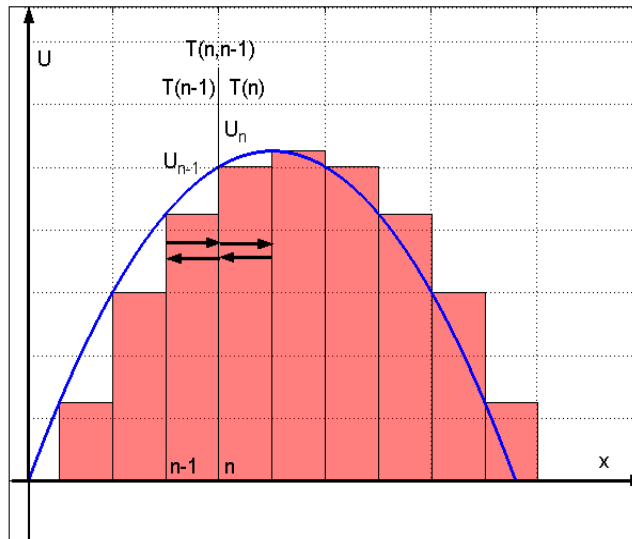
$$E = \pm \sqrt{(\hbar v_0 \vec{k})^2 + m^2 v_0^4} = \lambda |E|, \text{ và khi đó } C_2 = \frac{\hbar v_0 (k_x + i k_y)}{m v_0^2 + \lambda |E|} C_1 .$$

Ở đây chúng ta gặp lại hiện tượng liên quan đến các năng lượng âm của phương trình Dirac (cho electron tương đối tính). Một thời gian dài các nghiệm âm của phương trình Dirac đã gây bối rối cho các nhà vật lý, và một trong những hệ quả quan trọng do chính Dirac đưa ra là lý thuyết *positron* [3]. Ở đây, sự tồn tại của các nghiệm âm không quá xa lạ với vật lý chất rắn. Sự kỳ dị do hệ thức tán sắc của năng lượng âm sinh ra (chẳng hạn vận tốc nhóm ngược chiều với chiều xung lượng) chính là hiện tượng liên quan đến cơ xử của electron gần đỉnh của vùng hóa trị đã được bàn đến trong vật lý chất rắn. Và sự tồn tại của lỗ trống trong bán dẫn đã là một điều hiển nhiên từ nhiều thập kỷ nay (cuối chương 2 ta sẽ cố gắng đưa ra một lời giải thích đơn giản cho các hiện tượng liên quan đến những tính kỳ dị này). Chúng ta sẽ không lặp lại ở đây việc khảo sát các tính chất đặc biệt hơn của phương trình Dirac. Các khảo sát như vậy đã có nêu trong các sách giáo khoa về cơ học lượng tử tương đối tính [3].

Chương 2. Các trạng thái giả liên kết

Trong chương này chúng ta sẽ bắt đầu từ việc mô tả phương pháp T-ma trận để giải bài toán điện tử Dirac trong thế một chiều. Một phương trình đơn giản xác định các trạng thái giả liên kết từ T-ma trận được rút ra trong mục 2.2, dựa trên đó ta tiến hành các tính toán số và so sánh với các phân tích bán cổ điển. Cuối chương, chúng ta cố gắng đưa ra một giải thích ngắn gọn đơn giản cho các tính chất của electron Dirac dựa trên mô hình một chiều đơn giản hóa của hệ.

2.1. Giải phương trình Dirac với thế một chiều bằng phương pháp T-ma trận



Hình 11. Xấp xỉ thế một chiều theo $0x$ bởi thế bậc thang.

Trong trường hợp đơn giản nhất, electron Dirac chuyển động trong thế một chiều không đổi trên từng đoạn, phương trình Dirac cho lời giải giải tích. Ở đây khái niệm *thế* được dùng là tích của điện thế và điện tích của electron, trong trường hợp đề cập đến thế điện từ ta sẽ dùng khái niệm *điện thế*.

Phương trình trị riêng cho Hamiltonian Dirac có dạng:

$$H_D \psi(x, y) = \left[-i\hbar v_0 (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}) + \sigma_z m v_0^2 + U(x, y) \right] \psi(x, y) = E \psi(x, y) \quad (2.1)$$

Trường hợp riêng của ta ứng với $U(x, y)$ không đổi theo trục Oy , và theo Ox gồm $N+1$ đoạn không đổi từ 0 đến N ngăn cách nhau bởi N bước nhảy từ 1 đến N , thế tương ứng trên đoạn thứ n ký hiệu là U_n , tọa độ các bước nhảy là d_n . Về

nguyên tắc, một bờ thể tập trung trong một miền hữu hạn của không gian và có dạng tương đối tùy ý (mặc dù có những giới hạn liên quan đến tính ổn định của nghiệm) trên miền đó đều có thể được xấp xỉ theo cách chia bậc như vậy.

Như vậy nghiệm của phương trình Dirac, theo trục Oy là hàm riêng của xung lượng p_y , và trên từng đoạn của trục Ox là sóng phẳng đơn sắc truyền theo hai chiều ứng với hai chiều của xung lượng. Đòi hỏi sự liên tục của hàm sóng tại các bước nhảy của thế ta có mối liên hệ biên độ sóng giữa các miền, đó là tư tưởng cơ bản của phương pháp T -ma trận trong cơ học lượng tử.

Từ phương trình tổng quát cho hàm sóng hai thành phần trên mặt phẳng hai chiều, ta viết tường minh hệ phương trình cho hai thành phần *Spinor*:

$$\begin{cases} \hbar v_0 \left(-i \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - \frac{\partial \psi_2}{\partial y} \right) + [mv_0^2 + U(x, y)] \psi_1 = E \psi_1 \\ \hbar v_0 \left(-i \frac{\partial \psi_1}{\partial x} + \frac{\partial \psi_1}{\partial y} \right) + [-mv_0^2 + U(x, y)] \psi_2 = E \psi_2 \end{cases}$$

Hay:

$$\begin{cases} \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_2 = \frac{1}{\hbar v_0} [E - U(x, y) - mv_0^2] \psi_1 \\ \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_1 = \frac{1}{\hbar v_0} [E - U(x, y) + mv_0^2] \psi_2 \end{cases} \quad (2.2)$$

Đặt $\varepsilon = E / \hbar v_0$, $\varepsilon_0 = mv_0^2 / \hbar v_0$, $u(x, y) = U(x, y) / \hbar v_0$ (thực chất ta đã thực hiện một phép đổi đơn vị cho năng lượng), đồng thời rút thế ψ_2 từ phương trình thứ hai vào phương trình thứ nhất trong hệ (2.2) ta có:

$$\begin{cases} \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right) \frac{1}{[\varepsilon - u(x, y) + \varepsilon_0]} \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_1 = [\varepsilon - u(x, y) - \varepsilon_0] \psi_1 \\ \psi_2 = \frac{1}{[\varepsilon - u(x, y) + \varepsilon_0]} \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_1 \end{cases} \quad (2.3)$$

Quay trở lại trường hợp riêng của ta: thế $u(x, y)$ không đổi dọc theo trục Oy , khi đó nghiệm có thể tìm dưới dạng hàm riêng của xung lượng theo trục Oy : $\psi(x, y) = e^{ik_y y} \chi(x)$, ta có phương trình cho $\chi(x)$:

$$\begin{cases} \left(-i \frac{\partial}{\partial x} - ik_y\right) \frac{1}{[\varepsilon - u(x) + \varepsilon_0]} \left(-i \frac{\partial}{\partial x} + ik_y\right) \chi_1 = [\varepsilon - u(x) - \varepsilon_0] \chi_1 \\ \chi_2 = \frac{i}{[\varepsilon - u(x) + \varepsilon_0]} \left(-\frac{\partial}{\partial x} + k_y\right) \chi_1 \end{cases} \quad (2.4)$$

Mặt khác ta xét phương trình trên từng đoạn không đổi của thế trên trục Ox , khi đó phương trình đơn giản thu về:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2\right) \chi_1 + [(\varepsilon - u_n)^2 - \varepsilon_0^2] \chi_1 = 0 \\ \chi_2 = \frac{i}{[\varepsilon - u_n + \varepsilon_0]} \left(-\frac{\partial}{\partial x} + k_y\right) \chi_1 \end{cases}$$

Đặt $k_n = \sqrt{(\varepsilon - u_n)^2 - \varepsilon_0^2 - k_y^2}$ ta có:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \chi_1}{\partial x^2} + k_n^2 \chi_1 = 0 \\ \chi_2 = \frac{i}{[\varepsilon - u_n + \varepsilon_0]} \left(-\frac{\partial}{\partial x} + k_y\right) \chi_1 \end{cases} \quad (2.5)$$

Phương trình cho χ_1 đơn giản là phương trình kiểu dao động điều hòa, nghiệm tổng quát được cho dưới dạng:

$$\chi_1 = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x} \quad (2.6)$$

Và do đó:

$$\chi_2 = \frac{1}{\varepsilon - u_n + \varepsilon_0} \left[(k_n + ik_y) A_n e^{ik_n x} - (k_n - ik_y) B_n e^{-ik_n x} \right] \quad (2.7)$$

Trong trường hợp các giá trị ε , u_n , ε_0 là thực, ta có thể đơn giản hóa công thức bằng cách đặt các tham số mới:

$$t_n = \text{sign}(\varepsilon - u_n + \varepsilon_0) \sqrt{\frac{\varepsilon - u_n - \varepsilon_0}{\varepsilon - u_n + \varepsilon_0}}$$

$$\text{tg}(\varphi_n) = k_y / k_n, \quad -\pi/2 < \varphi_n < +\pi/2$$

Như vậy:

$$\chi_2 = t_n (A_n e^{i\varphi_n} e^{ik_n x} - B_n e^{-i\varphi_n} e^{-ik_n x}) \quad (2.8)$$

Lưu ý là trong trường hợp tổng quát, các tham số nói trên là phức, việc đặt

các biến phụ này là thiếu *chặt chẽ toán học* (có thể thấy rõ điều đó ở chỗ chính hàm dấu *sign* không được định nghĩa cho các số phức), tuy nhiên có thể xem chúng như những ký hiệu trung gian cho một biểu thức toán học và hoàn toàn không tham gia một cách *logic* vào kết quả cuối cùng, trong tính toán số, các hàm này hoàn toàn không phải dùng đến.

Đặt điều kiện liên tục cho hàm sóng ở bước nhảy thứ n của thế tại tọa độ d_n (tức là thành ngăn giữa đoạn thế không đổi thứ $n-1$ và n) (Trong [6] có thảo luận về việc áp dụng điều kiện liên tục cho hàm sóng tại bước nhảy của thế: hệ phương trình cho hàm sóng là bậc nhất theo tọa độ do đó ta chỉ yêu cầu sự liên tục của chính hàm sóng mà không đặt điều kiện liên tục đối với đạo hàm của nó, ngược lại có thể dễ dàng thấy rằng điều đó *kéo theo* đạo hàm của hàm sóng sẽ gián đoạn tại bước nhảy của thế. Điều đó thoát đầu có vẻ kỳ lạ, nhưng ta lưu ý rằng, yêu cầu thực sự của cơ học lượng tử là sự liên tục của hàm sóng đầy đủ (*the complete-wave function*) tức là tích của hàm “vỏ” (*envelope-function*) và hàm “lõi” (*core-function*) [1], điều kiện đối với hàm “vỏ” chỉ là sự phản ánh điều kiện đối với hàm sóng đầy đủ. Ta cũng gặp một trường hợp tương tự khi thực hiện “nối” hàm sóng trên hai miền của dị cấu trúc có khối lượng hiệu dụng của điện tử khác nhau [1]).

Ta có:

$$\begin{cases} A_{n-1}e^{ik_{n-1}d_n} + B_{n-1}e^{-ik_{n-1}d_n} = A_n e^{ik_n d_n} + B_n e^{-ik_n d_n} \\ t_{n-1}A_{n-1}e^{i\varphi_{n-1}}e^{ik_{n-1}d_n} - t_{n-1}B_{n-1}e^{-i\varphi_{n-1}}e^{-ik_{n-1}d_n} = t_n A_n e^{i\varphi_n} e^{ik_n d_n} - t_n B_n e^{-i\varphi_n} e^{-ik_n d_n} \end{cases} \quad (2.9)$$

Có thể viết lại điều kiện trên dưới dạng ma trận:

$$\begin{pmatrix} I & I \\ t_{n-1}e^{i\varphi_{n-1}} & -t_{n-1}e^{-i\varphi_{n-1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{n-1}d_n} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{n-1}d_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & I \\ t_n e^{i\varphi_n} & -t_n e^{-i\varphi_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_n d_n} & 0 \\ 0 & e^{-ik_n d_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$$

Nhân trái lần lượt với các ma trận nghịch đảo đứng trước $\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$ ta có:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_n d_n} & 0 \\ 0 & e^{-ik_n d_n} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} I & I \\ t_n e^{i\varphi_n} & -t_n e^{-i\varphi_n} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} I & I \\ t_{n-1}e^{i\varphi_{n-1}} & -t_{n-1}e^{-i\varphi_{n-1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{n-1}d_n} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{n-1}d_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix}$$

Đặt :

$$T(n, n-1) = \begin{pmatrix} e^{ik_n d_n} & 0 \\ 0 & e^{-ik_n d_n} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} I & I \\ t_n e^{i\varphi_n} & -t_n e^{-i\varphi_n} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} I & I \\ t_{n-1}e^{i\varphi_{n-1}} & -t_{n-1}e^{-i\varphi_{n-1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{n-1}d_n} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{n-1}d_n} \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Như vậy, $T(n, n-1)$ đơn giản là ma trận liên hệ biên độ của sóng truyền theo hai chiều của xung lượng trên hai miền $n-1$ và n . Dễ dàng thấy có thể lập các ma trận liên hệ biên độ giữa các miền khác nhau bằng cách nhân lần lượt các ma trận giữa các miền liên tiếp giữa chúng theo đúng tinh thần của phương pháp T -ma trận, nói riêng ma trận liên hệ biên độ sóng giữa miền 0 và miền thứ n cho bởi công thức:

$$T(n, 0) = T(n, n-1) * T(n-1, n-2) * \dots * T(1, 0) \quad (2.11)$$

Để cho gọn ta sẽ ký hiệu: $T(n) = T(n, 0)$ và $T = T(N)$.

Như vậy với hai hằng số, là biên độ sóng trên miền 0 : $\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}$, ta có thể tìm được biên độ sóng trên tất cả các miền còn lại theo công thức $\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = T(n) \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}$, và do đó có thể thu được tất cả các thông tin cần thiết về trạng thái của điện tử.

Kết luận trên kết thúc phép giải phương trình Dirac đối với thể một chiều bằng phương pháp T -ma trận. Tuy nhiên ta lưu ý rằng, trong [1], tác giả Davies đã có cảnh báo: “Mặc dù một bờ thể có dạng bất kỳ có thể được xấp xỉ với độ chính xác tùy ý bởi bờ thể không đổi trên từng đoạn, nhưng sự hội tụ và ổn định của nghiệm giải theo phương pháp này không phải bao giờ cũng tốt”. Vì vậy trong tính toán ta sẽ giới hạn trong những trường hợp đơn giản là thể với các bờ vuông góc và thể hình thang với thành nghiêng tuyến tính. Tính toán số đã được kiểm tra sự hội tụ với các số bước xấp xỉ khác nhau.

Cuối cùng, dựa trên T -ma trận, chúng ta rút ra biểu thức cho hệ số truyền qua rào thế của electron. Mặc dù mục đích của ta không phải là đi tìm hệ số truyền qua của electron đối với bờ thể, nhưng để khảo sát các trạng thái giả liên kết trong liên hệ với đặc trưng cộng hưởng ta cần thảo luận về việc tính hệ số truyền qua từ T -ma trận.

Trước hết ta nhắc lại rằng: một electron (nằm trong vùng phổ liên tục) đi tới bờ thể (có thể bị phản xạ hoặc truyền qua) sẽ được mô tả gần đúng bằng một electron có năng lượng xác định với điều kiện biên là không có dòng xác suất truyền ngược lại từ dương vô hạn. Ta lưu ý rằng đây hoàn toàn là một thủ thuật toán học, hơn là một hiện thực vật lý để mô tả electron, trong thực tế trạng thái của electron có độ định xứ nào đó đi tới bờ thể không phải là trạng thái riêng của Hamiltonian,

do đó không có gì ngạc nhiên khi lập luận của ta ở đây sẽ không đạt đến *mức độ chặt chẽ hình thức của toán học*.

Một đặc trưng quan trọng đặc biệt của electron Dirac là chiều của mật độ dòng xác suất trong tương quan với chiều xung lượng phụ thuộc vào dấu của năng lượng (điều này đúng trên từng miền riêng lẻ) [3]. Tại miền có dấu dương của năng lượng, mật độ dòng xác suất cùng chiều với chiều xung lượng trong khi tại miền có dấu âm của năng lượng, mật độ dòng xác suất ngược chiều với chiều xung lượng. Để xác định, ta xét trường hợp đơn giản nhất là trường hợp thế có dạng tiệm cận đến không ở bên trái và bên phải (âm vô hạn và dương vô hạn), electron đi tới có năng lượng dương (với cả hai phía). Với dấu dương của năng lượng mật độ dòng xác suất cùng chiều với xung lượng và điều kiện biên đơn giản là $t_0 = t_N > 0$: $A_0 = 1$, $B_0 = r$, $A_N = t$, $B_N = 0$ trong đó t, r là các tham số.

Do đó ta có :

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

$$\text{Vậy : } r = -T_{21}/T_{22} \text{ và } R = |r|^2 = |T_{21}|^2 / |T_{22}|^2$$

Hệ số truyền qua có thể thu được đơn giản từ hệ số phản xạ:

$$T = 1 - R = 1 - |T_{21}|^2 / |T_{22}|^2 \quad (2.13)$$

Dưới đây, để tránh các rườm rà về lý thuyết, ta sẽ chỉ giới hạn trong trường hợp đơn giản này, công thức đưa ra hoàn toàn đáng tin cậy khi các điều kiện về dấu nói trên được đảm bảo.

2.2. Các trạng thái giả liên kết

a) Mô tả trạng thái giả liên kết bằng T-ma trận

Trong bán dẫn thường, các trạng thái giả liên kết thông thường xuất hiện trong hệ hai bờ thế với thành dày hữu hạn. Electron tồn tại tạm thời trong hệ với mật độ xác suất tập trung giữa hai bờ thế, sau đó sẽ thoát ra ngoài tại một thời điểm nào đó trong tương lai nhờ hiện tượng chui ngầm lượng tử. Điều này rất tương tự như hình ảnh của hiện tượng phân rã *alpha* (và ở mức độ nào đó cũng tương tự như hiện tượng phân hạch hạt nhân, tuy có khác chút ít về hình thức). Vì electron trong bán dẫn thường được mô tả tốt bằng phương trình cho hàm sóng vô hướng kiểu Schrodinger, nên để đơn giản và đảm bảo các lập luận hình thức, ta sẽ làm việc với

electron thực một chiều (thay cho các giả hạt electron-các kích thích sơ cấp của *chất lỏng Fermi* trong môi trường bán dẫn) trong hệ hai bờ thế vuông góc với thành dày hữu hạn nhưng khá lớn.

Với mô tả bán cổ điển ta có thể hình dung như sau: electron bị giam cầm tạm thời giữa hai bờ thế, chuyển động qua lại liên tục va chạm giữa hai thành bờ thế. Giả sử thành bờ thế tương đối dày, điều đó khiến cho electron “cảm thấy” như đang chuyển động giữa hai thành dày vô hạn và do đó, ta cũng phải có các trạng thái “gần như” dừng trong hệ. Xấp xỉ đơn giản nhất cho các trạng thái này có thể tìm được nhờ qui tắc lượng tử hóa Bohr-Sommerfeld, cũng là kết luận của cơ học lượng tử đối với bài toán “nhập môn”-bài toán hố thế thành cao vô hạn. Kết quả là ta thu được phổ năng lượng hoàn toàn tương tự như phổ dừng của electron trong hố thế thành cao vô hạn:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2md^2} \quad (2.14)$$

Xét electron ở trạng thái n nào đó, tương ứng với xung lượng cổ điển $p_n = \hbar k_n = \hbar n \pi / d$ và vận tốc cổ điển $v_n = p_n / m$, liên tục va chạm qua lại giữa hai thành bờ thế, mỗi lần va chạm giữa các thành electron lại có thể “chui ngầm” qua thành với một xác suất nào đó. Xác suất chui ngầm được đánh giá bằng phương pháp *WKB* [1]:

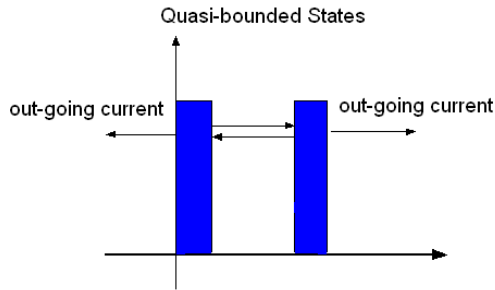
$$p_n = \exp \left\{ - \int_{x_1}^{x_2} |q(x')| dx' \right\} \quad (2.15)$$

Trong đó x_1, x_2 là các điểm đảo quỹ đạo cổ điển (còn gọi là điểm quay quỹ đạo), $q(x)$ là số sóng ảo trong miền cấm cổ điển.

Chu kỳ va chạm (với cả hai thành) là: $\tau_n = d / v_n$. Sau thời gian t số lần va chạm là: $N \approx t / \tau_n$. “Cơ may” để hạt còn lại trong hố thế có thể được tính đơn giản bằng lý thuyết xác suất $P_n(t) = (1 - p_n)^{t/\tau_n}$. Như vậy xác suất tìm được hạt trong hố thế sẽ giảm dần theo biểu thức hàm mũ (*exponential*) của thời gian.

Chuyển sang mô tả hệ bằng ngôn ngữ lượng tử: ta sẽ coi rằng trạng thái giả liên kết là tương đối bền và được mô tả bởi hàm sóng với *năng lượng phức* mà phần ảo rất nhỏ so với phần thực, đóng vai trò như một nhiễu loạn. Sự tồn tại của phần ảo (dù nhỏ) trong năng lượng làm cho mật độ xác suất giảm dần theo thời gian dưới

dạng hàm mũ (*exponential*), phù hợp với điều đã nêu trong lý luận bán cổ điển ở trên. Một cách hoàn toàn hợp lý, điều kiện biên áp dụng cho các trạng thái giả liên kết như vậy là: *chỉ các dòng xác suất đi ra từ hệ được phép xuất hiện*. Chúng ta nhấn mạnh rằng ở đây phần ảo là rất nhỏ so với phần thực và chỉ đóng vai trò nhiễu loạn, do đó chúng không tham gia vào biểu thức của dòng xác suất (điều đó có nghĩa là biểu thức của dòng xác suất được tính với bậc không của nhiễu loạn), kết quả là dòng xác suất vẫn đơn giản tỷ lệ với biên độ sóng.



Hình 12. Trạng thái giả liên kết.

Ta cũng biết rằng tương tự như Graphene, trong hệ thường một chiều với thế không đổi trên từng đoạn, ta cũng có thể mô tả hàm sóng của electron hoàn toàn bởi T -ma trận tại từng đoạn không đổi của thế (điều này đã được khảo sát chi tiết bởi [1]). Giả sử $T = T(N, \theta)$ ta có :

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

Điều kiện biên của ta có dạng $A_0 = 0, B_N = 0$, do đó ta có:

$$\begin{pmatrix} A_N \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ B_0 \end{pmatrix}$$

Hay:

$$\begin{cases} A_N = T_{12} B_0 \\ 0 = T_{22} B_0 \end{cases}$$

Dưới dạng ma trận:
$$\begin{pmatrix} 1 & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_N \\ B_0 \end{pmatrix} = 0$$

Điều kiện có nghiệm cho phương trình tuyến tính thuần nhất trên là:

$$\det \begin{pmatrix} 1 & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.17)$$

Từ đó ta có phương trình cho phổ năng lượng của trạng thái giả liên kết: $T_{22}(E) = 0$. Việc phân tích và giải chi tiết phương trình này sẽ được trình bày chi tiết cuối chương. Ta chỉ lưu ý rằng phương trình sẽ cho phổ nghiệm phức $E = a + i * b$ trong đó phần ảo b là âm và rất nhỏ so với phần thực. Mật độ xác suất giảm dưới dạng: $\rho \propto e^{-2|b|t}$ và do đó thời gian “bán rã” của trạng thái là $\tau = \frac{\ln(2)}{2|b|}$.

b) Các trạng thái giả liên kết của electron Dirac: phân tích bán cổ điển

Bây giờ ta quay lại với hệ Graphene. Trước hết người ta đã chỉ ra rằng trên mặt phẳng hai chiều Graphene, *xung lượng ngang* (tức là thành phần xung lượng theo trục Oy -vuông góc với mặt cắt của thể dọc trục Ox) và *khối lượng* của electron đóng vai trò quyết định trong việc cầm tù electron [6, 9, 10]. Xung lượng ngang và khối lượng càng lớn, sự cầm tù càng tốt. Đặc biệt, đối với trạng thái xung lượng ngang bằng không và khối lượng bằng không, electron có thể chui ngầm qua thể có độ cao và độ rộng tùy ý với xác suất gần đơn vị, ta có hiện tượng chui ngầm Klein nổi tiếng.

Xung lượng ngang không phải chỉ có thể xuất hiện với vai trò là giá trị riêng của xung lượng mà có thể xuất hiện như đại lượng đặc trưng cho các *mode* khác nhau trong các hệ một chiều xây dựng từ Graphene. Trong bài toán của ta, trạng thái electron luôn được coi là có xung lượng ngang xác định nào đó mà không khảo sát bản chất sinh ra nó. Xung lượng ngang trong ống nano Carbon là xung lượng vòng quanh ống, trong dải nano Carbon là xung lượng vuông góc với dải. Thật không may, tính toán đối với các hệ một chiều như vậy, với tham số đặc trưng nhỏ, không thể tránh khỏi các hiệu ứng liên quan đến sự tương tác giữa các thung lũng (K, K') của cấu trúc vùng [11]. Điều đó tuy về hình thức của phương pháp là khác, song không mang lại các hiệu ứng định tính quan trọng. Vì vậy, để tập trung vào mục đích chính, ta tạm bỏ qua các hiệu ứng liên quan đến dạng của ống nano Carbon cũng như dạng biên của dải nano Carbon.

Ngoài ra, như đã nói, Silvestrov và Eftov đã chỉ ra một điều rất lý thú là trong Graphene, một bờ thể (các tác giả xét thể *parabol*) cũng đủ để tạo thành hệ giả liên kết đối với electron [9]. Ở đây thành nghiêng của bờ thể đóng vai trò

như các thành cấm đối với electron Dirac.

Những điều nói trên có thể được giải thích đơn giản theo mô hình bán cổ điển dưới đây.

Xét electron Dirac chuyển động trong thế hình thang có độ cao U_0 , đáy lớn L và đáy nhỏ $L-2d$ trong đó d là độ dày thành nghiêng của hình thang.

Xung lượng bán cổ điển của electron cho từ phương trình Hamilton:

$$(E - U(x))^2 = v_0^2 (p_x^2 + p_y^2) + m^2 v_0^4 \quad (2.18)$$

Ta có:

$$p_x(x) = \frac{1}{v_0} \sqrt{(E - U(x))^2 - (p_y v_0)^2 - E_0^2} \quad (2.19)$$

Với $E_0 = m v_0^2$.

Miền cấm bán cổ điển tương ứng với miền ảo của xung lượng cho bởi bất đẳng thức:

$$(E - U(x))^2 - (p_y v_0)^2 - E_0^2 < 0$$

Hay:

$$U(x) - \sqrt{(p_y v_0)^2 + E_0^2} < E < U(x) + \sqrt{(p_y v_0)^2 + E_0^2} \quad (2.20)$$

Miền mô tả bởi bất đẳng thức trên được cho trên Hình 13.

Dựa trên Hình 13 ta sẽ phân miền năng lượng của electron làm 5 miền (không xét đến các giá trị tại biên giới các miền):

1. $E < -\sqrt{(v_0 p_y)^2 + E_0^2}$: miền này tương ứng với năng âm nhỏ hơn bờ thế của electron, electron đi qua thế mà không gặp vùng cấm nào cả.

2. $-\sqrt{(v_0 p_y)^2 + E_0^2} < E < \sqrt{(v_0 p_y)^2 + E_0^2}$: electron phản xạ giữa qua lại giữa hai miền cấm bán vô hạn tương ứng với các trạng thái liên kết của electron trong bờ thế, điều này đã được [6] khảo sát tuy nhiên là với giá trị thế âm. Từ sơ đồ này ta cũng thấy ngay yêu cầu thế âm như vậy rõ ràng không đóng vai trò gì cả.

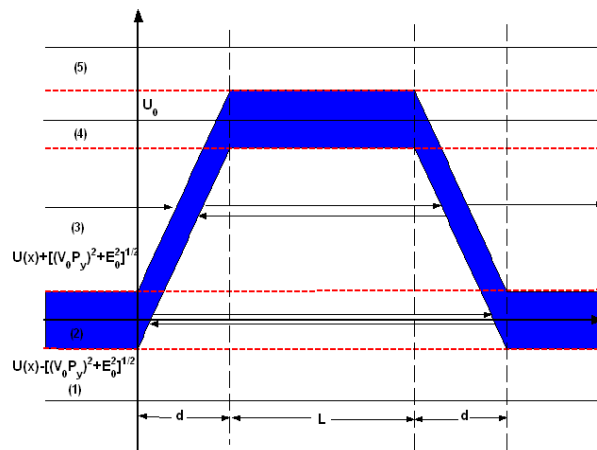
3. $\sqrt{(v_0 p_y)^2 + E_0^2} < E < U_0 - \sqrt{(v_0 p_y)^2 + E_0^2}$: electron đi vào chịu phản xạ qua

lại của hai thành cấm dày hữu hạn, đây chính là miền cho phép tồn tại các trạng thái giả liên kết với thời gian sống dài và tương ứng với các cộng hưởng nhọn trên đồ thị hệ số truyền qua.

4. $U_0 - \sqrt{(v_0 p_y)^2 + E_0^2} < E < U_0 + \sqrt{(v_0 p_y)^2 + E_0^2}$: electron truyền qua một vùng cấm tương ứng với miền suy giảm mạnh của hệ số truyền qua.

5. $U_0 + \sqrt{(v_0 p_y)^2 + E_0^2} < E$: năng lượng electron lớn, giống như trong trường hợp cổ điển năng lượng electron cao hơn rào thế, do đó hệ số truyền qua sẽ xấp xỉ đơn vị (theo quan điểm của cơ học lượng tử, electron trong vùng này vẫn chịu một sự phản xạ nào đó từ bờ thế nên nói chung hệ số truyền qua vẫn khác một, đây cũng là đặc tính chung của các hệ lượng tử).

Trên hình vẽ ta thấy rõ vai trò của khối lượng và xung lượng ngang của electron. Với xung lượng ngang bằng không, khối lượng bằng không, ta thấy rằng miền cấm bán cổ điển không tồn tại và không phụ thuộc độ cao bờ thế, điều đó giải thích hệ số truyền qua lý tưởng của electron. Khi tăng xung lượng ngang hay khối lượng của electron miền cấm mở rộng và sự cấm tù sẽ trở lên tốt hơn.



Hình 13. Sơ đồ phân miền năng lượng của electron tới với thế hình thang.

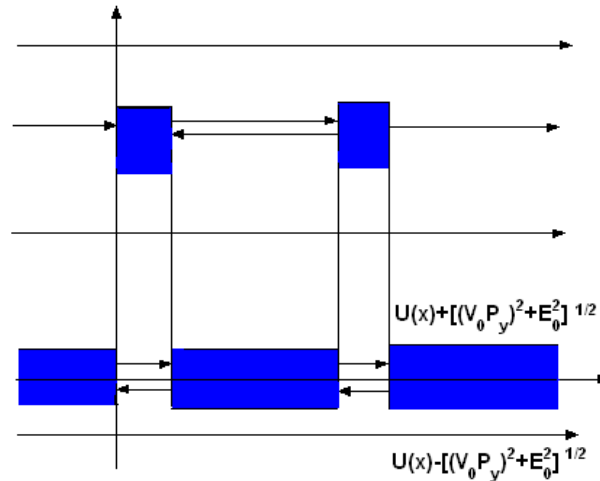
Mặt khác, độ nghiêng của bờ thế cũng đóng vai trò quan trọng trong việc hình thành miền cấm. Thành bờ thế càng thoải thoải sẽ làm cho độ dày miền cấm tăng và làm suy giảm sự chui ngầm của electron. Ngược lại bờ thế dốc thẳng đứng không tạo được hai thành cấm và không có các trạng thái giả liên kết như ta mong muốn. Tuy nhiên dưới đây ta sẽ thấy, trong trường hợp này cũng như trong trường

electron đi vào mà không bị cản trở bởi miền cấm nào nói chung, ta sẽ vẫn thấy xuất hiện các đỉnh cộng hưởng từ tương ứng với các trạng thái giả liên kết không bền (phần ảo của năng lượng tương đối lớn). Ta cũng lưu ý rằng đây không phải là tính chất đặc trưng riêng của Graphene, trong bán dẫn thường ta cũng gặp tình huống tương tự: kết quả cho thấy tồn tại những trạng thái giả liên kết tương đối không bền với năng lượng cao hơn độ cao bờ thế tương ứng với sự dao động nhỏ của hệ số truyền ở miền gần đơn vị. Điều đó không phải là quá bất bình thường: thực chất của nguyên nhân hình thành các trạng thái giả liên kết phải coi là do sự “không hoàn hảo” của thế (về mặt toán học ta không thể nào phân biệt định tính-logic thế “kiểu đồi” hay thế “kiểu giếng”), một “sai hỏng” như vậy của thế (so với thế hoàn toàn trơn tru từ dương vô hạn đến âm vô hạn) sẽ gây ra một sự “hấp dẫn” nhất định nào đó đối với “đám mây xác suất điện tử”. Như vậy các hệ với hai thành phần thực chất chỉ là một trường hợp riêng đảm bảo cho các trạng thái giả liên kết là bền (tức là chỉ mang đặc trưng định lượng), chứ không phải điều kiện cần cho chúng tồn tại. Nói riêng ra, theo lập luận đó, ngay cả đối với hệ một bờ thế (trong bán dẫn cổ điển cũng như bán dẫn thường) ta cũng phải có các trạng thái giả liên kết: quả thực như vậy, điều đó có thể thấy rõ từ sự xuất hiện các đỉnh cộng hưởng từ trên đồ thị hệ số truyền qua [1].

Hình 14 vẽ sơ đồ miền cấm bán cổ điển trong trường hợp hệ hai bờ thế vuông góc (Quantum Dot truyền thống). Ta cũng dễ dàng nhận thấy sự hiện diện của miền năng lượng cho các trạng thái giả liên kết và sự phụ thuộc của miền cấm vào các tham số tương tự như trường hợp trên. Khi độ dày bờ thế, xung lượng ngang cũng như khối lượng của electron tăng thì thời gian sống của trạng thái cũng sẽ phải tăng tương ứng. Ngoài ra, có một đặc điểm dễ nhận thấy là các trạng thái giả liên kết hình thành ở một vùng năng lượng gần đỉnh của bờ thế. Điều này khác với trường hợp cổ điển : các trạng thái giả liên kết càng bền khi năng lượng càng nhỏ (tính chất đó hoàn toàn hợp lý: năng lượng của electron tăng làm tăng đồng thời tần số va chạm và khả năng chui ngầm qua thành bờ thế do đó hiển nhiên là sẽ làm giảm thời gian sống của trạng thái). Sự đặc biệt của electron Dirac là do trong cấu trúc vùng của Graphene, miền hóa trị và miền dẫn tiếp xúc nhau, electron với năng lượng thấp sẽ chui ngầm qua trạng thái năng lượng âm nằm trong vùng hóa trị.

Việc giải cơ học lượng tử đối với electron Dirac hoàn toàn tương tự với trường hợp electron Schrodinger đã nói trên. Lưu ý rằng để đơn giản vấn đề ta vẫn chỉ xét hệ đối với các năng lượng dương của electron, khi đó dòng xác suất cùng

chiều với chiều xung lượng, điều kiện biên của ta vẫn có dạng đơn giản như trên và



Hình 14. Sơ đồ phân miền năng lượng electron trong hệ hai bờ thế vuông góc.

phương trình cho phổ năng lượng vẫn là $T_{22}(E) = 0$.

c) Độ rộng mức của các trạng thái giả liên kết: kết quả tính số

Bây giờ ta sẽ mô tả việc tính toán số cho các trạng thái giả liên kết. Ta sẽ bắt đầu từ trường hợp quen thuộc của electron cổ điển với những đơn giản hóa tối đa, qua đó làm rõ hình thức của phương pháp tính toán, cuối cùng sẽ đi vào tính cho hệ Graphene với những phức tạp thực tế cần thiết. Để đơn giản hóa tối đa các lập luận, trong trường hợp của electron Schrodinger, chúng ta giới hạn trong trường hợp đơn giản nhất: Xét electron trong hệ hai bờ thế delta đối xứng với hằng số thế delta là S ($S = V_0 a, a \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty$), cách nhau khoảng cách d .

Theo [1] T -ma trận của bờ thế delta có dạng:

$$T_{\text{delta}} = \begin{pmatrix} 1 - iZ & -iZ \\ iZ & 1 + iZ \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

Trong đó $Z = S \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2 E}}$.

Như vậy T -ma trận của hệ hai bờ thế delta đối xứng có dạng:

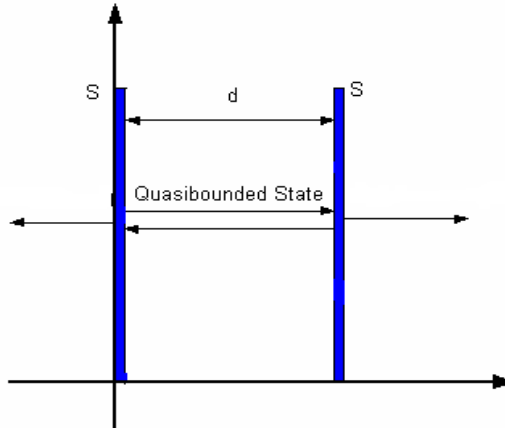
$$T = \begin{pmatrix} e^{-ikd} & 0 \\ 0 & e^{ikd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-iZ & -iZ \\ iZ & 1+iZ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikd} & 0 \\ 0 & e^{-ikd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-iZ & -iZ \\ iZ & 1+iZ \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

Trong đó số sóng được tính trực tiếp qua công thức: $k = \sqrt{2mE} / \hbar$.

Kết quả là ta thu được phương trình cho phổ năng lượng dưới dạng:

$$T_{22}(E) = e^{2ikd} Z^2 + 1 + 2iZ - Z^2 = 0 \quad (2.23)$$

Phương trình (2.23) mặc dù khá đơn giản nhưng cũng không đủ để thực hiện lời giải giải tích. Ta sẽ giải số phương trình này trên mặt phẳng phức của năng lượng. Chú ý rằng phương trình (2.23) tương đương với $|T_{22}(E)| = |e^{2ikd} Z^2 + 1 + 2iZ - Z^2| = 0$. Nhờ đó việc giải số được thực hiện khá đơn giản bằng phương pháp đồ thị. Mặt khác các nghiệm của phương trình cũng đồng thời là

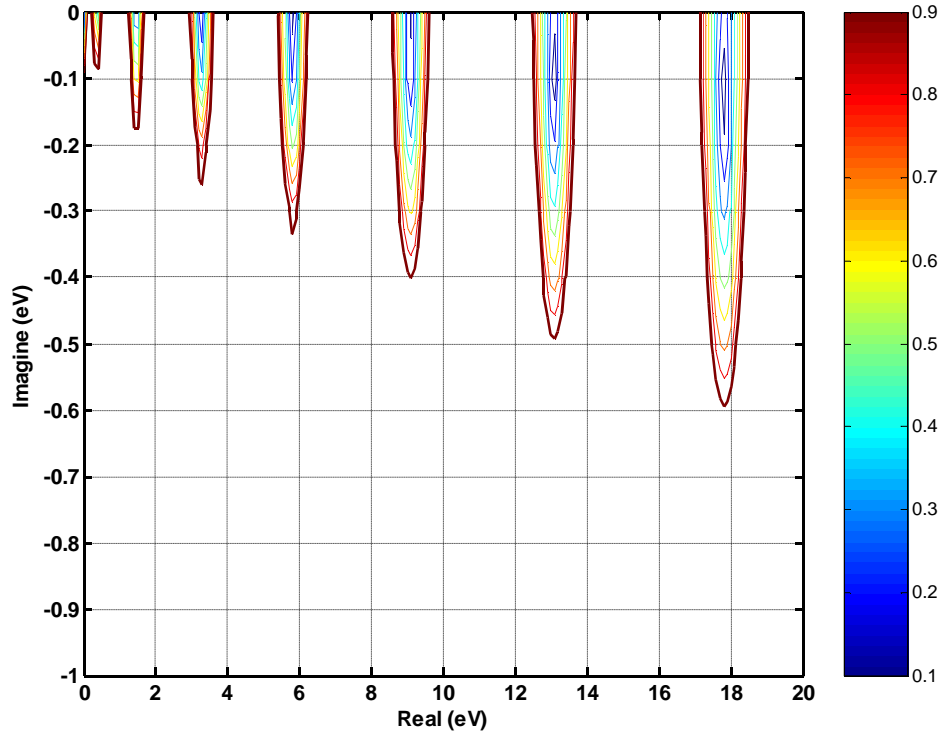


Hình 15. Trạng thái giả liên kết của electron Schrodinger trong hai bờ thế delta.

cực tiểu của hàm $|T_{22}(E)|$, điều đó giúp ta có thể chính xác hóa nghiệm bằng phương pháp tối ưu hóa nhờ hàm *fminsearch* trong Matlab.

Các tính toán số được thực hiện với số liệu như sau: $S = 6.40 * 10^{-28} \text{ Jm}$, $d = 1 \text{ nm}$, $m = 9.1 * 10^{-31} \text{ kg}$.

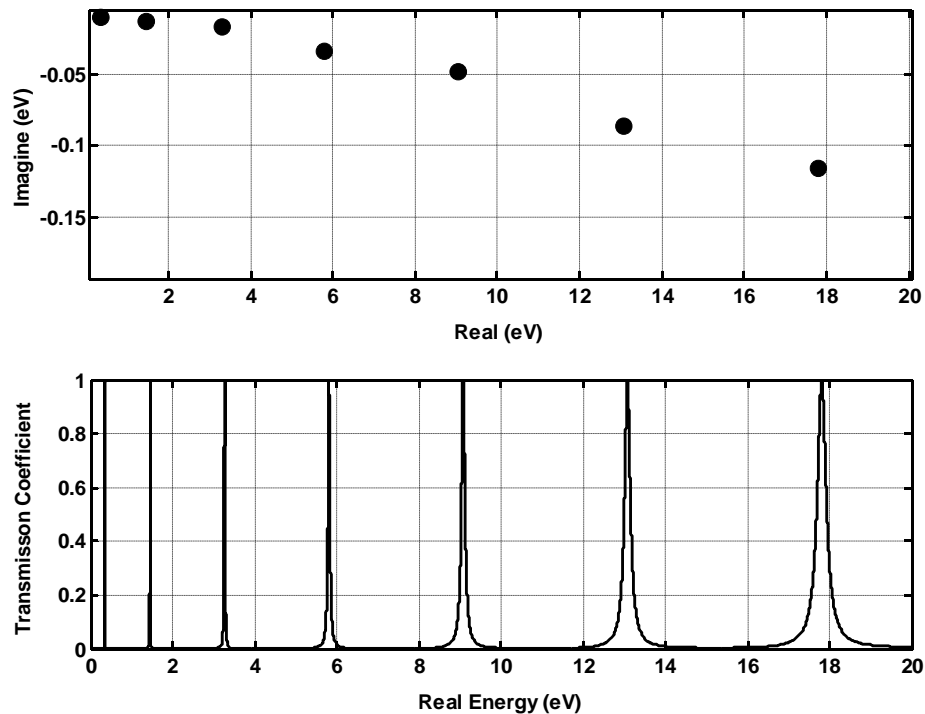
Hình 16 mô tả đồ thị *Contour* của hàm $|T_{22}(E)|$ (chỉ giữ lại các giá trị của hàm nhỏ hơn 1) trên mặt phẳng phức. Trên đó ta thấy các đường đồng mức thể



Hình 16. Đồ thị *Contour* của hàm $|T_{22}(E)|$ trong trường hợp hệ hai bờ thế delta. hiện xu hướng đi xuống của đồ thị tại các nghiệm và cũng là các cực tiểu của hàm. Các nghiệm này sẽ được lấy làm gần đúng đầu tiên của hàm f_{\minsearch} .

Hình 17 mô tả phổ nghiệm sau khi chính xác hóa và so sánh với điểm cộng hưởng của hệ số truyền qua.

Kết quả cho thấy sự phù hợp tốt của trạng thái giả liên kết và các điểm cộng hưởng trên đồ thì hệ số truyền qua. Vị trí các điểm cộng hưởng trùng với năng lượng các trạng thái giả liên kết đồng thời độ lớn giá trị tuyệt đối của phần ảo thể



Hình 17. Phổ nghiệm trong trường hợp hệ hai bờ thế delta và so sánh với hệ số truyền qua.

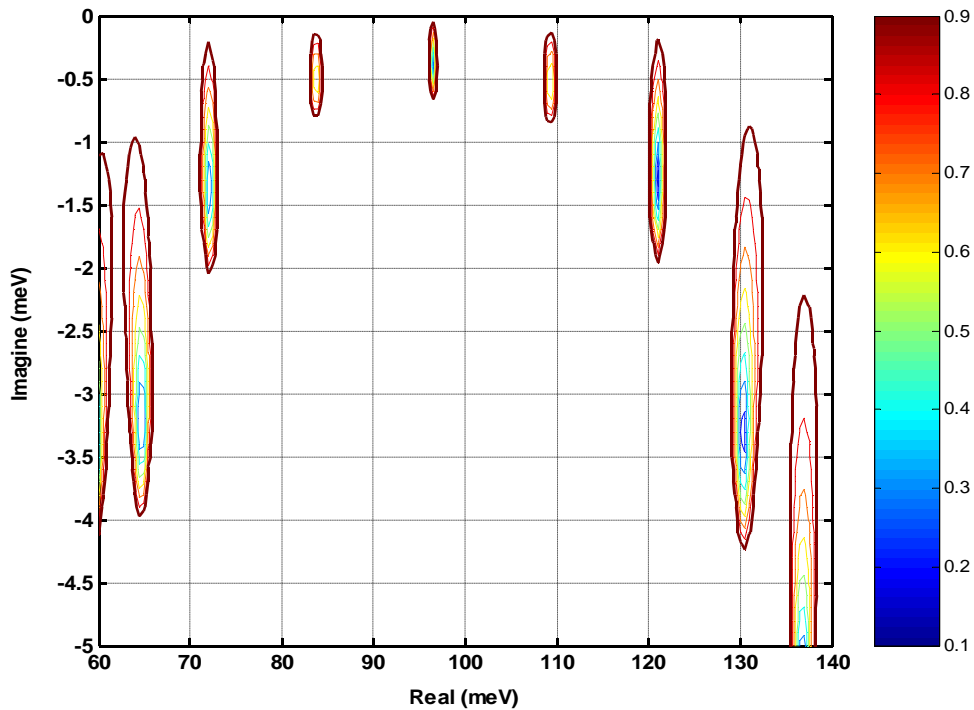
hiện độ rộng của đỉnh cộng hưởng.

Dựa trên cơ sở các hiểu biết định tính này về trạng thái giả liên kết của electron Schrodinger ta bắt đầu khảo sát các trạng thái giả liên kết của electron Dirac trong Graphene.

Đối với hệ Graphene, việc viết tường minh biểu thức của phương trình là rất công kềnh thậm chí là trong trường hợp đơn giản nhất mà ta quan tâm là hệ hai bờ thế vuông góc đối xứng. Nhưng như đã nói ở Chương 1, ta hoàn toàn không cần viết biểu thức tường minh của phương trình, việc tính T -ma trận theo phương pháp đã mô tả ở đầu Chương 2 sẽ được thực hiện trực tiếp bằng phương pháp chương trình số. Phương pháp số cho phép ta không chỉ tính T -ma trận đối với

trường hợp đơn giản nhất là hệ các bờ thể vuông góc mà còn thực hiện được đối với các dạng phức tạp khác nhau của thể qua phép xấp xỉ nhiều bậc liên tiếp. Việc giải số phương trình cho phổ năng lượng sẽ được thực hiện tương tự như trên.

Dưới đây ta trình bày kết quả tính đối với các dạng khác nhau của bờ thể và khảo sát sự phụ thuộc của thời gian sống của trạng thái vào các tham số khác nhau.



Hình 18. Đồ thị *Contour* của hàm $|T_{22}(E)|$.

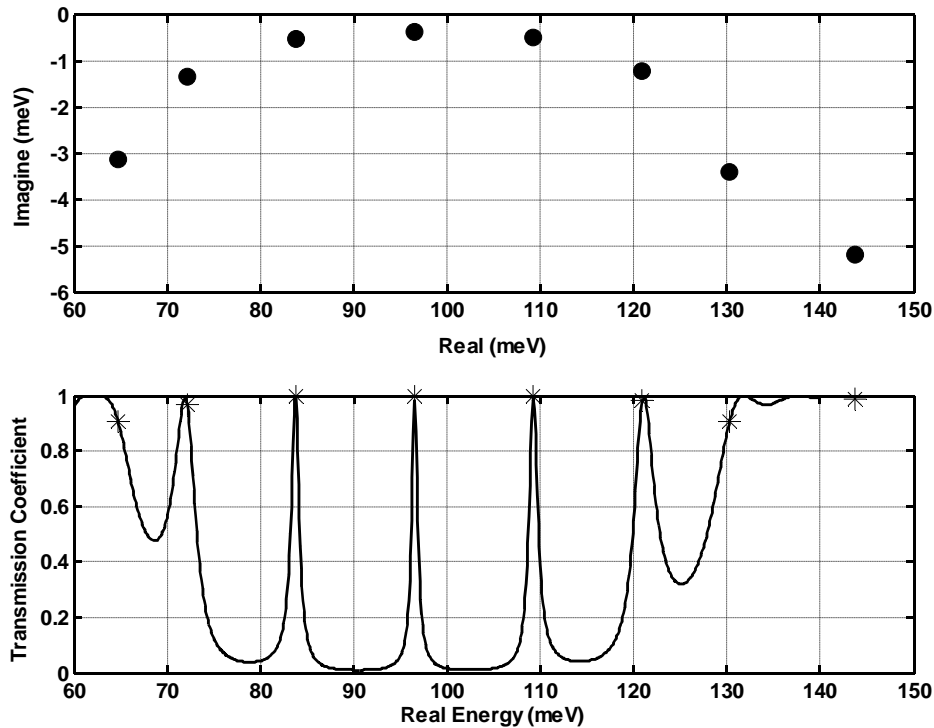
Vì lý do đơn giản hóa vấn đề, ta sẽ bắt đầu từ cấu trúc hai bờ thể vuông góc, sau đó phân tích kết quả của bờ thể hình thang [9] mà sẽ phải dùng đến phép xấp xỉ chia bậc.

Hình 18 cho đồ thị *Contour* của hàm $|T_{22}(E)|$ (chỉ giữ các giá trị nhỏ hơn 1) cho trường hợp hai bờ thể giống nhau có độ dày thành là $d = 50 \text{ nm}$, độ cao bờ thể là $U_0 = 100 \text{ meV}$, hai bờ cách nhau $L = 100 \text{ nm}$ và xung lượng ngang là $k_y = 0.030 \text{ nm}^{-1}$ (tương ứng với vùng con thứ nhất của dải nano Carbon với độ rộng $\approx 104 \text{ nm}$ nếu ta không tính đến các hiệu ứng đặc biệt gây ra bởi dạng biên).

Hệ nghiệm gần đúng được chính xác hóa và biểu diễn trên Hình 19. Trên đó ta thấy sự khác nhau về dạng phổ của trạng thái giả liên kết trong Graphene và trong

hệ cổ điển: ba trạng thái giả liên kết bền hơn cả có năng lượng trong khoảng 80 đến 110 meV trong khi đó các trạng thái năng lượng thấp đều có phần ảo tương đối lớn, điều này ngược lại với đồ thị trên Hình 17. Như vậy, chính do sự chui ngầm Klein mà trong Quantum Dot hai bờ thế mà trong Graphene không có các trạng thái giả liên kết bền với năng lượng thấp như trong bán dẫn thường, đây có thể coi là một đặc điểm dễ nhận thấy của electron Dirac.

Ta cũng thấy sự xuất hiện rõ ràng của các đỉnh cộng hưởng từ tại hai miền

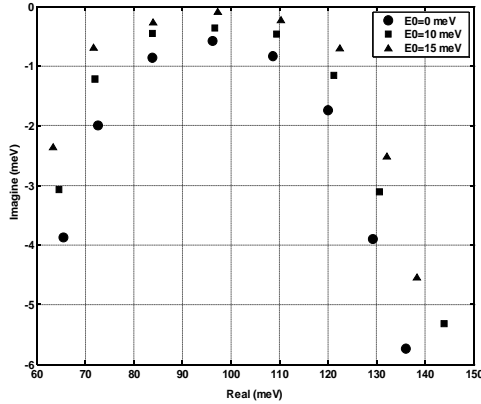


Hình 19. Phổ nghiệm đã chính xác hóa trường hợp Quantum Dot truyền thống.

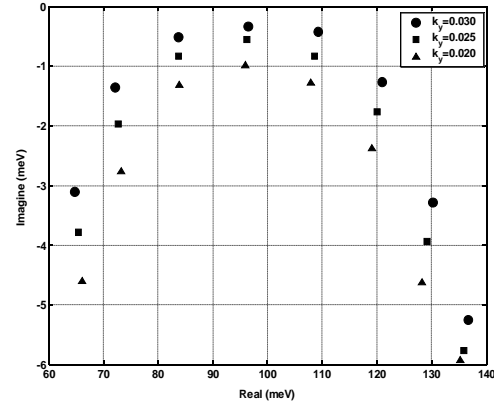
năng lượng cao và thấp (hệ số truyền lớn). Chúng cũng tương đương với các trạng thái giả liên kết và cùng là nghiệm của phương trình trên. Tuy nhiên có thể thấy sự trệch tương đối của điểm nghiệm giải được và điểm cộng hưởng trên đồ thị hệ số truyền qua. Lý do sự sai khác đó là do trong trường hợp này, phần ảo của năng lượng của trạng thái tương đối lớn, vi phạm điều kiện nhiễu loạn đã nói trên: bản thân dòng xác suất không còn đơn giản tỷ lệ với biên độ sóng, phương trình cho phổ năng lượng bây giờ chỉ là phương trình gần đúng với độ chính xác không cao. Thực ra điều đó không có gì lạ: các trạng thái giả liên kết không thể có một giá trị năng lượng xác định mà phải chứa một độ bất định nào đó tương ứng với độ rộng mức

cộng hưởng. Một cách gần đúng, ta lấy ngay chính phần ảo làm độ bất định này cho năng lượng, thì khi đó bản thân giá trị năng lượng tính theo các hình thức khác nhau có thể trệch khỏi nhau một độ lớn cỡ như vậy.

Hình 20 và Hình 21 khảo sát sự phụ thuộc của nghiệm vào xung lượng



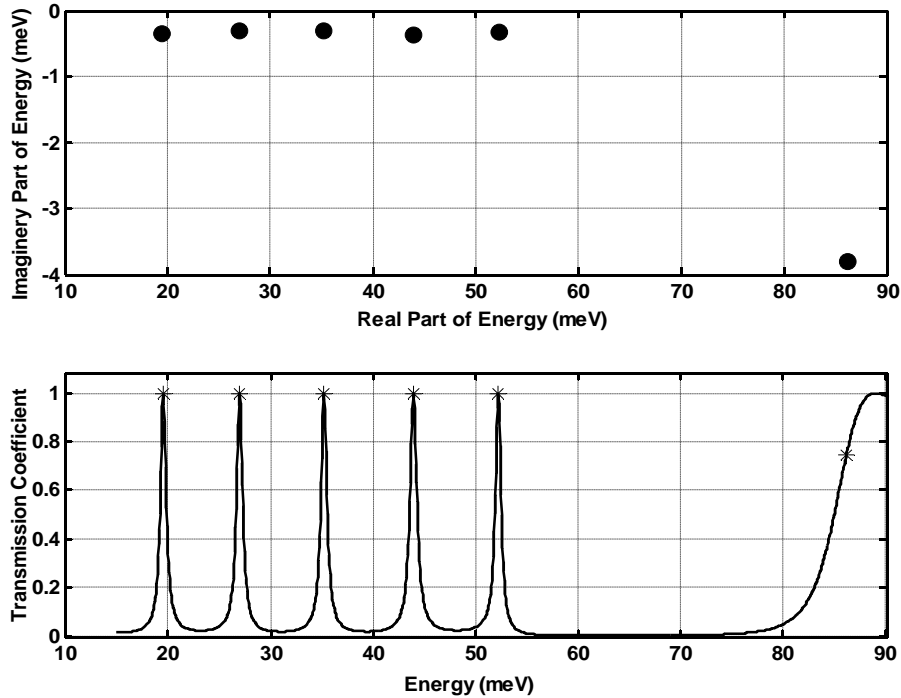
Hình 20. Sự phụ thuộc của phổ năng lượng vào khối lượng electron.



Hình 21. Sự phụ thuộc của phổ năng lượng vào xung lượng ngang của electron.

ngang và khối lượng nghỉ của electron. Có thể nhận thấy rằng khi khối lượng electron cũng như xung lượng ngang của electron tăng, toàn bộ phổ dịch gần về trục thực có nghĩa là giá trị tuyệt đối của phần ảo đều giảm, và thời gian sống của trạng thái tăng tương ứng.

Ta chuyển sang khảo sát Quantum Dot một bờ thể hình thang. Như đã nói, Silvestrov và Efetov, căn cứ vào các mức cộng hưởng trong đồ thị của Conductance chỉ ra rằng đối với hệ một bờ thể ta đã có các đặc trưng cộng hưởng. Điều đó cũng có nghĩa là bản thân hệ một bờ thể đã có tác dụng cảm tù electron. Đáng ngạc nhiên hơn nữa, sự cảm tù của electron có thể xảy ra ngay cả đối với điện thế dương và âm,

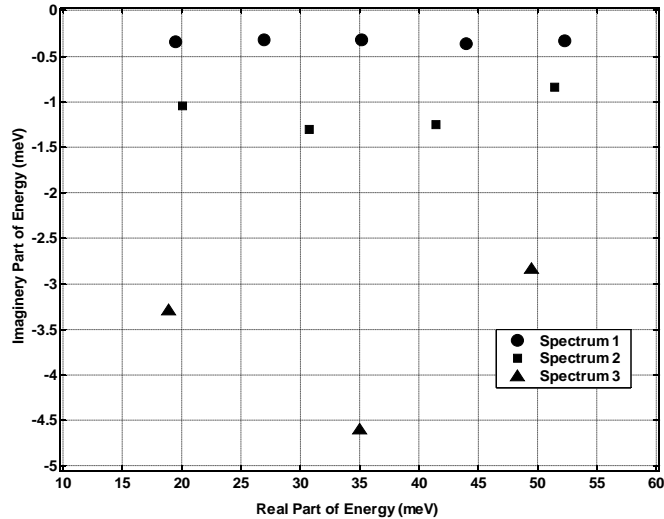


Hình 22. Phổ nghiệm đối với bờ thể hình thang độ dày thành nghiêng $d = 100 \text{ nm}$.

tức là xảy ra hiện tượng tích tụ điện tích âm trong điện thế âm của bờ thể. Như đã thấy khi phân tích bán cổ điển về hiện tượng, ở đây thành nghiêng của bờ thể đóng vai trò cốt yếu trong việc cảm tù electron. Mặc dù các bờ thể có thành thẳng đứng vẫn có các đặc trưng cộng hưởng từ nhưng các trạng thái đó đều có thời gian sống rất ngắn và thông thường không được coi như một trạng thái giả liên kết thực sự.

Các tính toán được thực hiện với bờ thể hình thang với độ cao $U_0 = 70 \text{ meV}$, đáy nhỏ $L = 100 \text{ nm}$, và độ dày thành nghiêng khác nhau $d = 100, 50, 5 \text{ nm}$, xung lượng ngang lấy là $k_y = 0.025 \text{ nm}^{-1}$. Hình 22 trình bày phổ các trạng thái giả liên kết trên mặt phẳng phức. Đồ thị hệ số truyền qua ở đây có dáng dấp đồ thị hệ số truyền

qua của hệ hai bờ thế đối với electron cổ điển. Trên đó ta có thể thấy rất rõ năm trạng thái liên kết tương đối đều nhau tương ứng với năm đỉnh nhọn của đồ thị hệ số truyền. Tiếp đó là vùng truyền qua một miền cấm tương ứng với sự giảm mạnh của hệ số truyền tạo thành một thung lũng. Khi năng lượng của electron đủ lớn, hệ số truyền đạt gần đơn vị, ta cũng có thể quan sát được các dao động nhỏ của hệ số truyền tương ứng với các cộng hưởng tử. Cũng như trên đối với các cộng hưởng tử



Hình 23. So sánh nghiệm với các độ dày khác nhau của thành nghiêng $d = 100, 50, 5 \text{ nm}$ (tương ứng với phổ 1, 2 và 3).

ta cũng quan sát được sự sai lệch của trạng thái giả liên kết tính được so với điểm cộng hưởng mà nguyên nhân là do giới hạn về phương pháp như đã nói.

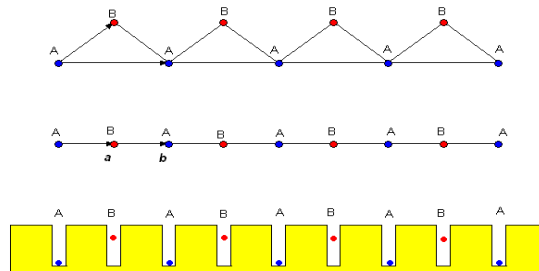
Hình 23 so sánh các trạng thái giả liên kết của bờ thế đối với các độ nghiêng khác nhau. Trên đó ta có thể quan sát được sự ảnh hưởng của độ nghiêng lên phổ giả liên kết. Thực tế là với các giá trị 5 nm của độ nghiêng bờ thế, ta đã tiến rất gần đến hệ một bờ thế vuông góc.

2.3. Giải thích hiện tượng bằng mô hình liên kết mạnh một chiều

Qua kết quả nêu ở các mục trước ta thấy các tính chất rất khác biệt của electron Dirac so với electron Schrodinger. Có thể thấy rõ nhất hai hiện tượng thú vị: thứ nhất, electron Dirac không khối lượng và xung lượng ngang bằng không không thể bị cấm tử với mọi thế cấm tử; thứ hai, có thể cấm tử electron Dirac trong một thế dương (tức là điện thế âm). Dưới đây ta cố gắng qui sự kỳ lạ đó về một lời giải thích đơn giản dựa trên tính chất của electron Schrodinger.

Điều thứ nhất có thể được giải thích là do phần tính chất *kim loại* trong tính bán kim của Graphene. Điều thứ hai có thể giải thích nhờ tính chất đặc thù của các trạng thái với khối lượng hiệu dụng âm. Không có gì ngạc nhiên lắm khi cả hai điều này đều có thể được minh họa định tính nhờ mô hình nhập môn của vật lý chất rắn: mô hình liên kết mạnh một chiều.

Hình 24 cho thấy sự chuyển tiếp từ mô hình Graphene thực sang mô hình



Hình 24. Mô hình một chiều cho sự suy biến của cấu trúc vùng tại biên của vùng Brillouin.

một chiều của ta diễn ra thế nào. Trước hết ta thấy rằng mạng Graphene như đã nói gồm hai mạng tam giác giống nhau lồng vào nhau. Sự suy biến của của cấu trúc vùng tại các điểm Dirac là do tính đồng nhất của hai mạng này đối với sự đối xứng của điểm Dirac trên vùng Brillouin. Để đưa hiện tượng đó vào một mô hình một chiều, đơn giản nhất là ta lấy một đường zigzag của Graphene, khi đó dễ thấy rằng sự suy biến trên vẫn được đảm bảo. Tiếp theo, ta thấy rằng việc các nguyên tử hai loại A và B không nằm trên cùng một đường thẳng thực ra không đóng vai trò quyết định, ta sẽ đưa hệ về mô hình đơn giản hơn gồm các nút nằm trên cùng một đường một chiều. Thực chất của một hệ như vậy tương đương với mạng một chiều có thể sinh ra bởi các thế vuông góc mô tả bởi hình cuối cùng. Đi xa hơn nữa, một mạng như vậy, ta có thể hiện thực hóa bằng mô hình Kronig-Panney khi thay đổi hợp lý thông số của vách ngăn. Mặt khác thông số của các vách ngăn có thể làm lớn tùy ý để sao cho xen phủ giữa hai trạng thái đơn trong từng vách là đủ nhỏ (theo đúng thuật ngữ *tight-binding*!). Kết hợp hai điều nói trên, ta thấy rằng có thể dựa trên các kết luận định tính của mô hình Kronig-Panney cũng như phương pháp liên kết mạnh để đưa ra các kết luận định tính cho mô hình của ta.

Trước tiên ta sẽ chứng tỏ rằng, hệ electron trong mạng như vậy thực chất là

tạo thành một kim loại. Điều đó có nghĩa là electron trên mặt Fermi tồn tại chính vào giữa vùng phổ liên tục của vùng dẫn.

Thực vậy, thoạt tiên ta sẽ đi tính cấu trúc vùng năng lượng của hệ dựa trên phương pháp gần đúng liên kết mạnh. Để lý luận rõ ràng, ta sẽ tạm giả sử rằng trạng thái nút tại hai vị trí A và B là khác nhau tương ứng $\alpha_A(x)$ và $\alpha_B(x)$, khoảng cách giữa hai nút lân cận cùng loại là b hai nút lân cận khác loại là $a = b/2$. Như vậy hằng số mạng của mạng là b , gốc mạng gồm hai nguyên tử A và B cách nhau khoảng a . Mạng có thể coi gồm hai mạng đơn A , B lồng vào nhau, hàm sóng liên kết mạnh trên từng mạng cho bởi:

$$\varphi_A = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_R e^{ikR} \alpha_A(x-R) \quad (2.24)$$

$$\varphi_B = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_R e^{ikR} \alpha_B(x-a-R) \quad (2.25)$$

Trong đó N_0 là số ô nguyên tố mà trên đó ta áp dụng điều kiện biên tuần hoàn Born-Von Karman, R là tọa độ các ô mạng.

Hàm sóng electron trong tinh thể, vẫn dựa trên mô hình liên kết mạnh (dưới dạng mở rộng của phương pháp *LCAO*) cho bởi tổ hợp tuyến tính của hai hàm sóng trên:

$$\varphi = C_A \varphi_A + C_B \varphi_B \quad (2.26)$$

Hamilton liên kết mạnh tương ứng với cơ sở là hai hàm sóng trên hai nút mạng cho bởi:

$$H = \begin{pmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

Trong đó các yếu tố ma trận sẽ được khai triển tới phối trí gần nhất:

$$\begin{aligned} H_{AA} &= \langle \varphi_A | H | \varphi_A \rangle = \frac{1}{N_0} \sum_{R,R'} e^{ik(-R+R')} \langle \phi_A(x-R) | H | \phi_A(x-R') \rangle \\ &= \sum_{R'} e^{ikR'} \langle \phi_A(x) | H | \phi_A(x-R') \rangle \\ &\approx \langle \phi_A(x) | H | \phi_A(x) \rangle = \alpha_A \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{BB} &= \langle \varphi_B | H | \varphi_B \rangle = \frac{1}{N_0} \sum_{R, R'} e^{ik(-R+R')} \langle \phi_B(x-a-R) | H | \phi_B(x-a-R') \rangle \\
&= \sum_{R'} e^{ikR'} \langle \phi_B(x-a) | H | \phi_B(x-a-R') \rangle \\
&\approx \langle \phi_B(x-a) | H | \phi_B(x-a) \rangle = \alpha_B
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{AB} &= \langle \varphi_A | H | \varphi_B \rangle = \frac{1}{N_0} \sum_{R, R'} e^{ik(-R+R')} \langle \phi_A(x-R) | H | \phi_B(x-a-R') \rangle \\
&= \sum_{R'} e^{ikR'} \langle \phi_A(x-a) | H | \phi_B(x-a-R') \rangle \\
&\approx \langle \phi_A(x) | H | \phi_B(x-a) \rangle + e^{-ikb} \langle \phi_A(x) | H | \phi_B(x-a+2a) \rangle \\
&= \beta(1 + e^{-ikb})
\end{aligned}$$

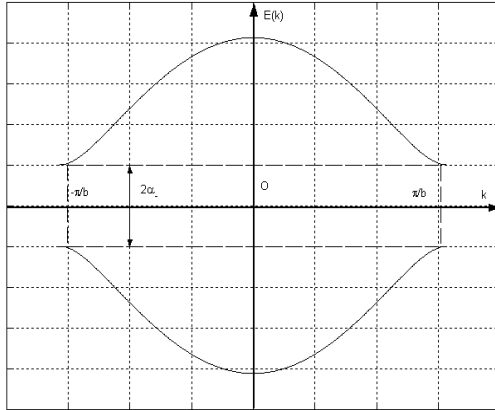
Và $H_{BA} = H_{AB}^*$ do tính liên hợp Hermite của toán tử Hamilton.

Trị riêng của Hamiltonian có thể tìm được dễ dàng từ phương trình trị riêng $\det(H - E) = 0$ hay cụ thể là:

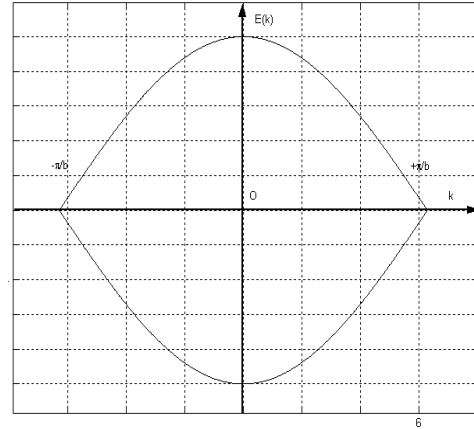
$$\det \begin{pmatrix} \alpha_A - E & \beta(1 + e^{-ikb}) \\ \beta(1 + e^{ikb}) & \alpha_B - E \end{pmatrix} = 0 \quad (2.28)$$

Đặt: $\alpha_+ = (\alpha_A + \alpha_B)/2$, $\alpha_- = (\alpha_A - \alpha_B)/2$ ta đưa phương trình trên về dạng:

$$(\alpha_+ - E)^2 - \alpha_-^2 - 2\beta^2(1 + \cos kb) = 0$$



Hình 25. Cấu trúc vùng của mô hình mạng một chiều.



Hình 26. Sự suy biến của cấu trúc vùng với hai nguyên tử đồng nhất.

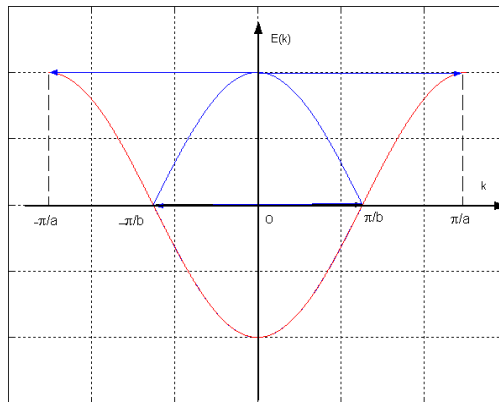
Do đó ta có:

$$E = \alpha_+ \pm \sqrt{\alpha_-^2 + 2\beta^2(1 + \cos kb)} \quad (2.29)$$

Trong đó dấu cộng tương ứng với vùng dẫn và dấu trừ tương ứng với vùng hóa trị. Mỗi nguyên tử (mỗi nút) sẽ cho một electron, vùng hóa trị hoàn toàn đầy trong khi vùng dẫn hoàn toàn trống (lưu ý rằng ta còn có suy biến bội hai của *Spin*)

Hình 25 mô tả cấu trúc vùng dẫn tả bởi công thức tìm được ở trên trên vùng Brillouin thứ nhất $-\pi/b < k < +\pi/b$. Tại biên vùng Brillouin xuất hiện một khe năng lượng với độ lớn $2\alpha_-$, điều đó chính là do sự không đồng nhất của hai nút *A* và *B*. Bây giờ ta chuyển tới giới hạn hai loại nguyên tử hoàn toàn đồng nhất, khi đó $\alpha_- = 0$ và ta có sự suy biến tại biên vùng Brillouin là điểm đóng vai trò điểm Dirac (Hình 26).

Tuy nhiên chính trong giới hạn này, mạng trở thành một mạng gồm một loại nút với hằng số mạng $a = b/2$ giống như (sự suy biến tại $k = \pi/b = \pi/2a$ trong mô hình nguyên tử hai loại tương ứng với suy biến về dấu của vector sóng $k = \pm\pi/2a$). Điều này còn có thể khảo sát chi tiết hơn bằng cách kiểm tra các hệ số khai triển hàm sóng trong mô hình liên kết mạnh, tuy nhiên ta không đi sâu hơn giải thích vấn đề này). Như vậy hai cấu trúc vùng mô tả trong Hình 27 là hoàn toàn tương đương nhau (vì đều mô tả một hệ như nhau). Trong khi Hình 26 dễ làm cho ta lầm tưởng rằng hệ là một bán dẫn nhưng thực chất nó lại là một kim loại nếu xét nó theo cấu



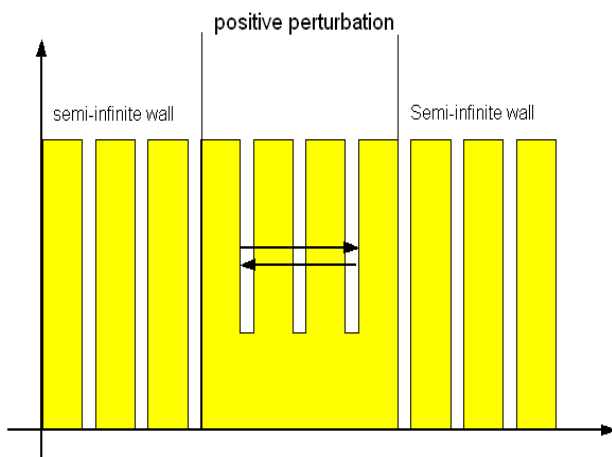
Hình 27. Sự chuyển từ hằng số mạng b sang $a = b/2$

trúc vùng ở Hình 27 (vì các electron bây giờ chỉ lấp đầy một nửa vùng dẫn). Tóm lại ta đã chứng minh được rằng electron trên mặt Fermi nằm đúng vào miền phổ liên tục. Vì nằm trong vùng phổ liên tục, tác động nhiễu loạn của trường ngoài không làm cho electron bị cầm tù (dưới đây ta sẽ lập luận chi tiết hơn chứng tỏ rằng việc đưa vào trường ngoài chỉ gián đoạn hóa biên của các vùng phổ liên tục, tức là chỉ tại biên của phổ liên tục mới có các trạng thái liên kết. Trong trường hợp này

mặc dù đáy của vùng dẫn có các trạng thái liên kết, nhưng các trạng thái đó đã bị lấp đầy, việc này cũng giống như ta đổ tràn nước trên một cốc nước nhỏ vậy).

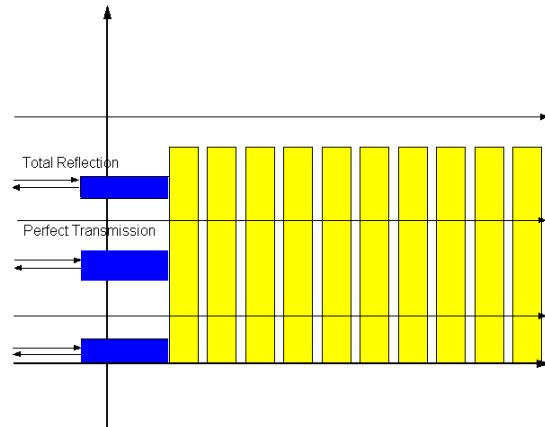
Việc đưa vào khối lượng electron trong Hamilton Dirac cũng như đưa vào xung lượng ngang theo Oy thực chất là làm phát sinh một khe năng lượng trong đường cong tán sắc theo xung lượng dọc theo Ox . Ảnh hưởng của khối lượng đến khe năng lượng là rõ ràng và không cần một sự giải thích nào cả. Việc ảnh hưởng của xung lượng ngang đến khe năng lượng thực chất chính là thảo luận về tính chất của ống nano Carbon phụ thuộc vào dạng biên cuốn được diễn giải trong [5], cũng như ảnh hưởng của dạng biên cắt đến tính chất điện của dải nano Carbon khảo sát trong [4, 11]. Cụ thể là với $p_y = 0$ đường cong tán sắc tiếp xúc nhau, và với $p_y \neq 0$ chúng sẽ tách nhau bằng một khe năng lượng hữu hạn.

Ta tiếp tục với việc giải thích điều thứ hai. Việc electron bị cầm tù (tức là sự xuất hiện các trạng thái liên kết và giả liên kết) trong một thế âm có vẻ như một



Hình 29. Tác động của thế nhiễu loạn trên thế tuần hoàn.

Từ đó ta thấy rằng một thành bán vô hạn gồm các thế tuần hoàn theo một



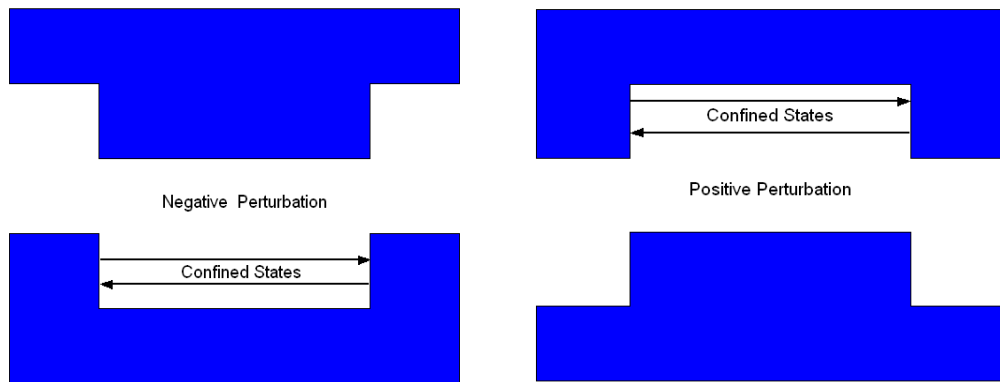
Hình 28. Sự phản xạ trên thành thế tuần hoàn bán vô hạn.

ngịch lý. Nhưng thực ra điều đó là một phản ứng hoàn toàn bình thường của các electron có khối lượng hiệu dụng âm ở đỉnh của vùng hóa trị. Ta có thể giải thích điều đó bằng mô hình đơn giản Kronig-Panney.

Ta biết rằng kết luận rút ra từ mô hình Kronig-Panney là sự hiện diện của thế tuần hoàn làm cho phổ năng lượng liên tục của electron tự do bị cắt thành các dải liên tục xen kẽ với các vùng cấm.

chiều sẽ có tính chất tương tự: chúng sẽ cho electron truyền qua hoàn toàn theo từng dải và phản xạ hoàn toàn theo từng dải xen kẽ nhau. Như vậy thành bán tuần hoàn vô hạn nói trên có tính chất hết sức độc đáo là có khi nó tương đương với thành trong suốt, có khi lại tương đương với thành phản xạ lý tưởng (Hình 28) tùy thuộc vào năng lượng của electron. Hình 29 vẽ một thể nhiễu loạn dương kẹp giữa hai thành dày vô hạn. Việc đưa một thể ngoài nhiễu loạn lên thể tuần hoàn như vậy làm cho electron trong hố thế có thể có năng lượng sao cho nó rơi đúng vào vùng phản xạ toàn phần của thành và làm xuất hiện các trạng thái liên kết trong hố thế. Điều đó là dễ hiểu đối với thể cầm tù âm, tuy nhiên ta lưu ý rằng đối với thể dương lập luận trên vẫn đúng như giải thích trên Hình 30.

Từ Hình 30 ta thấy sự nhiễu loạn của thể âm sẽ làm gián đoạn hóa năng lượng ở biên dưới (hay xuất hiện các trạng thái liên kết) của vùng liên tục trong khi nhiễu loạn của thể dương làm gián đoạn hóa biên trên (vùng khối lượng âm) của



Hình 30. Tác động của thể nhiễu loạn đến sự hình thành các trạng thái cầm tù trong thể tuần hoàn.

vùng phổ liên tục. Mặt khác, ở vùng phổ liên tục hoàn toàn không có các trạng thái liên kết phù hợp với điều đã nói trên.

Để tránh mọi nhầm lẫn ta nhắc lại rằng trên đây ta chỉ xét đến các trạng thái của một electron trong trường ngoài, mà không hề xét các hiệu ứng nhiễu loạn và do đó cũng không đề cập đến khái niệm lỗ trống.

Đưa vào khái niệm lỗ trống, ta có thể giải thích một cách đơn giản hơn và đồng thời hình thức hơn (mà thực chất là ta đi ngược dòng lý luận về lỗ trống của vật lý chất rắn) về tác dụng của thể nhiễu loạn dương đến sự hình thành các trạng thái liên kết này: nhiễu loạn thể dương (đối với electron) gây ra sự cầm tù đối với lỗ trống, điều này là hoàn toàn hiển nhiên vì lỗ trống mang điện tích dương. Tuy

nhiên lỗ trống là hạt liên hợp của electron với khối lượng âm trong vùng hóa trị, do đó sự cảm từ lỗ trống tương đương với sự cảm từ electron với khối lượng âm.

Như vậy hiện tượng tích tụ điện tích âm trong một điện thể âm có nguyên do là khối lượng hiệu dụng âm của electron, mà nguyên nhân của khối lượng âm chính là sự hiện diện của thế tuần hoàn tinh thể. Sự kỳ lạ của hiện tượng này như vậy thực chất không kỳ lạ hơn hiện tượng dao động Bloch⁵ mà ta đã gặp trong vật lý chất rắn.

⁵ hiện tượng dao động Bloch có được mô tả trong [1] và đã quan sát được trong thực nghiệm của vật lý nano.

Kết luận

Trong luận văn này chúng ta đã hoàn thành một bài toán nhỏ về vấn đề thời gian sống trong Quantum Dot Graphene với phương pháp rất truyền thống là phương pháp T -Ma trận. Tính chất chất giả tương đối tính làm cho electron trong Graphene thể hiện những biểu hiện khác thường. Về mặt lý thuyết, Graphene xứng đáng là một *sự đơn giản tế nhị*: Sự đơn giản về cấu trúc và hình thức chứa đựng những sự tế nhị về vật lý. Trong khi chính bản thân hệ là hệ cổ điển thì phương trình cho lượng tử của nó lại được mô tả bằng một phương trình giả tương đối tính, và chính các hiệu ứng giả tương đối tính lại được giải thích một cách hoàn toàn cổ điển.

Quay trở lại với vấn đề vai trò công nghệ của Graphene. Do những đặc tính lý thú về mặt công nghệ như đã nói, cùng với đó là những đặc tính độc đáo về mặt vật lý, Graphene thu hút được sự chú ý về nhiều mặt từ các nhà khoa học. Bên cạnh các xu hướng nghiên cứu về tác động cầm tù tĩnh điện trên electron trong Graphene, rất nhiều các hướng nghiên cứu khác nhau về vật liệu này cũng đang diễn ra sôi nổi. Có thể nhắc đến những khảo sát về các hiệu ứng liên quan đến từ trường làm ví dụ. Bài toán về các mức Landau được dẫn lại chi tiết trong [5] cũng thể hiện tính khác biệt của electron Dirac. Nhóm Novoselov (2005), Zhang (2005) [4] nghiên cứu hiệu ứng Hall dị thường đối với Graphene (anormalous IQHE), năm 2007 nhóm Novoselov chỉ ra rằng có thể quan sát được hiệu ứng Hall dị thường tại nhiệt độ phòng. Reher và các đồng tác giả năm 2007 quan sát hiệu ứng Bohn-Aharonov trên Graphene... Với sự nghiên cứu sôi nổi như vậy chúng ta có cơ sở để hi vọng rằng sẽ có thể hoàn thiện những hiểu biết về vật liệu lý thú này và sớm có những ứng dụng thực tế, hữu ích và nhân văn...

Tài liệu tham khảo

- [1] J.H.Davies, *Physics of low-dimentional Semiconductor*, Cambridge University Press (1998).
- [2] J.J.Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company (1994).
- [3] J.J.Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company (1967).
- [4] A.H.Castro Neto, F.Guinea, N.M.R.Peres, K.S.Novoselov and K.Geim, “The electronic properties of Graphene”, arxiv:0709.1163v1.[cond-mat.other].
- [5] Jean-Christophe Charlier, “Electronic and transport properties of nanotubes”, Rev.Mod.Phys **79** 2667 (2007).
- [6] J.Milton Pereira, Jr., V.Mlinar, and F.M.Peeters, “Confined states and direction-dependent transmission in graphene quantum wells”, Phys.Rev.B **74** 045424 (2006).
- [7] D.P.DiVincenzo and E.J.Mele, “Seft-consitent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds”, Phys.Rev.B **29** 1685 (1984).
- [8] M.I.Katsnelson, K.S.Novoselov and A.K.Geim, “Chiral tunnelling and the Klein paradox in Graphene”, Nature Physics **2** 620 (2006).
- [9] P.Q.Silvestrov and K.B.Efetov, “Quantum Dots in Graphene”, arXiv:cond-mat/0606620v4 (2007).
- [10] Hong-Yi Chen, Vadim Apalkov, and Tapash Chakraborty, “The Fock-Darwin States of Dirac Electrons in Graphene”, Phys.Rev.Lett **98** 186803 (2007).
- [11] L.Brey and H.A.Fertig, “Electronic States of Graphene nano ribbons studies with the Dirac equation”, Phys.Rev.B **73** 235411 (2006).
- [12] Rui Zhu and Young Guo, “Shot noise in the Graphene-based double barrier structure”, Appl.Phys.Lett **91** 252113 (2007).